



**İKİ BOYUTLU BA_2PbI_4 PEROVSKİT KATMANI
İÇEREN GÜNEŞ HÜCRESİ YAPISININ VERİM
OPTİMİZASYONU**

Orhan POLAT

**Yüksek Lisans Tezi
Elektrik Elektronik Mühendisliği Ana Bilim Dalı
Danışman: Doç. Dr. Çağlar DUMAN**

**2024
Her hakkı saklıdır.**



FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
YÜKSEK LİSANS TEZİ

İKİ BOYUTLU BA_2PbI_4 PEROVSKİT KATMANI İÇEREN GÜNEŞ HÜCRESİ
YAPISININ VERİM OPTİMİZASYONU

Orhan POLAT

Tez Danışmanı: Doç. Dr. Çağlar DUMAN

Ana Bilim Dalı: Elektrik Elektronik Mühendisliği

Erzurum

2024

Her hakkı saklıdır

ETİK KURALLARA UYGUNLUK BEYANI

Erzurum Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez içindeki tüm bilgilerin doğru ve tam olduğunu, bilgilerin üretilmesi aşamasında bilimsel etiğe uygun davrandığımı, yararlandığım bütün kaynakları atıf yaparak belirttiğimi beyan ederim.

24 / 06 /2024

Orhan POLAT

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

İKİ BOYUTLU BA_2PbI_4 PEROVSKİT KATMANI İÇEREN GÜNEŞ HÜCRESİ YAPISININ VERİM OPTİMİZASYONU

Orhan POLAT

Erzurum Teknik Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Elektrik Elektronik Mühendisliği Ana Bilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Çağlar DUMAN

Perovskit güneş hücrelerinin güç dönüşüm verimliliği, son zamanlarda hızla artmıştır. Bu gelişme, cihaz mimarisinin optimizasyonu, boşluk ve elektron taşıma tabakalarının iyileştirilmesi ve yüksek kaliteli perovskit filmlerin üretilmesiyle mümkün olmuştur. Ancak, 3B perovskit güneş hücreleri neme, ısıya ve ışığa maruz kaldığında düşük kararlılık gösterirler. Bu kararlılık sorununa çözüm olarak, yapı içerisinde 2B perovskit katmanları kullanılabilir. Bu çalışmada, NIP yapısındaki FTO/ETL/3B perovskit/2B perovskit/HTL/Au güneş hücresi modellenmiştir. Önerilen yapı SCAPS-1D yazılımı kullanılarak AM1.5G güneş spektrumu aydınlatması (1000 W/m^2) ve 300 K ortam sıcaklığı altında simüle edilmiştir. Farklı ETL ve HTL malzemelerinin karşılaştırmalı analiz sonuçlarına göre, sırasıyla SnO_2 ve NiO en uygun katman malzemeleri olarak seçilmiştir. 3B perovskit katman kalınlığının artışıyla Voc ve FF değerleri düşerken Jsc değeri artmıştır. 2B perovskit katman kalınlığının artırılması durumunda ise simülasyon sonuçlarına göre güneş hücresi performansı olumsuz etkilenmiştir. Ayrıca, 3B perovskit katmanındaki kusur yoğunluğu artışının güneş hücresi performansını düşürdüğü görülmüştür. Simülasyonlarla perovskit güneş hücrelerinin kararlılık problemlerini en aza indirecek optimum güneş hücresi tasarlanmaya çalışılmıştır. 900 nm kalınlığa sahip 3B perovskit katman üzerine kaplama katmanı olarak 9 nm kalınlığında 2B perovskit katmanın yer aldığı FTO/ SnO_2 /3B perovskit/2B perovskit/NiO/Au yapısına sahip NIP güneş hücresi tasarlanmıştır. Optimum güneş hücresi simülasyonu sonucunda Voc 1,40 V, Jsc 25,59 mA/cm², FF %79,59 ve PCE %28,58 olarak elde edilmiştir.

2024, 49 sayfa

Anahtar Kelimeler: 2B/3B Perovskit, Kararlılık, Güneş hücresi, J-V grafiği

ABSTRACT

MS. Thesis

EFFICIENCY OPTIMIZATION OF A SOLAR CELL STRUCTURE CONTAINING A TWO-DIMENSIONAL BA_2PbI_4 PEROVSKITE LAYER

Orhan POLAT

Erzurum Technical University

Graduate School of Natural and Applied Sciences

Department of Electrical Electronic Engineering

Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Çağlar DUMAN

Power conversion efficiency of perovskite solar cells has increased rapidly in recent years. This progress has been made possible through the optimization of the device architecture, the improvement of hole and electron transport layers, and production of high-quality perovskite films. However, 3D perovskite solar cells exhibit low stability to moisture, heat, and light. To address this stability issue, 2D perovskite layers can be incorporated into the structure. In this study, an FTO/ETL/3D perovskite/2D perovskite/HTL/Au solar cell in a NIP configuration was modeled. The proposed structure was simulated using SCAPS-1D software under AM1.5G solar spectrum illumination (1000 W/m^2) and at an ambient temperature of 300 K. According to the comparative analysis of different HTL and ETL materials, NiO and SnO_2 were chosen as the most suitable HTL and ETL materials, respectively. As the thickness of the 3D perovskite layer increased, the Voc and FF values decreased while the Jsc value increased. Conversely, increasing the thickness of the 2D perovskite layer negatively affected the solar cell performance according to the simulation results. Additionally, an increase in defect density within the 3D perovskite layer was found to degrade the solar cell performance. It was aimed to design an optimal solar cell to minimize the stability problems of perovskite solar cells with the simulations. A NIP solar cell structure with FTO/ SnO_2 /3D perovskite/2D perovskite/NiO/Au configuration, featuring a 900 nm thick 3D perovskite layer and a 9 nm thick 2D perovskite capping layer, was designed. The optimal solar cell simulation resulted in a Voc of 1,40 V, a Jsc of 25,59 mA/cm^2 , a FF of 79,59%, and a PCE of 28,58%.

2024, 49 pages

Keywords: 2D/3D Perovskite, Stability, Solar cell, J-V graph.

TEŞEKKÜR

Yüksek lisans eğitimim süresince sağladığı bilimsel katkılar, değerli öneriler ve teşvik edici tutumuyla, araştırmanın planlanmasından yazımına kadar her aşamada yanımda olan, titizlikle rehberlik eden, bilgi ve deneyimlerinden faydalandığım saygıdeğer danışmanım Doç. Dr. Çağlar DUMAN'a en içten teşekkürlerimi sunarım.

SCAPS-1D yazılımını sağladığı için Belçika Gent Üniversitesi Elektronik ve Bilgi Sistemleri (ELIS) Bölümü'nden Dr. Marc BURGELMAN'a içten teşekkürlerimi sunarım.

Yüksek lisans eğitimine başlamamda destek olan, yol gösteren Atatürk Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Dr. Öğr. Üyesi Muhammed Fatih ÇORAPSIZ'a, ayrıca süreç içerisinde yardım ve desteklerinden dolayı Dr. Öğr. Üyesi Volkan KIZILOĞLU'na teşekkürlerimi sunarım.

