



人工智能助力杂化半导体光伏结构设计与稳定性提升

王少强¹, 刘威², 李怡凡¹, 张晓春¹, 邱世民^{2*}, 曹青^{3*}, 李桂香^{1*}

1. 东南大学材料科学与工程学院, 南京 211189

2. 东南大学计算机科学与工程学院, 南京 211189

3. Department of Chemistry and Biochemistry, University of Notre Dame, South Bend, IN 46556, USA

* 联系人, E-mail: shimin.di@seu.edu.cn; qcao2@nd.edu; guixiang.li@seu.edu.cn

2025-11-12 收稿, 2026-01-19 修回, 2026-01-23 接受, 2026-01-26 网络版发表

国家自然科学基金(52503336)和江苏省基础研究计划(BK20251292)资助

摘要 有机-无机杂化钙钛矿太阳能电池(perovskite solar cells, PSCs)因其高光电转换效率与低成本制造潜力而成为新一代光伏技术的重要候选。然而, 其长期稳定性问题仍是制约其商业化应用的关键瓶颈。近年来, 人工智能(artificial intelligence, AI)技术在材料科学领域快速发展, 逐渐展现出在稳定性调控中的独特优势。本文围绕AI在PSCs稳定性优化中的应用进展, 系统梳理了AI在材料组分筛选、界面工程设计和缺陷调控方面的典型应用路径与代表性成果。通过引入机器学习、贝叶斯优化等前沿算法以及AI与密度泛函理论和分子动力学结合在复杂多变量体系中的建模能力与应用局限, 展望了未来AI与实验闭环结合、多尺度协同建模、数据共享标准化等发展趋势。本文旨在为PSCs结构稳定性设计提供系统性参考, 并推动AI技术在新型光伏器件可靠性提升中的更深层次融合。

关键词 人工智能, 钙钛矿太阳能电池, 新兴光伏技术, 界面工程, 缺陷调控

有机-无机杂化金属卤化物钙钛矿是一类由有机阳离子、金属阳离子及卤素阴离子构成的新型半导体材料。以该类材料为吸光层的钙钛矿太阳能电池(perovskite solar cells, PSCs)作为一种新兴光伏技术, 具有高光电转换效率(power conversion efficiency, PCE)及进一步提升效率的潜力, 同时具备溶液加工温度低、制备成本低、质量轻带隙可调、光电子性能优异、可通过溶液工艺实现柔性器件制备等优势, 近年来受到广泛关注^[1-3]。截至目前, 单结PSCs的最高认证光电转换效率已经突破27%, 而叠层电池的最高认证光电转换效率已达到34.6%^[4]。虽然PSCs凭借低成本、优异的光电转换效率与性能的优势, 已经成为新型光伏技术领域中极具发展前景的研究方向之一, 但从长远产业化的角度来看, 其最关键的问题是长期稳定性不佳^[5-8]。PSCs长期稳定性受很多因素影响, 包括钙钛矿材料的结构

组成、器件结构(尤其是多层界面)、环境条件、机械稳定性以及封装工艺等。因此, 解决长期稳定性的挑战是多维度、多层次的, 传统的研究方法效率低且劳动密集, 难以全面系统地对长期稳定性进行优化。在这种背景之下, 人工智能(artificial intelligence, AI)技术正在材料领域崭露头角, 并为PSCs解决长期稳定性挑战问题提供一个新方法和契机: 借助机器学习(machine learning, ML)、深度学习等AI技术, 可从多尺度多维度视角对PSCs的长期稳定性问题进行分析预测, 进而为提升器件长期稳定性提供更高效的方法和途径。目前, AI技术已经在材料的选择、带隙预测和缺陷生成能的预估等方面应用, 并且将在PSCs大规模制备过程的质量控制中展现出巨大潜力^[9,10]。本文关注AI辅助或者驱动的PSCs结构稳定性调控中的应用进展, 并展望大模型在钙钛矿稳定性设计领域的潜在突破。

引用格式: 王少强, 刘威, 李怡凡, 等. 人工智能助力杂化半导体光伏结构设计与稳定性提升. 科学通报, 2026, 71: 5496–5506

Wang S, Liu W, Li Y, et al. AI-aided structural design and stability of hybrid semiconductor photovoltaics (in Chinese). Chin Sci Bull, 2026, 71: 5496–5506, doi: [10.1360/CSB-2025-5779](https://doi.org/10.1360/CSB-2025-5779)

1 钙钛矿太阳能电池稳定性影响因素简述

PSCs长期稳定性问题是其商业化的主要瓶颈,该问题的复杂性源于多种因素的共同影响.钙钛矿材料是一种结构为 ABX_3 的晶体结构(图1(a))^[11];其材料组成是影响稳定性的内在因素.A位阳离子一般是一些有机一价阳离子,位于晶格的八面体的中心,其离子的尺寸与晶格匹配度对材料的稳定性至关重要,B位为二价金属离子如 Pb^{2+} 、 Sn^{2+} 等,其中 Pb^{2+} 具有生物毒性,而 Sn^{2+} 的活性高,易与环境中的水和氧气发生反应(图1(b))导致材料降解^[12].X位为卤素离子,其半径的不同会改变晶格参数,若混合比例分布不均会引起相分离(图1(c)),进而影响电池的稳定性^[13].

PSCs器件结构有正式(n-i-p)结构和反式(p-i-n)结构,均由钙钛矿层、电子传输层、空穴传输层等多层结构组成.界面处存在的缺陷与能级失配会成为载流子复合中心(图1(d)),加速非辐射复合损失^[14].若电子传输层与钙钛矿层的界面结合不紧密,会增大界面电阻,影响电荷提取效率;而空穴传输层与钙钛矿层的界面稳定性差,易引起空穴积累,导致界面处钙钛矿材料发生降解^[15,16].

外界环境应力(如水、氧、光、热)是影响PSCs稳定性的关键因素.水作为钙钛矿材料的破坏因素最为

常见,因为水分子会与钙钛矿材料产生化学反应,破坏其晶体结构,使得材料分解成为有机胺和金属卤化物.氧分子会使钙钛矿中的低价金属离子发生氧化反应,改变钙钛矿材料的化学组成和能带结构.光照会加速钙钛矿材料的离子迁移和相分离,同时也会产生光生载流子,此时如果载流子不能及时被收集,则会引发光催化反应(图1(e)),从而加速材料的降解^[17,18].高温会加速材料内的离子扩散和化学反应速率,导致材料内的结构稳定性变差,同时也容易导致封装材料的老化,进一步降低器件对于环境的封装能力.受到应力的影响而降低的长期可靠性也会影响PSCs的稳定性^[19].

此外,机械应力下的长期可靠性对太阳能电池稳定性的影响也不容忽视.在弯曲和挤压的情形下,钙钛矿材料由于脆弱的特性很容易出现裂纹(图1(f)),而裂纹的扩展会破坏材料的光电性能和电荷传输路径^[20].

