

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

GÜNEŞ PİLLERİNDE MEZOGÖZENEKLI PEROVSKİTLERİN
YAPI VE KOMPOZİSYONUNUN COMSOL SİMÜLASYONU
PERSPEKTİFİNDEN İNCELENMESİ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Aya KHACHNAOUI

Fizik Anabilim Dalı

EKİM 2024

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

GÜNEŞ PİLLERİNDE MEZOGÖZENEKLİ PEROVSKİTLERİN
YAPI VE KOMPOZİSYONUNUN COMSOL SİMÜLASYONU
PERSPEKTİFİNDEN İNCELENMESİ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Aya KHACHNAOUI

Fizik Anabilim Dalı

Tez Danışmanı: Dr.Öğr.Üyesi Nagihan DELİBAŞ

Ortak Danışman: Prof. Dr. Aligholi Niaei

EKİM 2024

Aya Khachnaoui tarafından hazırlanan “güneş pillerinde mezogözenekli perovskitlerin yapı ve kompozisyonunun comsol simülasyonu perspektifinden incelenmesi ” adlı tez çalışması 08/10/2024 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği/oy çokluğu ile Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı’nda Yüksek Lisans Tezi olarak kabul edilmiştir.

Tez Jürisi

Jüri Başkanı : **Dr.Öğr.Üyesi Nagihan DELİBAŞ** (Danışman)
Sakarya Üniversitesi

Jüri Üyesi : **Prof. Dr. Aligholi NİAEİ** (Ortak Danışman)

Jüri Üyesi : **Dr.Öğr.Üyesi Yusuf KARAKUŞ**
Sakarya Üniversitesi

Jüri Üyesi : **Dr. Öğr. Üyesi N.Berna TEŞNELİ**
Sakarya Uygulamalı Bilimler Üniversitesi

Jüri Üyesi : **Doç. Dr. Ergün NART**
Sakarya Uygulamalı Bilimler Üniversitesi



ETİK İLKE VE KURALLARA UYGUNLUK BEYANNAMESİ

Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Lisansüstü Eğitim-Öğretim Yönetmeliğine ve Yükseköğretim Kurumları Bilimsel Araştırma ve Yayın Etiği Yönergesine uygun olarak hazırlamış olduğum “Güneş pillerinde mezogözenekli perovskitlerin yapı ve kompozisyonunun COMSOL simülasyonu perspektifinden incelenmesi ” başlıklı tezin bana ait, özgün bir çalışma olduğunu; çalışmamın tüm aşamalarında yukarıda belirtilen yönetmelik ve yönergeye uygun davrandığımı, tezin içerdiği yenilik ve sonuçları başka bir yerden almadığımı, tezde kullandığım eserleri usulüne göre kaynak olarak gösterdiğimi, bu tezi başka bir bilim kuruluna akademik amaç ve unvan almak amacıyla vermediğimi ve 20.04.2016 tarihli Resmi Gazete’de yayımlanan Lisansüstü Eğitim ve Öğretim Yönetmeliğinin 9/2 ve 22/2 maddeleri gereğince Sakarya Üniversitesi’nin abonesi olduğu intihal yazılım programı kullanılarak Enstitü tarafından belirlenmiş ölçütlere uygun rapor alındığını, çalışmamla ilgili yaptığım bu beyana aykırı bir durumun ortaya çıkması halinde doğabilecek her türlü hukuki sorumluluğu kabul ettiğimi beyan ederim.

(08/10/2024)

Aya Khachnaoui





Babama ve anneme



TEŞEKKÜR

Yüksek lisans eğitimim boyunca değerli bilgi ve deneyimlerinden yararlandığım, her konuda bilgi ve desteğini almaktan çekinmediğim, araştırmanın planlanmasından yazılmasına kadar tüm aşamalarında yardımlarını esirgemeyen, teşvik eden, aynı titizlikte beni yönlendiren değerli danışman hocam Dr. Öğr. Üyesi Nagihan Delibaş'a teşekkürlerimi sunarım.

Çalışmalarım boyunca tecrübelerini ve desteğini paylaşan değerli hocam Prof. Dr. Aligholi Niaei'ye çok teşekkür ederim.

İtalya'da Erasmus dönemi boyunca yardımlarını ve desteğini paylaşan değerli hocam Prof. Dr. Mastroserio Annalisa'ya çok teşekkür ederim.

Tezin her aşamasında yardımlarını esirgemeyen Cihan Atas ve S. Reza Hosseini ve Mahsa Bahramgor arkadaşlarıma da teşekkürü bir borç bilirim.

Her zaman maddi-manevi desteğini esirgemeyen aileme çok teşekkür ederim.

Ayrıca bu tez çalışması, Sakarya Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Koordinatörlüğü tarafından Uluslararası İkili İşbirliği (ULIP) 2022-16-36-36 nolu proje kapsamında desteklendiği için teşekkürlerimi sunarım.

Aya KHACHNAOUI



İÇİNDEKİLER

Sayfa

ETİK İLKE VE KURALLARA UYGUNLUK BEYANNAMESİ	v
TEŞEKKÜR	ix
İÇİNDEKİLER	xi
KISALTMALAR	xv
SİMGELER	xvii
TABLO LİSTESİ	xix
ŞEKİL LİSTESİ	xxi
ÖZET	xxiii
SUMMARY	xxv
1. GİRİŞ	1
1.1. Tezin Kapsamı	2
1.2. Tezin Amacı	2
1.3. Tezin Yöntemi	2
2. LİTERATÜR İNCELEMESİ	3
2.1. Güneş Pili Uygulamalarında Perovskit Malzemelerine Genel Bakış	3
2.1.1. Özellikler ve avantajlar	3
2.1.2. Zorluklar ve araştırma yönleri	3
2.2. Mezogözenekli Yapılar Ve Güneş Hücresi Performansına Etkileri Üzerine Önceki Araştırmalar	4
2.2.1. Bulgular	4
2.2.2. Cihaz performansı üzerindeki etkisi	4
2.3. Güneş Pili Araştırmalarında COMSOL Simülasyonu Üzerine Önceki Çalışmalar	4
2.3.1. Uygulamalar	5
2.3.2. Önemli katkılar	5
2.3.3. Vaka çalışmaları	5
3. TEORİK BÖLÜM	7
3.1. Güneş Enerjisi Dönüşümünün Prensipleri	7
3.1.1. Güneş radyasyonuna genel bakış	7
3.1.2. Güneş enerjisi dönüşümünün önemi	7
3.1.3. Güneş enerjisi teknolojilerinin tarihsel gelişimi	8
3.2. Fotovoltaik Etkinliğin Temelleri	8
3.2.1. Fotovoltaik etki	8
3.2.2. Fotovoltaik hücrenin yapısı	9
3.2.3. Farklı Nesil Fotovoltaik Hücreler	9
3.2.3.1. Birinci Nesil Hücreler Kristalin Silisyum Güneş Hücreleri	9
3.2.3.2. İkinci nesil hücreler ince film güneş hücreleri	10
3.2.3.3. Üçüncü nesil hücreler	10
3.2.4. Bir fotovoltaik hücrenin i(v) karakteristiği	10

3.2.5. Karakteristik parametreler.....	11
3.2.5.1. 1 güneş pili ı-v (akım-gerilim) karakteristiği	12
3.2.5.2. Kısa devre akımı (Isc)	13
3.2.5.3. Açık devre voltajı (Voc).....	13
3.2.5.4. Çalışma noktası Pm (Vm, Im).....	14
3.2.5.5. Doldurma faktörü (FF)	14
3.2.6. Fotovoltaik dönüşümün mekanizmaları	15
3.2.7. Fotovoltaiklerin avantajları Ve dezavantajları	15
3.2.7.1. Avantajları	15
3.2.7.2. Sakıncaları.....	16
3.2.8. Yarı iletkenlerde üretim ve rekombinasyon	16
3.2.8.1. Taşıyıcının üretimi	16
3.2.8.2. Taşıyıcı rekombinasyon süreci.....	16
3.3. Fotovoltaikler İçin Perovskit	17
3.3.1. Perovskit malzemesi.....	17
3.3.2. Perovskitin kristalografik yapısı	17
3.3.3. Perovskitin morfolojik yapısı	19
3.3.4. Perovskitin stabilitesi	20
3.3.5. Optoelektronik özellikler.....	21
3.3.5.1. Optik özellikler.....	21
3.3.5.2. Elektronik özellikler	22
3.3.6. Perovskit hücresinin çalışması	23
3.3.7. Perovskit hücrelerinin yapıları	25
3.3.7.1. Mezogözenekli toplayıcı yapı	25
3.3.7.2. Düzlemsel toplayıcı yapısı	26
3.3.8. Perovskitin toksisitesini azaltmak	27
3.3.8.1. Elektron taşıma katmanı (ETL).....	27
3.3.8.2. Delik taşıma katmanı (HTL)	27
3.4. COMSOL Multiphysics Simülasyon Platformu.....	27
3.4.1. Giriş.....	27
3.4.2. COMSOL multiphysics.....	28
3.4.3. Uygulama alanları	28
3.4.4. Performans	30
3.4.5. Yazılım arayüzünün genel açıklaması.....	30
3.4.6. Farklı simülasyon adımlarının genel açıklaması.....	31
3.4.6.1. Yazılımı başlatma.....	31
3.4.6.2. Uzay boyutunun seçimi	32
3.4.6.3. Fizik seçimi	32
3.4.6.4. Çalışmayı seçme.....	32
3.4.6.5. Geometriyi tanımlama	33
3.4.6.6. Malzeme seçimi.....	33
3.4.6.7. Mesh (ağ yapısı)	34
3.4.6.8. Simülasyonun başlatılması ve sonuçların analizi.....	34
3.4.7. Grafik penceresi	34
3.4.7.1. Çizgi grafiği:	34
3.4.7.2. Nokta grafiği:	35
3.4.8. Sonuç.....	35
4. DENEYSEL KISIM	37
4.1. İlk Simülasyon.....	39
4.2. Malzemeler	40

4.3. Geometri Ağı.....	41
4.4. Çözücü Seçimi Ve Simülasyonun Başlatılması	42
4.5. İkinci Simülasyon.....	42
4.6. Üçüncü Simülasyon.....	44
5. SONUÇLAR VE YORUMLAR BÖLÜMÜ	47
5.1. Brinci Simülasyon	47
5.2. İkinci Simülasyon.....	50
5.3. Üçüncü Simülasyon.....	54
6. ÇÖZÜM	59
6.1. Mezoporöz Perovskit Güneş Pili Yapılarının Karşılaştırmalı Analizi	59
6.2. Performans Karşılaştırması	59
6.3. Genel Sonuç	60
KAYNAKLAR	61
ÖZGEÇMİŞ.....	67





KISALTMALAR

ABX₃	: Perovskite genel denklemi
CIGS	: Amorf silikon, bakır indiyum, galyum selenit
CaTiO₃	: Kalsiyum Titanat
Cl	: Klor
I	: İyot
eV	: Elektron Volt
CH (NH₂)₂⁺	: Aminyum
Cs⁺	: Sezyum
Sn²⁺	: Kalay
Pb²⁺	: Kurşun iyonları
Ge²⁺	: Germanyum
CH₃NH₃⁺	: Metilamonyum
Br⁻	: Brom iyonları
TiO₂	: Titanyum oksit
mpTiO₂	: mezogözenekli Titanyum oksit
SnO₂	: Kalay oksit
mpSnO₂	: mezogözenekli Kalay oksit
VOC	: Açık devre voltajı
ISC	: Kısa devre akımı
FF	: Doldurma faktörü
QE	: Kuantum verimliliği
PCE	: Güç dönüştürme verimliliği
ETL	: Elektron Taşıma Elemanı
HTL	: Delik Taşıma Elemanı
FTO	:Flor katkılı Kalay Oksit
PV	:Fotovoltaik



SİMGELER

I	: Akım
K	: Boltzmann sabiti.
Q	: Temel yük $1,6 \times 10^{-19}$ C.
T	: Kelvin cinsinden sıcaklık.
T	: tolerans faktörü
T(t)	: Zaman
V	: Hız
H	: Verimlilik



TABLO LİSTESİ

Sayfa

Tablo 3.1. Perovskitin farklı ailelerine karşılık gelen farklı moleküller.	18
Tablo 3.2. Fotovoltaik alanında en yaygın perovskitlerin farklı bileşikleri [12]–[15].	19
Tablo 4.1. Küresel Parametreler.	37
Tablo 4.2. Geometri parametreleri.	37
Tablo 4.3. Çalışma Parametreleri.	38
Tablo 4.4. Mesh Parametreleri.	38
Tablo 4.5. Havanın optoelektronik parametresi.	38
Tablo 4.6. FTO'nun optoelektronik parametresi.	39
Tablo 4.7. CH ₃ NH ₃ PbI ₃ 'ün optoelektronik parametresi.	39
Tablo 4.8. AU'nun optoelektronik parametresi.	39
Tablo 4.9. Geometri Parametreleri.	40
Tablo 4.10. Mesh Parametreleri.	40
Tablo 4.11. TiO ₂ 'nin Malzeme Parametreleri.	40
Tablo 4.12. TiO ₂ 'nin Malzeme Parametreleri.	41
Tablo 4.13. spiro-MeOTAD'nin Malzeme Parametreleri.	41
Tablo 4.14. Karbon'unu Malzeme Parametreleri.	43
Tablo 4.15. Geometri Parametreleri.	43
Tablo 4.16. Mesh Parametreleri.	43
Tablo 4.17. SnO ₂ 'ini Malzeme Parametreleri.	44
Tablo 4.18. Geometri Parametreleri.	44
Tablo 4.19. Mesh Parametreleri.	44
Tablo 4.20. Mezogözenekli SnO ₂ 'ini Malzeme Parametreleri.	45
Tablo 5.1. I(V) ölçüm simülasyonundan değerler 1.	47
Tablo 5.2. I(V) ölçüm simülasyonundan değerler 2.	51
Tablo 5.3. I(V) ölçüm simülasyonundan değerler 3.	54



ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa

Şekil 3.1. Güneş Radyasyonuna.....	7
Şekil 3.2. Fotovoltaik etki.....	8
Şekil 3.3. Bir Hücresinin Genel Yapısı PV.	9
Şekil 3.4. Karanlıkta ve aydınlatma altında bir güneş hücresinin akım-gerilim özellikleri [2]......	10
Şekil 3.5. Bir fotovoltaik jeneratörün I(V) karakteristiğinin farklı bölgeleri.	11
Şekil 3.6. I-V Eğrisi.	12
Şekil 3.7. 1 Taşıyıcı Rekombinasyon Süreci 2. Taşıyıcının üretimi.....	17
Şekil 3.8. Perovskit yapısının gösterimi.	18
Şekil 3.9. NREL tarafından onaylanan perovskit güneş hücrelerinin verimlerinin ilerleme grafiği, bunları oluşturan perovskitlerin özgülülüğü ile [12].	19
Şekil 3.10. TiO ₂ üzerinde biriken MAPI perovskit katmanlarının SEM görüntüleri, a) [25]; b) [26]......	20
Şekil 3.11. Malzeme soğurma eğrisi: c-Si, a-Si: H (%10H), GaAs ve CH ₃ NH ₃ PbI ₃ [33].	21
Şekil 3.12. a) Farklı perovskitlerin (MAPI, FAPI, CsPI) emilim eğrileri; b) FAPbI _y Br _{3-y} 'nin y oranına bağlı emilim eğrileri [34].	22
Şekil 3.13. Perovskit güneş pilinin genel yapısı. Alt tabaka burada şeffaftır ve aydınlatma arka taraftan gelir.....	24
Şekil 3.14. Yük ayrımı sırasında enerji seviyelerinin bant eğriliği.....	24
Şekil 3.15. Perovskit hücresinin enerji bandı diyagramı.	24
Şekil 3.16. n-i-p ve p-i-n perovskit hücreleri için mezogözenekli tip yapı (aydınlatma burada arka taraftadır).	25
Şekil 3.17. n-i-p ve p-i-n perovskit hücreleri için düzlemsel tip yapı (aydınlatma burada arka taraftadır).	26
Şekil 3.18. Yazılım başlatma penceresi.	28
Şekil 3.19. COMSOL MULTIPHYSICS'teki farklı simülasyon modelleri.	29
Şekil 3.20. Yazılım arayüzü.	31
Şekil 3.21. Yazılım başlatma penceresi.	31
Şekil 3.22. Simülasyonun farklı boyutları.	32
Şekil 3.23. Hangi fiziğin kullanılacağını seçilmesi.	32
Şekil 3.24. Çalışma seçimi.	32
Şekil 3.25. İstenen geometrinin oluşturulması.....	33
Şekil 3.26. Çeşitli malzemelerin seçimi.....	33
Şekil 3.27. Ağ üzerinde örnek.	34
Şekil 4.1. Yapı ağı 1.....	42
Şekil 4.2. Yapı ağı 2.....	43
Şekil 4.3. Yapı ağı 3.....	45
Şekil 5.1. I(V) eğrisini 1.	47

Şekil 5.2. Yüzey Shockley-Read-Hall rekombinasyoterimi ($1/(m^3*s)$).	48
Şekil 5.3. Yüzey: Shockley-Read-Hall üretim terimi ($1/(m^3*s)$).	48
Şekil 5.4. Üretimdeki sıcaklık yüzeyi (K).	49
Şekil 5.5. Yüzey:Elektron konsantrasyonu($1/cm^3$).	50
Şekil 5.6. Yüzey: Delik konsantrasyonu($1/cm^3$).	51
Şekil 5.7. I(V) eğrisini 2.	51
Şekil 5.8. Yüzey: Shockley-Read-Hall rekombinasyon terimi ($1/(m^3*s)$).	51
Şekil 5.9. Yüzey: Shockley-Read-Hall üretim terimi ($1/(m^3*s)$).	52
Şekil 5.10. Yüzey ve Sıcaklık üretimi (K).	52
Şekil 5.11. Yüzey Elektron konsantrasyonu($1/cm^3$).	53
Şekil 5.12. Yüzey Delik konsantrasyonu($1/cm^3$).	53
Şekil 5.13. I(V) eğrisini 3.	54
Şekil 5.14. Yüzey: Shockley-Read-Hall rekombinasyon terimi ($1/(m^3*s)$).	55
Şekil 5.15. Yüzey: Shockley-Read-Hall üretim terimi ($1/(m^3*s)$).	55
Şekil 5.16. Yüzey ve Sıcaklık üretimi (K).	56
Şekil 5.17. Yüzey Elektron konsantrasyonu($1/cm^3$).	56
Şekil 5.18. Yüzey Delik konsantrasyonu($1/cm^3$).	57
Şekil 5.19. Yüzey: Elektrik potansiyeli (V).	57

GÜNEŞ PİLLERİNDE MEZOGÖZENEKLİ PEROVSKİTLERİN YAPI VE KOMPOZİSYONUNUN COMSOL SİMÜLASYONU PERSPEKTİFİNDEN İNCELENMESİ

ÖZET

Bu tez çalışmasında mezogözenekli perovskitlerin güneş hücrelerinde emici katman olarak kullanımını COMSOL simülasyonları aracılığıyla kapsamlı bir şekilde araştırılmaktadır. Tezin temel amacı, güneş hücrelerinde emici tabakanın verimliliğini optimize etmek, en uygun malzemeleri belirlemek, çeşitli yapı kombinasyonlarını incelemek ve perovskit güneş hücrelerinin (PSC'ler) performansını ve optik-elektriksel özelliklerini tahmin etmektir. Bu bağlamda, çalışmanın başlangıcında, verimliliği artırmak, kararlılığı sağlamak ve kurşun toksisitesini azaltmak amacıyla, site A'da organik ve inorganik katyonların, site B'de inorganik katyonların ve site X'te halojenürlerin karışımından oluşan hibrit perovskit yapıların (ABX₃) sentezlenmesi, modifikasyonu ve optimizasyonu üzerinde durulacaktır.

Tezde, yüksek performans ve kararlılık gösteren malzemelerin seçimi, çalışmanın en önemli hedeflerinden biri olarak öne çıkmaktadır. Bu amaç doğrultusunda, perovskit filminin kristal yapısı, atomik pozisyonları, site doluluğu gibi unsurlar detaylı bir şekilde analiz edilecektir. Kristal yapı özellikleri, morfoloji ve yüzey özellikleri ile bu özelliklerin optik ve elektriksel davranışları arasındaki ilişkilerin incelenmesi, optimum perovskit tasarımını oluşturmak açısından kritik öneme sahiptir. Bu ilişkilerin sistematik bir şekilde anlaşılması, PSC'lerin tasarımında en ideal malzemelerin ve yapı kombinasyonlarının belirlenmesine olanak tanıyacaktır.

Buna ek olarak, tez çalışması, çevresel sorunlara ve özellikle kurşun toksisitesine alternatif olarak kullanılabilir katyon ve halojenürlerin kapsamlı bir incelemesini de içermektedir. Çalışma, çevresel etkileri azaltırken cihaz performansını koruma veya artırma potansiyeline sahip alternatif malzemelerin kullanımını değerlendirecektir. Özellikle kurşun içermeyen alternatiflerin, çevre dostu güneş hücreleri geliştirme sürecine katkıda bulunma potansiyeli bu çalışmanın önemli bir parçasını oluşturmaktadır.

Çalışmanın nihai hedefi, bu faktörler arasındaki sistematik ilişkileri ortaya koyarak, perovskit güneş hücreleri için en uygun tasarımı elde etmektir. Bu kapsamlı araştırma, detaylı simülasyon ve analizlerle PSC'lerin performansını optimize etmeyi, daha verimli, kararlı ve çevre dostu güneş hücrelerinin geliştirilmesine katkıda bulunmayı amaçlamaktadır. Ayrıca, çevresel sorunların ve kurşun toksisitesinin azaltılması amacıyla farklı katyon ve halojenürlerin kullanımı da kapsamlı bir şekilde incelenecektir. Bu alternatif malzemelerin, çevresel etkileri minimize edilerek cihazın performansını koruma veya iyileştirme potansiyeli tez kapsamında değerlendirilecektir. Gerçekleştirilen bu çalışma ile PSC teknolojisinin gelişimine ve yaygınlaşmasına önemli bir katkı sağlanması hedeflenmektedir. Böylece, sürdürülebilir enerji çözümleri arayışında perovskit güneş hücrelerinin gelecekteki potansiyelini daha da artırmak için değerli bilgiler sunacak ve bu alandaki önemli boşlukları dolduracaktır.



INVESTIGATION OF STRUCTURE AND COMPOSITION OF MESOPOROUS PEROVSKITES IN SOLAR CELLS FROM COMSOL SIMULATION PERSPECTIVE

SUMMARY

This thesis investigates the use of mesoporous perovskites as absorber layers in solar cells, leveraging COMSOL simulations to explore the material's structure and composition. The primary objective of this research is to design and optimize the absorber layer, identify optimal materials, explore various structural configurations, and predict the performance and optoelectronic properties of perovskite solar cells (PSCs). By addressing these key aspects, the research aims to contribute to the development of more efficient, stable, and environmentally friendly PSCs, which hold significant promise for the future of renewable energy technologies.

The research begins with an in-depth analysis of the absorber layer, a critical component of PSCs that significantly influences their overall efficiency and stability. In particular, the focus is on mesoporous perovskites due to their unique structural properties, which allow for enhanced light absorption and charge transport. These properties make them ideal candidates for high-performance solar cells, but their optimization requires careful consideration of material selection, structural design, and fabrication processes.

To achieve these objectives, the research leverages COMSOL Multiphysics, a powerful simulation tool that allows for the detailed modeling of complex physical phenomena. COMSOL's capabilities in simulating electrical, optical, and thermal properties of materials are particularly useful in this context, as they enable the precise prediction of how different perovskite structures will perform in real-world solar cell applications.