Dualarıyla yanımda olan ve bugüne gelmemde büyük fedakârlık gösteren babam Abdulbari POLAT'a ve annem Fatma POLAT'a ve bu süreçte beni her zaman destekleyen aileme sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Yoğun çalışmalarım sırasında en büyük destekçim olan, bana sabırla katlanan, her zaman yanımda olan değerli hayat arkadaşım Hacer POLAT'a, bu süreçte yeteri kadar zaman ayıramadığım için beni her zaman anlayışla karşılayan canım oğlum Emir Asaf POLAT'a en içten teşekkürlerimi sunarım.

Orhan POLAT
Haziran 2024

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET	i
ABSTRACT	ii
TEŞEKKÜR	iii
İÇİNDEKİLER	iv
SİMGELER VE KISALTMALAR	vi
ŞEKİLLER DİZİNİ	vii
ÇİZELGELER DİZİNİ	viii
1. GİRİŞ	1
2. KAYNAK ÖZETLERİ	4
3. MATERYAL ve YÖNTEM	10
3.1. Güneş Hücreleri	10
3.2. Güneş Hücresi Parametreleri.....	11
3.2.1. Kısa devre akımı	12
3.2.2. Açık devre gerilimi	13
3.2.3. Dolgu faktörü	13
3.2.4. Güneş hücresi verimliliği	14
3.3. Güneş Hücresi Eşdeğer Devresi.....	15
3.4. Perovskit Malzemeler.....	16
3.4.1. Perovskit güneş hücrelerinin yapısı ve çalışması.....	17
3.5. Simülasyon Yazılımları.....	23
4. ARAŞTIRMA BULGULARI ve TARTIŞMA	26
4.1. Simülasyon Sonuçları	27
4.1.1. ETL katman seçimi	27
4.1.2. HTL katman seçimi.....	31
4.1.3. 3B perovskit katman kalınlığının etkisi	33
4.1.4. Kusur yoğunluğunun etkisi	34
4.1.5. 2B perovskit katman kalınlığının etkisi	37
4.2. Optimum Cihaz Yapısı.....	38
5. SONUÇ ve ÖNERİLER	41
KAYNAKLAR	44

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

<u>Simgeler</u>	<u>Açıklama</u>
a-Si	Amorf silisyum
CaTiO ₃	Kalsiyum titanat
CdTe	Kadmiyum tellür
E _g	Bant aralığı
E _{ea}	Elektron ilgisi
eV	Elektronvolt
FF	Dolgu faktörü
FTO	Flor katkılı kalay oksit
G	Jenerasyon oranı
I _d	Diyot akımı
I ₀	Ters doyma akımı
I _{ph}	Güneş hücresinin aydınlatılmasıyla üretilen akım
I _{sc}	Kısa devre akımı
I _m	Çıkış akımı
ITO	Kalay katkılı indiyum oksit
J _{sc}	Kısa devre akım yoğunluğu
K	Kelvin
k	Boltzman sabiti
mV	Milivolt
NiO	Nikel oksit
Nt	Kusur yoğunluğu
PV	Fotovoltaik
PS	Güneş hücresi
P _{in}	Giriş gücü
P _m	Çıkış gücü
q	Elektron yükü
R _s	Seri direnç
R _{sh}	Şönt direnç
R	Rekombinasyon oranı

Si	Silisyum
SnO ₂	Kalay dioksit
T _g	Cam geiř sııcaklıęı
t	Tölerans faktörü
TiO ₂	Titanyum dioksit
V _m	Çıkıř gerilimi
V _{oc}	Açık devre gerilimi
ZnO	Çinko oksit
ϵ	Geçirgenlik
ϵ_r	Dielektrik sabiti
$\varphi(x)$	Elektrostatik potansiyel
μ	Oktahedral faktörü
μ_p	Bořluk mobilitesi
μ_e	Elektron mobilitesi
η	Verim

Kısaltmalar

BA	Butilamonyum
CIGS	Bakır İndiyum Galyum Di-Selenid
CPV	Konsantre güneř hücreleri
DSSC	Boyaya duyarlı güneř hücresi
ETL	Elektron taşıma katmanı
HTL	Bořluk taşıma katmanı
MA	Metilamonyum
MAPbI	Metilamonyum kurřun iyodür
PCE	Güç dönüřüm verimlilięi
PSC	Perovskit güneř hücreleri
QE	Kuantum verimlilięi

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 3.1. (a) İletkenlerin, (b) yarı iletkenlerin ve (c) yalıtkanların bant yapıları.....	10
Şekil 3.2. PN eklemi ve N, P tipi yarı iletken bölgelerdeki azınlık ve çoğunluk taşıyıcıları.....	10
Şekil 3.3. Güneş hücresinin çalışma prensibi.....	11
Şekil 3.4. I-V eğrisi.....	12
Şekil 3.5. I-V grafiği üzerinden FF gösterimi	14
Şekil 3.6. Güneş hücresi eşdeğer devresi	15
Şekil 3.7. ABX_3 formülüne sahip perovskit kristal yapısı	16
Şekil 3.8. Farklı perovskitler için tolerans ve oktahedral faktörleri.....	17
Şekil 3.9. Basit perovskit güneş hücresinin katman yapısı	18
Şekil 3.10. (a) Mezoskopik NIP yapısı, (b) düzlemsel NIP yapısı ve (c) düzlemsel PIN yapısı	18
Şekil 3.11. 2B, Yarı-2B ve 3B perovskit kristal yapıları	21
Şekil 3.12. Basit bir perovskit güneş hücresi bant diyagramı ve taşıyıcı hareketleri.....	22
Şekil 4.1. Simülasyonda kullanılan perovskit güneş hücresinin yapısı	26
Şekil 4.2. Farklı ETL katmanlar için perovskit güneş hücresinin yapısı	27
Şekil 4.3. (a) SnO_2 ETL katmanı, (b) TiO_2 ETL katmanı, (c) ZnO ETL katmanına sahip yapılar için J-V grafikleri.	29
Şekil 4.4. Farklı ETL malzemeleri için QE'nin dalga boyu ile değişimi.....	31
Şekil 4.5. Farklı HTL katmanları için perovskit güneş hücresinin yapısı.....	31
Şekil 4.6. Spiro-OMeTAD ve NiO 'nun HTL katmanı olarak kullanılması durumunda elde edilen J-V grafikleri.....	32
Şekil 4.7. Farklı HTL katmanları için QE'nin dalga boyu ile değişimi	33
Şekil 4.8. 3B-MAPI katmanında farklı derin kusur yoğunluklarına ait J-V grafikleri ...	35
Şekil 4.9. 3B-MAPI katman için QE değerinin dalga boyu ile değişimi	36
Şekil 4.10. Optimum 2B/3B perovskit güneş hücresi yapısı.	38
Şekil 4.11. Optimum 2B/3B perovskit güneş hücresine ait J-V grafiği.....	39
Şekil 4.12. Optimum 2B/3B perovskit güneş hücresine ait QE, dalga boyu değişimi ...	39