上述因素的多维度耦合将使得材料的稳定性规律难以通过传统的实验方法来进行高效分析,AI技术在多变量复杂系统中的数据挖掘、模式预测的特长则为针对性地解决上述问题提供了新的研究方向.

2 AI在结构稳定性调控中的应用路径

调控PSCs的稳定性是一项系统的工程,需要从材

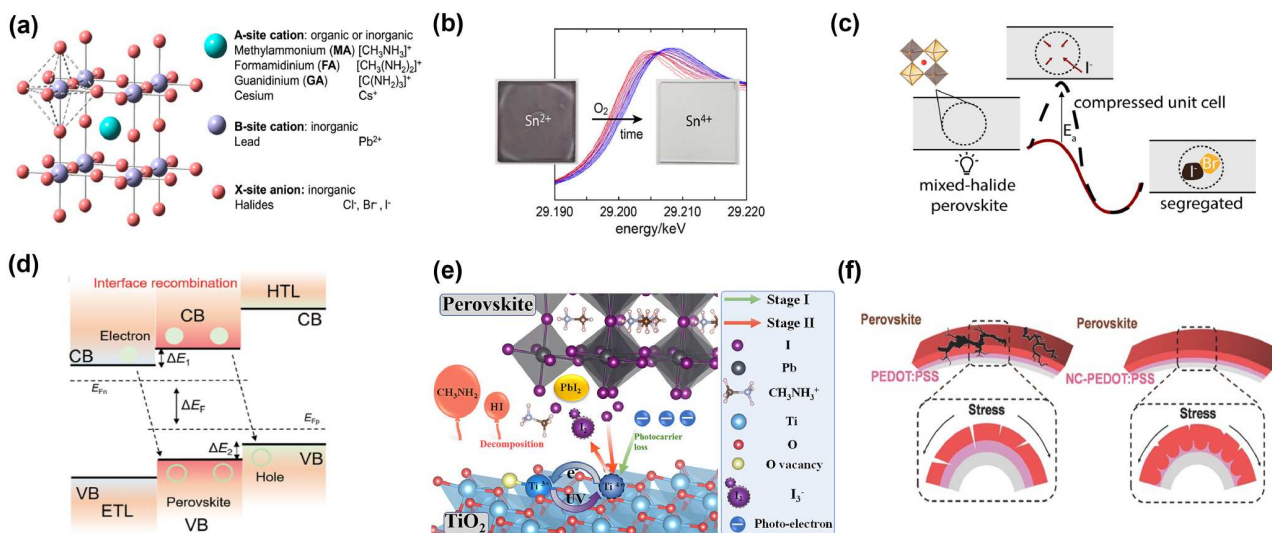


图1 (网络版彩色)PSCs稳定性影响因素。(a)理想 ABX_3 钙钛矿的电子结构^[11], (b)氧气使得 Sn^{2+} 氧化成 Sn^{4+} ^[12], (c)混合比例不均引起相分离^[13], (d)太阳能电池内载流子的界面复合过程^[14], (e) PSCs在持续紫外光照射下的两阶段降解过程^[18], (f) 基于纳米NC-PEDOT:PSS与PEDOT:PSS结构的钙钛矿层应力缓解方案^[20]

Figure 1 (Color online) Factors affecting the stability of perovskite solar cells. (a) Electronic structure of ideal ABX_3 perovskite^[11]; (b) oxygen oxidation of Sn^{2+} to Sn^{4+} ^[12]; (c) phase separation caused by uneven mixing ratio^[13]; (d) interface recombination process of carriers within the solar cell^[14]; (e) two-stage degradation process of perovskite solar cells under continuous ultraviolet light irradiation^[18]; (f) stress relief scheme for perovskite layers based on nano-NC-PEDOT:PSS and PEDOT:PSS structures^[20]

料、界面、环境等方面统筹控制。AI通过ML、数据驱动建模、复杂系统的预测功能为PSCs结构稳定性调控提供了全新的思路,包括控制组分筛选、材料组成优化、界面控制、缺陷消除等。

2.1 材料组分筛选

钙钛矿的材料化学组成是影响PSCs的本质因素,其配比和化学特性直接影响晶体的结构稳定、缺陷的形成和抗降解能力。在高通量筛选方面,许多案例已经展现出AI与材料组分筛选的高度融合,推动着钙钛矿材料开发的变革性发展。从材料体系维度来看,AI在钙钛矿组分方面的筛选覆盖范围广泛且各有侧重。针对经典 ABX_3 型钙钛矿,在开展无铅钙钛矿材料的筛选方面,通过电荷平衡和可形成性规则初步筛选超万种材料,再以ML模型精准筛选,挖掘出大量适合于PSCs的无铅钙钛矿材料,体现出 ABX_3 型钙钛矿材料体系在环境友好型材料开发中的探索方向^[21]。有机-无机杂化钙钛矿材料方面,构建大规模的数据库结合ML模型和筛选规则,从海量杂化钙钛矿中筛选出无毒稳定、带隙适配的材料,解决了传统筛选的局限性(图2)^[22]。双钙钛矿($A_2B'B''X_6$)、二维层状钙钛矿等体系也有对应的高通量研究;双钙钛矿可形成的ML预测包括有机-无机杂化、纯无机、二维等多种体系,体现了高通量在跨体系钙钛矿筛选中的通用性。

在筛选逻辑上,多数研究先构建数据集,融合高通量计算再经过特征工程,筛选关键特征借助ML模型训练预测,最后高通量筛选出目标材料。但也存在特殊差

异,不同体系筛选目标不同, ABX_3 型注重无铅替代和稳定性评估;杂化钙钛矿聚焦带隙适配、稳定无毒;双钙钛矿关注于无铅化、形成能和带隙,并且模型与特征选择因体系而异;二维钙钛矿筛选中,人工神经网络(artificial neural network, ANN)在光电性能预测方面表现更优,体现了体系特征性对方法选择性的影响。

2.2 材料组成优化

针对组分稳定性的精准预测,AI可以通过ML和多特征建模来解析预测相稳定性、相图和晶格容忍因子的关联规律。众多研究都聚焦于组分与稳定性的关联,ML作为核心,通过离子半径、电子结构、热力学参数等多方面的特征参数整合打破传统实验低效的缺点。在金属卤化物钙钛矿薄膜研究中^[23],梯度提升(gradient boosted trees, GBT)模型将组分、工艺参数与稳定性相关联;准二维体系通过追踪PL光谱的动态变化来构建生长动力学^[24],这些均体现了多特征融合精准预测的共性。