The research methodology involves several key steps:

Material Synthesis and Optimization: The first phase of the research focuses on the synthesis, modification, and optimization of hybrid perovskite structures with the general formula ABX_3 . Here, site A is occupied by a mixture of organic and inorganic cations, site B by inorganic cations, and site X by halides. The combination of these materials is designed to improve the efficiency, stability, and environmental safety of the PSCs.

Simulation and Analysis: Using COMSOL, detailed simulations are conducted to analyze the crystal structure of the perovskite films. This includes determining atomic positions, site occupancy, and other critical parameters that influence the material's optoelectronic properties. The simulation results provide insights into how different material compositions and structural configurations affect the overall performance of the solar cells.

Structure-Property Relationship: One of the key goals of this research is to establish a systematic relationship between the crystal structure, morphology, surface

properties, and the optical and electrical characteristics of the perovskite films. By understanding these relationships, it becomes possible to design optimized perovskite structures that offer the best combination of efficiency and stability.

Environmental Considerations: In addition to optimizing performance, the research also addresses environmental concerns associated with PSCs, particularly the issue of lead toxicity. Alternative cations and halides are explored as potential replacements for lead in the perovskite structure. The impact of these alternative materials on both the performance and environmental footprint of the solar cells is thoroughly analyzed.

Performance Prediction: The final phase of the research involves predicting the performance of the optimized perovskite structures in solar cell applications. This includes not only assessing their efficiency and stability but also evaluating their long-term durability and scalability for industrial production.

The significance of this research lies in its potential to advance the field of solar energy by providing a more detailed understanding of how to optimize perovskite materials for use in PSCs. By systematically exploring the relationship between material composition, structure, and performance, the research offers valuable insights that could lead to the development of PSCs with significantly higher efficiency and stability than current technologies.

One of the key contributions of this research is its focus on environmental sustainability. The exploration of alternative materials to reduce or eliminate lead toxicity in PSCs is particularly important given the increasing concern over the environmental impact of electronic waste. By identifying safer materials that do not compromise performance, the research paves the way for the development of more eco-friendly solar technologies.

Furthermore, the use of COMSOL simulations in this research highlights the importance of advanced modeling tools in materials science. The ability to accurately predict the behavior of complex materials in different environmental conditions is crucial for the development of next-generation solar cells. The insights gained from these simulations can inform not only the design of PSCs but also other applications where perovskite materials might be used, such as in light-emitting diodes (LEDs), photodetectors, and other optoelectronic devices.

Despite the promising results, several challenges remain in the development of PSCs. One of the main challenges is the long-term stability of perovskite materials, which can degrade under environmental stressors such as heat, moisture, and UV radiation. The research addresses these issues by exploring different material compositions and structural designs, but further work is needed to develop PSCs that can withstand these conditions over extended periods.

Another challenge is the scalability of the production process. While the research focuses on optimizing the material properties of PSCs, translating these findings into scalable manufacturing processes remains a significant hurdle. Future research should explore methods for large-scale production of optimized perovskite materials, including the development of cost-effective fabrication techniques and the integration of PSCs into existing solar technologies.

Finally, the research highlights the need for continued exploration of alternative materials. While the substitution of lead with other cations and halides shows promise, more work is needed to identify materials that offer the same or better performance while being readily available and environmentally benign. The exploration of new

materials, combined with advances in simulation and modeling techniques, will be crucial for the continued development of PSC technology.

In conclusion, this thesis represents a significant contribution to the field of perovskite solar cells by providing a comprehensive analysis of how to optimize these materials for improved performance and environmental sustainability. Through the use of COMSOL simulations, the research offers detailed insights into the relationship between material composition, structure, and optoelectronic properties, paving the way for the development of more efficient, stable, and eco-friendly PSCs. As the world continues to seek out renewable energy solutions, the findings of this research could play a crucial role in advancing solar technology and promoting the widespread adoption of PSCs in various applications. Future research will build on these findings to address the remaining challenges and further enhance the potential of perovskite materials in the energy sector.





1. GİRİŞ

Güneş enerjisi, çevresel sürdürülebilirlik ve enerji güvenliği konusundaki artan endişeleri azaltmak için en umut verici yenilenebilir enerji kaynaklarından biri olarak ortaya çıkmıştır. Fotovoltaik (PV) hücreler olarak da bilinen güneş hücreleri, güneş enerjisini kullanma ve elektriğe dönüştürmede önemli bir rol oynar. Yıllar içinde, güneş hücresi teknolojisinde önemli ilerlemeler kaydedilmiş ve bu da artan verimlilik, uygun fiyat ve yaygın benimsenmeye yol açmıştır.

Perovskit malzemeler, yüksek emilim katsayıları, uzun taşıyıcı ömürleri ve bant aralıklarının kolayca ayarlanabilirliği gibi olağanüstü optoelektronik özellikleri nedeniyle güneş hücresi teknolojisi alanında önemli ilgi görmüştür. Bu özellikler, perovskitleri fotovoltaik uygulamalar için oldukça cazip hale getirerek düşük üretim maliyetleriyle yüksek performanslı güneş hücreleri için potansiyel sunmaktadır.

Perovskit bazlı güneş hücreleri alanında, mezogözenekli yapılar cihaz performansını etkileyen kritik bir bileşen olarak ortaya çıkmıştır. Nanoölçekli gözeneklerin birbirine bağlı ağlarıyla karakterize edilen mezogözenekli perovskit katmanları, gelişmiş yüzey alanı ve iyileştirilmiş yük taşıma özellikleri sunarak verimli yük çıkarımını kolaylaştırır ve rekombinasyon kayıplarını en aza indirir.

Mezogözenekli perovskit güneş hücrelerine ilişkin anlayışımızı daha da ilerletmek ve performanslarını optimize etmek için hesaplamalı simülasyon araçları vazgeçilmez hale gelmiştir. Bunlar arasında COMSOL Multiphysics, güneş hücresi çalışmasında yer alan çeşitli fiziksel fenomenler arasındaki karmaşık etkileşimleri simüle edebilen çok yönlü ve güçlü bir yazılım platformu olarak öne çıkmaktadır. Elektromanyetik dalga yayılımı, yük taşıma ve kimyasal reaksiyonlar gibi birleştirilmiş çoklu fizik fenomenlerini modelleme yeteneği, onu mezogözenekli perovskit güneş hücrelerini incelemek için ideal bir araç haline getirir.

Bu araştırmanın temel amacı, COMSOL MULTIPHYSICS6.1 simülasyonunu kullanarak mezogözenekli perovskitlerin güneş hücrelerinde emici yapısını ve bileşimini araştırmaktır. Bu çalışma, aşağıdaki araştırma problemini ele almayı

amaçlamaktadır: Mezogözenekli perovskitlerin yapısal ve bileşimsel özellikleri güneş hücrelerinin performansını nasıl etkiler? Bu kapsamlı hedefe ulaşmak için belirli hedefler şunlardır: (1) mezogözenekli perovskit malzemelerin yapısal özelliklerini karakterize etmek, (2) yapısal parametrelerin güneş hücresi performansı üzerindeki etkisini analiz etmek, (3) bileşimsel varyasyonların cihaz verimliliği üzerindeki etkilerini araştırmak ve (4) güneş hücresi tasarımını optimize etmek için yapısal ve bileşimsel içgörülerini entegre etmek.

Bu araştırma, titiz simülasyon tabanlı analiz yoluyla, mezogözenekli perovskit yapısı/bileşimi ile güneş hücresi performansı arasındaki ilişkiye ilişkin hipotezleri doğrulamayı amaçlamaktadır. Bu çalışma, temel yapı-işlev ilişkilerini açıklayarak, mezogözenekli perovskit malzemelerin yeni nesil güneş hücresi teknolojilerindeki tam potansiyelini gerçekleştirmeyi amaçlayan devam eden çabalara katkıda bulunmayı amaçlamaktadır.

1.1. Tezin Kapsamı

Simülasyon çalışmasının deneysel testlerin yürütülmesinde gereksiz maliyetleri azalttığı ve güneş pilinin performansını optimize etme imkânı sağladığı açıktır. Bu nedenle, deneysel araştırmalarla birlikte, matematiksel modelleme ve simülasyon yazılımı yetenekleri de kullanılacaktır.

1.2. Tezin Amacı

Simülasyon çalışmasının deneysel testlerin yürütülmesinde gereksiz maliyetleri azalttığı ve güneş pilinin performansını optimize etme imkânı sağladığı açıktır. Bu nedenle, deneysel araştırmalarla birlikte, matematiksel modelleme ve simülasyon yazılımı yetenekleri de kullanılacaktır.

1.3. Tezin Yöntemi

Matematiksel modelleme ve sayısal simülasyonun kullanımı, Fotovoltaik (PV) cihazının fiziğine dair fikir veren ve çeşitli faktörlerin güneş pilinin genel performansı üzerindeki etkisini analiz eden güçlü bir araçtır.

2. LİTERATÜR İNCELEMESİ

2.1. Güneş Pili Uygulamalarında Perovskit Malzemelerine Genel Bakış

Perovskit malzemeler, olağanüstü optoelektronik özellikleri ve uygun maliyetli üretim yöntemleri nedeniyle güneş pili araştırmaları alanında önemli ilgi görmüştür. Mineral perovskitten (kalsiyum titanat) adını alan bu malzemeler genellikle ABX_3 formülüyle temsil edilir; burada 'A' organik bir katyondur (örneğin metilamonyum), 'B' metal bir katyondur (örneğin kurşun veya kalay) ve 'X' bir halojenür anyonudur (örneğin iyot, brom veya klor).

2.1.1. Özellikler ve avantajlar

Yüksek Emilim Katsayısı: Perovskit'ler yüksek emilim katsayıları sergiler ve bu da geleneksel silikon bazlı güneş pillerine kıyasla daha ince katmanlarla güneş ışığını verimli bir şekilde emmelerine olanak tanır.

Bant Aralığı Ayarlanabilirliği: Perovskit malzemenin bileşimini değiştirerek bant aralığı ayarlanabilir ve malzeme güneş spektrumunun farklı kısımları için optimize edilebilir.

Düşük Maliyetli Üretim: Perovskit güneş hücreleri, düşük sıcaklıklı çözelti işleme teknikleri kullanılarak üretilebilir ve bu da onları geleneksel silikon güneş hücrelerine kıyasla üretmeyi daha ucuz hale getirir.

Yüksek Güç Dönüşüm Verimliliği (PCE): Perovskit güneş hücreleri, bazı cihazların %25'i aşarak diğer önde gelen fotovoltaiik teknolojilerle rekabet edebilmesini sağlayarak hızla yüksek PCE'lere ulaşmıştır.

2.1.2. Zorluklar ve araştırma yönleri

Perovskit güneş hücreleri, umut vadeden özelliklerine rağmen, aşağıdakiler de dahil olmak üzere çeşitli zorluklarla karşı karşıyadır:

Kararlılık: Perovskit malzemeler nem, oksijen ve UV ışığından kaynaklanan bozulmaya karşı hassastır.

Toksosite: Birçok perovskit formülasyonunda kurşun kullanımı, çevresel ve sağlık riskleri oluşturur ve kurşunsuz alternatiflere yönelik araştırmaları teşvik eder.

Ölçeklenebilirlik: Yüksek verimlilik ve kararlılığı korurken laboratuvar ölçekli üretimden büyük ölçekli üretime geçiş kritik bir engeldir.

2.2. Mezogözenekli Yapılar Ve Güneş Hücresi Performansına Etkileri Üzerine Önceki Araştırmalar

Mezogözenekli yapılar, ışık emilimini artırma, yük taşınmasını kolaylaştırma ve genel cihaz verimliliğini iyileştirme yetenekleri nedeniyle perovskit güneş hücreleri bağlamında kapsamlı bir şekilde incelenmiştir. Bu yapılar tipik olarak, perovskit birikimi için yüksek bir yüzey alanı sağlayan titanyum dioksit (TiO_2) veya alümina (Al_2O_3) gibi malzemelerden yapılmış bir iskeleden oluşur.

2.2.1. Bulgular

Gelişmiş Işık Emilimi: Mezogözenekli iskele, cihaz içindeki ışığın optik yol uzunluğunu artırarak ışık hasadının iyileştirilmesine yol açar.

Gelişmiş Yük Taşımacılığı: Mezogözenekli malzemeler, elektron veya delik taşıması için sürekli bir ağ sağlayarak verimli yük ayrımını ve taşınmasını kolaylaştırır.

Yüzey Alanı ve Morfoloji: Mezogözenekli yapının sağladığı artan yüzey alanı, perovskit kristalleşme sürecini geliştirerek film kalitesinin ve cihaz performansının iyileştirilmesine yol açar.

2.2.2. Cihaz performansı üzerindeki etkisi

Çalışmalar, perovskit güneş hücrelerine mezogözenekli yapıların dahil edilmesinin performanslarını önemli ölçüde artırabileceğini göstermiştir. Örneğin, mezogözenekli TiO_2 iskelelerinin verimli elektron taşıma yolları sağlayarak ve rekombinasyon kayıplarını azaltarak PCE'yi iyileştirdiği gösterilmiştir. Ek olarak, mezogözenekli tabakanın morfolojisi, perovskit infiltrasyonunu ve kristalleşmesini optimize etmek için ayarlanabilir ve bu da cihaz verimliliğini daha da artırabilir.

2.3. Güneş Pili Araştırmalarında COMSOL Simülasyonu Üzerine Önceki Çalışmalar

COMSOL Multiphysics, elektriksel, termal ve optik özellikler de dahil olmak üzere çeşitli fiziksel olayları modellemek ve analiz etmek için güneş hücrelerinin

incelenmesinde yaygın olarak kullanılan güçlü bir simülasyon yazılımıdır. Çoklu fizik yetenekleri, araştırmacıların güneş hücreleri içindeki karmaşık etkileşimleri simüle etmelerine ve tasarımlarını ve performanslarını optimize etmelerine olanak tanır.

2.3.1. Uygulamalar

Optik Simülasyonlar: COMSOL, güneş hücrelerindeki ışık Emilimini ve saçılmasını simüle ederek ışık hasadını en üst düzeye çıkaran yapılar tasarlamaya yardımcı olabilir.

Elektrik Simülasyonları: Yazılım, yük taşıma ve rekombinasyon süreçlerini modelleyebilir ve farklı malzemelerin ve cihaz mimarilerinin elektronik özelliklerine ilişkin içgörüler sağlayabilir.

Termal Simülasyonlar: COMSOL, kararlılığı ve performansı değerlendirmek için çok önemli olan, çalışma koşulları altında güneş hücreleri içindeki sıcaklık dağılımlarını tahmin edebilir.

2.3.2. Önemli katkılar

Katman Kalınlıklarının Optimizasyonu: COMSOL simülasyonları, perovskit güneş hücrelerindeki çeşitli katmanların kalınlığını optimize etmek ve ışık Emilimini yük taşıma verimliliğiyle dengelemek için kullanılmıştır.

Kusur ve Eksikliklerin Analizi: Yazılım, malzeme kusurlarının ve arayüz kusurlarının cihaz performansı üzerindeki etkisini anlamaya yardımcı olur ve malzeme kalitesi ve üretim tekniklerindeki iyileştirmelere rehberlik eder.

Yeni Mimarilerin Tasarımı: Araştırmacılar, fotovoltaik cihazların verimlilik sınırlarını zorlamayı amaçlayan tandem hücreler ve çoklu bağlantı hücreleri gibi yeni güneş hücresi mimarilerini keşfetmek ve tasarlamak için COMSOL'u kullandılar.

2.3.3. Vaka çalışmaları

Perovskit Güneş Hücreleri: Çok sayıda çalışma, cihaz verimliliğini ve kararlılığını iyileştirmek için iyon göçü, kusur durumları ve arayüz özellikleri gibi faktörleri analiz ederek perovskit güneş hücrelerini modellemek için COMSOL'u kullandı.

Organik Fotovoltaikler: COMSOL ayrıca organik güneş hücrelerini incelemek için de kullanıldı ve moleküler yönelimin, faz ayrımının ve eksiton difüzyonunun cihaz performansı üzerindeki etkisine dair içgörüler sağladı.

Özetle, perovskit malzemeler, mezogözenekli yapılar ve COMSOL simülasyonları hakkındaki literatür, güneş hücresi performansını optimize etmeyi amaçlayan önemli ilerlemeleri ve devam eden araştırma çabalarını vurgulamaktadır. Bu çalışmalar toplu olarak yeni nesil fotovoltaik teknolojilerin anlaşılmasına ve geliştirilmesine katkıda bulunmaktadır.



3. TEORİK BÖLÜM

3.1. Güneş Enerjisi Dönüşümünün Prensipleri

3.1.1. Güneş radyasyonuna genel bakış

Dünya'nın ana enerji kaynağı, ultraviolettten ultraviolete kadar bir dalga uzunluğunun spektrumunu kaplayan güneş radyasyonudur. Dünya yörüngesine ve atmosfer koşullarına göre farklı yoğunluk ve dağılımına sahiptir. Yenilenebilir enerji üretimi, iklim modelleme, tarım ve çevre izleme için, güneş radyasyonunu iyi anlamak çok önemlidir. Verilerin ölçüm ve analizi, güneş enerjisi sistemlerinin geliştirilmesine ve iklim dinamiklerinin incelenmesine katkıda bulunur.



Şekil 3.1. Güneş radyasyonuna

3.1.2. Güneş enerjisi dönüşümünün önemi

Güneş enerjisi, enerji ihtiyacını karşılamak ve çevresel endişeler için vazgeçilmezdir. Fosil yakıtların aksine, bol miktarda, dayanıklı ve çevre dostudur. Fotovoltaik teknolojilerdeki ilerlemeler, güneş enerjisini çeşitli uygulamalar için daha erişilebilir ve esnek hale getiren verimliliği ve erişimi artırdı. Güneş enerjisinin ekonomik ve sosyal faydaları arasında iş yaratma, enerji erişilebilirliğinin iyileştirilmesi, ekonomik teşvik ve enerji maliyetlerinin azaltılması yer alıyor. Araştırma güneş teknolojisini genişletmeye ve akıllı ağlarla entegre etmeye devam ederken, güneş enerjisinin geleceği umut verici görünüyor.

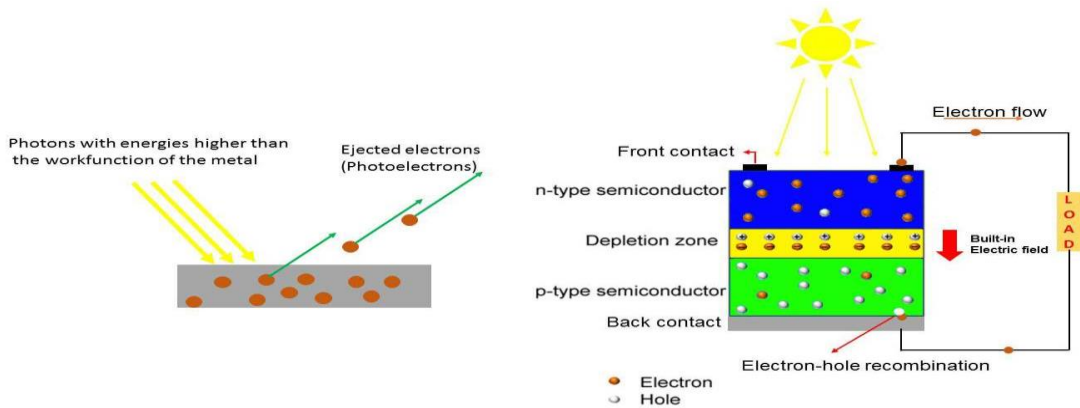
3.1.3. Güneş enerjisi teknolojilerinin tarihsel gelişimi

Güneş enerjisi teknolojileri uzun bir geçmişe sahiptir, eski toplumlarda aydınlatma ve ısı için pasif güneş yöntemlerinin uygulanmasıyla ortaya çıkmıştır. Ancak güneş enerjisi dönüşüm teknolojisinde önemli gelişmeler 19. yüzyıla kadar gerçekleşmedi. Amerikan icatçısı Charles Fritts ilk fonksiyonel güneş hücresini 1883'te yarattı, ancak Fransız bilim adamı Alexandre Edmond Becquerel 1839'da fotovoltaiik etkiyi tanımlamıştı. 20. yüzyılda araştırma ve geliştirme hızlandırıldı ve Bell Laboratuvarları 1954 yılında silikon güneş hücresini icat etti. Güneş enerjisiyle zengin bölgelerdeki güneş ısı teknolojisinin ticarileştirilmesi 1970'lerin enerji krizi sonucunda meydana geldi ve bu da güneşin enerjisine olan ilgi artışına yol açtı. Malzeme bilimi, şebeke entegrasyonu ve güneş enerjisi depolama alanındaki son gelişmeler güneş enerji teknolojilerinin uygulanabilirliğini ve rekabet gücünü artırdı.

3.2. Fotovoltaiik Etkinliğin Temelleri

3.2.1. Fotovoltaiik etki

Fotovoltaiik etki, güneş radyasyonundan elektrik üretmek için fotovoltaiik hücrelerde uygulanır. PV hücreleri üretmek için belirli özelliklere sahip malzemeler kullanılır: yarı iletkenler, çünkü ışığı kolayca emerler ve çoğunlukla farklı şekilde katkılanmış silikondan yapılmış iki katmanın üst üste gelmesi nedeniyle bir elektrik alanı oluşturulmasına izin verirler. Güneş radyasyonu iki terminali olan PV hücresine çarptığında, ışık fotonları enerjilerini belirli elektronlara aktarır, onları atomlarından ayırır ve böylece delikler adı verilen pozitif yük boşlukları bırakır. Bu, hem yarı-nötr bölgelerde hem de uzay yükü bölgesinde bağlantı boyunca çiftler (elektron/delik) oluşturur [1].



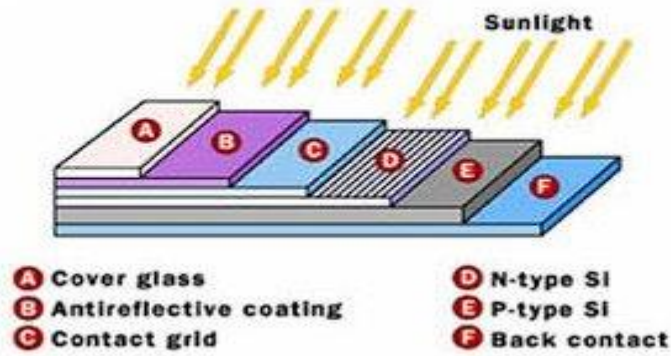
Şekil 3.2. Fotovoltaiik etki.

3.2.2. Fotovoltaik hücrenin yapısı

Fotovoltaik hücre birkaç katmandan oluşur. Bu hücrenin çekirdeğinde, serbest yük taşıyıcıları olarak elektronlar içeren katkılı bir katman (N) ve serbest yük taşıyıcıları olarak delikler içeren başka bir katkılı katman (P) ile temas halinde olan bir katman (N) bulunur. Hücrenin çekirdeğinin her iki tarafında, metalik bir temas görevi gören iletken ve korozyon önleyici bir katman bulunur. Biri katkılı yarı iletken katmanı (P) kaplayan bir katot (+ kutup) görevi görür ve diğer katman yarı iletken katmanı (N) kaplayan bir anot (- kutup) görevi görür.

Ayrıca, silikon oldukça yansıtıcı olduğundan, tüm ışınların emilmesini sağlamak için hücrenin üstüne yansıma önleyici bir kaplama uygulanır. Son olarak, çok kırılğan hücreyi korumak için bir kapak görevi gören bir cam katman gereklidir. Hücrenin toplam kalınlığı bir milimetre mertebesinde.