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 4.1. NiO, Spiro-OMeTAD (HTL), 2B-3B soğurucu katmanlar ve TiO ₂ , ZnO, SnO ₂ ETL'e ait parametreler.....	28
Çizelge 4.2. Farklı ETL katmanları için elde edilen sonuçlar.....	30
Çizelge 4.3. Spiro-OMeTAD ve NiO'e HTL katmanları için elde edilen sonuçlar	32
Çizelge 4.4. 3B provskit katman kalınlığının değiştirilmesi ile elde edilen Voc, Jsc, FF ve PCE değerleri	34
Çizelge 4.5. Farklı kusur yoğunlukları için elde edilen Voc, Jsc, FF ve PCE değerleri.	35
Çizelge 4.6. 2B perovskit katmanının farklı kalınlıkları için elde edilen sonuçlar.....	37

1. GİRİŞ

İklim değışikliđinin öngörülen ekonomik ve çevresel maliyetleri, insan faaliyetlerinin hızlı ve sürdürülebilir bir şekilde karbonsuz hale getirilmesini amaçlanmaktadır. Elektrik üretimi, karbonsuzlaştırmanın en kolay alanlarından biri olarak kabul edilirken, özellikle fosil yakıt üretim kapasitesinin hemen yenilenebilir enerji kaynaklarıyla değıştirilmesi ve birçok yüksek emisyonlu sektörün aynı anda elektrik kullanımına geçişı gibi karbonsuzlaştırma yol haritaları önerilmektedir (Metcalf et al. 2023). Güneş enerjisinin bol ve temiz olması nedeniyle elektrik enerjisi üretiminde önemli bir enerji kaynağı olarak görülmektedir. Genellikle fotovoltaiik hücreler olarak da adlandırılan güneş hücreleri, hidroelektrik, rüzgâr ve gelgit enerjisiyle birlikte en önemli çevre dostu güç kaynaklarından biri olarak kabul edilmektedir (Shah et al. 2023).

Güneş hücreleri geliştirilme zamanlarına ve kullandıkları malzemelere göre birinci, ikinci, üçüncü ve dördüncü nesil olmak üzere farklı kategorilere ayrılabilir.

Birinci nesil güneş hücreleri, en verimli ve en yaygın olarak kullanılan silisyum tabanlı güneş hücrelerini içerir. Tek kristalli ve çok kristalli güneş hücreleri olarak iki alt grupta kategorize edilebilirler. İnce film ve a-Si (amorf silisyum) kullanılan güneş hücrelerinin çođu ikinci nesil güneş hücreleridir. Bu hücreler, silisyum tabanlı güneş hücrelerine nispeten daha ucuzdur. Üçüncü nesil güneş hücreleri, nano kristal bazlı, polimer bazlı, boyaya duyarlı, konsantre ve perovskit güneş hücreleri (PSC)'dir (Sharma et al. 2015). Dördüncü nesil güneş hücreleri arasında; çok eklemlili güneş hücreleri, aşağı-yukarı dönüşüm güneş hücreleri, termofotovoltaik güneş hücreleri ve ara bant yapılı güneş hücreleri gösterilebilir (Kızılođlu 2015).

Geleneksel silisyum tabanlı güneş hücreleri, yüksek maliyetlerine rağmen yüksek verimlilik sağladıkları için uzun zaman tercih edilmiştir. Ancak, zamanla esnek üretim teknikleri kullanılarak üretilebilen, düşük ağırlıklı, düşük maliyetli ve mükemmel verimliliğe sahip üçüncü nesil ve gelişen güneş hücresi teknolojileri piyasaya çıkmıştır (Shah et al. 2023). Halide perovskit güneş hücreleri, belki de yakın gelecekte kullanılmaya başlanacak en umut verici yeni güneş hücresi teknolojisidir.

Tamamen geri dönüştürülebilir malzemeler ve üretim süreçleri kullanarak üretilen tek bileşenli yapılarda, silisyum güneş hücrelerinin verimlilikleri aşılabilmektedir. Ayrıca, yaklaşık olarak oda sıcaklığında üretilibilmeleri, potansiyel olarak silikon tabanlı güneş hücrelerinden çok daha ucuz olmalarını sağlar. Ancak, en yüksek verimlilikteki halide perovskit hücrelerde, çevresel etkenlere karşı hassas olan üç boyutlu (3B) halide perovskit soğurucu tabaka kullanılmaktadır (Metcalf et al. 2023).

2B/3B perovskit yapılar için farklı üretim teknikleri ve malzeme kombinasyonları denenmektedir. Hidrofobik boşluk katyonları ile 3B perovskit örgüsünün bölünmesiyle oluşturulan iki boyutlu (2B) perovskitler, 3B perovskitlere göre önemli ölçüde kararlıdır. Ancak, bu soğurucularla yapılan cihazlar verimlilik açısından 3B halide perovskit hücrelerinden geride kalmaktadır. Bir güneş hücresinde yüksek kararlılık ve yüksek verimliliğin aynı yapıda elde edilebilmesi istenir. 3B halojenür perovskitler ve 2B halojenür perovskitler, çeşitli mimarilerde tek bir cihazda bir araya getirilebilecek son derece uyumlu malzemelerdir. Özellikle 3B ve 2B halojenür perovskitlerin tek bir güneş hücresinde birleştirilmesiyle, 3B perovskitlerin verimliliğinden ödün vermeden 2B perovskitlerin kararlılığı elde edilebilir. Ek olarak, 3B-2B halojenür perovskitler kusurların, tane sınırlarının ve arayüzlerin pasifleştirilmesi yoluyla, tek bileşenli yapılardan daha üstün stabilite ve verimlilik oluşturabilir (Metcalf et al. 2023).

Büyük organik katyonların 3B perovskit filmlere dâhil edilmesi, bu katyonların nasıl yerleştirildiklerine, film kalınlığına, biriktirme tekniklerine ve malzemenin optik soğurma, taşıyıcı hareketliliği ve bant aralığı gibi fotofiziksel özelliklerine bağlı olarak farklı yapılar ortaya çıkarabilir. Bu yapılar genellikle karışık 3B/2B perovskit, 3B perovskit üzerinde bir kaplama katmanı olarak 2B perovskit ve 3B perovskitin 2B perovskit ile pasivasyonu olmak üzere üç ana kategoride incelenir (Kumar et al. 2022). Perovskit filmlere büyük katyonların eklenmesinin birinci olası etkisi, karışık 2B/3B fazların oluşumudur; bu durum, filmlerde hem 2B hem de 3B perovskit kristalitlerinin mevcut olduğu anlamına gelir. 3B perovskit taneleri arasına serpiştirilmiş bir 2B butilamonyum (BA) fazının dâhil edilmesini heteroyapı içindeki ışıınımsız yük rekombinasyonunu bastırmaktadır (Ortiz-Cervantes et al. 2019). Oluşacak ikinci yapı ise, 3B perovskit filmin üzerinde, alttaki filme zarar vermemesi beklenen bir 2B