不同的钙钛矿体系研究各有侧重,对于金属卤化物钙钛矿,主要研究复杂环境下的稳定性规律。通过全自动化机器人平台,可探究多阳离子钙钛矿在热老化、光热老化中的规律^[23]。准二维钙钛矿主要面临多相混合的难题,针对 $PEA_nPb_nI_{3n+2}$ -FAPbI₃体系,合成多比例2D:3D样品并追踪PL光谱,明确了 $n=2$ 相的长期主导稳定性以及高温退火对相稳定性的双重影响^[24]。杂化钙钛矿则围绕无毒稳定目标构建大规模数据库,结合ML筛选带隙适配,无Pb/Cd/Hg的稳定材料^[22]。AI不仅将数

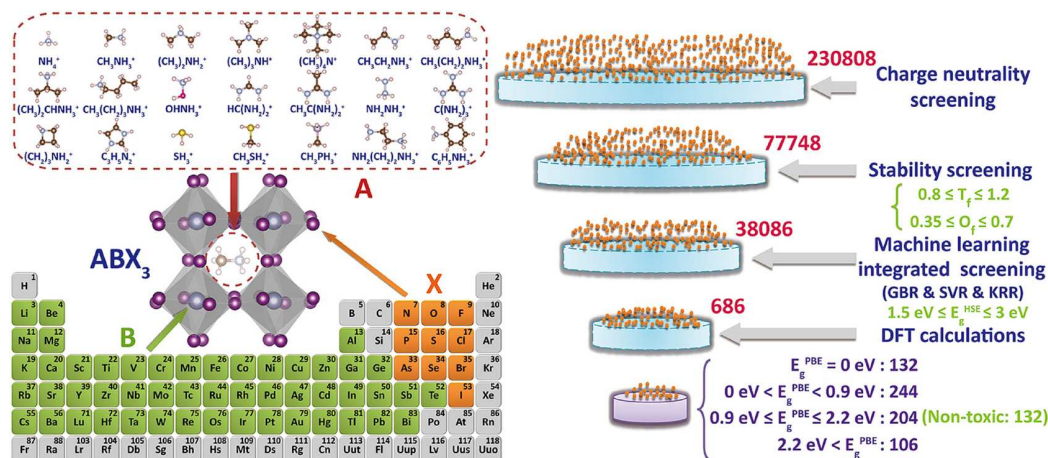


图2 (网络版彩色)AI在材料的组分筛选方面调控PSCs的稳定性: ML与DFT结合预测新型钙钛矿框架示意图^[22]

Figure 2 (Color online) AI-regulated stability of perovskite solar cells in terms of material component screening: schematic diagram of predicting novel perovskite frameworks via the combination of ML and DFT^[22]

月实验周期压缩至数周乃至数天,更通过夏普利加性解释(Shapley additive explanations, SHAP)等工具提升预测可解释性。通过ML方法(密度泛函理论(density functional theory, DFT)与神经网络势函数相结合)对不同FA/Cs和I/Br分布的钙钛矿进行全局随机表面行走(stochastic surface walking, SSW)优化,得到每种成分的最稳定结构,再计算相分离吉布斯自由能,以该能量为靶向属性构建 $\text{FA}_x\text{Cs}_{1-x}\text{Pb}(\text{I}_y\text{Br}_{1-y})_3$ 钙钛矿的全局相图(图3(a~c))。相图中不同颜色区域直观地表示了不同组

分的相分离倾向^[25]。因此,借助ML模型可快速预测整个体系的大范围相图,避免了对所有成分点进行昂贵的DFT计算。

AI在缺陷容忍度分析方面也普遍遵循从特征因素的提取到构建模型再筛选或预测的流程。针对 ABO_3 型无机氧化物钙钛矿的研究中,在数据库中利用符号分类开发了描述符分类模型,建立与氧空位缺陷形成概率的映射关系^[26,27]。研究无铅杂化有机-无机钙钛矿时,将容忍因子、八面体因子、B位电负性作为核心特征,