Yeterli güç elde etmek için hücreler bir güneş paneli oluşturmak üzere birbirine bağlanır.



Şekil 3.3. Bir Hücrenin Genel Yapısı PV.

3.2.3. Farklı Nesil Fotovoltaik Hücreler

Üç nesil fotovoltaik hücre vardır İşte bazı ana tipler:

3.2.3.1. Birinci Nesil Hücreler Kristalin Silisyum Güneş Hücreleri

Bunlar çoğunlukla yaklaşık 0,5 mm kalınlığında katı silikondan, gofretlerden yapılır.

- Monokristalin Silisyum: Tek kristal yapıdan yapılır, yüksek verimlilik ve uzun vadeli güvenilirlik sunar

- Polikristalin Silisyum: Birden fazla küçük silikon kristalinden oluşur, maliyet açısından etkilidir ancak genellikle monokristalin hücrelere kıyasla daha düşük verimliliğe sahiptir.

3.2.3.2. İkinci nesil hücreler ince film güneş hücreleri

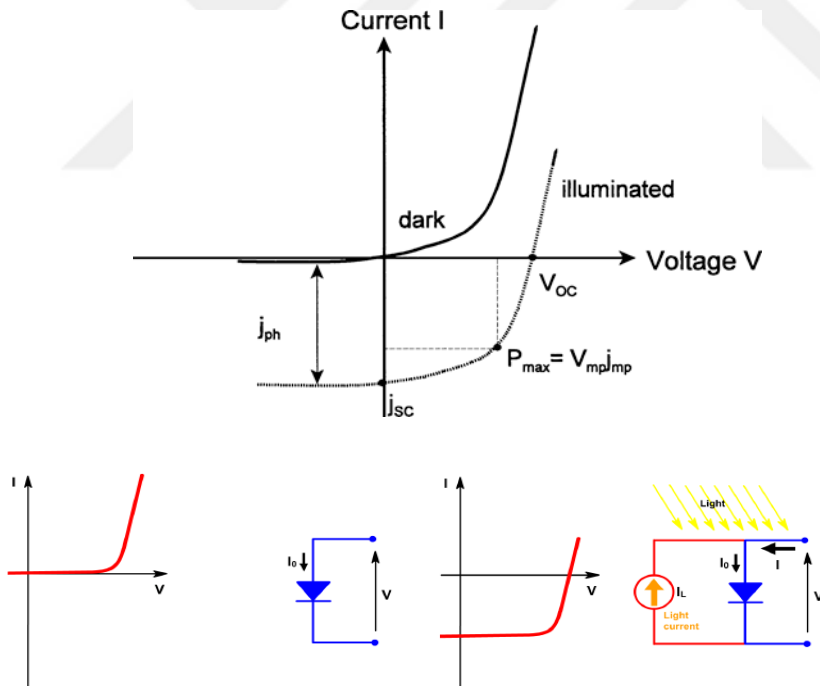
- Amorf Silisyum (a-Si)
- Kadmiyum Tellür (CdTe)
- Bakır İndiyum Galyum Selenür (CIGS)

3.2.3.3. Üçüncü nesil hücreler

- Perovskit Güneş Hücreleri(Bu türdeki bu çalışmayla ilgileneceğiz)
- Organik Fotovoltaikler (OPV'ler)
- Ortaya Çıkan Teknolojiler.

3.2.4. Bir fotovoltaik hücrenin i(v) karakteristiği

Aşağıdaki şekil bir Fotovoltaik panelin akım-gerilim eğrisini temsil etmektedir:

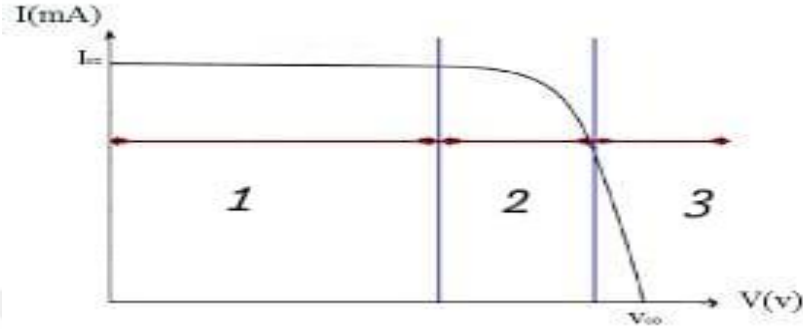


Şekil 3.4. Karanlıkta ve aydınlatma altında bir güneş hücresinin akım-gerilim özellikleri [2].

Akım-gerilim karakteristiği $I(V)$ veya $J(V)$ 'nin (J akım yoğunluğudur) çizimi, cihazların performansını değerlendiren çeşitli fotovoltaik parametrelerin çıkarılmasına

olarak tanır. Şekil 3.4, karanlıkta ve aydınlatma altında bir akım-gerilim karakteristiğini şematik olarak temsil eder.

Karanlıkta, fotovoltaiik hücre klasik bir diyot (PN eklemi) gibi davranır. Uygulanan voltajın bir eşik voltajından büyük veya küçük olmasına bağlı olarak, diyot sırasıyla iletken veya bloke edicidir.



Şekil 3.5. Bir fotovoltaiik jeneratörün $I(V)$ karakteristiğinin farklı bölgeleri.

Bir fotovoltaiik panele akım veya gerilim kaynağı açısından bir akım-gerilim karakteristiği atamak karmaşıktır.

- Bölge (1): Gerilimden bağımsız olarak akımın sabit kaldığı bölge, fotovoltaiik jeneratörün bir akım jeneratörü görevi görmesini sağlar.
- Bölge (2): karakteristiğin dirseği olan önceki iki bölge arasındaki ara bölge, jeneratörün çalışması için tercih edilen bölgedir ve burada optimum nokta (maksimum güçle karakterize edilir) belirlenebilir.
- Bölge (3), neredeyse sabit bir gerilime karşılık gelen bir akım dalgalanmasıyla karakterize edilir ve bu da onu bir gerilim üretici yapar [3].

3.2.5. Karakteristik parametreler

Güneş pilleri ve fotovoltaiik malzemeleri incelerken, karakterizasyon çok önemlidir. çünkü bazı durumlarda bu pillerin özellikleri kolayca etkilenebilir. Sonuç olarak, bir güneş pilini karakterize etmek için bir hücreyi tanımak gerekir. Bu, bir hücrenin davranışını, verimliliğini ve performansını etkileyen hataların veya parazitik unsurların varlığını belirlemeye yardımcı olan herhangi bir bilgiyi içermelidir. Bu güneş pillerinin çalışma prensibine en uygun devre modelini oluşturmak ve bu devre modeli için kullanılan parametreleri bilmek, elektronik davranışları hakkında daha fazla bilgi edinmek için gereklidir.

Bu bölümde güneş pilleri ile ilgili önemli kavramlar tanıtılmıştır.

- ✓ I-V eğrisi
- ✓ Kısa devre akımı
- ✓ Açık devre gerilimi
- ✓ Doldurma faktörü
- ✓ Verimlilik

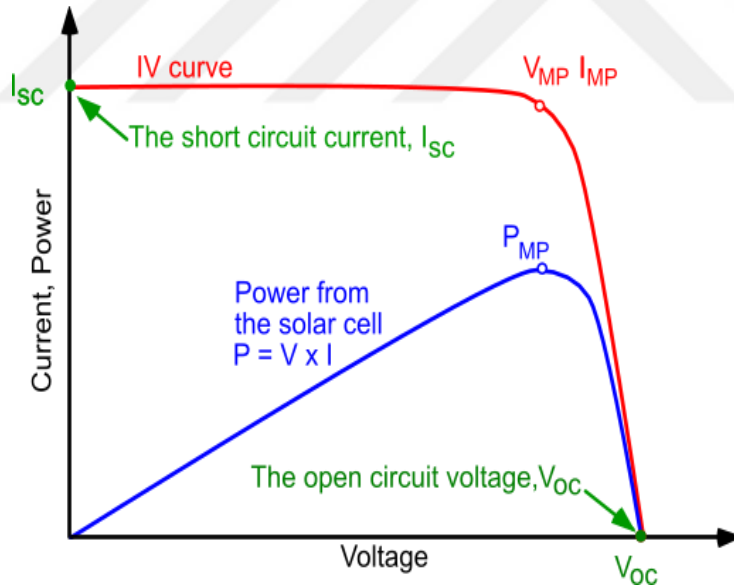
3.2.5.1. 1 güneş pili i-v (akım-gerilim) karakteristiği

Bir fotovoltaik güneş hücresinin karakteristikleri, akım-gerilim karakteristiğinden çıkarılan bir takım parametrelerle belirlenir.

Bir güneş pili tarafından üretilen akımın genel ifadesi

$$I = I_{SC} - I_{01} \left(e^{\frac{qV}{kT}} - 1 \right) - I_{02} \left(e^{\frac{qV}{2kT}} - 1 \right) \quad (3.1)$$

Yukarıdaki denklemde eqV/kT , yarı-nötr bölgelerdeki rekombinasyon akımını temsil ederken, $eqV/2kT$ tükenme bölgesindeki rekombinasyonu temsil eder.



Şekil 3.6. I-V Eğrisi.

Hücresinin aydınlatılması, diyottaki normal akımlara eklenir, böylece diyot yasası

$$I = I_0 \left[\exp \left(\frac{qV}{nkT} \right) - 1 \right] - I_L$$

Aydınlatma olmadan bir güneş pili, büyük bir diyotla aynı elektriksel özelliklere sahiptir. Pil üzerinde ışık parlادığında, hücre güç üretmeye başlar ve IV eğrisi değişir.

$$I = I_L - I_0 \left[\exp \left(\frac{qV}{nkT} \right) \right] - 1$$

Yukarıdaki denklemde -1 (eksi bir) değeri genellikle ihmal edilebilir. Üstel terim, 100 mV'nin altındaki gerilimler dışında genellikle 1'den büyüktür. Ayrıca, düşük gerilimlerde ışık ile üretilen akım (IL), I0 terimine hakimdir, bu nedenle -1 (eksi bir) değeri aydınlatma altında gerekli değildir ihmal edilir.

$$I = I_L - I_0 \left[\exp \left(\frac{qV}{nkT} \right) \right]$$

3.2.5.2. Kısa devre akımı (Isc)

Bu, hücrenin terminallerinin kısa devre edilmesiyle (eşdeğer devrede V = 0 ayarlanarak) elde edilen akımdır. Hücrenin aydınlatma yoğunluğuyla doğrusal olarak artar ve aydınlatılan yüzey alanına, radyasyon dalga boyuna, taşıyıcı hareketliliğine ve sıcaklığa bağlıdır. [5].

Kısa devre akımının bağlı olduğu faktörler :

- ✓ Güneş hücresinin alanı (ISC mA/cm2)
- ✓ Foton sayısı (ISC doğrudan ışık yoğunluğuna bağlıdır.)
- ✓ Gelen ışığın spektrumu (çoğu güneş pili için spektrum AM 1.5'tir.)
- ✓ Optik özellikler (güneş pilinin soğurulması ve yansımaları)

3.2.5.3. Açık devre voltajı (Voc)

Bu, güneş hücresinden akan akım sıfır olduğunda (I = 0) hücrenin terminalleri arasında ölçülen voltajdır. Aşağıdaki ilişkiyle verilir [4]:

$$V_{co} = \frac{KT}{q} \ln \left(\frac{I_{sc}}{I_s} + 1 \right) \quad (3.2)$$

Voc: Açık devre voltajı.

K: Boltzmann sabiti.

T: Kelvin cinsinden sıcaklık.

q: Temel yük $1,6 \times 10^{-19}$ C.

Isc: Kısa devre akımı.

Is: Diyot doyma akımı.

3.2.5.4. Çalışma noktası Pm (Vm, Im)

Aydınlatılmış bir fotovoltaik hücrenin maksimum gücü, performansını değerlendirmek için önemli bir parametredir; şu ilişkiyle verilir:

$$P_m = V_m \times I_m \quad (3.3)$$

I(V) karakteristiğinde, I(V) eğrisinin dizinde bulunan ve voltaj Vm ve akım Im değerlerinin sırasıyla maksimum voltaj ve akım olarak da bilinen maksimum güç noktası olarak adlandırılan çalışma noktası Pm (Vm, Im) olarak gösterilir, [4].

3.2.5.5. Doldurma faktörü (FF)

Karanlıkta ve aydınlatma altında bir hücrenin akım-voltaj karakteristiğini kullanarak, fotovoltaik hücrenin performansını ve elektriksel davranışını değerlendirmek mümkündür. Bu nedenle, Doldurma Faktörü (FF), yük direncine (hücre terminalleri boyunca yerleştirilen dış direnç) bağlı olan aydınlatma altında bir fotovoltaik hücre tarafından harici devreye sağlanan güç olarak tanımlanır. Bu güç, akım-gerilim eğrisindeki (0 ila Isc arasında değişen akımlar ve 0 ila Voc arasında değişen voltaj) bir çalışma noktası Pm (Im, Vm) için Pmax veya Pm olarak gösterilen maksimum değerdir. Bu nokta Pm, x eksen, y eksen ve x = Im ve y = Vm doğruları tarafından tanımlanan dikdörtgenin alanı maksimuma ulaşacak şekilde dış direncin değerinin değiştirilmesiyle elde edilir [4]

$$FF = \frac{V_m \times I_m}{V_{oc} \times I_{sc}} \quad (3.4)$$

3.2.5.6. Verimlilik (η)

Bir hücrenin verimliliği, çıkış gücünün olay ışık gücüne oranıyla ölçülür. Optik veya elektriksel kökenli bir dizi kayıp, hücrenin iletilen voltajını veya akımını sınırlayabilir. Işık enerjisinden elektrik enerjisine bir dönüşüm faktörü sağlar. Verimlilikler şu durumlarda daha yüksektir:

1. Çok sayıda fotojenerasyon süreci vardır ve termalizasyondan kaynaklanan kayıplar düşüktür.
2. Taşıyıcı ayırma ve toplama kolaylaştırılmıştır

$$\eta = \frac{P_m}{P_{in}} = \frac{FF \times V_{co} \times I_{cc}}{P_{in}} * 100\% \quad (3.5)$$

Voc = Açık devre voltajı

Jsc = Kısa devre akım yoğunluğu

FF = Doldurma faktörü

Pin = Olay ışığının gücüdür

3.2.6. Fotovoltaik dönüşümün mekanizmaları

Fotovoltaik dönüşüm mekanizmaları, fotovoltaik (PV) hücreler içerisinde ışık enerjisinin elektriğe dönüştürülmesini içerir. Aşağıdaki adımları izleyerek çalışır:

Fotonların emilmesi: fotovoltaik hücrelerin yarı iletken malzemesi sayesinde yapılır. Bu soğurma yöntemi, elektronları malzeme içindeki daha yüksek enerji durumlarına teşvik eder.

Elektron-Delik Çiftlerinin Oluşturulması: Emilen fotonlar, yarı iletken malzemede elektron-hol çiftleri üretir; burada elektronlar değer bandından iletim bandına uyarılır ve serbest şarj cihazları oluşturulur.

Şarj Ayırımı: Fotovoltaik hücrenin içindeki, genellikle yerleşik bir bağlantı veya harici öngerilim tarafından üretilen elektrik alanları, üretilen elektron-holon çiftlerini ayırır. Bu ayrılma, şarj cihazlarının hücrenin zıt bölgelerine hareket etmesine olanak tanır.

Şarj Aleti Toplama: Fotovoltaik hücrenin yüzeyindeki metal kontaklar, ayrılan şarj cihazlarını toplayarak harici bir devreye aktarır. Bu yük dolaşımı bir elektrik akımı oluşturur.

Elektriksel G üç Çıkışı: Harici devre üzerinden yük akışı, çeşitli uygulamalarda kullanılabilen elektrik üretir.

Bu teknoloji güneşi kullanılabilir elektriğe dönüştürerek fotovoltaik güneş pillerini bir teknoloji haline getiriyor

3.2.7. Fotovoltaiklerin avantajları Ve dezavantajları

Fotovoltaik güneş panellerinin birçok avantajı ve dezavantajı vardır:

3.2.7.1. Avantajları

- Yakıt (güneş radyasyonu) yenilenebilir ve bedava bir enerji kaynağıdır.

- Fotovoltaik güneş enerjisi çevre dostu ve çevreyi kirletmeyen bir enerji kaynağıdır.
- Gerekli enerjiyi üretir.
- Elektrik kesintilerine karşı hassasiyeti azaltır.
- Sistemleri genişletmek kolaydır, kurulumun boyutu da farklılık gösterebilir.
- Üretim fazlasının yeniden satışı, yatırımların amorti edilmesini ve hatta gelir elde edilmesini mümkün kılar.
- Minimum bakım.
- Ses yok.

3.2.7.2. Sakıncaları

- Fotovoltaik güneş panellerinin üretimi, büyük miktarda araştırma ve geliştirme gerektiren, sonradan yükün ihtiyaçlarını karşılamak için artışlara yol açan yüksek teknoloji bir faaliyettir.
- Fotovoltaik panellerin verimi hâlâ düşüktür.
- Evsel kurulumlar için bir yedekleme sistemi (piller) gerektirir.
- Fotovoltaik kurulumun yatırım maliyeti pahalıdır.

3.2.8. Yarı iletkenlerde üretim ve rekombinasyon

3.2.8.1. Taşıyıcının üretimi

Taşıyıcı üretimi, valans bandındaki elektronların iletkenlik bandına uyarılmasıyla elektron deliği çiftlerinin oluşturulduğu ve böylece valans bandında bir delik oluşturulduğu süreçtir.

Bir güneş hücresinde, güneş ışığı yarı iletken malzemeye çarptığında, malzemedeki elektronlara enerji aktarır. Bu onları daha güçlü hale getirir ve elektron-delik çiftleri oluşturur.

Üretim $\Rightarrow$ elektronların ve deliklerin oluşturulduğu süreç.

3.2.8.2. Taşıyıcı rekombinasyon süreci

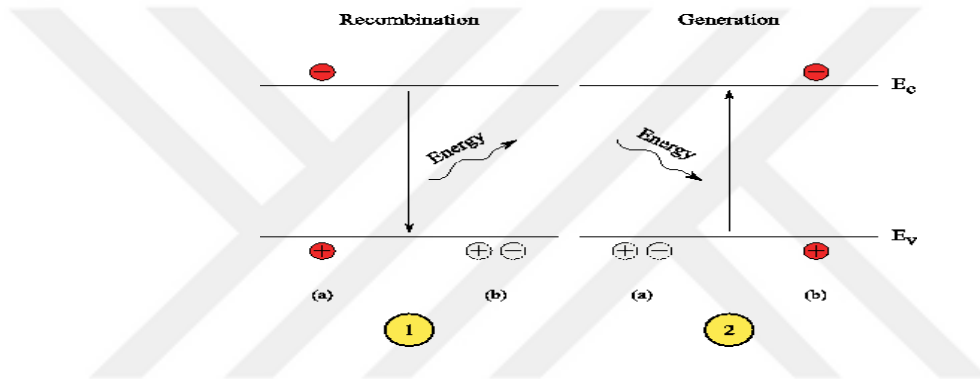
Elektron-delik çiftleri, taşıyıcı rekombinasyonu olarak bilinen bir işlemle yeniden birleşir ve bu işlem güneş hücresinin verimliliğini düşürür ve elektrik akımı kaybına neden olur.

Bir güneş hücresinde, elektron ve deliklerin radyasyonel (foton salan) veya radyasyonel olmayan (foton salmayan) rekombinasyonu sonucunda elektrik iletimi için daha az yük taşıyıcısı bulunacaktır.

Rekombinasyon, iletkenlik bandındaki elektronlar valans bandının deliklerine düştüğünde serbest elektronlar ve delikler kaybolur.

Rekombinasyon $\Rightarrow$ elektronların ve boşlukların bir araya gelerek kaybolması süreci.

Doğrudan üretim/rekombinasyon süreci. Foton destekli rekombinasyon sırasında, iletkenlik bandındaki bir elektron valans bandındaki bir delikle yeniden birleşir. Fazla enerji bir fotona aktarılır. Ters süreç enerjisini radyasyondan alır ve bir elektron deliği çifti oluşturur.



Şekil 3.7. 1 Taşıyıcı Rekombinasyon Süreci 2. Taşıyıcının üretimi.

3.3. Fotovoltaikler İçin Perovskit

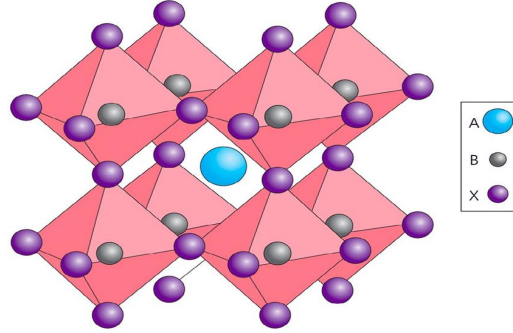
3.3.1. Perovskit malzemesi

Perovskit malzemesi 1839'da CaTiO_3 formunda keşfedildi, ancak perovskit fotovoltaik hücrenin ilk gösterimi 2000'li yıllara kadar yapılmadı. Kojima ve ark. Grätzel hücresine (veya ışığa duyarlı pigment güneş piline) dayalı nano gözenekli TiO_2 üzerinde $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ kullandı [6] ve %2,2'lik bir dönüşüm verimliliği elde etti [7]. Oradan güneş enerjisindeki perovskitlere olan ilgi hızla arttı. Perovskitin pek çok avantajının olduğu söylenmelidir: mükemmel optoelektronik özellikler, düşük hammadde maliyetleri, ayarlanabilir bant aralığı ve çok çeşitli biriktirme teknikleri [8].

3.3.2. Perovskitin kristalografik yapısı

Genel olarak konuşursak, perovskit malzemesi, kalsiyum titanat (CaTiO_3) ile aynı yapıya sahip olan, yani bir A katyonunu çevreleyen ve ABX_3 kimyasal formülüne sahip dört BX_6 oktahedraya sahip bir malzemedir (bkz. Şekil 3.8). İki gruba ayrılır: oksit formundaki inorganik perovskitler ve inorganik veya hibrit (organik-inorganik)

olabilen halojenli perovskitler [9]-[11]. Tablo 1'de perovskitlerin her biri için farklı bileşikleri görebiliriz.



Şekil 3.8. Perovskit yapısının gösterimi.

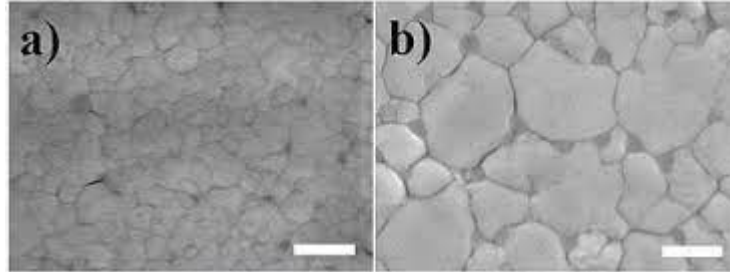
Tablo 3.1. Perovskitin farklı ailelerine karşılık gelen farklı moleküller.