perovskit filmi oluşturmaktır. 2B kaplama katmanının, cihazların stabilitesini önemli ölçüde artırabilen kapsülleyici bir hidrofofik katman görevi gördüğü gösterilmiştir. 2B perovskitler oluşturmaya çalışırken, büyük organik katyonların varlığının yaratabileceği diğer bir olası sonuç da tane sınırlarının pasifleşmesidir. Pasivasyon, genellikle dâhil edilen katyonların kristalitlerin sınırlarına bağlanmasıyla gerçekleşir. Bu işlem, suya, ısıya, oksijene ve UV ışığına karşı genel stabiliteyi artırırken, aynı zamanda filmin fotofiziksel özelliklerini de iyileştirir. Genel olarak pasifleştirilmiş yapılar olağanüstü optik özellikler, tekdüze morfoloji ve daha az kusur tuzağı bölgesi sergiler ve bu da elektron-boşluk rekombinasyon oranının azalmasına neden olur (Ortiz-Cervantes et al. 2019).

Bu tez çalışması kapsamında, SCAPS-1D yazılımı yardımıyla, hidrofofik özelliğe sahip olan 2B BA_2PbI_4 halojenür perovskit tabakasının, cihaz stabilitesini artırmak amacıyla 3B MAPbI_3 halojenür perovskit tabakanın üzerine kaplama katmanı olarak uygulandığı bir perovskit güneş hücresi yapısı oluşturulmuştur. Oluşturulan yapıda, 2B perovskit ve 3B perovskit katman kalınlıklarının, 3B perovskit katmandaki kusur yoğunluğunun (N_t), farklı elektron taşıma katmanı (ETL) ve boşluk taşıma katmanı (HTL) katmanlarının güneş hücresi performansı üzerine etkisi incelenmiştir. Bu amaçla akım yoğunluğu-gerilim (J-V) ve kuantum verimliliği (QE) grafikleri elde edilmiş ve açık devre gerilimi (V_{oc}), kısa devre akım yoğunluğu (J_{sc}), dolgu faktörü (FF) ve güç dönüşüm verimliliği (PCE) değerleri karşılaştırılarak optimum güneş hücresi yapısı elde edilmiştir. Optimum güneş hücresi 2B perovskit katmanının, 3B perovskit katman üzerine kaplama katmanı olarak uygulandığı FTO/ SnO_2 /3B perovskit/2B perovskit/ NiO/Au katmanlarından oluşan NIP yapıya sahiptir. Yapıda 75 nm kalınlığındaki NiO , HTL katmanı olarak, 80 nm kalınlığındaki SnO_2 ise ETL katmanı olarak seçilmiştir. 2B perovskit olan BA_2PbI_4 'ün, 3B perovskit olan MAPbI_3 üzerinde kaplama katmanı olarak beraber kullanıldığı yapıda, 2B perovskit kalınlığı 9 nm, 3B perovskit kalınlığı ise 900 nm olarak alınmıştır. 3B perovskit katmandaki kusur yoğunluğu değeri ise 10^{12} cm^{-3} olarak belirlenmiştir. Oluşturulan optimum yapıda simülasyonu sonucunda, V_{oc} 1,40 V, J_{sc} 25,59 mA/cm^2 , FF %79,59 ve PCE %28,58 değerleri elde edilmiştir.

2. KAYNAK ÖZETLERİ

Yao et al. (2015) tarafından gerçekleştirilen çalışmada, 3B kurşun-halojenür (MAPbX_3) perovskit üzerine, polimerik amonyumdan türetilen 2B perovskit ($\text{PEI}_2(\text{PbI}_4)$) katman biriktirilmiş ve yerinde oluşturulmuş katmanlı perovskitin ($\text{PEI}_2(\text{PbI}_4)$), 3B perovskit üzerindeki morfolojik ve arayüz kontrolü yönünden kritik etkisi araştırılmıştır. 2B perovskitleri oluşturmak için boşluk taşıma katmanı ile metilamonyum kurşun halojenür katmanı arasındaki yüzeye dallanmış polietilenimin hidriyodidi ($\text{PEI}\cdot\text{HI}$) yerleştirilmiştir. Yeni 2B perovskit malzemelerin, polimerik amonyum ve kurşun halojenür çözeltilerinin iki aşamalı ardışık biriktirilmesiyle tavlama olmadan ortam koşulları altında kolayca elde edilebileceği gözlemlenmiştir. Katmanlı malzemelerin 3B perovskitin film oluşumunu modüle edip edemeyeceğini ve nem stabilitesini artırıp arttıramayacağı değerlendirilmiştir. Yapı içerisinde kullanılan 2B perovskit arayüzle daha iyi enerji seviyesi hizalaması sağladığı gözlemlenmiştir. Ayrıca, neme karşı oldukça dayanıklı 2B malzemelerin dâhil edilmesi, perovskit güneş hücrelerinin uzun vadeli stabilitesini artırmıştır. İlk kez oluşturulan bu hibrit güneş hücresi yapısı ile PCE değeri %13,8 olarak elde edilmiştir.

Ma et al. (2016) tarafından gerçekleştirilen çalışmada, 2B (CA_2PbI_4) ve 3B ($\text{MAPbI}_x\text{Cl}_{3-x}$) perovskit katmanları birleştirilerek hibrit bir yapı oluşturulmuştur. 2B/3B hibrit yapıların 3B perovskit yapılara göre önemli avantajlar sunduğu gösterilmiştir. Özellikle, %63 $\pm$ 5'lik yüksek nem koşullarında 2B/3B hibrit yapılarda filmlerin ve cihazların nem stabilitesinde belirgin bir iyileşme gözlemlenmiştir. 2B/3B perovskit-hibrit filmler 40 gün sonra herhangi bir bozulmaya uğramazken, aynı koşullar altında 3B perovskitler 8 gün sonra tamamen ayrılmıştır. Ayrıca, 2B/3B perovskit-hibrit yapılar, 220 saat sonunda orijinal verimliliğinin %54'ünü korurken, 3B perovskit yapılar sadece 50 saat içinde tüm verimliliğini kaybetmiştir. Cihaz performansında, 2B/3B hibrit perovskitlerin optimizasyon sonrasında PCE değeri %13,86 olarak elde edilmiş ve 3B perovskitlerin %13,12'lik PCE değerleri ile karşılaştırılabilir sonuçlar elde edilmiştir.