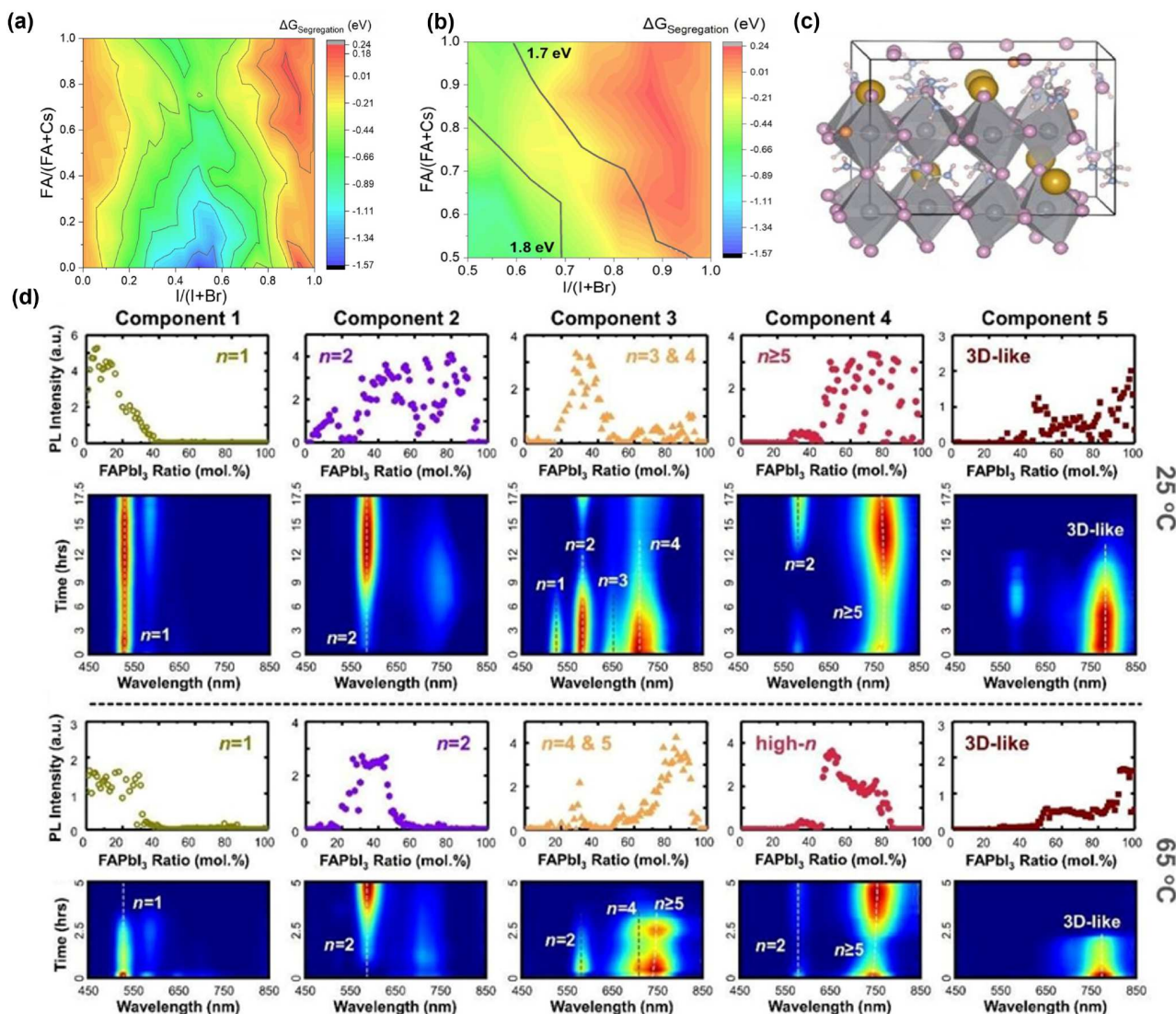


图3 (网络版彩色)AI在材料的组成优化方面调控PSCs的稳定性。(a)以相分离吉布斯自由能为目标属性的神经网络预测卤化物钙钛矿相图^[25];(b)预测相图中带隙为1.7与1.8 eV的钙钛矿(分布)^[25];(c)预测的最优1.7 eV钙钛矿(成分)^[25];(d)非负矩阵分解ML分析图^[24]

Figure 3 (Color online) AI-regulated stability of perovskite solar cells in terms of material composition optimization. (a) Neural network-based prediction of halide perovskite phase diagrams with the Gibbs free energy of phase separation as the target property^[25]; (b) perovskites with a band gap of 1.7 and 1.8 eV in the predicted phase diagram (distribution)^[25]; (c) predicted optimal 1.7 eV perovskite; (d) NMF-ML analysis chart^[24]

构建ML模型从五千多种未探索的无铅杂化有机-无机钙钛矿中筛选低相变敏感性组分(图3(d))^[24]。针对准二维钙钛矿,通过挖掘组分、相分布与缺陷之间的定量关系,揭示了 $n \neq 2$ 相的高缺陷容忍以及 $n = 2$ 相的相变风险来指导组分的优化^[24]。通过AI来提取关键特征并构建合适的模型是分析缺陷容忍度的有效路径,不同研究方法在逻辑上具有一致性。

AI通过高通量筛选、稳定性预测和缺陷容忍度分析,依托自主构建的材料数据库(如Perovskite Database),为钙钛矿材料组分的优化提供高效可靠的解决方案,推动了稳定性体系的开发进程。

2.3 界面工程

在PSCs的多层异质结中,界面是电荷分离与传输的重要节点,又是缺陷富集和降解反应的敏感部位。界面能级失配会引发电荷的复合,晶格失配产生的应力会促使界面层分离;缺陷的产生会降低PSCs的性能与效率^[28]。传统的实验方法对于界面的微观结构与缺陷行为难以系统关联地研究,AI技术利用建模来研究界面间复杂的联系,能够为界面的优化和缺陷的调控提供高效化的优化解决方法。

钙钛矿的带隙是影响其光伏性能的关键参数。在模型选择与性能方面,多种AI模型被用于钙钛矿相关参数的预测。极端梯度提升回归模型(extreme gradient boosting, XGB)表现突出, Ye等人^[29]针对卤化物钙钛矿关键能带属性预测工作中就证实了该模型的优异性能(图4(a))。随机森林(random forest, RF)、贝叶斯优化(Bayesian optimization, BO)等模型也各有其侧重,例如, RF模型在筛选界面修饰材料以优化能级匹配时(图4(b))^[30],测试集具有较小的均方根误差和较高的相关系数等优良特性,并且该模型的输入特征不仅包含界面修饰分子的HOMO/LUMO能级、偶极矩、极性和分子尺寸等电子与结构参数,还纳入了关键官能团信息以及与钙钛矿表面配位的不饱和位点类型,以器件的开路电压损失为预测目标,通过学习大量分子特征与开路电压损失样本,识别出有利于能级梯度优化的分子结构特征,最终精准筛选出THEACl、PEACl等优质修饰材料;而BO算法则可以通过优化器件工艺间接实现界面能级匹配与应力缓解的预测优化,显著提升器件性能和稳定性。除此之外,基于神经网络、XGBoost、多层感知等的模型也在相关研究中得到应用,这种模型选择的多样性与适配性,为钙钛矿相关研

究提供了有力工具。

在场景覆盖层面上, AI模型的应用已经遍及钙钛矿器件的多个关键界面和工艺环节。在界面类型方面涉及了钙钛矿与空穴传输层、电子传输层和钝化层的界面研究;研究角度则聚焦组分设计与工艺优化等方向^[30-32]。在空穴传输层材料的设计中, AI借助高通量实验精准预测材料的HOMO能级是否与钙钛矿的VBM匹配,从而筛选出高效的空穴传输层材料^[33,34]。在阴离子钝化层设计中, AI通过预测界面能级对齐与晶格应力缓解来提升器件的性能与稳定性^[32,35];在器件工艺优化方面, BO算法可以间接优化界面能级匹配和薄膜应力分布^[36],这体现出AI模型应用的广泛性。

不过,目前针对界面应力缓解的AI预测工作相对匮乏,现有研究更多的是通过能级匹配等手段间接体现对界面应力的作用。具体来看,两类模型具有代表性,一个是利用ANN模型优化能级匹配,通过推荐适配的传输层材料减少晶格失配,间接缓解界面应力^[37];另一个是利用RF模型筛选修饰材料,以填充钙钛矿表面缺陷、降低晶格畸变,辅助应力缓解^[30]。未来还需进一步丰富直接针对界面应力缓解的AI研究,以更好地指导PSCs的研发。

2.4 缺陷调控

缺陷形成能和迁移势垒能是评估材料是否易于被降解的重要参数之一。传统的方法采用密度泛函理论计算来实现,虽然结果精确却耗时很长。AI模型通过学习理论计算的数据,可实现缺陷参数的快速预测。

AI模型的应用覆盖了钙钛矿缺陷形成能与迁移势垒能预测的多个方面。在组分设计方面,核心方法是从源头降低钙钛矿本征缺陷密度来提升稳定性,通过XGBoost模型预测不同卤化物钙钛矿的缺陷形成能,可筛选出本征缺陷少的稳定体系,该方法直接解决了传统钙钛矿本征缺陷过高、稳定性不足的问题^[38];在界面钝化剂选择上, RF模型可从海量分子中筛选出能与钙钛矿表面缺陷形成高形成能复合物的钝化剂,可针对性地解决界面缺陷密度高、非辐射复合速率快的痛点:通过RF模型筛选出的硫代乙酸钠与未配位 Pb^{2+} 形成的复合物缺陷形成能高,能显著降低界面缺陷密度与非辐射复合速率,有效提升界面稳定性(图4(e))^[39];在器件工艺优化方面,通过XGBoost模型分析工艺参数与缺陷迁移势垒及器件效率衰减的关系,可