Oksitler	İnorganik halojenli	Halojenli hibritler
A İki değerlikli katyon (Mg^{2+} , Ca^{2+} , Sr^{2+} , Ba^{2+} , ...)	Tek değerlikli alkali metal (Li^{+} , Na^{+} , K^{+} , ...)	Küçük organik molekül (MA (metilamonyum), FA (formamidinyum), ...)
B Metalik katyon (Ti^{4+} , Si^{4+} , Sn^{4+} , ...)	İki değerlikli iyonik metal (Pb^{2+} veya Sn^{2+})	
X Oksijen	Halojen (Cl^{-} , Br^{-} veya I^{-})	

Halojenli hibrit perovskitler, en iyi dönüşüm performansını elde ettikleri için fotovoltaik alanında çok popüler olmuştur. Dahası, ilk sertifikalı hücreler $CH_3NH_3PbI_3$ (veya MAPI) kimyasal formülüne sahip perovskitten yapılmıştır. Tablo 3.2, güneş alanında yaygın olarak kullanılan çeşitli bileşikleri sunmaktadır [12]-[15]. FAPI, MAPBr, $MASnCl$ veya $CsPbX_3$ en yaygın kullanılan formülasyonlardır. Klor genellikle iyodine (MAPICl) bağlıdır. Benzer şekilde, Şekil 2'de gösterildiği gibi, her bileşiğin avantajlarından yararlanmak için çeşitli katyon ve anyonların bir karışımını içeren karışık perovskitlerden birçok hücre elde edilir.

Bu tez için seçilen perovskit olduğundan, aşağıda esas olarak MAPI'nin özelliklerini tartışacağız.

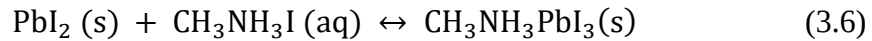
oluşumunda düzenli bir yapı yoktur ve taneler farklı şekillerdedir (Şekil 3.10). Kristallerin boyutu ve şekli her durumda kullanıcı ve kullanılan öncüller de dahil olmak üzere üretim koşullarına oldukça bağlıdır. Örneğin perovskit çözeltisine klor eklenerek kristallik geliştirilebilir. Bu nedenle taneler oldukça büyüktür [19].



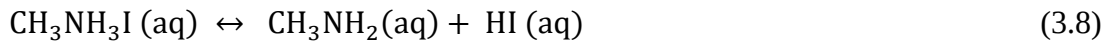
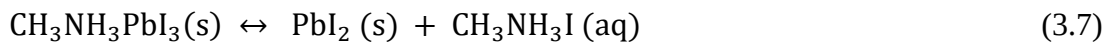
Şekil 3.10. TiO₂ üzerinde biriken MAPI perovskit katmanlarının SEM görüntüleri, a) [19]; b) [20].

3.3.4. Perovskitin stabilitesi

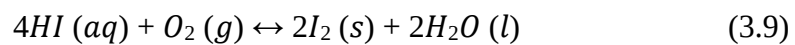
Perovskitin ortam havasındaki bozunması, biriktirme sırasında kristal kalitesindeki değişimin nedenlerinden biridir. Gerçekten de perovskit neme ve oksijene karşı büyük bir dirence sahiptir. Öncüller arasında kristalleşme sırasında meydana gelen reaksiyon (2), tersine çevrilebilir bir reaksiyondur. Perovskit beş ana bozunma kaynağından herhangi birine maruz kaldığında: nem, oksijen, UV ışınları, çözücüler ve sıcaklık, reaksiyon tersine döner [21].



Perovskit, muhtemelen metilamonyum kationunun yüksek higroskopisitesinden dolayı nemli bir ortamda (%30'un üzerinde nem seviyesi) kristalleşmeden önce bozunabilir [21]. CH_3NH_3^+ iyonu, iyotla yeniden birleşerek bir PbI_2 tuzu ve MAI'nin (3.7) sulu bir fazını oluşturur. Daha sonra MAI, CH_3NH_2 ve HI'ye bölünür (3.8).



Oluşan hidrojen iyodür daha sonra oksijenle reaksiyona girerek I_2 ve su (3.9) oluşturabilir veya UV etkisi altında reaksiyona girerek I_2 ve dihidrojen (3.10) oluşturabilir:



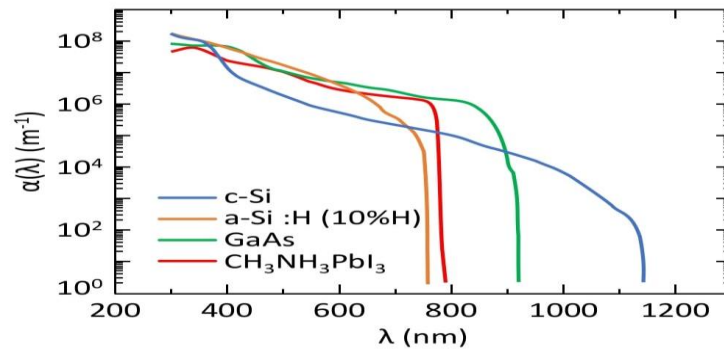
Çevreye karşı bu duyarlılık, araştırmacıların çoğunlukla su ve oksijen konsantrasyonunu kontrol etmek için bir eldiven kutusu içinde çalıştıkları anlamına gelir. Bazı perovskit'ler diğerlerinden daha az kararlıdır. MAPI bu nedenle $\text{MAP}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)$ 'ten daha az kararlıdır [22].

Özellikle tavlama sırasında katman sıcaklığının hassas bir şekilde kontrol edilmesi de iyi kristalleşme için gereklidir. Çok düşük bir sıcaklık perovskitin tam kristalleşmesine izin vermezken, 100°C 'nin üzerindeki tavlama PbI_2 'nin ikincil fazlarının üretimine neden olabilir [23]. Ayrıca perovskit ile güneş pilleri için kullanılan malzemeler arasında bir reaksiyondan da bahsedilmektedir. Doğrudan veya UV etkisi altında.

3.3.5. Optoelektronik özellikler

3.3.5.1. Optik özellikler

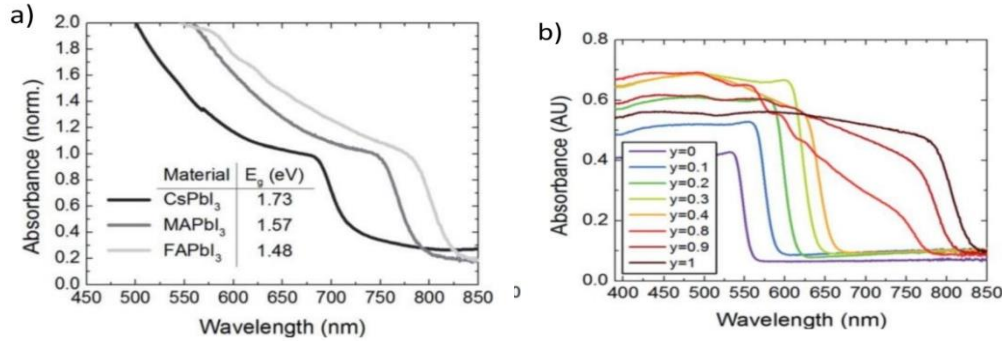
Perovskitler, onları fotovoltaiik uygulamalar için uygun aday haline getiren özelliklere sahiptir. Doğrudan aralıklarına [24] ve boşluktaki kusurların fiilen yokluğuna [25] ek olarak, soğurma katsayıları çok yüksektir (550 nm dalga boyunda yaklaşık 10^4 cm^{-1} [26], [27]). Bu yüksek absorpsiyon, kristalin silikonunkıyla karşılaştırıldığında (bkz. Şekil 3.11), neredeyse tam absorpsiyon için gerekli perovskit katman kalınlığının yaklaşık 500 nm 'ye düşürülmesini mümkün kılar [21]. Fotojenlenmiş yük taşıyıcıları daha kısa seyahat mesafesi nedeniyle daha kolay toplanır.



Şekil 3.11. Malzeme soğurma eğrisi: c-Si, a-Si: H (%10H), GaAs ve $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ [27].

Perovskitler, kullanılan katyon veya anyonlara bağlı olarak ayarlanabilir bir boşluğa sahip olma avantajına sahiptir (bkz. Şekil 3.12.a). Örneğin MAPI açığı $1,57\text{ eV}$ 'dir. Ancak metilamonyumu (CH_3NH_3^+) formamidinyum ($\text{HC}(\text{NH}_2)_2^+$) ile değiştirdiğimizde boşluk $1,48\text{ eV}$ 'ye düşer [34]. İki anyonu birleştirerek boşluk enerjisinde bir değişiklik elde etmek de mümkündür.

Bu anyonların y oranının bir fonksiyonu olarak sürekli olarak. $FAPbI_yBr_{3-y}$ için, Eperon ve ark. 1,48 eV'den 2,23 eV'ye giden bir varyasyon elde edin (Şekil 3.12.b) [28].



Şekil 3.12. a) Farklı perovskitlerin (MAPI, FAPI, CsPI) emilim eğrileri; **b)** $FAPbI_yBr_{3-y}$ 'nin y oranına bağlı emilim eğrileri [28].

3.3.5.2. Elektronik özellikler

Optik özelliklerde olduğu gibi perovskitin elektriksel özellikleri de bileşimi değiştirilerek değiştirilebilir. Perovskitin elektriksel özellikleri de sentez yöntemine ve katmanın üretim yöntemine bağlı olarak değişmektedir.

Aramada farklı mobilite veya difüzyon uzunluğu değerlerinin bulunabilmesinin nedeni budur.

Denklem (3.10)'ye göre difüzyon uzunluğu, difüzyon katsayısı D ile taşıyıcı ömrü τ arasındaki korelasyon olarak tanımlanır:

$$L_D = \sqrt{D\tau} \quad (3.10)$$

Fotovoltaik alanında önemli bir özellik, elektronların ve deliklerin difüzyon uzunluğudur, çünkü bu, aktif katmanın kalınlığının seçimini etkileyecektir. Silikonun difüzyon uzunluğu birkaç yüz mikrometredir [24]. Taşıyıcı difüzyon uzunlukları perovskit için silikondan önemli ölçüde daha düşüktür. Delikler ve elektronlar, 180 nm kalınlığındaki bir MAPI katmanı üzerinde fotoluminesans yoluyla yaklaşık 100 nm'lik saçılma uzunluklarıyla ölçülürken, 270 nm kalınlığındaki $MAPI_{3-x}Cl_x$ ince filmleri 1 μm 'ye ulaştı [29].

Klorür iyonu, MAPI-Cl katmanında artan kristalleşmeyi ve homojenliği teşvik ederek perovskitin son yapısında önemli bir rol oynayabilir. Bu nedenle MAPI'nin difüzyonu sınırlı kalır ve silikonun özelliklerinden uzak kalır. Bu nedenle elektriksel özellikleri

iyileştirmek amacıyla yaklaşık yüz nanometre büyüklüğünde perovskit katmanlarının kullanılması tavsiye edilir.

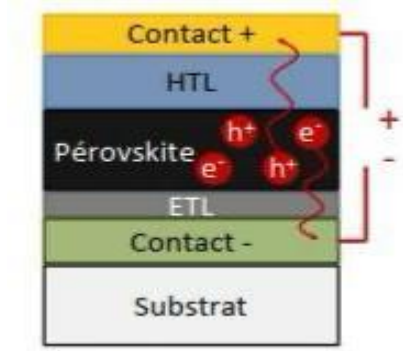
Deneyssel olarak elektronların hareketliliği $10 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ civarında değişmektedir [30], [31].

Deliklerin boyutu 8 cm^2 civarındadır. $\text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ [30], [31]. Bu, Motta ve arkadaşlarının gerçekleştirdiği teorik hesaplamayla örtüşmektedir. Elektronların hareketliliğini 5 ila $10 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ arasında ve deliklerin hareketliliğini 1 ila $5 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$. arasında tahmin eden kişiler [32]. Bu hareketlilik değerleri, 10^{-4} ile 10 cm^2 arasında salınan organik malzemeler için aralığın en üst noktasındadır. $\text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ [33], [34]. Bu, serbest taşıyıcıların düşük etkili kütlelere sahip olmasıyla açıklanmaktadır ($m_e^* = 0.23m_0$ et $m_h^* = 0.29m_0$) [35]. Ayrıca, foto uyarımdan sonra üretilen eksitonlar, düşük bağlanma enerjileri (yaklaşık 16 meV) [36] sayesinde yalnızca 2 ps'de [31] serbest taşıyıcılara ayrışır.

Ancak perovskitin hareketlilik değerleri silikonunkinden çok uzak kalmaktadır (elektronlar için $1,43 \cdot 10^3 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ ve delikler için $4,27 \cdot 10^2 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ [37] , [38]). Ayrıca elektronların ve deliklerin hareketliliği yakın olduğundan 3 boyutlu perovskitler delik veya elektron taşıyıcı olarak kullanılabilir. Bu çift kutuplu karakter onlara güneş alanında avantaj sağlıyor çünkü oldukça yüksek mobilite değerleriyle düzlemsel yapıya sahip hücreler üretmek mümkün.

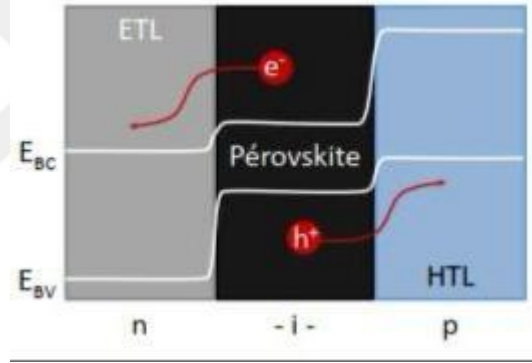
3.3.6. Perovskit hücresinin çalışması

PN eklemli silikon fotovoltaik (PV) hücrelerin aksine, perovskit bazlı hücre seçici kontaklar kullanan bir yapı kullanıyor. Taşıyıcılar, silikonda olduğu gibi emici yerine temas noktalarında etkili bir şekilde ayrılır. Elektronları toplamak için bir n tipi (Elektron Taşıma Elemanı: ETL) ve delikleri toplamak için bir p tipi (Delik Taşıma Elemanı: HTL) olmak üzere iki kontakın olması önemlidir. Hücrenin tamamı daha çok bir p-i-n heteroeklemine (V) benzer [42]. Elektron-boşluk çiftlerinin oluşumundan sonra yükler yerel toplayıcılara doğru yönlendirilir. Daha sonra - tarafta FTO (Flor katkılı Kalay Oksit) ve + tarafta Au veya Ag olmak üzere iki iletken kontak toplanır (Şekil 3.13'de görülebileceği gibi).



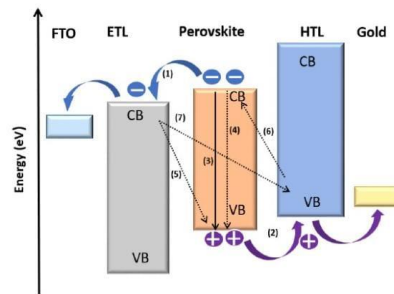
Şekil 3.13. Perovskit güneş pilinin genel yapısı. Alt tabaka burada şeffaftır ve aydınlatma arka taraftan gelir.

Etkin yük ayrımı sağlamak için ETL'nin iletim bant kenarının perovskitinkinden daha düşük olması gerekir. Öte yandan ETL'nin değerlik bandının kenarının perovskitinkinden daha büyük olması gerekir (Şekil 13'te gösterildiği gibi). Bu şekilde ETL bir delik bariyeri rolünü oynarken, HTL bir elektron bariyeri rolünü oynar.



Şekil 3.14. Yük ayrımı sırasında enerji seviyelerinin bant eğriliği.

ETL için en çok kullanılan malzemeler arasında TiO₂, ZnO, SnO₂... Deliklerin toplanmasını ve taşınmasını sağlayan HTL, spiro-OMeTAD veya PEDOT molekülü: PSS gibi organik olabilir. veya karbon gibi inorganik.



Şekil 3.15. Perovskit hücrenin enerji bandı diyagramı.

3.3.7. Perovskit hücrelerinin yapıları

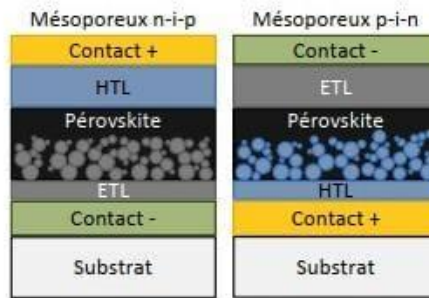
Bir perovskit hücre için seçici temaslar kurmak amacıyla iki yapı mevcuttur: mezogözenekli ve düzlemsel.

3.3.7.1. Mezogözenekli toplayıcı yapı

İlk perovskit hücreleri doğrudan Boyaya Duyarlılaştırılmış Güneş Pillerinden (DSSC veya Grätzel hücreleri) geldi; burada perovskit mezogözenekli TiO₂ üzerinde biriktirildi ve daha sonra bir delik toplayıcı olarak lityum halojenür ve halojen içeren organik bir elektrolit çözeltisi ile kaplandı. Bu gözenekli yapı, elektronların toplanmadan önce gerekli yollarını azaltarak verimli bir şekilde toplanmasına olanak tanır; bu, perovskitin kısa difüzyon uzunlukları göz önüne alındığında çok önemlidir.

2009 yılı, bir perovskit hücresi için %3,8'lik bir değerle sertifikalı ilk fotovoltaik dönüşüm verimliliği ile işaretlendi, ancak perovskit elektrolit içinde hızla çözüldü [43]. 2011 yılında, mezogözenekli yapının kalınlığının arttırılması (8-12 µm'ye kıyasla 3,6 µm), dönüşüm verimliliğini büyük ölçüde artırmıştır (%6,5) [39]. Mezogözenekli tabakanın kalınlığı şu anda 300 nm civarındadır. Azaltılmış kalınlık, perovskitin kristalleşmesini iyileştirir ve TiO₂'nin üzerinde bir perovskit tabakası elde edilmesini mümkün kılar, bu da taşıyıcılar arasındaki rekombinasyonların azaltılmasını ve transfer hızlarının arttırılmasını mümkün kılar [44], [45].

Sıvı elektrolitin yerine katı delikli bir toplayıcı olan spiro-OMeTAD'ın kullanılmasıyla hücre stabilitesi beklentileri aştı [46]. Bu nedenle, bu hücrelerin tasarımını Şekil 15'te gösterildiği gibi bu yapıya göre benimsiyoruz. Başlangıçta, Şekil 16'te gösterildiği gibi n-i-p tipi hücreleri, ardından mezogözenekli p-i-n tipi hücreleri gözlemliyoruz. 2019'da mezogözenekli bir yapı kaydedildi %24,02'lik rekor verim [47]. TiO₂, MACl katkılı FAPbI₃ ve spiro-OMeTAD içeren bir n-i-p bileşiğidir.



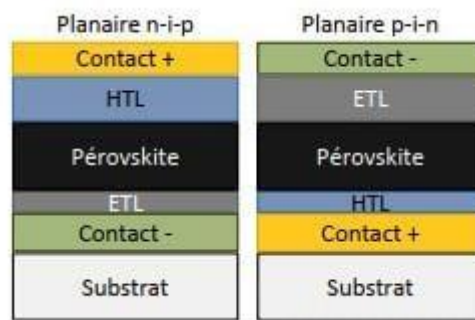
Şekil 3.16. n-i-p ve p-i-n perovskit hücreleri için mezogözenekli tip yapı (aydınlatma burada arka taraftadır).

3.3.7.2. Düzlemsel toplayıcı yapısı

Perovskit, hem yüksek görünür absorpsiyona hem de yeterli taşıyıcı difüzyon uzunluğuna sahip olduğundan, mezo-gözenekli bir yapıya sahip olmayabilir. Bu özellikler sayesinde, çok sayıda taşıyıcı toplayıp fotojenerasyona bağlı kayıpları azaltırken, yaklaşık yüz nanometre kalınlığa sahip hücreler üretmek mümkün oluyor. Daha sonra yapıya düzlemsel diyoruz. Bu konfigürasyon esnek hücreler için uygundur [48]. Ancak ETL üzerinde homojen bir katman elde etmek için perovskit oluşumunun izlenmesi gerekmektedir. Elde edilen ilk sonuçlar, ETL'deki perovskit konsantrasyonunun düşük olması nedeniyle zayıftı. Emilim, ETL ile HTL arasında doğrudan bir yol oluşturan emici katmandaki deliklerle sınırlıydı.

Emilim, ETL ile HTL arasında doğrudan bir yol oluşturan ve kısa devrelere neden olan emici katmandaki delikler nedeniyle sınırlandı. Açıklık olmadan homojen bir perovskit tabakası oluşturmak için solvent mühendisliği [40] veya iki aşamalı biriktirme [41] gibi farklı yöntemler geliştirilmiştir. Perovskit tabakasının kalınlığı düzlemsel bir yapıda önemli bir unsurdur. Taşıyıcıların nispeten kısa difüzyon uzunlukları nedeniyle rekombinasyonu kısıtlarken, katmanın iyi bir emilim sağlayacak kadar kalın olması gerekir.

Simülasyonla, perovskitin kalınlığı minimum olduğunda hücrenin dönüşüm verimliliğinin arttığı gösterilmiştir, çünkü taşıyıcı toplama bu şekilde optimize edilmiştir [49]. Mezogözenekli yapıda olduğu gibi, n-i-p veya pi-n tipinde düzlemsel hücreler vardır (Şekil 16). 2019 yılında, bir n-i-p hücresi %22,51'lik dönüşüm verimliliğiyle düzlemsel yapı rekorunu elinde tutuyor [50]. Bir perovskit hücre için kaydedilen büyüme oranının %25,2 olduğu, ancak mimarının (düzlemsel veya mezogözenekli) ve kullanılan bileşiklerin henüz belirlenmediği belirtilmelidir [51].



Şekil 3.17. n-i-p ve p-i-n perovskit hücreleri için düzlemsel tip yapı (aydınlatma burada arka taraftadır).

3.3.8. Perovskitin toksisitesini azaltmak

Perovskitler ve özellikle kurşun bazlı halojenlenmiş perovskitler, fotovoltaik uygulamalardaki potansiyelleri nedeniyle büyük ilgi görmüştür.

Kurşun bazlı perovskit (örn. $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$) gibi en yaygın olarak incelenen perovskitler, toksisitesiyle bilinen bir ağır metal olan kurşun içerir. Kurşun çevreye ve insan sağlığına zararlıdır. MAPI (metilamonyum kurşun iyodür, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$) perovskit güneş pillerindeki toksisiteyi azaltmak için, elektron taşıma katmanı (ETL), delik taşıma katmanı (HTL) ve mezogözenekli malzeme için malzeme seçimi çok önemlidir. Simülasyonlarım için bu malzemeleri kullandım:

3.3.8.1. Elektron taşıma katmanı (ETL)

Titanyum dioksit (TiO_2), kalay oksit (SnO_2) gibi kurşun içermeyen ETL malzemeleri kullanın:

Titanyum Dioksit (TiO_2): Kusurları düzeltmek ve perovskit ile istenmeyen reaksiyonları en aza indirmek, bozulmayı ve kurşun salınımını azaltmak için bir yüzey işleminin kullanılması.

Kalay Oksit (SnO_2): Perovskit bütünlüğünün korunmasına ve kurşun sızıntısının önlenmesine yardımcı olan, enerji hizalamasını ve kusurlu pasivasyonu artıran yüzey işlemi.

3.3.8.2. Delik taşıma katmanı (HTL)

MAPI perovskit güneş pillerinde spiro-OMeTAD ve karbonun delik taşıma malzemeleri (HTL) olarak kullanılması yaygın bir yaklaşımdır.

Spiro-OMeTAD'ın Rolü: Homojen bir tabaka oluşturarak perovskiti nem ve oksijene karşı korur.

Karbonun Rolü: Karbon katmanları, kurşun iyonlarının sızmasını önlemek için fiziksel ve kimyasal bariyer görevi görebilir.

3.4. COMSOL Multiphysics Simülasyon Platformu

3.4.1. Giriş

Elektronik sistemlerin performansındaki iyileştirme, giderek daha küçük ve daha karmaşık bileşenler sayesinde hesaplama hızlarında ve çalışma güçlerinde artışa

olanak sağlamıştır. Bu tür kriterlere sahip bileşenlerin üretimi çok pahalıdır. Araştırmacılar bu sorunu çözmek için "Simülasyon" aracını kullanmaktadır. [53].