Koh et al. (2018) tarafından gerçekleştirilen çalışmada arayüz kusurlarını ve boşlukları pasifleştirmek ve nem toleransını arttırmak için 3B perovskit yapısı üzerine 2B alkilamonyum halojenür perovskitler oluşturulmuştur. Bu şekilde oluşturulan hibrit

3B/2B perovskit filmler daha uzun fotoluminesans ömürlerinin yanı sıra daha düşük tuzak durum yoğunluğu sergilemiştir. Bu durum, yüzey veya tane sınırlarındaki katyonik ve halojenür boşluklarının pasifleştiği ve böylece ışınlımsız rekombinasyonun azalttığını ortaya koyulmuştur. Daha da önemlisi, hibrit 3B/2B perovskitin, saf bir 3B perovskite göre daha yüksek ortam stabilitesi sergilediği ve 2B perovskitteki uzun alifatik karbon zincirlerinin hidrofobik yapısından dolayı ek bir nem itici etkisi gösterdiği bulunmuştur. 3B/2B hibrit yapı ile PCE değeri %14,17'den %15,74'e çıkarılmıştır. Ayrıca 1.000 saniye boyunca aydınlatma altında hibrit 3B/2B perovskit güneş hücresi başlangıçtaki PCE değerinin %86'sını korurken, 3B perovskit yapının ise PCE değerinin neredeyse %40'ını kaybettiği görülmüştür.

Akın (2019) tarafından gerçekleştirilen çalışmada perovskit/spiro-OMeTAD arayüz tabakası olarak 1-phenyl-1H-tetrazole-5-thiol (PT(thiol)) moleküllerinin kullanıldığı güneş hücreleri üretilmiştir. Arayüz malzemesi olarak kullanılan PT(thiol), farklı konsantrasyonlarda (1, 5, 10 ve 20 mg/ml) 2-propanol içinde çözülerek hazırlanmış ve döndürerek kaplama yöntemi ile perovskit yüzeyine uygulanmıştır. Bu arayüz tabakasının kullanıldığı hücrelerde V_{OC} değerlerinde 40 mV'luk bir iyileşme sağlanmış ve %19,5'luk verim elde edilmiştir. Fotovoltaik performanstaki bu iyileşme, perovskit tabakasının yüzeyindeki ve tane sınırlarındaki rekombinasyon merkezlerinin pasivasyonu ile açıklanmıştır. Ayrıca, arayüz tabakasının, hücrenin operasyonel kararlılığına önemli katkı sağladığı belirlenmiştir. Sürekli ışınlı altında ve %40 nem içeren bir ortamda gerçekleştirilen kararlılık testlerinde, arayüz tabakalı hücrelerin 300 saat sonunda başlangıç verimlerinin %75'ini koruduğu tespit edilmiştir. Bu sonuçlar, PT(thiol) moleküllerinin perovskit hücrelerin en önemli sorunlarından biri olan kararlılık problemine çözüm sunma potansiyeline sahip olduğunu ve aynı zamanda yüzey özelliklerini iyileştirerek hücre performansını artırdığını göstermektedir.

Jiang et al. (2020) tarafından gerçekleştirilen çalışmada perovskit güneş hücrelerinin verimliliğini ve stabilitesini artırmak amacıyla, 3B perovskitlerin üstüne 2B Dion-Jacobson (DJ) perovskitlerden oluşan bir kaplama katmanı uygulanmıştır. 3B perovskit filmi, tek adımlı döndürerek kaplama ve anti-solvent destekli biriktirme yöntemiyle hazırlanmıştır. Daha sonra, izopropanol içinde farklı konsantrasyonlara (1,5 ve 10 mg/mL) sahip ODAI₂ çözeltisi, 3B perovskit katmanının üzerine döndürülerek

kaplanmıştır. Normal atmosfer altında, 90°C sıcaklıkta 5 dakika boyunca tavlama işlemi gerçekleştirilmiştir. Bu süreçte, ODAI_2 tuzunun PbI_2 ile reaksiyonu sonucunda ince bir DJ 2B perovskit tabakası oluşturulmuştur. Ayrıca, doğrudan 3B yapı üzerine büyütülen DJ 2B perovskit tabakası, en yüksek dolu moleküler orbital seviyesinin oluşturulmasına katkı sağladığı görülmüştür. Bu durum, güneş hücresindeki boşlukların daha etkili bir şekilde çıkarılmasını ve iletilmesini sağlayarak cihazın verimliliğini önemli ölçüde artırmıştır. Kapsüllenmemiş DJ 2B/3B perovskit güneş hücrelerinin %85'lik sabit bağıl nem altında yüksek stabilite ile %21,6'lık yüksek verimlilik sağladığı gözlemlenmiştir.

Kumar et al. (2021) tarafından gerçekleştirilen çalışmada, ITO/Nb-Ti₂O₃/3B Perovskite/2B Perovskite/Spiro-OMeTAD/Au katmanları bir araya getirilerek bir perovskit güneş hücresi yapısı oluşturulmuştur. Bu yapı SCAPS-1D yazılımı ile simüle edilmiş ve hem 2B perovskit hem de 3B perovskit katmanlarının kalınlıklarının çeşitli fotovoltaiik parametreler üzerindeki etkisi detaylı bir şekilde analiz edilmiştir. 2B perovskit katman kalınlığının artırılmasının güneş hücresi parametrelerini olumsuz etkilediği gösterilmiştir.

Adihetty et al. (2021) tarafından gerçekleştirilen çalışmada, PIN yapıya sahip CAM/ITO(TCO)/PEDOT(HTL)/i-2B-MAPI/i-3B-MAPI/i-2B-MAPI/PCBM(ETL)/Ag güneş hücresi yapısı oluşturulmuştur. Bu yapıdaki 2B/3B/2B temel hücre modeli, SCAPS-1D yazılımı kullanılarak simüle edilmiştir. 3B-MAPI katmanındaki derin kusur yoğunluğu konsantrasyonları değiştirilerek hücre performansındaki değişiklikler gözlemlenmiştir. Çalışma sonuçlarına göre, 3B-MAPI katmanındaki derin kusur yoğunluğunun artması, karanlık akımın artmasına ve güneş hücresi içindeki SRH rekombinasyonunun artmasına neden olmuştur. Sonuçlar, 3B-MAPI soğurucu katmanındaki SRH rekombinasyonunu en aza indirmek için derin kusur yoğunluğunun 10^{12} cm^{-3} 'ü geçmemesi gerektiği sonucunu ortaya koymuştur.

Liu et al. (2021) tarafından gerçekleştirilen çalışmada, FAPbBr_3 güneş hücrelerinde 2B/3B perovskit arayüzü oluşturmak için basit ve etkili bir yöntem olan fenetilamonyum bromür (PEABr) işleme yöntemi kullanılmıştır. Bu yöntemle, PEABr çözeltisi kullanılarak 3B perovskit filmleri üzerine çok ince bir tabaka halinde 2B $\text{PEA}_2\text{PbBr}_4$ perovskit katmanı başarıyla oluşturulmuştur. 2B perovskit katmanı olmayan

cihazlara kıyasla arayüz kusurlarını önemli ölçüde giderildiği ve sonuç olarak verimliliğin arttığı gözlemlenmiştir. Ayrıca, perovskitin nem toleransını iyileştiren PEA katyonundaki hidrofobik alkil zincirleri, güneş hücresinin stabilitesini de artırmıştır. Sonuç olarak, 2B perovskit arayüz modifikasyonuna sahip yarı şeffaf güneş hücresinde FF değeri %76,4 ve PCE değeri %8,7 olarak elde edilmiştir.