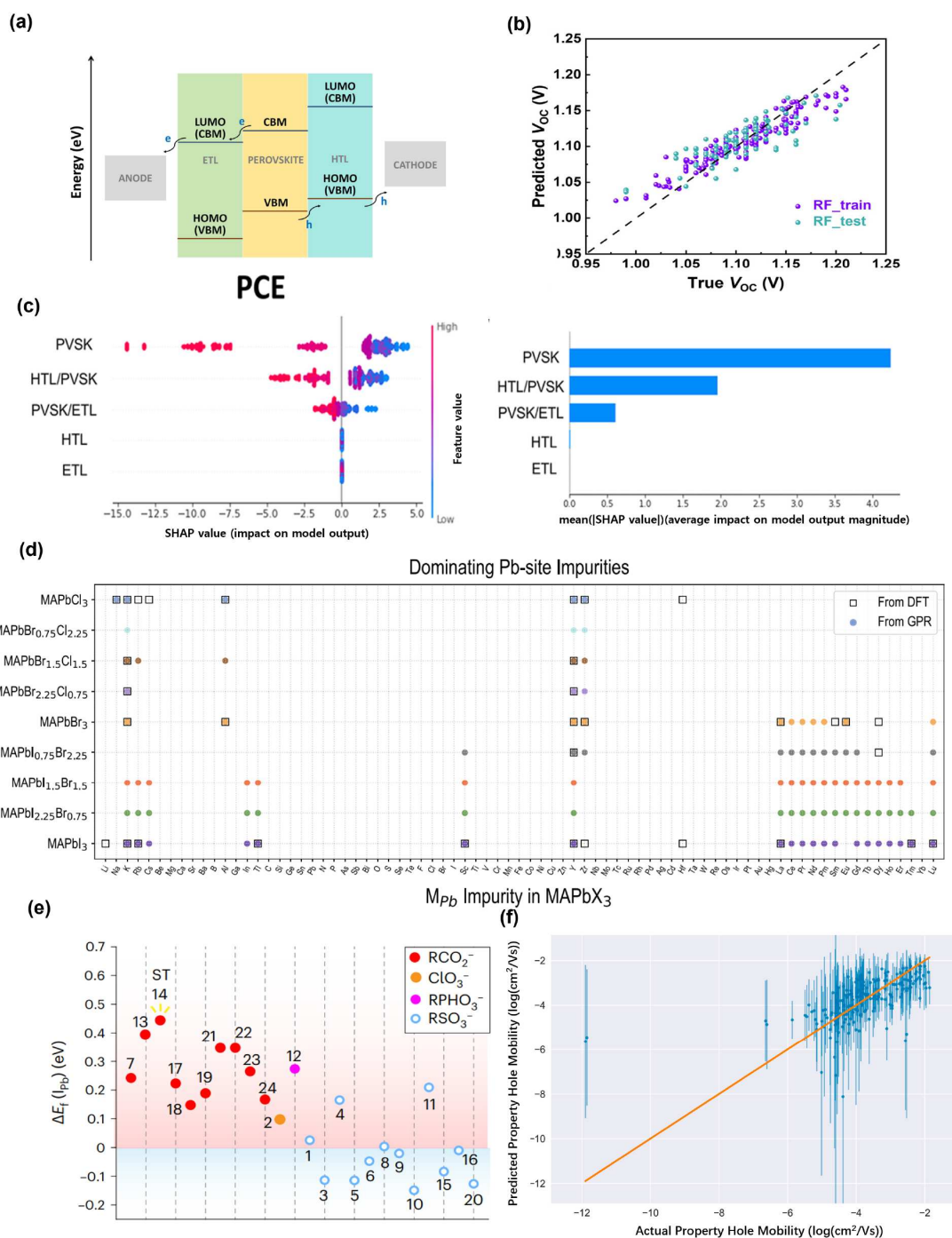


图 4 (网络版彩色)AI在界面工程与缺陷调控方面调控PSCs的稳定性. (a) PSCs中界面电荷传输的示意图^[29]; (b) RF模型在训练集与测试集上的预测值与真实值对比^[30]; (c) 通过RF回归算法与SHAP分析得到的电流-电压(I - V)特性的SHAP摘要图^[40]; (d) 9种MAPbX₃化合物的主导杂质筛选结果^[42]; (e) 当用作钝化的各类阴离子型配体在卤素阴离子位点发生取代时, IPb反位缺陷的缺陷形成能(ΔE_f)^[39]; (f) ML预测值与实际空穴迁移率的散点图^[44]

Figure 4 (Color online) AI regulation of the stability of perovskite solar cells in terms of interface engineering and defect regulation. (a) Schematic diagram of interfacial charge transfer in perovskite solar cells^[29]; (b) comparison between predicted values and actual values of the random forest model on the training set and test set^[30]; (c) SHAP summary plot of current-voltage (I - V) characteristics obtained via the random forest regression algorithm and SHAP analysis^[40]; (d) screening results of dominant impurities for 9 types of MAPbX₃ compounds^[42]; (e) defect formation energy (ΔE_f) of IPb antisite defects when various anionic ligands used for passivation are substituted at the halogen anion site^[39]; (f) scatter plot of ML-predicted values and experimental hole mobility^[44]

指导制定界面钝化方案^[40]. 尽管AI模型计算效率高, 但不同研究中模型的解释性存在差异, 部分研究通过SHAP等方法增强了模型解释性, 明确了关键影响特征(图4(c))^[40], 而部分研究可能更侧重预测结果应用, 在解释性方面有待加强.

密度泛函理论和分子动力学是解析界面电子结构和动态演化的重要工具手段. AI可以通过辅助建模显著提高效率和广度. 在AI辅助DFT突破计算瓶颈方面, 多种ML模型与DFT结合, 可快速预测界面关键参数. RF模型被用于筛选空穴传输材料与钙钛矿的高界面结合能体系, 不仅可以降低计算成本, 还能筛选出高稳定性材料^[41]; 高斯过程回归模型不仅能够以上百个样本的缺陷形成能与多能级跃迁数据为基础, 精准预测9种MAPbX化合物的数百种杂质并指导费米能级调控(图4(d)), 还能辅助预测杂质缺陷对载流子输运的影响, 为低缺陷风险掺杂提供依据^[42]; 极端梯度提升回归模型则助力无铅双钙钛矿界面电子结构预测, 快速优化能级匹配, 提升电子提取效率, 加速无铅钙钛矿的研发进程^[43]. AI可大幅减少DFT的重复计算量, 将研究聚焦于高稳定性、高能级匹配度的体系, 同时保留DFT的高精度优势.