Sayısal simülasyon, bilim ve mühendislik alanlarında vazgeçilmez bir unsur haline gelmiştir. Gerçek sistemlerin işleyişini ve özelliklerini modellemeyi, incelemeyi ve daha iyi anlamayı ve ayrıca evrimlerini tahmin etmeyi mümkün kılar. İncelenen modele farklı fiziksel fenomenler ekleme olasılığını içeren bir simülasyon ortamına sahip olmak çok ilginçtir. Ve bugün çok çeşitli dijital araçlar mevcuttur. Sonlu elemanlar tekniği de dahil olmak üzere farklı matematiksel araçlar kullanılarak teorik modellerin uygulanmasına dayanmaktadır. Bu felsefede birkaç yazılım geliştirilmiştir: Comsol Multiphysics, Silvaco, Xilinx ISE, ISIS, PSPICE, [54].

Çalışmamız için Comsol Multiphysics 6.1 ile simülasyonu seçtik ve bu bölümde kullanılan yazılımı detaylı olarak sunacağız:

3.4.2. COMSOL multiphysics

COMSOL yazılımı ve ilgili şirket, 1986 yılında İsveç, Stockholm'deki Kraliyet Teknoloji Enstitüsü'nde (KTH) sayısal simülasyona adanmış dersini takiben Germund Dahlquist'in öğrencileri tarafından yaratıldı. COMSOL Multiphysics'in ilk versiyonu 1998'de yayınlandı. [55].

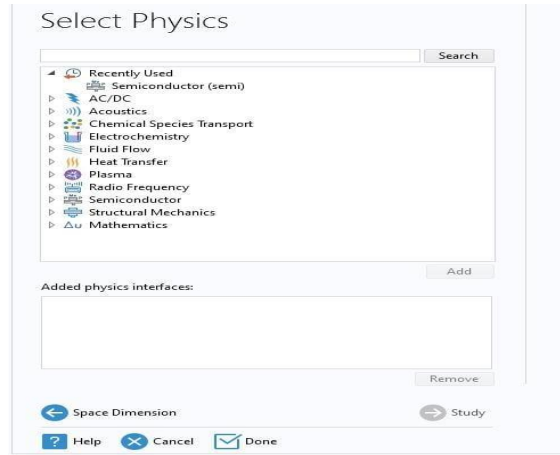
COMSOL Multiphysics, mühendislik ve bilimsel araştırmanın tüm alanlarında kullanılan sonlu elemanlar yöntemine dayalı bir sayısal simülasyon yazılımıdır. Yazılım, çoklu fizik ve monofizik modelleme yetenekleri sunar. [56]



Şekil 3.18. Yazılım başlatma penceresi.

3.4.3. Uygulama alanları

Mühendisler ve bilim insanları, mühendislik, üretim ve bilimsel araştırmanın tüm alanlarında tasarımları, cihazları ve süreçleri simüle etmek için COMSOL Multiphysics yazılımını kullanır. COMSOL MULTIPHYSICS 6.1 için birkaç özel uygulama modeli vardır: (Şekil 3.19.)



Şekil 3.19. COMSOL MULTIPHYSICS'teki farklı simülasyon modelleri.

AC/DC modeli: AC/DC arayüzleri, statik ve düşük frekanslı sistemlerde elektrik ve manyetik alanları hesaplamak için kullanılır. [52]

Akustik Model: Akustik arayüzler, frekans ve zaman alanında çeşitli koşullar altında akustik alanların yayılmasını hesaplamak için kullanılır. [57]

Kimyasal tür taşıma modeli: kimyasal tür taşıma arayüzleri, çözeltilerdeki kimyasal türlerin konsantrasyon alanlarını hesaplamak için kullanılır. [57]

Elektrokimya modeli: elektrokimya dalı, elektrokimyasal hücrelerdeki potansiyel ve akım dağılımlarını modellemek için genel fizik arayüzleri içerir. [57]

Isı transferi modeli: ısı transferi arayüzleri, sıcaklık ve yoğunluk radyasyon alanlarını hesaplamak için kullanılır. COMSOL arayüzleri ayrıca hız, basınç veya elektromanyetik alanlar gibi diğer fiziksel alanları da hesaplar. [57]

Sıvı akış modeli: sıvı akış arayüzleri, sıvıların ve gazların akış ve basınç alanlarını simüle etmek için kullanılır. [57]

Optik Model: optik sistem arayüzleri, dalga boyu incelenen cihaz veya sistemle karşılaştırılabilir veya daha küçük olan sistemler için elektrik ve manyetik alanları hesaplamak için kullanılır. [57]

Plazma modeli: plazma dalı, plazmayı modellemek için fizik arayüzleri içerir. [57]

Radyo frekansı modeli: radyo frekansı arayüzleri, yüksek frekanslı sistemlerde elektrik ve manyetik alanları hesaplamak için kullanılır. [57]

Yapıların mekanik modeli: mekaniğin yapısal dalı, katı yapıların deformasyonlarını, kuvvetlerini ve gerilimlerini analiz etmek için fizik arayüzleri içerir. [57]

Yarı iletken modeli: yarı iletken dalı, elektrik potansiyeli için Poisson denklemini ve yarı iletken bir malzemedeki elektron ve delikler için sürüklenme difüzyon denklemlerini çözen yarı iletken arayüzünü içerir. [57]

Model Matematiği: matematik dalı, hassasiyet analizi, hareketli ağları ve deforme olmuş geometrileri modelleme ve daha fazlası için arayüzler içerir [58].

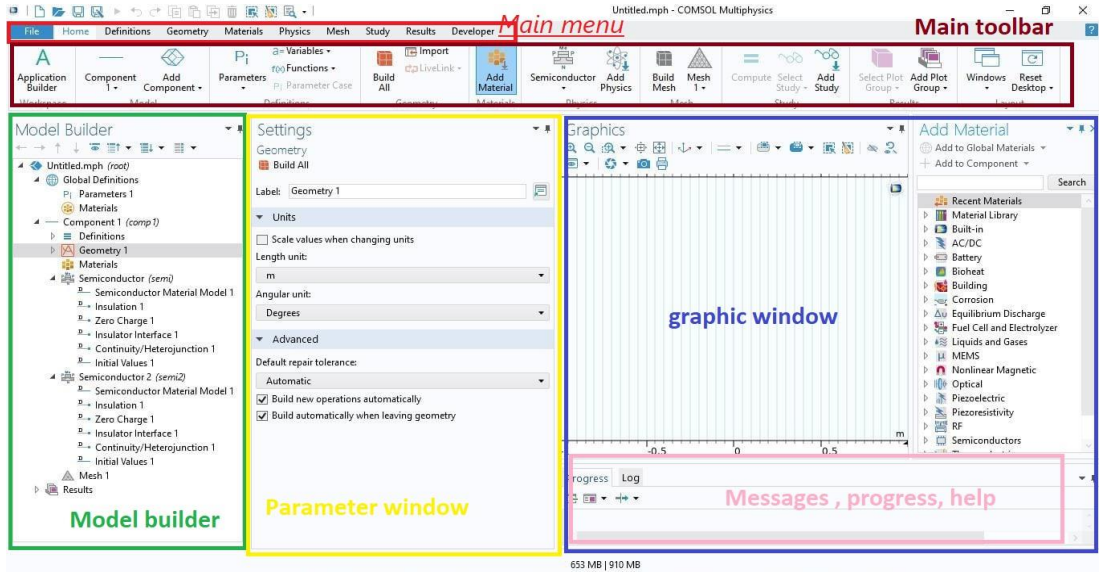
3.4.4. Performans

COMSOL Multiphysics, tam olarak birleştirilmiş çoklu fizik ve monofizik modelleme yetenekleri sunan bir simülasyon platformudur. Mevcut fiziksel modüllerin gücünü ve çok disiplinliliğini bir araya getirir; bunların arasında akışkan mekaniği, ısı transferi, elektromanyetizma, kimya, yapısal mekanik bulunur... Aynı sayısal simülasyon sırasında birkaç fiziksel olguyu birleştirmek mümkündür: bu, bu yazılımın güçlü yönlerinden biridir [54].

COMSOL Multiphysics platformu ayrıca, sürüm kontrolü ve verimli veri depolama sağlayan bir simülasyon modelleme ve yönetim aracı olan Model Yöneticisi'ni de içerir. [56]. Ayrıca, COMSOL ürün paketinden herhangi bir tamamlayıcı ürün kombinasyonunu platforma eklemek mümkündür; Bu, ele alınacak mühendislik alanı veya fiziksel olgudan bağımsız olarak, tutarlı bir şekilde aynı kullanıcı arayüzünde belirli modelleme ihtiyaçlarını karşılamak için özel özelliklere erişim sağlar.

3.4.5. Yazılım arayüzünün genel açıklaması

COMSOL arayüzü dört bölüme ayrılabilir. Solda Model Oluşturucu bulunur. Doğrudan sağdaki sütun, Modelde neyin seçildiğine ilişkin seçenekleri ve simülasyonun başlangıç parametrelerini içerir, görüntüleme penceresi grafiği (Grafikler) geometriyi, ağı veya sonuçları görselleştirmeyi mümkün kılar, pencere hata mesajlarını, simülasyonların ilerlemesini görselleştirmeyi mümkün kılar [59].



Şekil 3.20. Yazılım arayüzü.

3.4.6. Farklı simülasyon adımlarının genel açıklaması

COMSOL MULTIPHYSICS 6.1'de bir yapının tasarımı için izlenmesi gereken temel adımlar şunlardır:

- Uzak boyutunu seçin
- Fiziki seçin
- Çalışmayı seçin
- Geometriyi tanımlayın
- Malzemeleri seçin
- Mesh
- Simülasyonu başlatın
- Sonuçları işleyin ve analiz edin.

3.4.6.1. Yazılımı başlatma

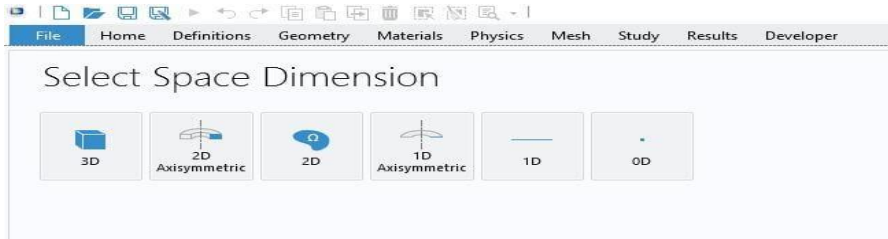
Yazılımı başlatmak için COMSOL MULTIPHYSICS ikonuna tıklayın, yazılım penceresi aşağıdaki gibi açılır:



Şekil 3.21. Yazılım başlatma penceresi.

3.4.6.2. Uzay boyutunun seçimi

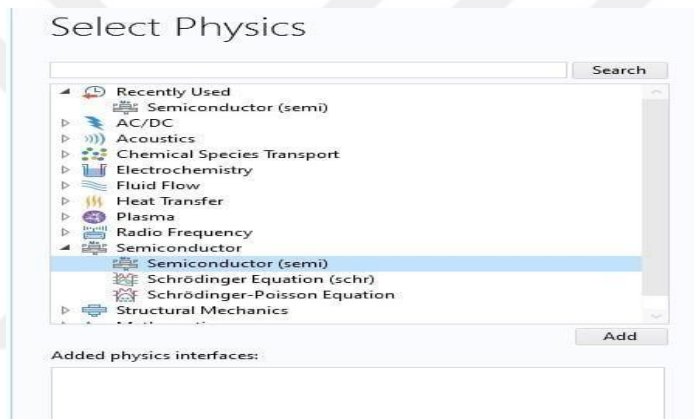
Uzayın birkaç boyutu vardır, her çalışma için belirli bir boyut seçiyoruz.



Şekil 3.22. Simülasyonun farklı boyutları.

3.4.6.3. Fizik seçimi

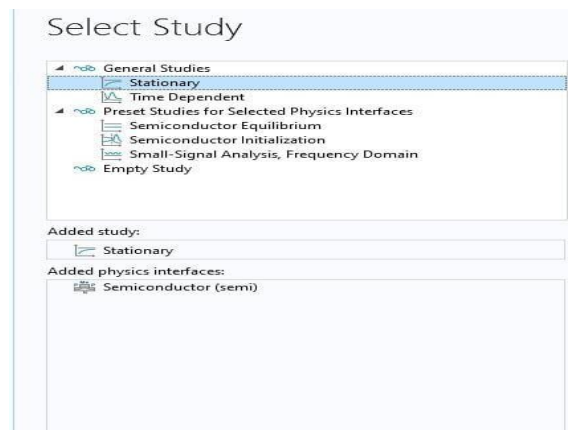
Uzay boyutunun seçiminden sonra, yapacağımız simülasyona göre kullanılacak fiziğin seçimine geçiyoruz, şekil 23 yazılımda bulunan farklı fiziği göstermektedir.



Şekil 3.23. Hangi fiziğin kullanılacağını seçilmesi.

3.4.6.4. Çalışmayı seçme

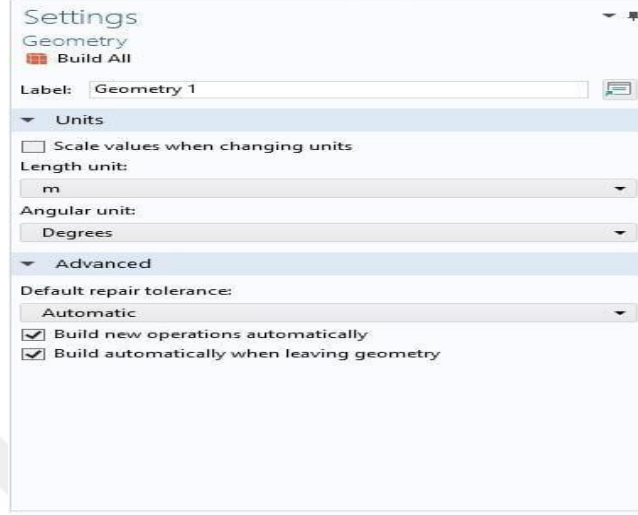
Çalışma konusu, kullanılan fiziğe uygun bir çalışma alanı seçmemize veya tanımlamamıza olanak tanır.



Şekil 3.24. Çalışma seçimi.

3.4.6.5. Geometriyi tanımlama

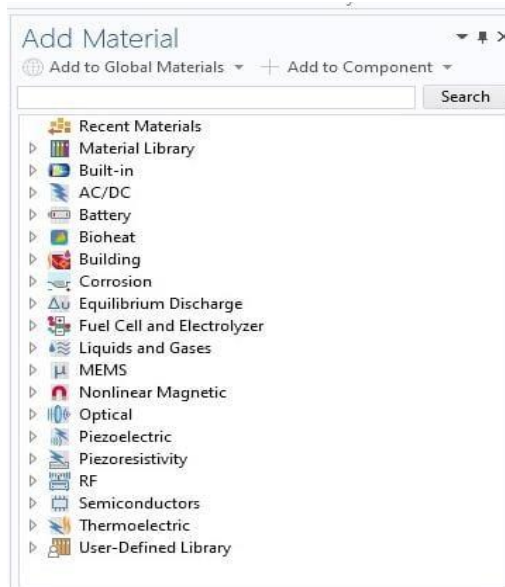
Fiziksel alan ve çalışma alanı seçildikten sonra, yapımızın geometrisini belirlemeye başlarız. Şekil 25, istenen geometriyi elde etmemizi sağlayan çalışma arayüzünü göstermektedir.



Şekil 3.25. İstenen geometrinin oluşturulması.

3.4.6.6. Malzeme seçimi

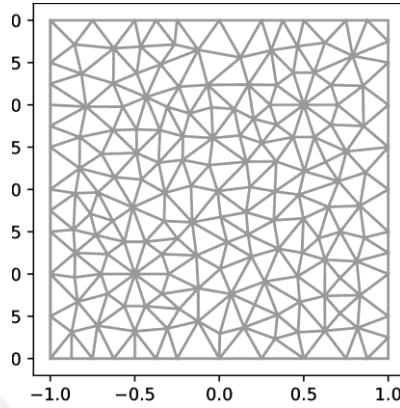
Malzeme seçimi bölümü, yazılımda bulunan çok çeşitli malzemeleri içerir ve benzer şekilde, bu yazılım bize teorik çalışmalarda bulunan tüm özellikleri ilişkilendirerek bir malzeme oluşturma olanağı sunar.



Şekil 3.26. Çeşitli malzemelerin seçimi.

3.4.6.7. Mesh (ağ yapısı)

Mesh, mesh adı verilen temel hacimdeki geometrinin mekansal ayrıklaştırılmasına karşılık gelir. Mesh, yazılım tarafından otomatik olarak oluşturulur. Önceden tanımlanmış boyutları kullanabilirsiniz: ekstra kaba; kaba; normal; ince veya ekstra ince...



Şekil 3.27. Ağ üzerinde örnek.

3.4.6.8. Simülasyonun başlatılması ve sonuçların analizi

Simülasyon, başlangıçta belirtilen tüm adımlar tamamlandıktan sonra başlatılır.

Yazılım tüm verileri derler ve veri kümeleri, türevler, değerler ve tablolar tanımlandıktan ve 1D ve 2D ve gruplar kullanılarak raporlar dışa aktarıldıktan sonra simülasyon sırasında elde edilen tüm sonuçları bize verir.

3.4.7. Grafik penceresi

Grafik penceresi, geometri, ağ ve model sonuçlarının grafiksel bir görünümünü sunar. Grafik penceresinde, geometri oluştururken birden fazla nesnenin görünümünü ve seçimini değiştirmek için kullanışlı araçlar ve ayrıca fiziği tanımlamak veya ağı veya modelin belirli bir bölümündeki nicelikleri değerlendirmek için geometrik varlıkları seçmek için alanlar, sınırlar, kenarlar ve noktalar bulunur.

3.4.7.1. Çizgi grafiği:

Bir geometrik çizgi boyunca bir skaler niceliği çizmek için bir çizgi grafiği kullanın. Çizgi bir geometri kenarı, parametrik bir eğri veya bir kesit çizgisi olabilir. Bir niceliği başka bir niceliğe göre çizin. Gerektiğinde bir alt düğüm, renk ifadesi ekleyin. Bu tür bir çizim eklemek için bir 1D grup veya Polar Plot grubuna sağ tıklayın.

3.4.7.2. Nokta grafiđi:

Zaman içindeki bir noktadaki değeri veya bir parametre değeri görselleştirmek için bir "Nokta" grafiđi kullanın. Bu, geometrideki bir nokta veya bir kesme noktası olabilir. Gerektiđinde bir Renk İfadesi alt düğümü ekleyin. Bu tür bir çizim eklemek için bir 1D grup veya Polar Plot grubuna sağ tıklayın.

- **Küresel**

Zamanın veya bir parametrenin bir fonksiyonu olarak bir skaler niceliđi temsil etmek için bir dünya çizimi kullanın.

3.4.8. Sonuç

Bu bölümde COMSOL 6.1 yazılımı, uygulama alanları, yardımcı programları ve küresel menüden COMSOL yazılımının tüm pencerelerine kadar yazılımın kullanımıyla ilgili her şeyi sunduk.

Daha sonra gerekli tüm talimatların doğrudan uygulanmasını ayrıntılı olarak açıkladık: farklı simülasyon adımları; incelenen yapının işlevleri ve seçimleri, elde edilen tüm sonuçları kullanmayı ve izlemeyi başaranaya kadar.



4. DENEYSEL KISIM

Bu bölümde mezogözenekli perovskit bazlı yapının simülasyonunu inceliyorum.

Bu tezde, her biri farklı bir metal oksit kullanılan üç farklı güneş pili sistemi simüle edilmiştir: TiO₂ ve SnO₂.

Üç simülasyonda da aynı adımları yapıyorum .Comsol programını açıyorum. 2D'de uzaydan bahsetmeyi seçiyorum. Yarı iletken fiziğini seçiyorum. Sabit sistemde çalışıyorum. Global parametreleri aşağıdaki tablolarda belirtildiği gibi tanımlıyorum.(tablo 4.3-4.8 arasında)

Tablo 4.1. Küresel Parametreler.

Ad	Ifade	Değer
h1	h_const	6.6261E-34 J·s
k1	k_B_const	1.3806E-23 J/K
Q	e_const	1.6022E-19 C
P_in	P0*Area	6.25E-11 W
P0	1000[W/m^2]	1000 W/m ²
n_air	1	1
T0	293.15[K]	293.15 K

Tablo 4.2. Geometri parametreleri.

Ad	Ifade	Değer
Area	W*D	6.25E-14 m ²
W	250[nm]	2.5E-7 m
D	W	2.5E-7 m
H_Au	100[nm]	1E-7 m
H_perovs	500[nm]	5E-7 m
H_FTO	50[nm]	5E-8 m
H_Air	lda_max/2	4.5E-7 m

Tablo 4.3. Çalışma Parametreleri.

Ad	Ifade	Değer
lda_max	900[nm]	9E-7 m
lda_min	300[nm]	3E-7 m
lda0	500[nm]	5E-7 m
n_step	60	60
k0_max	2*pi/lda_min	2.0944E7 1/m
f0	c_const/lda0	5.9958E14 1/s
lda_step	(lda_max - lda_min)/n_step	1E-8 m
V_a	0[V]	0 V

Tablo 4.4. Mesh Parametreleri.

Ad	Ifade	Değer
h_max_air	lda_min/10/n_air	3E-8 m
h_max_prov	min(h_prov_n, h_prov_k)	1.1538E-8 m
h_prov_n	lda_min/10/2.6	1.1538E-8 m
h_prov_k	1/(k0_max*0.9)	5.3052E-8 m
h_max_Au	min(h_Au_n, h_Au_k)	6.8209E-9 m
h_Au_n	lda_min/10/1.5	2E-8 m
h_Au_k	1/(k0_max*7)	6.8209E-9 m
h_max_FTO	lda_min/10/2.2	1.3636E-8 m

Tablo 4.5. Havanın optoelektronik parametresi.

Tanım	Değer	Birim
Isıl genleşme katsayısı	alpha_p(pA, T)	1/K
Ortalama mol kütlesi	0.02897	kg/mol
Toplu viskozite	muB(T)	Pa·s
Bağıl geçirgenlik	1	1
Bağıl geçirgenlik	1	1
Dinamik viskozite	eta(T)	Pa·s
Özgül ısıların oranı	1.4	1
Elektriksel iletkenlik	0	S/m
Sabit basınçta ısı kapasitesi	Cp(T)	J/(kg·K)
Yoğunluk	rho(pA, T)	kg/m ³
Isıl iletkenlik	k(T)	W/(m·K)
Ses hızı	cs(T)	m/s

Tablo 4.6. FTO'nun optoelektronik parametresi.

Ad	Değer	Birim
Sabit basınçta ısı kapasitesi	343	J/(kg·K)
Yoğunluk	5560	kg/m ³
Isıl iletkenlik	31	W/(m·K)

Tablo 4.7. CH₃NH₃PbI₃'ün optoelektronik parametresi.

Ad	Değer	Birim
Bağıl geçirgenlik	6.5	1
Isıl iletkenlik	0.5	W/(m·K)
Yoğunluk	4000	kg/m ³
Sabit basınçta ısı kapasitesi	258	J/(kg·K)
Bant aralığı	1.57	V
Elektron afinitesi	3.93	V
Etkin durum yoğunluğu, değerlik bandı	5.41E25	1/m ³
Etkin durum yoğunluğu, iletim bandı	1.66E25	1/m ³
Elektron hareketliliği	0.005	m ² /(V·s)
Delik hareketliliği	0.005	m ² /(V·s)
Elektron ömrü, SRH	8E-9	S
Delik ömrü, SRH	8E-9	S

Tablo 4.8. AU'nun optoelektronik parametresi.