Kumar et al. (2022) tarafından gerçekleştirilen çalışmada, ITO/NiO/2B perovskit/3B perovskit/PCBM/Au katmanlardan oluşan PIN yapıya sahip güneş hücresinin simülasyonu gerçekleştirilmiştir. Simülasyonlar SCAPS-1D yazılımı ile gerçekleştirilerek yapı optimize edilmiştir. Simülasyon sonuçları, elektronların ve boşlukların sırasıyla 3B soğurucu katmandan, elektron taşıma katmanına ve boşluk taşıma katmanına etkili bir geçişinin olduğunu ortaya çıkarmıştır. Simülasyonlar sonucunda 2B perovskit katmanının PCE üzerinde küçük bir etkiye sahip olduğunu ancak histereziyi büyük ölçüde artırdığı gözlemlenmiştir. Elde edilen 1,2 V'luk iyi Voc değeri, 2B perovskitin arayüz kusurlarının büyük ölçüde pasifleştirdiğini göstermiştir. Çalışmalarında, FTO/NiO/2B perovskite/3B perovskite/PCBM/Ag yapısı ile %19'un üzerinde PCE değeri elde edilmiştir.

Duan and Dai (2022) tarafından gerçekleştirilen çalışmada, perovskit güneş hücrelerinin MAPbI₃ katman yüzeyini pasifleştirmek için Fenetilamonyum bromür (PEABr) eklenmiştir. PEABr, döndürülerek kaplanmış ve termal tavlama sırasında perovskit filmlerin tane sınırlarına yayılmıştır, böylece 2B/3B hibrit bir yapı oluşturulmuştur. Oluşan yapı, MAPbI₃ katmanı ile PCM katmanı arasındaki arayüz kusurlarını azaltmıştır. Simülasyonlar, arayüzdeki kusur durumu yoğunluğunun azalmasının cihazın FF değerinin artırdığını göstermiş ve PEABr ile yapılan deneysel sonuçları doğrulamıştır. PEABr işleminden sonra perovskit güneş hücrelerinin PCE değeri %17,95'ten %19,24'e yükselmiştir. Ayrıca çalışmada, 2B/3B hibrit yapının aynı zamanda su ve oksijen girişini engellediği ve bu sayede perovskit cihazın stabilitesinin önemli ölçüde iyileştiği görülmüştür.

Huang et al. (2023) tarafından gerçekleştirilen çalışmada, 2B perovskitlerin 3B perovskit üzerine istiflenmesi ile 2B/3B yapı oluşturulmuştur. 3B perovskit ile boşluk taşıma katmanı arasına yerleştirilebilen konjuge florlu benzimidazolyum katyonu

(FBI_m+) üretilmiştir. (FBI_m)₂PbI₄ ve (FBI_m)₂PbBr₄'ün 2B tek kristalli yapıda oldukları X ışını kırınımı (XRD) ölçümleri ile doğrulanmıştır. 3B perovskit üzerine oluşturulan 2B perovskit yapı arayüzey kusurları pasifleştirmiş, daha iyi kristalleşme sağlamış ve tuzak yoğunluğunu azaltmıştır. Ayrıca yapının enerji seviyesi düzenlemesinin, karşıt iyonun iyodürden bromüre değiştirilmesiyle düzenlenebildiği, bu durumun boşluk çıkarma ve cihaz performanslarını iyileştirdiği bildirilmiştir. Çalışmada FBI_mBr içeren cihazlar için %23'lik yüksek verimlilik elde edilmiştir.

Yang et al. (2023) tarafından gerçekleştirilen çalışmada, Dion-Jacobson 2B perovskit ile perovskit güneş hücrelerinde verimli ve stabil bir FAPbI tabanlı 2B/3B hetero yapı oluşturulmuştur. 2B destekli 3B büyümenin kristalizasyon dinamiklerini derinlemesine anlamak için, filmlerin XRD karakterizasyonu, 25°C'den 150°C'ye kadar yapılan termal tavlama işlemleri sırasında gerçekleştirilmiştir. XRD ölçümlerinde, 2B perovskit ilavesiyle kristalleşme sırasında daha güçlü kırınım yoğunluğu olduğu görülmüştür. Ayrıca, XRD ölçümü sırasında 2B/3B filmde $2\theta = 8.8^\circ$ açısında 2B (4AP)PbI₄ bileşiğinin oluşumu gözlemlenmiştir. 2B/3B filmlerin termal tavlama sırasında daha az kafes değişimi gösterdiği belirlenmiş ve bu durumun, 2B bileşenin, 3B perovskitin kafes gerilimini azalttığı gösterilmiştir. Amidino bazlı 2B/3B heteroeklem perovskit filmleri ile üretilen sert ve esnek güneş hücrelerinden sırasıyla %24,9 ve %22,3 gibi yüksek PCE değerleri elde edilmiştir.

Zhang et al. (2024) tarafından gerçekleştirilen çalışmada, 2B/3B perovskit güneş hücrelerinin çalışma mekanizmalarını ve tasarım ilkelerini açıklamak için geleneksel bir perovskit güneş hücresi önerilmiştir. Simülasyonlar COMSOL Multiphysics platformu kullanılarak sonlu elemanlar yöntemi ile gerçekleştirilmiştir. 2B/3B perovskit tasarımının perovskit güneş hücrelerin iyon göçünü cihaz fiziği perspektifinden engelleyebileceği olgusu ilk olarak bu çalışmada bildirilmiştir. Ayrıca, 2B/3B perovskit yapısının, geniş bant aralıklı perovskit güneş hücreleri üzerinde daha belirgin bir etkiye sahip olduğu gösterilmiştir.

Meskini and Asgharizadeh (2024) tarafından gerçekleştirilen çalışmada, SCAPS-1D yazılımı kullanılarak perovskit güneş hücrelerinin ETL katmanında kullanılan farklı Ti₃C₂ içeriklerine sahip SnO₂-Ti₃C₂ (2 boyutlu MXene) bulunan ve