在AI辅助分子动力学(molecular dynamics, MD)扩展模拟方面, AI能突破MD的力场限制, 预测长期界面动态行为. 利用AI学习MD轨迹, 将钙钛矿界面的空穴传输模拟尺度从短时间尺度扩展至100 ns, 筛选出的HTM使空穴迁移率提升至传统材料的2倍, 这一手段直接解决了短时间模拟无法精准评估空穴传输长期稳定性的痛点(图4(f))^[44]; 通过AI与MD结合, 把离子迁移的模拟时间延伸至1000 h, 能够有效解决短期模拟无法预判长期离子迁移引发PCE衰减的核心问题; 预测出的低迁移率钙钛矿体系在长期实验中PCE保持率达85%, 远高于对比体系的60%^[45]. AI通过学习MD动态轨迹, 能有效关联界面动态演化与器件长期性能衰减, 为界面优化提供有力手段.

尽管将AI与DFT、MD相结合在很大程度上提升了计算效率并拓展了可探索的参数空间, 但在面向真实材料体系时仍存在不少瓶颈. 其一, 训练数据通常局限于少数典型成分和结构窗口, 当模型直接迁移到新型钙钛矿体系时, 容易出现明显的偏差, 需要借助主动学习、迁移学习等策略不断引入新的代表性样本来修正模型. 其二, 基于机器学习的势函数和各类代理模型在拟合总能量、缺陷形成能等标量物理量时往往表现

优异, 但对于界面复杂反应、离子迁移通道等强耦合、多自由度过程, 其泛化能力和可解释性仍然有限. 其三, 实际器件工作环境中普遍存在杂质引入、应力作用、封装缺陷等诸多非理想因素, 而这些往往难以在理论模型中得到完整表征, 因此相关预测结果有必要通过原位/准原位表征与寿命测试等实验手段进行闭环验证, 以避免在过于理想化的计算框架下给出与实际应用脱节的结论.

在实验层面, AI与自动化高通量平台、贝叶斯优化等方法的深度结合, 为PSCs稳定性研究提供了新的范式. 通过数据融合策略与贝叶斯优化相结合, 在文献数据和新获得实验数据的基础上构建统一模型, 可以实现多元卤化物钙钛矿成分稳定性的闭环优化, 在有限实验轮次内快速锁定高稳定性配方区域^[46]. 通过构建“robotic learning”平台, 进行全自动化制备与高通量老化测试, 配合机器学习分析, 可以得到多阳离子钙钛矿在不同温度下出现稳定性反转的规律^[23]. 因此, AI不再仅仅是对既有数据的事后拟合, 而是可以通过贝叶斯优化、主动学习等策略直接驱动制备、表征、建模和决策的实验闭环, 大幅缩短稳定性筛选周期, 减少对人为经验的依赖^[47,48].

从多尺度协同建模的角度看, AI也正在逐步打通从原子尺度到器件尺度的稳定性研究链条. 通过多尺度实验设计, 从材料薄膜到器件层面系统表征金属卤化物钙钛矿在不同应力条件下的失效行为, 为构建跨尺度稳定性数据库提供了范例^[49]. 在原子与缺陷层面, 基于第一性原理数据训练机器学习力场, 可对CsPbBr₃晶界处离子迁移进行纳秒尺度的分子动力学模拟并解析晶界结构对迁移通道和活化能的影响^[50]. 在更宏观的层面, 将ML代理模型与器件/组件甚至建筑集成光伏的多物理耦合模拟相结合, 有望在可接受的计算成本下完成对真实工况下温度场、应力场与效率衰减的协同预测, 为PSCs大规模应用场景中的稳定性评估提供工具支撑.

AI模型的精度依赖于训练数据集的质量与规模, 若数据集存在偏差或涵盖范围不足, 可能影响预测结果准确性; 且部分研究中, AI模型与DFT、MD的协同闭环虽已形成, 但在模型解释性方面, 部分研究仍需加强, 以更好地揭示AI预测结果背后的物理机制. 针对一些复杂的多尺度界面行为, AI如何更高效地协同DFT与MD, 实现从电子结构到动态演化的全流程精准辅助, 相关研究还需进一步深入.

3 机遇、挑战与未来展望

AI技术的应用在PSCs稳定性调控中已经表现出极为强大的潜力,从材料筛选到界面对接的角度均为PSCs实现商业化提供了新的解决方案,在实际落地和深度整合等方面依然面临着不少挑战的同时,也预示着突破发展的重大机遇。

受限于当前AI模型在PSCs中的应用水平,部分研究成果仍存在不足:在大数据及样本不匹配上,由于稳定性大范围长周期实测数据、多介质环境下降解数据难以获取且周期较长,训练数据量级小;此外,大多AI模型预估的物质参数依赖于理论推导或基于小量实验,未经过大量工业化量产环境验证,其中部分基于AI模型的材料优化虽然有效改善了材料的稳定性,但忽视了工艺的便利性,造成了实验上最优解与实际工业应用场景的脱轨。

PSCs的降解本质上是一个多尺度多物理场的耦合作用复杂过程,而现有AI模型大多聚焦于单一尺度的单一任务,缺乏对降解路径的完整解析,跨尺度耦合建模和多任务联合建模的需求更加迫切。跨尺度建模需

要相互补充,密度泛函理论计算数据格式与有限元分析热分布的时空尺度差别较大,耦合作用机制有待进一步研究,未来还需要构建多任务联合模型,以通过共享特征提取层来同时优化任务。

AI模型的驱动离不开数据,现阶段PSCs领域数据割裂、数据格式各异等瓶颈亟待解决。一方面,现有公开数据库多聚焦于材料组分、晶体结构和初始光电性能等静态信息,而关于不同光/热/电/湿度应力组合下的时序性能衰减、界面化学演化、形貌变化以及封装失效等与长期稳定性高度相关的数据严重匮乏;另一方面,不同课题组在样品制备工艺、环境应力条件、测试协议以及元数据记录方面缺乏统一规范,使得跨团队数据难以直接整合并用于训练通用的AI模型。因此,数据缺乏标准化,来自不同研究组别间的实验数据存在偏差,数据无法跨研究集成;缺少开源数据库,如PerovskiteDatabase数据库主要针对材料的结构和性能,缺乏降解过程中与稳态对应的动力学降解数据。因此,推动“材料组分-制备流程-环境要素-降解数据”全流程的数据集建立以及数据采集与标注数据集规范是打破数据瓶颈的关键所在。