Ad	Değer	Birim
Isı iletkenliği	317	W/(m·K)
Yoğunluk	19300	kg/m ³
Sabit basınçta ısı kapasitesi	129	J/(kg·K)

4.1. İlk Simülasyon

- Yapı: FTO/kompakt TiO₂/mezopoz TiO₂+MAPbI₃/spiro-OMeTAD/Au.
Model Yapılandırması

Geometrileri aşağıdaki tabloda belirtildiği gibi tanımlıyorum.

Tablo 4.9. Geometri Parametreleri.

Ad	İfade	Değer
H_spiro	600[nm]	6E-7 m
H_mpTiO2	250[nm]	2.5E-7 m
H_TiO2	100[nm]	1E-7 m
H_FTO	50[nm]	5E-8 m
H_cell	H_spiro + H_perovs + H_mpTiO2 + H_TiO2	9.35E-7 m

Mesh parametrelerini tablo 10'de tanımladım

Tablo 4.10. Mesh Parametreleri.

Ad	İfade	Değer
h_max_mpTiO2	min(h_mpTiO2_n, h_mpTiO2_k)	1.6667E-8 m
h_mpTiO2_n	lda_min/10/1.8	1.6667E-8 m
h_mpTiO2_k	1/(k0_max*0.01)	4.7746E-6 m
h_max_TiO2	min(h_TiO2_n, h_TiO2_k)	1.0526E-8 m
h_TiO2_n	lda_min/10/2.85	1.0526E-8 m
h_TiO2_k	1/(k0_max*0.6)	7.9577E-8 m
h_max_spiro	min(h_spiro_n, h_spiro_k)	1.5E-8 m
h_spiro_n	lda_min/10/2	1.5E-8 m
h_spiro_k	1/(k0_max*0.36)	1.3263E-7 m

4.2. Malzemeler

TiO2, mezogözenekli TiO2 ve spiro'nun optoelektronik parametrelerini tanıtacağım. aşağıdaki tablolarda nasıl yazılır.

Tablo 4.11. TiO2'nin Malzeme Parametreleri.

Ad	Değer	Birim
Bağıl geçirgenlik	9	1
Isıl iletkenlik	5	W/(m·K)
Yoğunluk	3900	kg/m ³
Sabit basınçta ısı kapasitesi	683	J/(kg·K)
Bant aralığı	Eg_TiO2_V	V
Elektron afinitesi	4	V
Etkin durum yoğunluğu, değerlik bandı	1E25	1/m ³
Etkin durum yoğunluğu, iletim bandı	1E25	1/m ³
Elektron hareketliliği	0.002	m ² /(V·s)
Delik hareketliliği	0.001	m ² /(V·s)
Elektron ömrü, SRH	5E-9	S
Delik ömrü, SRH	5E-9	S

Tablo 4.12. TiO₂'nin Malzeme Parametreleri.

Ad	Değer	Birim
Bağıl geçirgenlik	5.57	1
Isıl iletkenlik	0.5	W/(m·K)
Sabit basınçta ısı kapasitesi	700	J/(kg·K)
Yoğunluk	2500	kg/m ³
Bant aralığı	3.2	V
Elektron afinitesi	4	V
Etkin durum yoğunluğu, değerlik bandı	1E31	1/m ³
Etkin durum yoğunluğu, iletim bandı	1E31	1/m ³
Elektron hareketliliği	1E-9	m ² /(V·s)
Delik hareketliliği	1E-9	m ² /(V·s)
Elektron ömrü, SRH	1E-10	S
Delik ömrü, SRH	1E-10	S

Tablo 4.13. spiro-MeOTAD'nin Malzeme Parametreleri.

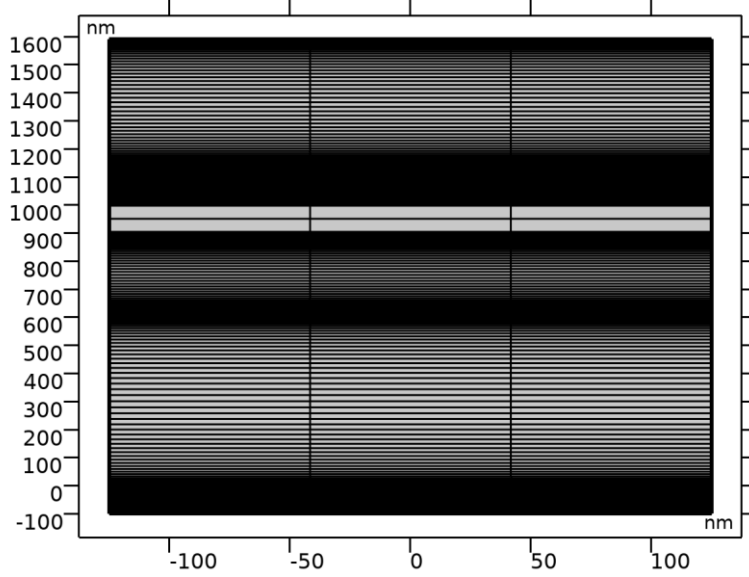
Ad	Değer	Birim
Heat capacity at constant pressure	262	J/(kg·K)
Density	4128	kg/m ³
Thermal conductivity	0.3	W/(m·K)
Relative permittivity	3	1
Band gap	Eg_spiro_V	V
Electron affinity	2.45	V
Effective density of states, valence band	1E26	1/m ³
Effective density of states, conduction band	1E26	1/m ³
Electron mobility	2E-4	m ² /(V·s)
Hole mobility	1E-6	m ² /(V·s)
Electron lifetime, SRH	1E-10	S
Hole lifetime, SRH	1E-10	S

4.3. Geometri Ağı

Bu simülasyonda ince bir ağı kullanılması, özellikle kritik arayüzlerde elektrik potansiyeli ve akım yoğunluğu gradyanlarının doğru bir şekilde yakalanmasını mümkün kıldı. Bu yaklaşım, sayısal hataları en aza indirirken sonuçların doğruluğunu sağladı ve böylece MAPI perovskit güneş hücrelerinde kurşun toksisitesini azaltmak

için HTL ve ETL malzemelerinin optimize edilmesine yönelik güvenilir bilgiler sağladı.

Şekil 4.1, COMSOL Multifizik programından elde edilen yapı sonuçlarının ağını temsil etmektedir



Şekil 4.1. Yapı ağı 1.

4.4. Çözücü Seçimi Ve Simülasyonun Başlatılması

Çözücü tarafından üç ana kriterin sağlanması gerekir:

- Çözümün kararlılığı.
- Çözümün benzersizliği.
- Çözümün yakınsaması

Sorun tamamen tanımlandığında sonuçların ortaya çıkmasını sağlamak için simülasyonu başlatırız.

4.5. İkinci Simülasyon

- **Yapı: FTO/kompakt TiO_2 /mezopoz TiO_2 +MAPbI₃/Karbon.**

İlk simülasyonun aynı adımını yapıyorum, HTL spironun malzemesini karbona değiştiriyorum.

Tablo 4.14. Karbon'unu Malzeme Parametreleri.

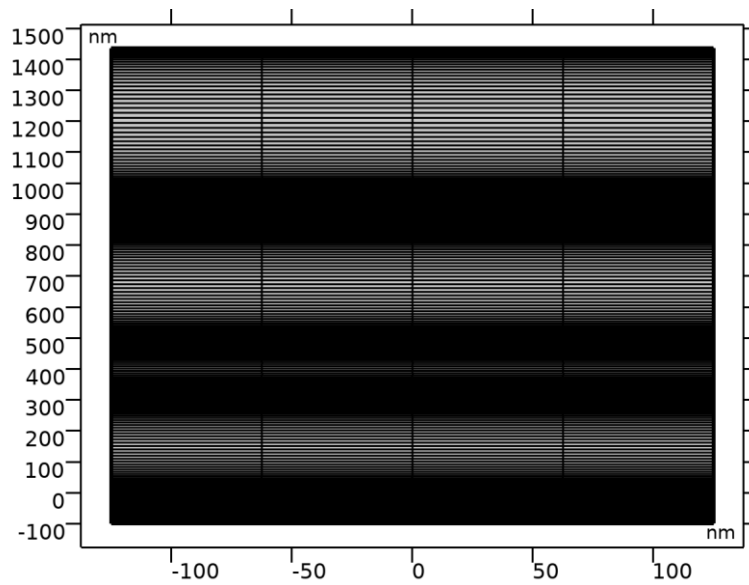
Ad	Değer	Birim
Sabit basınçta ısı kapasitesi	262	J/(kg·K)
Yoğunluk	4128	kg/m ³
Isıl iletkenlik	0.3	W/(m·K)
Bağıl geçirgenlik	3	1
Bant aralığı	Eg_Carbon_V	V
Elektron afinitesi	2.45	V
Durumların etkin yoğunluğu, değerlik bandı	1E26	1/m ³
Durumların etkin yoğunluğu, iletim bandı	1E26	1/m ³
Elektron hareketliliği	2E-4	m ² /(V·s)
Delik hareketliliği	1E-6	m ² /(V·s)
Elektron ömrü, SRH	1E-10	S
Delik ömrü, SRH	1E-10	S

Tablo 4.15. Geometri Parametreleri.

Ad	İfade	Değer
H_Carbon	300[nm]	3E-7 m
H_cell	H_Carbon + H_perovs + H_mpTiO2 + H_TiO2	9.35E-7 m

Tablo 4.16. Mesh Parametreleri.

Ad	İfade	Değer
h_max_Carbon	min(h_Carbon_n, h_Carbon_k)	1.7647E-8 m
h_Carbon_n	lda_min/10/1.7	1.7647E-8 m
h_Carbon_k	1/(k0_max*0.94)	5.0794E-8 m

**Şekil 4.2.** Yapı ağı 2.

4.6. Üçüncü Simülasyon

- **Yapı: FTO/kompakt SnO₂/mezopoz SnO₂+MAPbI₃/spiro-OMeTAD/Au.**

Bu simülasyonda, ilk simülasyonun aynı adımını yapıyorum. ETL TiO₂ ve mezogözenekli TiO₂'nin malzemesini SnO₂ ve mezogözenekli SnO₂ ile değiştiriyorum.

Tablo 4.17. SnO₂'ini Malzeme Parametreleri.

Ad	Değer	Birim
Relative permittivity	14	1
Thermal conductivity	4	W/(m·K)
Density	3900	kg/m ³
Heat capacity at constant pressure	1165	J/(kg·K)
Band gap	Eg_SnO2_V	V
Electron affinity	4	V
Effective density of states, valence band	1E25	1/m ³
Effective density of states, conduction band	1E25	1/m ³
Electron mobility	0.002	m ² /(V·s)
Hole mobility	0.001	m ² /(V·s)
Electron lifetime, SRH	5E-9	S
Hole lifetime, SRH	5E-9	S

Tablo 4.18. Geometri Parametreleri.

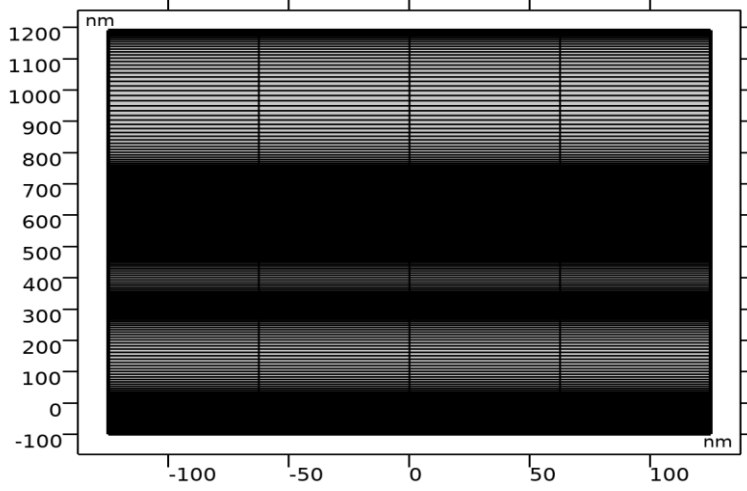
Ad	İfade	Değer
H_mpSnO2	100[nm]	1E-7 m
H_SnO2	90[nm]	9E-8 m
H_cell	H_spiro + H_perovs + H_mpSnO2 + H_SnO2	6.9E-7 m

Tablo 4.19. Mesh Parametreleri.

Ad	İfade	Değer
h_max_mpSnO2	min(h_mpSnO2_n, h_mpSnO2_k)	1.4925E-8 m
h_mpSnO2_n	lda_min/10/2.01	1.4925E-8 m
h_mpSnO2_k	1/(k0_max*0.01)	4.7746E-6 m
h_max_SnO2	min(h_SnO2_n, h_SnO2_k)	3.3333E-8 m
h_SnO2_n	lda_min/10/0.9	3.3333E-8 m
h_SnO2_k	1/(k0_max*0.7)	6.8209E-8 m

Tablo 4.20. Mezogözenekli SnO₂'ini Malzeme Parametreleri.

Ad	Değer	Birim
Bağıl geçirgenlik	8	1
Isıl iletkenlik	0.45	W/(m·K)
Sabit basınçta ısı kapasitesi	1165	J/(kg·K)
Yoğunluk	4000	kg/m ³
Bant aralığı	3.5	V
Elektron afinitesi	4	V
Etkin durum yoğunluğu, değerlik bandı	1E25	1/m ³
Etkin durum yoğunluğu, iletim bandı	2E27	1/m ³
Elektron hareketliliği	0.001	m ² /(V·s)
Delik hareketliliği	5E-4	m ² /(V·s)
Elektron ömrü, SRH	10	S
Delik ömrü, SRH	10	S



Şekil 4.3. Yapı ağı 3.



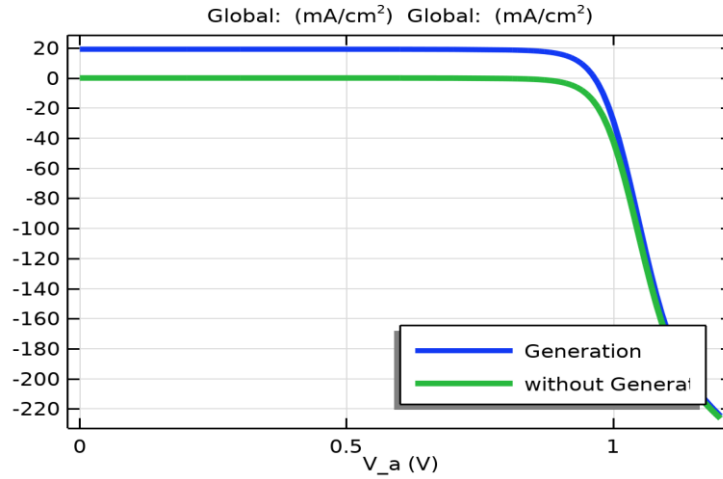
5. SONUÇLAR VE YORUMLAR BÖLÜMÜ

Sonuçlar ve yorumlama

Bu bölümde, elde edilen ana sonuçları sunacağız ve bunları yorumlayarak, hücrenin davranışına ve özellikle de dönüşüm verimliliğine büyük ölçüde karar veren belirli parametrelerin etkisini vurgulayacağız.

5.1. Brinci Simülasyon

Yapının simülasyonu: FTO/kompakt TiO_2 /mezoporous TiO_2 +MAPbI₃/spiro-OMeTAD/Au, bu I(V) eğrisini veriyor. şekil 5.1'e bakın

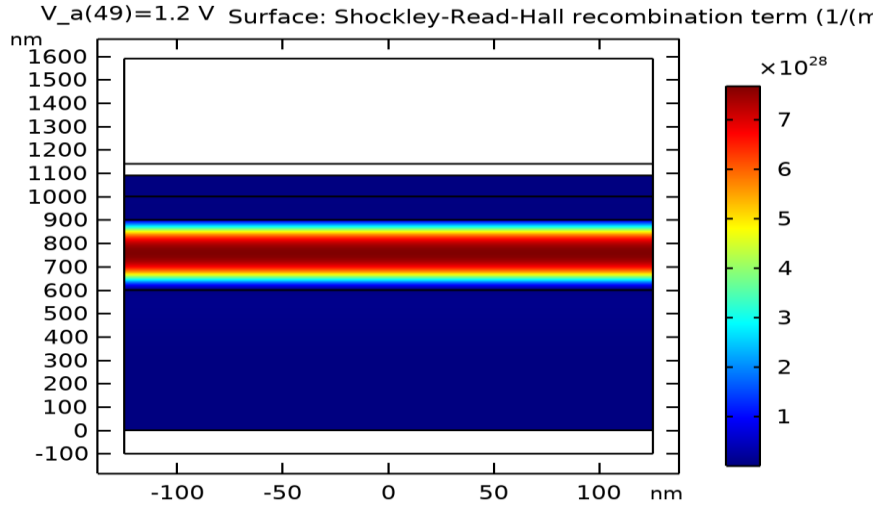


Şekil 5.1. I(V) eğrisini 1.

I(V)'nin bu eğrisine göre 5 parametreyi hesaplayacağız. Bu simülasyonun etkinliğini elde etmek için

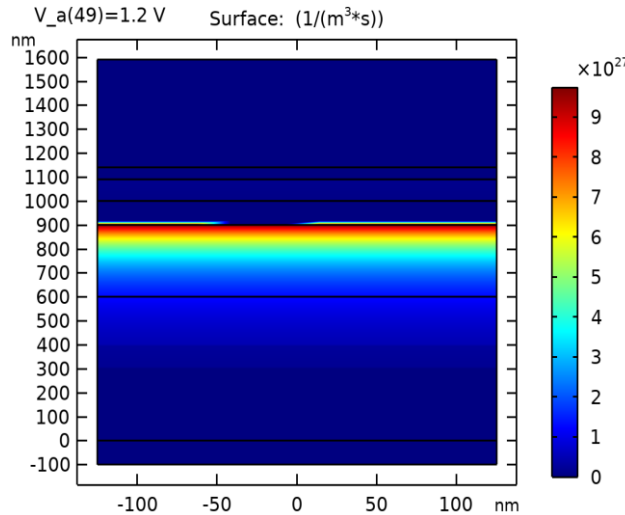
Tablo 5.1. I(V) ölçüm simülasyonundan değerler 1.

VOC	ISC	Pmax	FF	PCE
19.13	0.97	15.35	0.83	15.34



Şekil 5.2. Yüzey Shockley-Read-Hall rekombinasyoterimi ($1/(m^3*s)$) 1.

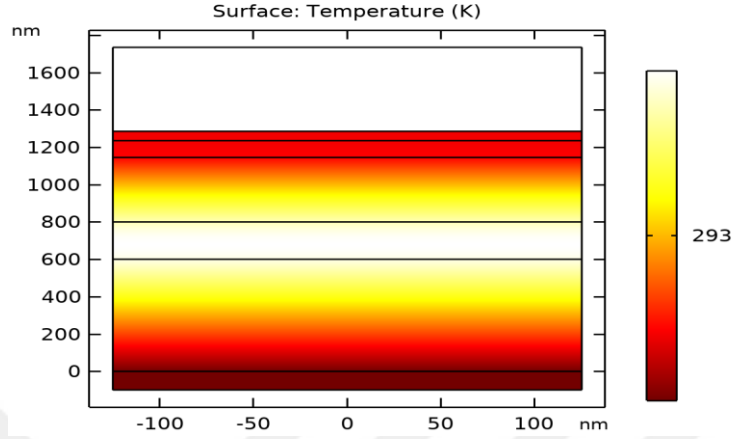
Bu görüntü, FTO, kompakt TiO_2 , mezogözenekli $TiO_2 + MAPbI_3$, spiro-OMeTAD ve Au katmanları dahil olmak üzere simüle edilmiş bir fotovoltaiik hücre yapısında Shockley-Read-Hall rekombinasyon oranı dağılımını temsil eder. Rekombinasyon, ortadaki kırmızı-sıcak renkle gösterildiği gibi $MAPbI_3$ katmanında en yoğunudur ve bu, bu bölge içinde önemli taşıyıcı rekombinasyonunu düşündürmektedir. Bu bölgenin dışındaki alanlar, cihazdaki daha az aktif katmanlara karşılık gelen çok daha düşük rekombinasyon oranları sergiler.



Şekil 5.3. Yüzey: Shockley-Read-Hall üretim terimi ($1/(m^3*s)$) 1.

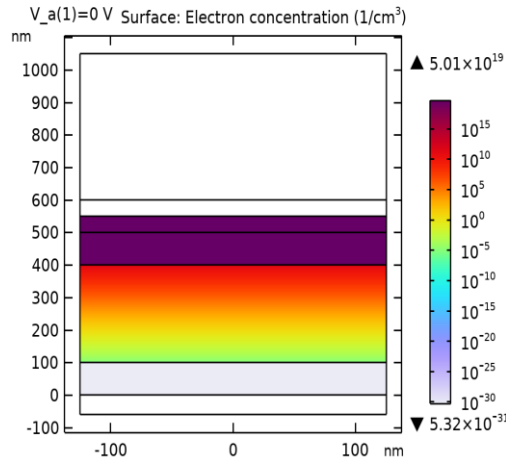
Bu görüntü, 1,2 V'luk bir voltaj altında aynı fotovoltaiik hücre yapısı içindeki yük taşıyıcılarının üretim oranını göstermektedir. En yoğun taşıyıcı üretimi, 800-900 nm yakınındaki parlak sarı-kırmızı bantla gösterildiği gibi, mezogözenekli $TiO_2 + MAPbI_3$

katmanında meydana gelir. Yapının geri kalanı, ışık emiliminin ve yük üretiminin baskın olarak meydana geldiği aktif bölgenin MAPbI₃ katmanı içinde olduğunu vurgulayarak önemli ölçüde daha düşük üretim oranları sergiler.



Şekil 5.4. Üretimdeki sıcaklık yüzeyi (K) 1.

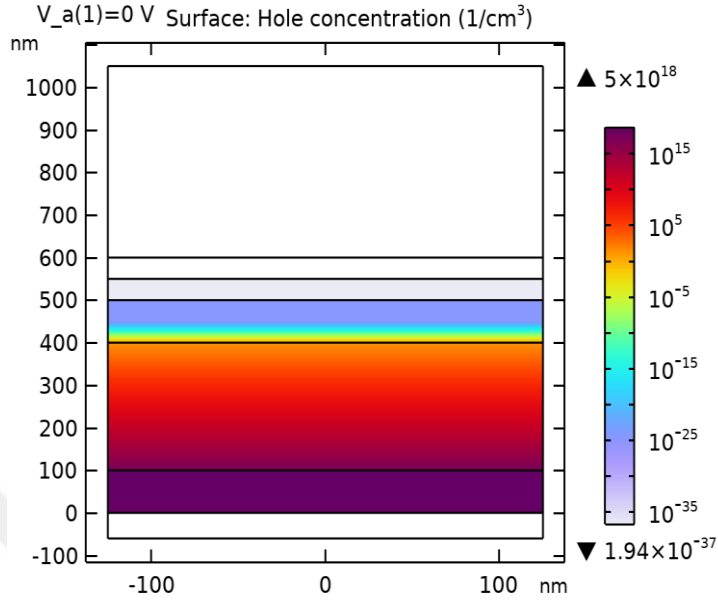
Bu görüntü, bir fotovoltaik hücre yapısının katmanları arasındaki sıcaklık dağılımını göstermektedir. Sıcaklık, katmanlar arasındaki arayüzlere yakın yerlerde hafif değişikliklerle cihaz boyunca eşit olarak dağılmış görünmektedir. Kırmızıdan sarıya doğru olan renk gradyanı, tüm yapının oda sıcaklığına (293 K) yakın çalıştığını ve çalışma sırasında minimum yerel ısıtma olduğunu göstermektedir.