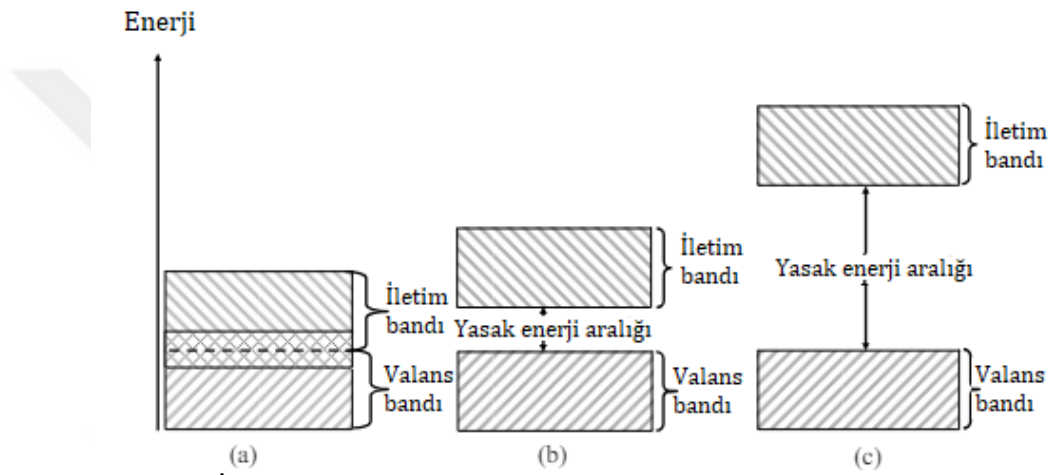
$\text{SnO}_2\text{-Ti}_3\text{C}_2$ bulunmayan cihazlar üzerinde incelemeler gerçekleştirilmiştir. $\text{ITO/SnO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3/\text{Spiro-OMeTAD/Ag}$ ve ağırlıkça %1,0 Ti_3C_2 içeren $\text{SnO}_2\text{-Ti}_3\text{C}_2$ 'nin ETL katmanı olarak kullanılması durumunda $\text{ITO/SnO}_2\text{-Ti}_3\text{C}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3/\text{Spiro-OMeTAD/Ag}$ cihaz mimarisine sahip iki yapı karşılaştırılmıştır. ETL katmanına eklenen 2B MXene'nin, hücrenin gelişmiş performansının temel nedeni olan arayüzey rekombinasyonunu azaltmada önemli bir rol oynadığı ve MXene'ye sahip yapının %27,81'lik nispeten yüksek bir PCE değeri oluşturduğu bildirilmiştir.

Dandali et al. (2023) tarafından gerçekleştirilen çalışmada, grafenin perovskit güneş hücrelerindeki etkisini değerlendirmek amacıyla, grafenli ve grafensiz cihazların performanslarını karşılaştırmak için SCAPS-1D yazılımı kullanılmıştır. Arayüz kusur yoğunluğunun cihaz performansı üzerindeki etkilerini hesaba katmak amacıyla modele $\text{TiO}_2/\text{MAPbI}_3$, $\text{MAPbI}_3/\text{Grafen}$ ve $\text{Grafen/Spiro-OMeTAD}$ olmak üzere üç arayüz katmanı dahil edilmiştir. Ayrıca modellenen perovskit güneş hücreleri için soğurucu katkı konsantrasyonu, soğurucu kusur yoğunluğu, ETL katkı konsantrasyonu, HTL katkı konsantrasyonu, seri direnç ve şönt direncinin etkileri de değerlendirilmiştir. Herhangi bir optimizasyon olmadan, grafenle modifiye edilmiş cihaz %20,911 PCE değeri oluştururken, karşılaştırılan yapı %20,677 değerinde PCE üretmiştir. Oluşan bu farkın çoğunlukla daha düşük rekombinasyon kayıplarından ve arayüzey ışınlımsız rekombinasyonun daha etkili bastırılmasından kaynaklandığı ifade edilmiştir. Optimize edilmiş grafen tabanlı güneş hücresinde PCE değeri %26,667 olarak elde edilmiştir.

3. MATERYAL ve YÖNTEM

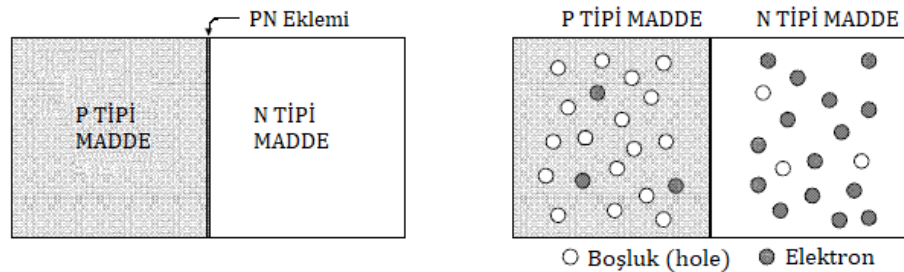
3.1. Güneş Hücreleri

Güneş radyasyonunun elektriğe dönüşümü, ilk kez 1839 yılında Alexandre-Edmond Becquerel tarafından gözlemlenen fotovoltaiik etki ile açıklanmıştır. Bu etki, yarı iletken malzemelerde gözlemlenebilir (Sampaio and Gonzalez 2017). Şekil 3.1’de iletken, yarı iletken ve yalıtkanlara ait bant yapıları gösterilmektedir.



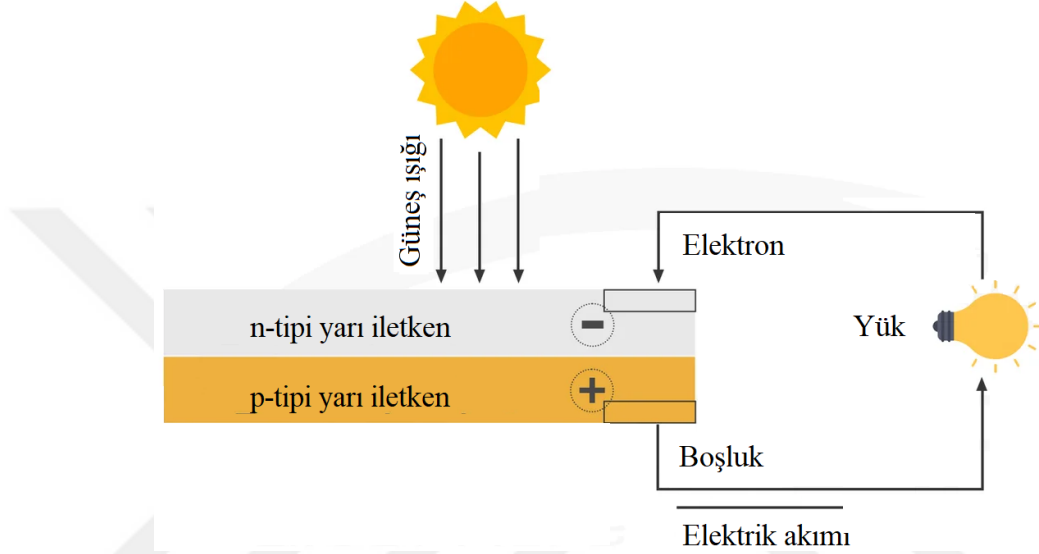
Şekil 3.1. (a) İletkenlerin, (b) yarı iletkenlerin ve (c) yalıtkanların bant yapıları

Hemen hemen tüm fotovoltaiik cihazlar, PN eklemi içerir. Güneş ışığını, elektrik akımına dönüştüren bu cihazlar güneş hücreleri veya fotovoltaiik hücreler olarak adlandırılır. Şekil 3.2’de PN eklemi ve N tipi ve P tipi yarı iletken bölgelerdeki azınlık ve çoğunluk taşıyıcıları gösterilmektedir.