参考文献

- 1 Dong H, Ran C, Gao W, et al. Metal halide perovskite for next-generation optoelectronics: progresses and prospects. *eLight*, 2023, 3: 3
- 2 Ahn N, Choi M. Towards long-term stable perovskite solar cells: degradation mechanisms and stabilization techniques. *Adv Sci*, 2024, 11: 2306110
- 3 Green M A, Ho-Baillie A, Snaith H J. The emergence of perovskite solar cells. *Nat Photon*, 2014, 8: 506–514
- 4 Jia L, Xia S, Li J, et al. Efficient perovskite/silicon tandem with asymmetric self-assembly molecule. *Nature*, 2025, 644: 912–919
- 5 Meng J, Gao Y, Hu J, et al. Deuterium-substituted cations enhance perovskite solar cell efficiency and stability. *Joule*, 2025, 9: 102031
- 6 Xu X, Li S, Shan C, et al. Unraveling the interfacial homogeneity and bulk crystallization for efficient and stable perovskite solar cells via ionic liquids. *Energy Environ Sci*, 2025, 18: 3407–3417
- 7 Liu C, Yang Y, Chen H, et al. Two-dimensional perovskitoids enhance stability in perovskite solar cells. *Nature*, 2024, 633: 359–364
- 8 Jia Z, Wang R, Zhu L, et al. Film-forming polymer nanoparticle strategy for improving the passivation and stability of perovskite solar cells. *Energy Environ Sci*, 2024, 17: 7221–7233
- 9 Xu Z, Chin S H, Park B I, et al. Advancing perovskite solar cell commercialization: bridging materials, vacuum deposition, and AI-assisted automation. *Next Mater*, 2024, 3: 100103
- 10 Hering A R, Sutter-Fella C M, Leite M S. An AI-accelerated pathway for reproducible and stable halide perovskites. *Chem Soc Rev*, 2025, 54: 10397–10426
- 11 Ünlü F, Jung E, Haddad J, et al. Understanding the interplay of stability and efficiency in A-site engineered lead halide perovskites. *APL Mater*, 2020, 8: 070901
- 12 Smith M A, Chen M, Dai Z, et al. Real-time investigation of Sn(II) oxidation in Pb-free halide perovskites by X-ray absorption and Mössbauer spectroscopy. *ACS Appl Energy Mater*, 2021, 4: 4327–4332
- 13 Muscarella L A, Hutter E M, Wittmann F, et al. Lattice compression increases the activation barrier for phase segregation in mixed-halide perovskites. *ACS Energy Lett*, 2020, 5: 3152–3158
- 14 Xia J, Sohail M, Nazeeruddin M K. Efficient and stable perovskite solar cells by tailoring of interfaces. *Adv Mater*, 2023, 35: 2211324
- 15 Noman M, Khan A H H, Jan S T. Interface engineering and defect passivation for enhanced hole extraction, ion migration, and optimal charge dynamics in both lead-based and lead-free perovskite solar cells. *Sci Rep*, 2024, 14: 5449

- 16 Liang X, Liu S, Zhang T, et al. Deactivation of interfacial recombination center for thermally stable perovskite solar cells. *J Am Chem Soc*, 2025, 147: 37437–37448
- 17 Xiao C, Zhai Y, Song Z, et al. Operando characterizations of light-induced junction evolution in perovskite solar cells. *ACS Appl Mater Interfaces*, 2023, 15: 20909–20916
- 18 Ji J, Liu X, Jiang H, et al. Two-stage ultraviolet degradation of perovskite solar cells induced by the oxygen vacancy-Ti⁴⁺ states. *iScience*, 2020, 23: 101013
- 19 Yusuf A S, Ramalan A M, Abubakar A A, et al. Effect of electron transport layers, interface defect density and working temperature on perovskite solar cells using SCAPS 1-D software. *East Eur J Phys*, 2024, (1): 332–341
- 20 Liang H, Yang W, Xia J, et al. Strain effects on flexible perovskite solar cells. *Adv Sci*, 2023, 10: 2304733
- 21 Kumar S, Dutta S, Jaafreh R, et al. Accelerated discovery of perovskite materials guided by machine learning techniques. *Mater Lett*, 2023, 353: 135311
- 22 Wu T, Wang J. Global discovery of stable and non-toxic hybrid organic-inorganic perovskites for photovoltaic systems by combining machine learning method with first principle calculations. *Nano Energy*, 2019, 66: 104070
- 23 Zhao Y, Zhang J, Xu Z, et al. Discovery of temperature-induced stability reversal in perovskites using high-throughput robotic learning. *Nat Commun*, 2021, 12: 2191
- 24 Yang J, Lawrie B J, Kalinin S V, et al. high-throughput automated exploration of phase growth behaviors in quasi-2D formamidinium metal halide perovskites. *Adv Energy Mater*, 2023, 13: 2302337
- 25 Luo R, Jia X, Niu X, et al. Machine learning-driven insights for phase-stable FA_xCs_{1-x}Pb(I_yBr_{1-y})₃ perovskites in tandem solar cells. *JACS Au*, 2025, 5: 1771–1780
- 26 Liu S, Wang J, Duan Z, et al. Simple structural descriptor obtained from symbolic classification for predicting the oxygen vacancy defect formation of perovskites. *ACS Appl Mater Interfaces*, 2022, 14: 11758–11767
- 27 Jiang S, Wu C, Li F, et al. Machine learning (ML)-assisted optimization doping of KI in MAPbI₃ solar cells. *Rare Met*, 2021, 40: 1698–1707
- 28 Du B, Ma J, Xiang H, et al. Recent progress of buried interface in high-efficiency and stable perovskite solar cells. *Chem Commun*, 2024, 60: 13819–13831
- 29 Ye Y, Li R, Qu B, et al. Machine learning for energy band prediction of halide perovskites. *Mater Futures*, 2025, 4: 035601
- 30 Liu W, Meng N, Huo X, et al. Machine learning enables intelligent screening of interface materials towards minimizing voltage losses for p-i-n type perovskite solar cells. *J Energy Chem*, 2023, 83: 128–137
- 31 Chen Z, Pan S, Wang J, et al. Machine learning will revolutionize perovskite solar cells. *Innovation*, 2024, 5: 100602
- 32 Zhi C, Wang S, Sun S, et al. Machine-learning-assisted screening of interface passivation materials for perovskite solar cells. *ACS Energy Lett*, 2023, 8: 1424–1433
- 33 Wu J, Torresi L, Hu M M, et al. Inverse design workflow discovers hole-transport materials tailored for perovskite solar cells. *Science*, 2024, 386: 1256–1264
- 34 Wen J, Yang S, Jiang L, et al. Accelerated discovery of high-performance small-molecule hole transport materials via molecular splicing, high-throughput screening, and machine learning. *J Mater Inf*, 2025, 5: 30
- 35 Liu J, Lv H, Wang P, et al. Synergistic machine learning and DFT screening strategy: accelerating discovery of efficient perovskite passivators. *J Energy Chem*, 2025, 112: 56–63
- 36 Eguchi N, Fukazawa T, Kanda H, et al. Performance optimization of perovskite solar cells with an automated spin coating system and artificial intelligence technologies. *EES Sol*, 2025, 1: 320–330
- 37 Zhang Q, Wang J, Liu G. Auxiliary guidance manufacture and revealing potential mechanism of perovskite solar cell using machine learning. *J Energy Chem*, 2023, 86: 146–157
- 38 Touati S, Benghia A, Hebboul Z, et al. Predictive machine learning approaches for perovskites properties using their chemical formula: towards the discovery of stable solar cells materials. *Neural Comput Applic*, 2024, 36: 16319–16329
- 39 Xu J, Chen H, Grater L, et al. Anion optimization for bifunctional surface passivation in perovskite solar cells. *Nat Mater*, 2023, 22: 1507–1514
- 40 Kim S, Jeong Y, Han D W, et al. Machine learning-assisted defect analysis and optimization for P-I-N-structured perovskite solar cells. *J Electron Mater*, 2023, 52: 5861–5871
- 41 Yang Z, Liu Y, Zhang Y, et al. Machine learning accelerates the discovery of light-absorbing materials for double perovskite solar cells. *J Phys Chem C*, 2021, 125: 22483–22492
- 42 Mannodi-Kanakkithodi A, Chan M K Y. Accelerated screening of functional atomic impurities in halide perovskites using high-throughput computations and machine learning. *J Mater Sci*, 2022, 57: 10736–10754
- 43 Gao Z, Zhang H, Mao G, et al. Screening for lead-free inorganic double perovskites with suitable band gaps and high stability using combined machine learning and DFT calculation. *Appl Surf Sci*, 2021, 568: 150916