Şekil 5.5. Yüzey:Elektron konsantrasyonu(1/cm³) 1.

Bu simülasyon görüntüsü, çok katmanlı bir fotovoltaik yapıdaki elektron konsantrasyon profilini temsil eder. Yüksek elektron konsantrasyonu, öncelikle mezogözenekli TiO₂ + MAPbI₃ katmanında gözlenir ve bu, bu bölgede önemli yük taşıyıcısı oluşumunu gösterir. Elektron konsantrasyonu, spiro-OMeTAD ve FTO

katmanlarında minimal elektron varlığıyla bu aktif katmanın dışında keskin bir şekilde düşer ve bu, cihaz içinde etkili yük ayrımı ve taşınmasını vurgular.

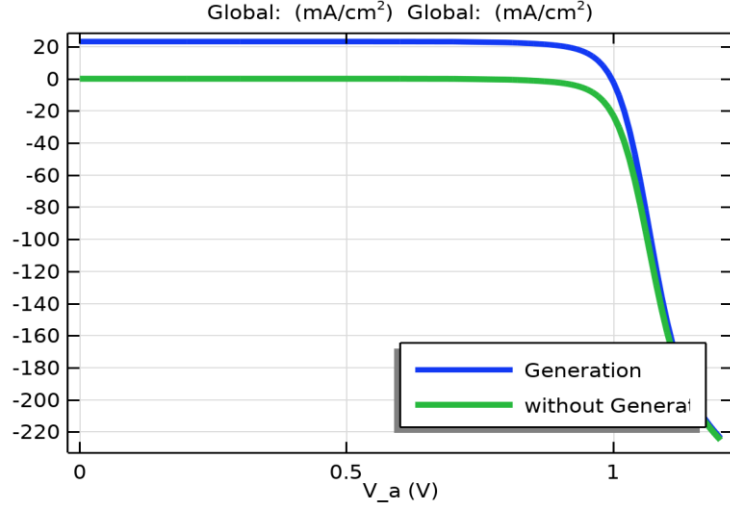


Şekil 5.6. Yüzey: Delik konsantrasyonu(1/cm³) 1.

Bu simülasyon görüntüsü aynı fotovoltaiik yapıdaki delik konsantrasyon profilini gösterir. Spiro-OMeTAD katmanında yüksek delik konsantrasyonu belirgindir ve bu katmanda verimli delik taşınması ve birikimi olduğunu gösterir. Delik konsantrasyonu, kompakt TiO₂ ve FTO katmanlarında ihmal edilebilir düzeyde olmakla birlikte, mezogözenekli TiO₂ + MAPbI₃ katmanında hızla azalır ve bu da cihaz boyunca elektronların ve deliklerin etkili bir şekilde ayrıldığını gösterir.

5.2. İkinci Simülasyon

Yapının simülasyonu: FTO/kompakt TiO₂/mezoporous TiO₂+MAPbI₃/Karpon/Au, bu I(V) eğrisini veriyor. şekil 1'e bakın

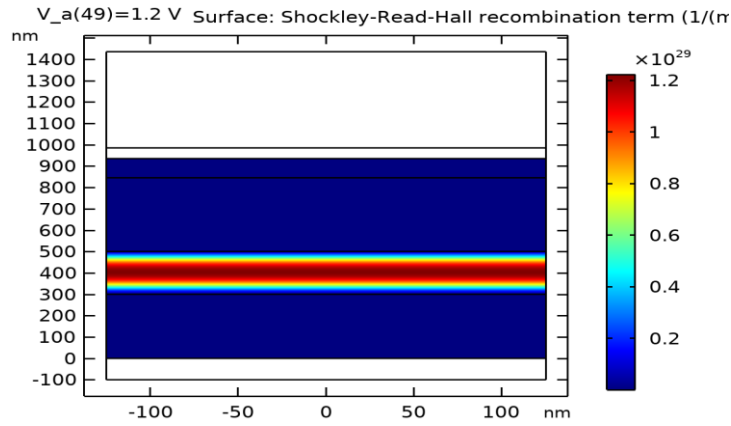


Şekil 5.7. I(V) eğrisini 2.

I(V)'nin bu eğrisine göre 5 parametreyi hesaplayacağız. Bu simülasyonun etkinliğini elde etmek için.

Tablo 5.2. I(V) ölçüm simülasyonundan değerler 2.

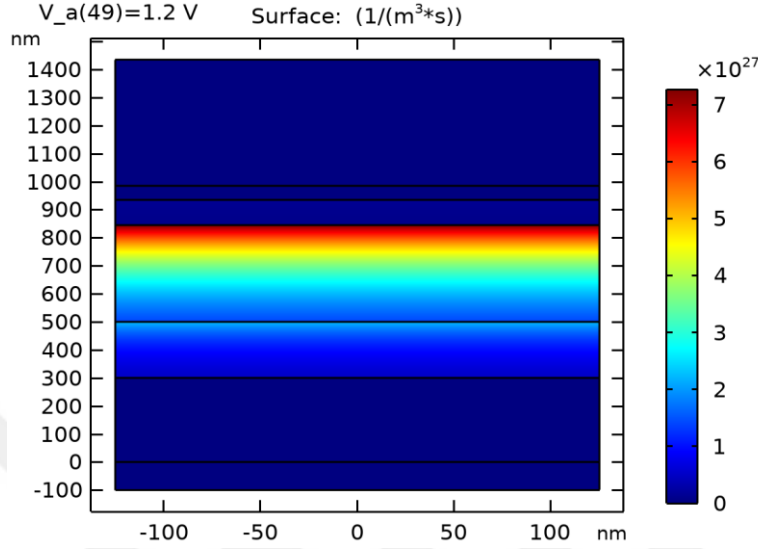
VOC	ISC	Pmax	FF	PCE
23.15	0.99	18.66	0.81	18.56



Şekil 5.8. Yüzey: Shockley-Read-Hall rekombinasyon terimi ($1/(m^3 \cdot s)$) 2.

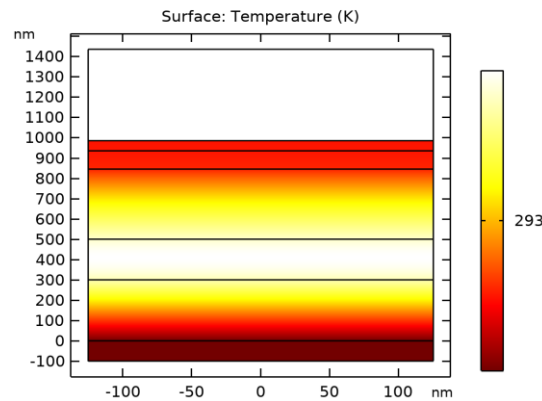
Bu görüntü, simüle edilmiş fotovoltaik yapıdaki Shockley-Read-Hall (SRH) rekombinasyon terimini göstermektedir. En yüksek rekombinasyon oranı, mezogözenekli $TiO_2 + MAPbI_3$ katmanında yoğunlaşmıştır ve bu, bu bölgenin radyasyon dışı rekombinasyon kayıplarının birincil yeri olduğunu göstermektedir.

Rekombinasyon, çevreleyen katmanlarda asgari düzeydedir ve bu katmanların cihazdaki genel rekombinasyon kayıplarına daha az katkıda bulunduğunu göstermektedir.



Şekil 5.9. Yüzey: Shockley-Read-Hall üretim terimi ($1/(m^3*s)$) 2.

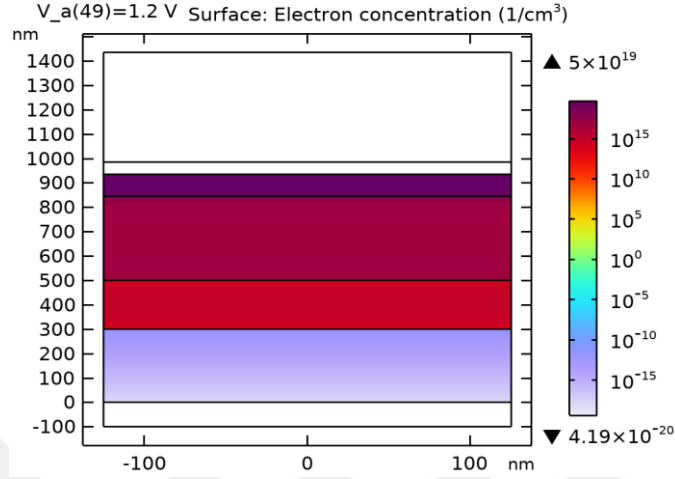
Bu görüntü, fotovoltaik yapıda Shockley-Read-Hall (SRH) üretim terimini göstermektedir. En yüksek üretim oranı, mezoporlu TiO_2 + $MAPbI_3$ katmanında yoğunlaşmış olup, bu bölgenin cihazdaki taşıyıcı üretiminde önemli bir rol oynadığını göstermektedir. Diğer katmanlarda ise üretim oranı oldukça düşük olup, bu katmanların cihazın toplam üretim sürecine daha az katkıda bulunduğunu göstermektedir.



Şekil 5.10. Yüzey ve Sıcaklık üretimi (K) 2.

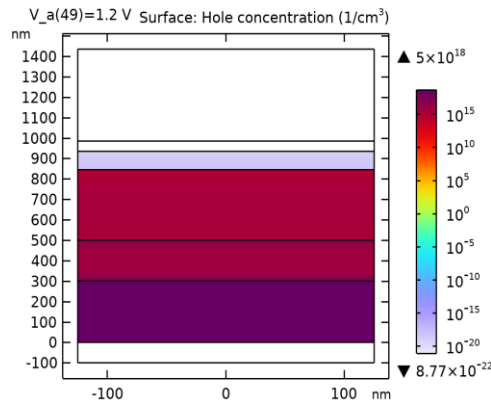
Bu görüntü, simüle edilmiş fotovoltaik yapı boyunca sıcaklık dağılımını gösterir. Sıcaklık, katmanlar arasında nispeten düzgündür ve özellikle mezogözenekli TiO_2 +

MAPbI₃ ve Karbon katmanlarında farklı malzemeler arasındaki sınırlarda hafif bir artış vardır. Bu, cihazda ısı üretimi ve dağılımının iyi dengelendiğini, önemli sıcak noktalar olmadığını ve yapı içinde kararlı termal yönetim olduğunu gösterir.



Şekil 5.11. Yüzey Elektron konsantrasyonu(1/cm³) 2.

Bu görüntü, fotovoltaik yapı içinde uygulanan 1,2 V'luk bir voltajda elektron konsantrasyon profilini göstermektedir. En yüksek elektron konsantrasyonu, kompakt TiO₂ ve mezogözenekli TiO₂ + MAPbI₃ katmanlarında gözlemlenmiştir ve bu, bu bölgelerde etkili elektron birikimini göstermektedir. Elektron konsantrasyonu, Karbon katmanında ve ötesinde önemli ölçüde azalır ve bu da elektroda doğru verimli elektron çıkarımı olduğunu göstermektedir.



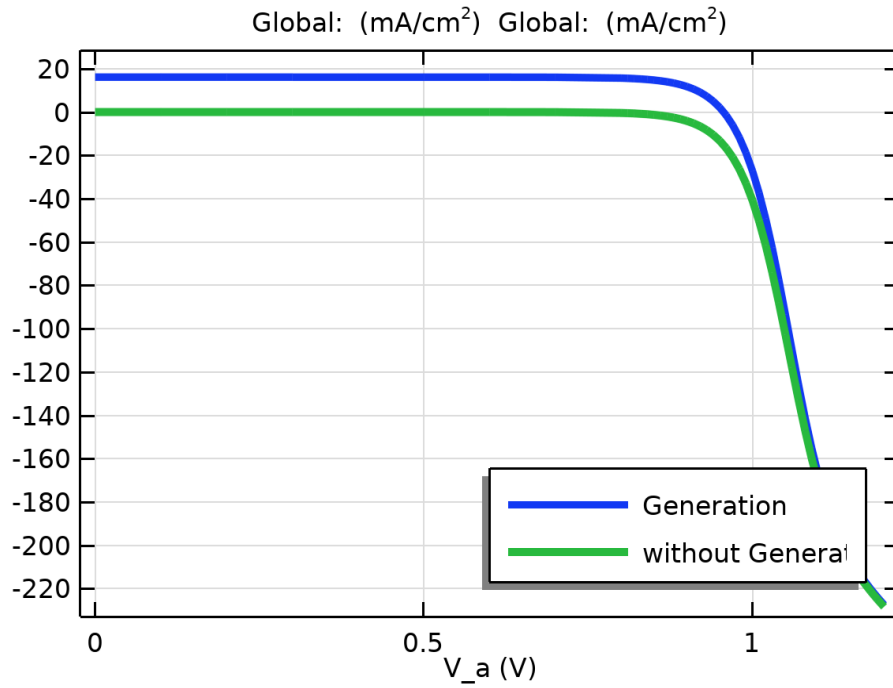
Şekil 5.12. Yüzey Delik konsantrasyonu(1/cm³) 2.

Resimde 1,2 V altında bir FTO/kompakt TiO₂/mezopöz TiO₂+MAPbI₃/karbon/Au perovskit güneş hücresindeki delik konsantrasyon profili gösterilmektedir. En yüksek delik konsantrasyonu karbon tabakasında gözlemlenmiştir, bu da deliklerin etkili bir şekilde toplandığını ve orada yoğunlaştığını göstermektedir. Bu, karbon tabakasının

delik taşıma ve toplama tabakası olarak verimli bir şekilde işlev gördüğünü ve deliklerin perovskit aktif tabakasından dış devreye hareketini kolaylaştırdığını göstermektedir.

5.3. Üçüncü Simülasyon

Yapının simülasyonu: FTO/kompakt SnO_2 /mezoporous SnO_2 +MAPbI₃/ spiro-OMeTAD /Au, bu I(V) eğrisini veriyor. şekil 5.13'e bakın

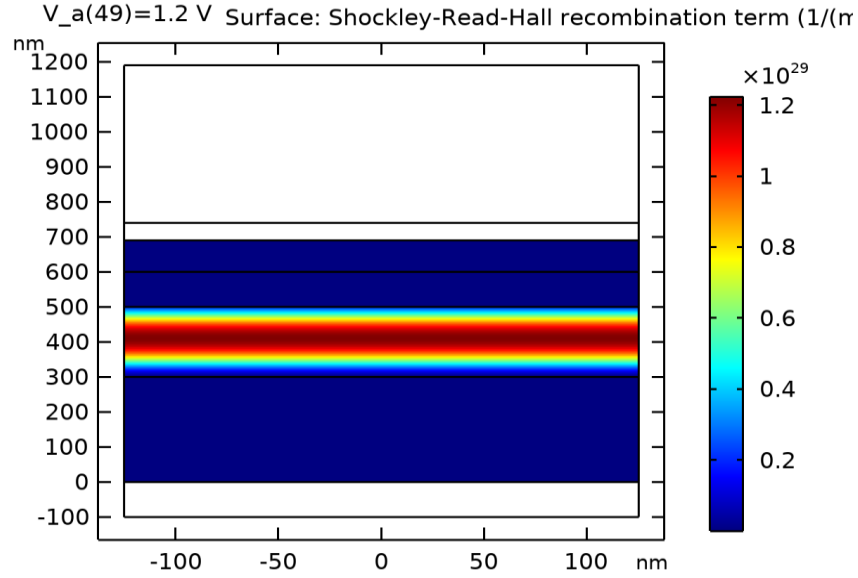


Şekil 5.13. I(V) eğrisini 3.

I(V)'nin bu eğrisine göre 5 parametreyi hesaplayacağız. Bu simülasyonun etkinliğini elde etmek için:

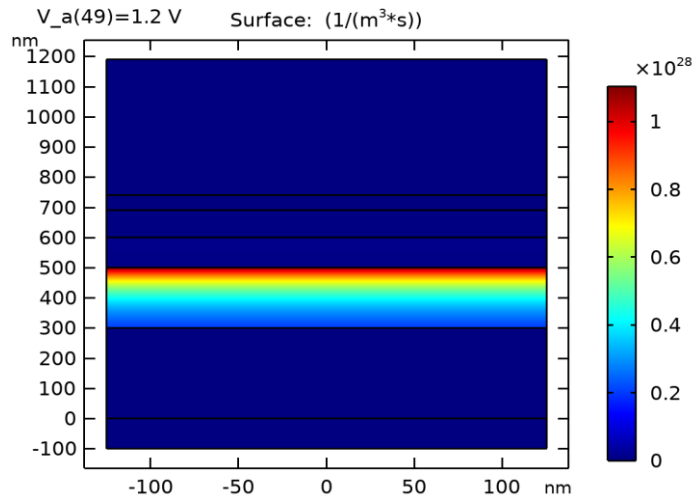
Tablo 5.3. I(V) ölçüm simülasyonundan değerler 3.

VOC	ISC	Pmax	FF	PCE
16.11	0.95	12.65	0.82	12.54



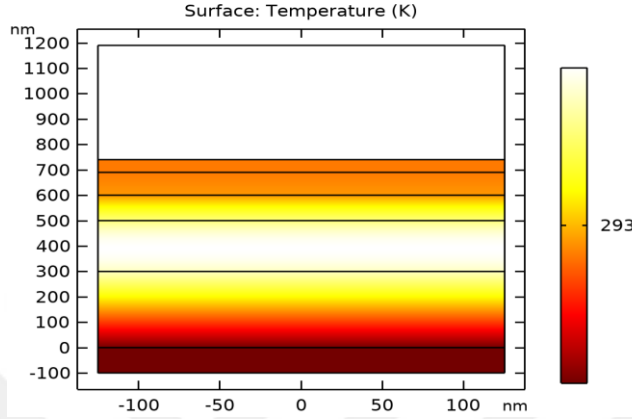
Şekil 5.14. Yüzey: Shockley-Read-Hall rekombinasyon terimi ($1/(m^3*s)$) 3.

Görüntü, 1,2 V'luk uygulanan voltaj altında bir FTO/kompakt SnO_2 /mezopoz SnO_2 +MAPbI₃/spiro-OMeTAD/Au perovskit güneş hücresindeki Shockley-Read-Hall (SRH) rekombinasyon profilini göstermektedir. En yüksek rekombinasyon aktivitesi, özellikle 400 nm ile 500 nm arasında, mezogözenekli SnO_2 ve MAPbI₃ katmanları arasındaki arayüz etrafında yoğunlaşmıştır. Bu, cihaz verimliliğini azaltabilen bir işlem olan yük taşıyıcı rekombinasyonunun bu arayüzde en önemli olduğunu göstermektedir. Bu arayüzün üstünde ve altında kalan bölgeler çok daha düşük rekombinasyon oranları sergiler ve bu da bu alanlardaki kayıpların azaldığı daha verimli yük taşınmasını gösterir.



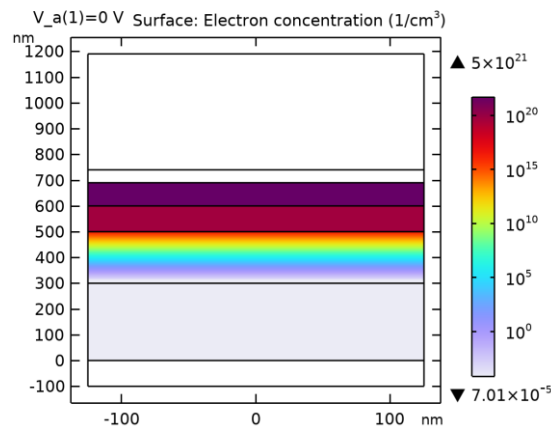
Şekil 5.15. Yüzey: Shockley-Read-Hall üretim terimi ($1/(m^3*s)$) 3.

Resimde, simüle edilmiş bir FTO/kompakt SnO_2 /mezoporoz SnO_2 + MAPbI_3 /spiro-OMeTAD/Au güneş hücresi yapısında Shockley-Read-Hall (SRH) üretim oranı gösterilmektedir. En yüksek üretim, 1,2 V'luk uygulanan bir voltaj altında mezogözenekli SnO_2 + MAPbI_3 katmanında meydana gelir ve bu bölgenin cihazın performansı için önemli olan yük taşıyıcı üretimi için kritik olduğunu gösterir.



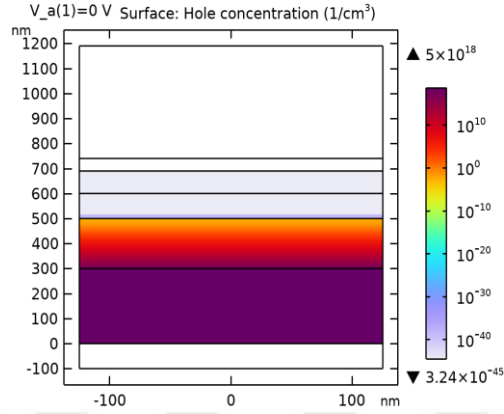
Şekil 5.16. Yüzey ve Sıcaklık üretimi (K) 3.

Bu görüntü, muhtemelen bir perovskit güneş hücresinin çok katmanlı bir yapısında simüle edilmiş sıcaklık dağılımını göstermektedir. Dikey eksen, nanometre (nm) cinsinden kalınlığı temsil ederken, kırmızıdan sarıya doğru renk gradyanı Kelvin (K) cinsinden sıcaklığı temsil eder. Sıcaklık dağılımı, farklı katmanlar arasında hafif değişikliklerle nispeten tekdüze görünür. Alt katmanlar, daha koyu renklerle gösterilen biraz daha soğukken, orta ve üst katmanlar daha açık tonlarla gösterilen daha sıcaktır. Bu tekdüzelik, hücrenin yapısı içinde iyi bir termal yönetim olduğunu gösterir.



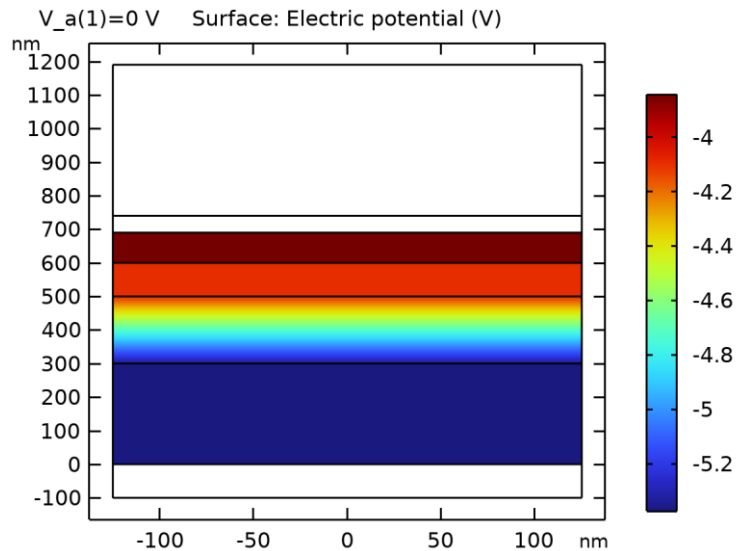
Şekil 5.17. Yüzey Elektron konsantrasyonu(1/cm³) 3.

The highest electron concentration is observed in the mesoporous $\text{SnO}_2 + \text{MAPbI}_3$ layer, particularly between 400 nm and 600 nm, highlighting this region as crucial for electron accumulation in the device. The electron concentration decreases significantly in the adjacent layers, indicating effective charge separation and transport within the structure.



Şekil 5.18. Yüzey Delik konsantrasyonu($1/\text{cm}^3$) 3.