-
- 44 Antono E, Matsuzawa N N, Ling J, et al. Machine-learning guided quantum chemical and molecular dynamics calculations to design novel hole-conducting organic materials. *J Phys Chem A*, 2020, 124: 8330–8340
 - 45 Schmidt J, Shi J, Borlido P, et al. Predicting the thermodynamic stability of solids combining density functional theory and machine learning. *Chem Mater*, 2017, 29: 5090–5103
 - 46 Sun S, Tiihonen A, Oviedo F, et al. A data fusion approach to optimize compositional stability of halide perovskites. *Matter*, 2021, 4: 1305–1322
 - 47 Meftahi N, Surmiak M A, Fürer S O, et al. Machine learning enhanced high-throughput fabrication and optimization of quasi-2D Ruddlesden–Popper perovskite solar cells. *Adv Energy Mater*, 2023, 13: 2203859
 - 48 Omidvar M, Zhang H, Ihalage A A, et al. Accelerated discovery of perovskite solid solutions through automated materials synthesis and characterization. *Nat Commun*, 2024, 15: 6554
 - 49 Zhang Y, Zhou Y. High-throughput multi-scale experiments to probe the stability of metal halide perovskites. *ACS Energy Lett*, 2023, 9: 186–190
 - 50 Samatov M R, Liu D, Zhao L, et al. Ion migration at metal halide perovskite grain boundaries elucidated with a machine learning force field. *J Phys Chem Lett*, 2024, 15: 12362–12369

Summary for “人工智能助力杂化半导体光伏结构设计与稳定性提升”

AI-aided structural design and stability of hybrid semiconductor photovoltaics

Shaoqiang Wang¹, Wei Liu², Yifan Li¹, Xiaochun Zhang¹, Shimin Di^{2*}, Qing Cao^{3*} & Guixiang Li^{1*}

¹ School of Materials Science and Engineering, Southeast University, Nanjing 211189, China

² School of Computer Science and Engineering, Southeast University, Nanjing 211189, China

³ Department of Chemistry and Biochemistry, University of Notre Dame, South Bend, IN 46556 USA

* Corresponding authors, E-mail: shimin.di@seu.edu.cn; qcao2@nd.edu; guixiang.li@seu.edu.cn

Perovskite solar cells (PSCs) have rapidly emerged as a promising candidate for next-generation photovoltaic technologies due to their high power-conversion efficiency, low-temperature solution processability, and compatibility with lightweight and flexible device architectures. To date, the certified efficiency of single-junction PSCs has exceeded 27%, while perovskite/silicon tandem devices have surpassed 34%. Despite these advances, long-term operational stability under realistic working conditions remains the primary barrier to large-scale commercialization.

The stability of PSCs is governed by complex and strongly coupled interactions between intrinsic material properties and external stress factors. Intrinsic factors include crystal composition, phase stability, defect chemistry, and interfacial characteristics, while extrinsic stressors involve illumination, heat, electric fields, moisture, oxygen, and mechanical deformation. The resulting high-dimensional parameter space renders conventional trial-and-error optimization approaches highly inefficient.

Machine learning (ML), as a key branch of artificial intelligence (AI), has recently emerged as a powerful tool for data-driven materials and device design targeting stability optimization. In this review, we summarize AI-assisted strategies to enhance PSC stability from four complementary perspectives: (i) materials component screening, (ii) composition optimization, (iii) interface engineering, and (iv) defect control using density functional theory (DFT) and molecular dynamics (MD)-based modeling.

For materials screening, we review the integration of high-throughput first-principles calculations with ML models to explore the vast chemical space of ABX_3 perovskites, double perovskites, and two-dimensional perovskites, with an emphasis on identifying lead-free, nontoxic, and bandgap-matched light-absorbing materials. Regarding composition optimization, we highlight recent progress using machine learning interatomic potentials and ML-based Gibbs free energy models, which enable the construction of multidimensional phase diagrams and the prediction of phase segregation behavior in multicomponent systems, such as $FA_xCs_{1-x}Pb(I_yBr_{1-y})_3$ alloys.

At the device and interface levels, we discuss representative applications of AI models, including random forest, gradient boosting, and Bayesian optimization, for screening charge transport layers and interface modifiers, reducing energy-level mismatches, suppressing nonradiative recombination, and guiding process optimization in closed-loop experimental platforms. In defect engineering and multiscale modeling, we summarize ML-based surrogate models and ML force fields trained on DFT and MD datasets for predicting defect formation energies, migration barriers, and ion transport behavior in perovskite lattices and grain boundaries.

Finally, we outline key challenges and future opportunities for applying AI to PSC stability research, including the limited availability of high-quality stability datasets, the need for physics-informed multitask models capable of capturing multiscale degradation mechanisms, and the integration of AI with automated high-throughput experimentation and multiphysics device simulations. We argue that establishing FAIR-compliant stability databases, developing automated testing platforms, and advancing synergistic “AI-DFT/MD-device” design frameworks are essential for transforming PSC stability optimization from experience-driven trial-and-error approaches into a data-driven and mechanism-guided engineering science.

artificial intelligence, perovskite solar cells, emerging photovoltaic technology, interface engineering, defect passivation

doi: [10.1360/CSB-2025-5779](https://doi.org/10.1360/CSB-2025-5779)