En yüksek delik konsantrasyonu spiro-OMeTAD katmanında bulunur ve bu bölgenin delik taşımadaki etkinliğini gösterir. Konsantrasyon bitişik katmanlarda büyük ölçüde düşer ve bu da güçlü taşıyıcı ayrımını, deliklerin öncelikle delik taşıma malzemesi olan spiro-OMeTAD'ın yakınında biriktiğini gösterir.



Şekil 5.19. Yüzey: Elektrik potansiyeli (V) .

Görüntü, FTO, kompakt SnO_2 , MAPbI_3 'li mezogözenekli SnO_2 , Spiro-OMeTAD ve Au katmanları da dahil olmak üzere bir perovskit güneş hücresinin çok katmanlı yapısı

boyunca simüle edilmiş bir elektrik potansiyeli dağılımını göstermektedir. Potansiyel, elektron taşıma katmanlarında daha düşük değerler ve delik taşıma ve elektrot katmanlarında daha yüksek değerlerle önemli ölçüde değişir ve bu da hücre içindeki yük ayrımını ve taşımayı gösterir. Bu simülasyon, güneş hücresinin aktif bileşenlerinin verimliliğini ve davranışını anlamaya yardımcı olur.



6. ÇÖZÜM

Fotovoltaik dönüşümün genel verimliliği, soğurma verimliliğine, yük aktarım verimliliğine, form faktörüne ve emilen fotonların enerjisi ile çıkarılan enerji arasındaki orana bağlıdır.

Fotovoltaik dönüşüm verimliliğinin artırılması, cihazların yapısına göre iyi bir seçim yapılarak ve onu oluşturan farklı katmanların kalınlıklarının optimize edilerek bu süreçte yer alan mekanizmaların iyileştirilmesini gerektirir.

Kalınlıkları optimize etmenin amacı, emilimi maksimuma çıkararak ve iletilen akım yoğunluğunu artırarak fotovoltaik dönüşümün verimliliğinin artırılmasına katkıda bulunmaktır.

6.1. Mezoporöz Perovskit Güneş Pili Yapılarının Karşılaştırmalı Analizi

Bu çalışma, COMSOL Multiphysics yazılımını kullanarak mezogözenekli perovskit güneş pillerinin üç farklı konfigürasyonunu simüle etti ve karşılaştırdı. Analiz edilen yapılar aşağıdaki gibidir:

- Yapı 1: FTO/kompakt TiO_2 /mezoporöz TiO_2 +MAPbI₃/Spiro/Au
- Yapı 2: FTO/kompakt TiO_2 /mezoporöz TiO_2 +MAPbI₃/Karbon/Au
- Yapı 3: FTO/kompakt SnO_2 /mezoporöz SnO_2 +MAPbI₃/Spiro/Au
- Bu yapılar için elde edilen enerji dönüşüm verimleri sırasıyla %15,35, %18,56 ve %12,54 olmuştur.

6.2. Performans Karşılaştırması

- **Yapı 1: FTO/kompakt TiO_2 /mezoporöz TiO_2 +MAPbI₃/Spiro/Au**

Bu yapı %15,35 verim gösterdi. Elektron taşıma katmanı (ETL) olarak TiO_2 ve delik taşıma katmanı (HTL) olarak Spiro-OMeTAD'ın kullanılması, perovskit güneş pillerinde klasik bir konfigürasyondur. TiO_2 iyi elektron ekstraksiyonu ve perovskit ile uygun bir arayüz sağlarken Spiro-OMeTAD verimli delik aktarımı sağlar. Ancak

Spiro-OMeTAD'ın nem ve sıcaklık koşulları altında kimyasal stabilitesi ve bozulması, uzun vadeli performansı sınırlayabilir.

- **Yapı 2: FTO/kompakt TiO_2 /mezoporöz TiO_2 +MAPbI₃/Karbon/Au**

%18,56'lık bir verimle bu yapının incelenen üç konfigürasyon arasında en verimli olduğu kanıtlandı. Spiro-OMeTAD'ın delik taşıma (HTL) malzemesi olarak karbonla değiştirilmesi, önemli verimlilik artışlarıyla sonuçlandı. Karbonun kimyasal stabilite, maliyet ve bulunabilirlik açısından avantajları vardır. Ek olarak, karbon nanotüpleri veya grafen gibi karbon bazlı malzemeler, mükemmel elektriksel iletkenlik ve perovskit ile kimyasal uyumluluk sağlayarak bozulmayı azaltır ve güneş pillerinin ömrünü uzatır.

- **Yapı 3: FTO/kompakt SnO_2 /mezoporöz SnO_2 +MAPbI₃/Spiro/Au**

Elektron taşıma katmanı (ETL) olarak SnO_2 kullanan yapı, üçü arasında en düşük olan %12,54 verimlilik gösterdi. Her ne kadar SnO_2 , TiO_2 ile karşılaştırıldığında termal ve kimyasal stabilite açısından avantajlara sahip olsa da Spiro-OMeTAD ve perovskite ile uyumluluk bu spesifik konfigürasyonda daha az optimal görünmektedir. SnO_2 /perovskite ve SnO_2 /Spiro-OMeTAD arayüzleri, hücrenin genel verimliliğini azaltan kusurlara veya ışınımsız rekombinasyonlara neden olabilir.

6.3. Genel Sonuç

Bu çalışmanın sonuçları, perovskit güneş pillerinin verimliliğini optimize etmek için ETL ve HTL malzemelerinin seçilmesinin önemini vurgulamaktadır. Delik taşıma malzemesi olarak karbon kullanılan konfigürasyonun en etkili olduğu bulunmuştur ve bu, karbon bazlı malzemelerin perovskit güneş pillerinin performansını artırma potansiyeli olduğunu göstermektedir.

Verimli ve dayanıklı güneş pillerinin geliştirilmesinde malzemelerin kimyasal stabilitesi ve uzun vadeli performansı dikkate alınmalıdır. Gelecekteki araştırmalar, perovskit güneş pillerinin performansını ve stabilitesini daha da artırmak için arayüzleri optimize etmeye ve alternatif malzemeleri entegre etmeye odaklanabilir.

Sonuç olarak bu çalışma, yük taşıma malzemelerinin optimizasyonunun perovskit güneş pillerinin verimliliğinde önemli gelişmelere yol açabileceğini, dolayısıyla daha verimli ve sürdürülebilir güneş enerjisi teknolojilerinin geliştirilmesi için umut verici umutlar sağladığını göstermektedir.

KAYNAKLAR

- [1] https://www.youtube.com/watch?v=23i-_v_tWTA.
- [2] ASTM G159-98. Hava kütlesi 1,5'te referans güneş spektral hava radyasyonu için standart tablolar: 37 eğimli bir yüzey için doğrudan normal ve yarım küresel (E891 ve E892).
- [3] BEN SERRADJ Chafik, Sayın BAHMED Idir, Şebekeye bağlı bir fotovoltaik sistemin gücünün kontrolü, Elektroteknik alanında yüksek lisans derecesi alma anısı, A.MIRA BEJAIA Üniversitesi, Tanıtım: 2015/2016.
- [4] BERREZZOUG Hanane, Bir fotovoltaik hücrenin çalışma prensibi ve karakteristiklerinin ölçümü, YÜKSEK LİSANS tezi, Dr. Moulay Tahar Saidi Üniversitesi, 2016 sınıfı.
- [5] Belaout Abdeslam, Akım voltaj karakteristiğini kullanarak fotovoltaik (PV) sistemlerdeki sık görülen arızaların incelenmesi ve teşhisi, MAGISTER belleği, ÜNİVERSİTE – SETIF 1, 2014 tanıtımı.
- [6] B. O'Regan ve M. Grätzel, "Boya duyarlı kolloidal TiO₂ filmlerine dayalı düşük maliyetli, yüksek verimli bir güneş pili," Nature, cilt 353, sayı 24, sayfa 737–740, 1991.
- [7] A. Kojima, K. Teshima, Y. Shirai ve T. Miyasaka, "Kurşun-halojenür Bileşikleriyle Duyarlılaştırılan Mezoskopik Elektrotlara Sahip Yeni Fotoelektrokimyasal Hücre (11)," ECS Meet. Özet, cilt MA2008-02, sayı 1, sayfa 27, 2006.
- [8] M. A. Green, A. Ho-Baillie ve H. J. Snaith, "Perovskit güneş hücrelerinin ortaya çıkışı," Nat. Photonics, cilt 8, sayı. 7, s. 506–514, Temmuz 2014.
- [9] M. Cyrot ve diğerleri, "Yeni bir perovskit oksit Sr₂VO₄'ün özellikleri," J. Solid State Chem., cilt 85, no. 2, s. 321–325, Nisan 1990.
- [10] G. E. Eperon ve diğerleri, "İnorganik sezyum kurşun iyodür perovskit güneş pilleri", J. Mater. Kimya A, cilt. 3, hayır. 39, s. 19688–19695, 2015.
- [11] J.-W. Lee, D.-J. Seol, A.-N. Cho ve N.-G. Park, "HC(NH₂)₂PbI₃'ün Siyah Polimorfuna Dayalı Yüksek Verimli Perovskit Güneş Hücreleri," Adv. Mater., cilt 26, no. 29, s. 4991–4998, Ağustos 2014.
- [12] L. K. Ono, E. J. Juarez-Perez ve Y. Qi, "Karışık Katyonlar ve Halid Anyonları Olan Perovskit Malzemeler ve Güneş Hücreleri Üzerindeki İlerlemeler," ACS Appl. Mater. Interfaces, cilt 9, no. 36, s. 30197–30246, Eylül 2017.
- [13] Belchi Raphaëlle, "Fotovoltaikler için karbon ve TiO nanoyapılarına dayanan mimariler," Université Paris-Saclay, 2019.

- [14] B. Parida, S. Yoon, S.M. Jeong, J.S. Cho, J.-K. Kim ve D.-W. Kang, "Kararlı ve verimli güneş pilleri için sezyum kurşun/kalay halojenür bazlı inorganik perovskitlerle ilgili son gelişmeler: Bir inceleme" *Sol.Energy Mater. Zemin. Hücreler*, cilt. 204, s. 110212, Ocak. 2020
- [15] Q. Wali, F. J. Iftikhar, M. E. Khan, A. Ullah, Y. Iqbal ve R. Jose, "Perovskit güneş hücrelerinin kararlılığındaki gelişmeler," *Org. Electron.*, cilt 78, s. 105590, Mart 2020.
- [16] V. M. Goldschmidt, "Die Gesetze der Krystallochemie," *Naturwissenschaften*, cilt 14, sayı 21, s. 477–485, Mayıs 1926.
- [17] C. Li, X. Lu, W. Ding, L. Feng, Y. Gao ve Z. Guo, "ABX₃ (X = F, Cl, Br, I) halid perovskitlerinin şekillendirilebilirliği," *Acta Crystallogr. Bölüm B Yapı Bilimi*, cilt 64, sayı. 6, s. 702–707, Aralık 2008.
- [18] T. Baikie ve diğerleri, "Katı hal duyarlı güneş pili uygulamaları için hibrit perovskit (CH₃NH₃)PbI₃'ün sentezi ve kristal kimyası," *J. Mater. Chem. A*, cilt 1, no. 18, s. 5628, 2013.
- [19] M. Bouchard ve diğerleri, "TiO₂ Üzerinde Büyütülen Metilamonyum Kurşun İyodür Perovskitlerinde Klorla Tetiklenen Tercihli Kristal Yönlendirmenin Doğrudan Kanıtı," *J. Phys. Chem. C*, cilt 121, no. 14, s. 7596–7602, Nisan 2017.
- [20] R. Ciesielski ve diğerleri, "Büyük Kristal MAPI İnce Filmlerde Yük Taşıyıcı Difüzyonu için Tane Sınırları Katı Duvarlar Gibi Davranır," *ACS Appl. Mater. Interfaces*, cilt 10, sayı 9, s. 7974–7981, Mart 2018.
- [21] Q. Chen ve diğerleri, "Spot ışığı altında: Optoelektronik uygulamalar için organik-inorganik hibrit halid perovskit," *Nano Today*, cilt 10, sayı. 3, s. 355–396, Haziran 2015.
- [22] J. H. Noh, S. H. Im, J. H. Heo, T. N. Mandal ve S. Il Seok, "Renkli, Verimli ve Kararlı İnorganik-Organik Hibrit Nanoyapılı Güneş Hücreleri için Kimyasal Yönetim," *Nano Lett.*, cilt 13, no. 4, s. 1764–1769, Nisan 2013.
- [23] A. Dualeh, N. Tétreault, T. Moehl, P. Gao, M. K. Nazeeruddin ve M. Grätzel, "Tavlama Sıcaklığının Organik-İnorganik Hibrit Pervoskit Katı Hal Güneş Hücrelerinin Film Morfolojisi Üzerindeki Etkisi," *Adv. Funct. Mater.*, cilt 24, no. 21, s. 3250–3258, Haziran 2014.
- [24] V. Sarritzu ve diğerleri, "Hibrit Kurşun Halid Perovskitlerinde Doğrudan mı Dolaylı mı Bant Aralığı?," *Adv. Opt. Mater.*, cilt 6, no. 10, s. 1701254, Mayıs 2018.
- [25] W.-J. Yin, T. Shi ve Y. Yan, "CH₃NH₃PbI₃ perovskit güneş pili soğurucusunda alışılmadık kusur fiziği," *Appl. Phys. Lett.*, cilt 104, no. 6, s. 063903, Şubat 2014.
- [26] J.-H. Im, C.-R. Lee, J.-W. Lee, S.-W. Park ve N.-G. Park, "%6,5 verimli perovskit kuantum nokta duyarlı güneş pili," *Nanoscale*, cilt 3, sayı 10, s. 4088, 2011.
- [27] X. Ziang ve diğerleri, "Spektroskopik elipsometri ile incelenen CH₃NH₃PbI₃'ün kırılma indisi ve sönüm katsayısı," *Opt. Mater. Express*, cilt 5, sayı 1, s. 29, Ocak 2015.

- [28] G. E. Eperon, S. D. Stranks, C. Menelaou, M. B. Johnston, L. M. Herz ve H. J. Snaith, "Formamidinyum kurşun trihalid: verimli düzlemsel heterojunksiyon güneş pilleri için geniş ölçüde ayarlanabilir bir perovskit," *Energy Environ. Sci.*, cilt 7, sayı 3, s. 982, 2014.
- [29] S. D. Stranks ve diğerleri, "Organometal Trihalid Perovskit Absorberinde 1 Mikrometreyi Aşan Elektron Deligi Difüzyon Uzunlukları," *Science* (80-.), cilt 342, no. 6156, s. 341–344, Ekim 2013.
- [30] C. Wehrenfennig, G. E. Eperon, M. B. Johnston, H. J. Snaith ve L. M. Herz, "Organolead Trihalide Perovskitlerde Yüksek Yük Taşıyıcı Hareketlilikleri ve Yaşam Süreleri," *Adv. Mater.*, cilt 26, no. 10, s. 1584–1589, Mart 2014.
- [31] C. S. Ponseca ve diğerleri, "Organometal Halide Perovskit Güneş Pili Malzemelerinin Akılcılaştırılması: Ultra Hızlı Yük Üretimi, Yüksek ve Mikrosaniye Uzunluğunda Dengeli Hareketlilikler ve Yavaş Rekombinasyon," *J. Am. Chem. Soc.*, cilt 136, no. 14, s. 5189–5192, Nisan 2014.
- [32] C. Motta, F. El-Mellouhi ve S. Sanvito, "Hibrit halojenür perovskitlerde yük taşıyıcı hareketliliği," *Sci. Temsilci*, cilt. 5, hayır. 1, s. 12746, Ekim 2015.
- [33] A. Mirloup, "Ingénierie moléculaire de nouveaux composants photoactifs pour le photovoltaïque organique," *Université de Strasbourg*, 2015.
- [34] H. Diab, "Propriétés optiques des pérovskites hybrides 3D pour le photovoltaïque," *Université Bibliographie 137 Paris-Saclay*, 2017.
- [35] G. Giorgi, J.-I. Fujisawa, H. Segawa ve K. Yamashita, "Methylamonium Lead Iodide Perovskite'te Ambipolar Taşıma Özelliğine Sahip Küçük Foto Taşıyıcı Etkin Küteller: Bir Yoğunluk Fonksiyonel Analizi," *J. Phys. Chem. Lett.*, cilt 4, no. 24, s. 4213–4216, Aralık 2013.
- [36] A. Miyata ve diğerleri, "Organik-inorganik tri-halojenür perovskitlerindeki yük taşıyıcıları için eksiton bağlanma enerjisinin ve etkin kütlelerin doğrudan ölçümü," *Nat. Phys.*, cilt. 11, no. 7, s. 582–587, Tem. 2015.
- [37] S. S. Li ve W. R. Thurber, "n-tipi silikondaki elektron hareketliliği ve öz direncinin katkı yoğunluğu ve sıcaklık bağımlılığı," *Solid. State. Electron.*, cilt 20, no. 7, s. 609–616, Tem. 1977.
- [38] J. F. Lin, S. S. Li, L. C. Linares ve K. W. Teng, "p-tipi silikondaki hall faktörünün ve hall hareketliliğinin teorik analizi," *Solid. State. Electron.*, cilt 24, no. 9, s. 827–833, Eyl. 1981.
- [39] J.-H. Im, C.-R. Lee, J.-W. Lee, S.-W. Park ve N.-G. Park, "%6,5 verimli perovskit kuantum nokta duyarlı güneş hücresi," *Nanoscale*, cilt 3, sayı 10, s. 4088, 2011.
- [40] N. J. Jeon, J. H. Noh, Y. C. Kim, W. S. Yang, S. Ryu ve S. Il Seok, "Yüksek performanslı inorganik-organik hibrit perovskit güneş hücreleri için çözücü mühendisliği," *Nat. Mater.*, cilt 13, sayı 9, s. 897–903, Eylül 2014.
- [41] J.-H. Im, H.-S. Kim ve N.-G. Park, "Perovskit güneş hücrelerinde morfoloji-fotovoltaik özellik korelasyonu: CH₃NH₃PbI₃'ün tek adımlı ve iki adımlı birikimi," *APL Mater.*, cilt 2, no. 8, s. 081510, Ağustos 2014.

- [42] E. Edri, S. Kirmayer, S. Mukhopadhyay, K. Gartsman, G. Hodes ve D. Cahen, "CH₃NH₃PbI₃-xCl_x perovskit güneş hücrelerinin yük taşıyıcı ayrımı ve çalışma mekanizmasının açıklanması," Nat. Commun., cilt 5, no. 1, s. 3461, Mayıs 2014.
- [43] A. Kojima, K. Teshima, Y. Shirai ve T. Miyasaka, "Fotovoltaik Hücreler için Görünür Işık Duyarlılaştırıcıları Olarak Organometal Halide Perovskitleri," J. Am. Chem. Soc., cilt 131, no. 17, s. 6050–6051, Mayıs 2009.
- [44] M. I. H. Ansari, A. Qurashi ve M. K. Nazeeruddin, "Perovskit güneş hücrelerinde sınırlar, fırsatlar ve zorluklar: Eleştirel bir inceleme," J. Photochem. Photobiol. C Photochem. Rev., cilt 35, s. 1–24, Haziran 2018.
- [45] Z. Shi ve A. Jayatissa, "Perovskit Tabanlı Güneş Hücreleri: Son İlerleme, Malzemeler ve İşleme Yöntemlerinin İncelenmesi," Materials (Basel), cilt 11, no. 5, s. 729, Mayıs 2018.
- [46] M. M. Lee, J. Teuscher, T. Miyasaka, T. N. Murakami ve H. J. Snaith, "Mezo-Üst Yapılı Organometal Halid Perovskitlere Dayalı Verimli Hibrit Güneş Hücreleri," Science (80-.), cilt 338, sayı 6107, s. 643–647, Kasım 2012.
- [47] M. Kim ve diğerleri, "Methylammonium Chloride Induces Intermediate Phase Stabilization for Efficient Perovskite Solar Cells," Joule, cilt 3, sayı 9, s. 2179–2192, Eylül 2019.
- [48] J. Cui ve diğerleri, "Verimli hibrit kurşun halid perovskit güneş hücrelerinde son gelişmeler," Sci. Technol. Adv. Mater., cilt. 16, no. 3, s. 036004, Haziran 2015.
- [49] M. Soldera ve K. Taretto, "Perovskit Güneş Hücrelerinde Potansiyel Verimlilik İyileştirmeleri için Kalınlık Azaltma ve Işık Tutmayı Birleştirme", Phys. status solidi, cilt 215, no. 6, s. 1700906, Mart 2018.
- [50] G. Yang, H. Zhang, G. Li ve G. Fang, "%22'nin üzerinde verimliliğe sahip son derece verimli ve kararlı düzlemsel güneş hücreleri için formamidinyum bazlı perovskitlerin stabilizatör destekli büyümesi", Nano Energy, cilt 63, no. Mayıs, s. 103835, Eylül 2019.
- [51] "En İyi Araştırma-Hücre Verimliliği Tablosu | Fotovoltaik Araştırma | NREL." [Çevrimiçi]. Mevcut: <https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html>. [Erişim tarihi: 17-Ocak-2020].
- [52] azedine belhiteche "Submicron mosfet transistörlerinin çalışması ve elektriksel karakterizasyonları" Elektronik Seçeneği: Enstrümantasyon, Mouloud Mammeri De TIZIOUZOU Üniversitesi'nde devlet mühendisi diploması almak için tez sonu çalışması; 2009.
- [53] Boulgheb Abdelaaziz ve Kroun Amine "COMSOL simülasyon yazılımının kullanımına giriş: MOS yapısına uygulama" Elektronikte Yüksek Lisans derecesi almak için sunulan tez; Mikroelektronik seçeneği. JIJEL Üniversitesi Bilim ve Teknoloji Fakültesi Elektronik Bölümü. 2016.
- [54] N. Fekiri - master mepp - staj raporu "Mikro ve nano yapılı elemanlarda ısı transferleri: Kızılötesi termografi ve SThM mikroskopisi ile simülasyon ve deney", Lorraine Üniversitesi.
- [55] web sitesi: https://fr.wikipedia.org/wiki/COMSOL_Multiphysics#Historique.
- [56] web sitesi: <https://www.comsol.fr/comsol-multiphysics>.

- [57] M. Mesrouk - yüksek lisans tezi "Organik bir güneş pili için TCO/metal/TCO'ya dayalı üç katmanlı elektrot çalışması", Mouloud Mammeri Tizi-Ouzou Üniversitesi 2013.
- [58] base de données du Logiciel COMSOL MULTIPHYSICS 6.1.
- [59] Sayısal Modelleme Kursu "COMSOL Multifizik Eğitimi", École Polytechnique de Montréal.





ÖZGEÇMİŞ

Ad-Soyad : Aya Khachnaoui

ÖĞRENİM DURUMU:

- **Lisans** : 2019, Fen Bilimleri Fakültesi Monastır Tunus
- **Yükseklisans** : Devam ediyor, Sakarya Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Ana Bilim Dalı

MESLEKİ DENEYİM VE ÖDÜLLER:

- 2020-2023 yılları arasında Üniversite sınavına hazırlık için Fizik ve matematik derslerinden özel ders verdi.
- 2023-2024 yılları arasında İtalya'ya Erasmus Öğrenme Hareketliliği kazandı.

TEZDEN TÜRETİLEN ESERLER:

- Delibaş, N., Khachnaoui, A.,ve Niaei, A. (2023, 13-16 Eylül). COMSOL Simülasyonu Perspektifinden Güneş Hücrelerinde Absorber Katmanları Olarak Perovskitlerin Farklı Yapılarının İncelenmesi (Sözlü sunum), *_3rd Global Conference on Engineering Research (GLOBCER'23)*, Bandırma Üniversitesi, Turkey.