Şekil 3.2. PN eklemi ve N ve P tipi yarı iletken bölgelerdeki azınlık ve çoğunluk taşıyıcıları.

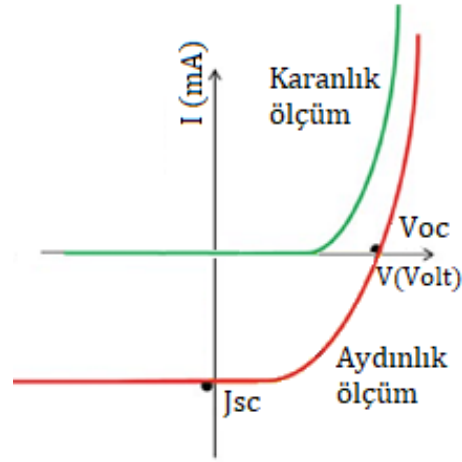
Güneş ışığı, bir yarı iletkene ulaştığında enerjisi yarı iletkenin yasak bant aralığından daha yüksek olan fotonlar, değerlik (valans) bandındaki elektronları iletkenlik bandına çıkararak elektron-boşluk çiftleri oluşturabilirler. Elektron-boşluk çiftlerinin elektrik alan yardımıyla birbirinden ayrılmasıyla yük üzerinde bir fotoakım elde edilebilir. PN eklemnin dâhili elektrik alanı elektron-boşluk çiftlerini ayırmak için kullanılabilir. Şekil 3.3'te güneş hücresinin temel çalışma prensibi gösterilmektedir.



Şekil 3.3. Güneş hücresinin çalışma prensibi

3.2. Güneş Hücresi Parametreleri

Güneş hücrelerinin karakterizasyonu, güneş ışığına benzer ışık üretebilen solar simülatörler yardımı ile gerçekleştirilir. Karakterizasyon yapılırken karanlıkta ve ışık altında bir güneş hücresinin akım-gerilim (I-V) grafiği elde edilir (Kietzke 2007). Şekil 3.4'te karanlık ve ışık altında elde edilen örnek I-V grafiği gösterilmektedir.



Şekil 3.4. I-V eğrisi

Bir güneş hücresinin performansı I-V ölçümlerinden türetilen parametrelerle tanımlanır. Akım-gerilim grafiği kullanılarak V_{oc} , I_{sc} , PCE ve FF gibi temel güneş hücresi parametreleri elde edilebilir (Mi et al. 2014).

3.2.1. Kısa devre akımı

Güneş hücresi ışınlandığında, ışık etkisi ile oluşan elektronlar elektrik alan etkisi ile N tipi yarı iletken, boşluklar ise P tipi yarı iletken doğru taşınır. Elektronların ve boşlukların bu hareketi ile oluşan akım I_1 olarak ifade edilir. Fotovoltaik akımın üretilmesi sürecinde fotovoltaik akımın tersi yönde bir ileri I_2 akımı da üretilenir. Sonuç olarak, güneş hücresinin çıkış akımı I , bu iki akım arasındaki fark olarak tanımlanır.

$$I = I_1 - I_2 \quad (3.1)$$

Güneş hücresinin çıkış akımı Denklem 3.2 kullanılarak hesaplanabilir.

$$I = I_1 - I_0 \left[\exp\left(\frac{qV}{nk_B T}\right) - 1 \right] \quad (3.2)$$

Denklem 3.2’de, I_0 ters doyma akımını ve V_D PN eklem gerilimini göstermektedir. I_1 akımı ışığın yoğunluğuyla doğru orantılı olan fotovoltaik akım, n ise

idealite faktörüdür ve değeri genellikle 1-2 aralığındadır. T Kelvin derece cinsinden sıcaklık, q birim elektron yükü ve k_B Boltzmann sabitini gösterir. Güneş hücrelerinin seri direnci ihmal edilebilirse V_D , güneş hücresinin gerçek gerilimi V olarak ifade edilebilir (Li et al. 2022).

Güneş hücresinin kısa devre edilmesi durumunda gerilim sıfıra düşecek ve çıkış akımı gerçek akıma ve dolayısıyla kısa devre akımına eşit olacaktır. Yani, Denklem 3.2'e göre kısa devre akımı $I_{sc} = I_1$ olur.

3.2.2. Açık devre gerilimi

Güneş hücresinin açık devre yapılması durumunda devreden herhangi bir akım oluşmaz yani güneş hücresinin ürettiği gerçek I akımı sıfır olur. Bu durumda elde edilen gerilim, açık devre gerilimi V_{oc} olarak tanımlanır (Li et al. 2022). Denklem 3.2 kullanılarak açık devre gerilimi için Denklem 3.3 elde edilir.

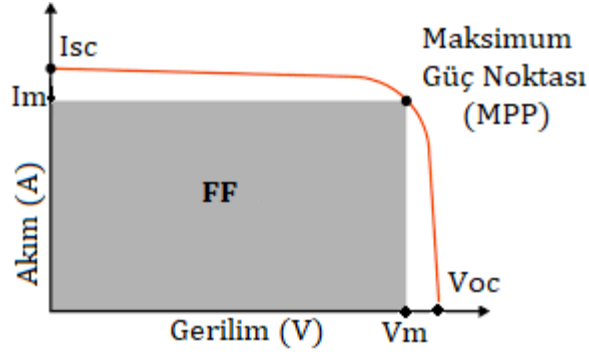
$$V_{oc} = \frac{nk_B T}{q} \ln \left(\frac{I_{sc}}{I_0} + 1 \right) \quad (3.3)$$

3.2.3. Dolgu faktörü

Bir güneş hücresinden elde edilebilecek en yüksek akım ve gerilim sırasıyla kısa devre akımı ve açık devre gerilimidir. Ancak, güneş hücresinin kısa devre ya da açık devre edilmesi durumunda güneş hücresinin ürettiği güç sıfırdır. Dolgu faktörü FF, V_{oc} ve I_{sc} ile birlikte bir güneş hücresinin ürettiği gücü belirler (Li et al. 2022). Dolgu faktörü Denklem 3.4'de gösterildiği gibi hesaplanır.

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

Denklem 3.4'de P_m güneş hücresinin üretebildiği gücü ve V_m ve I_m ise sırasıyla bu gücün oluştuğu gerilim ve akım değerlerini göstermektedir. Grafiksel olarak FF güneş hücresinin I-V eğrisine sığacak en büyük dörtgenin alanıdır. Şekil 3.5'te FF alanı I-V grafiği üzerinden gösterilmiştir.



Şekil 3.5. I-V grafiği üzerinden FF gösterimi

I-V eğrisinde gösterilen maksimum güç noktası (MPP), bir güneş hücresinin standart test koşullarında üretebileceği maksimum gücü temsil eder. I_{sc} ve V_{oc} değerlerinin maksimum güç sağladığı yer en ideal maksimum güç noktasıdır. Dolgu faktörü, I-V eğrisinin altına yerleştirilebilecek, olası en büyük dikdörtgenin alanıdır. Yüzde olarak dolgu faktörü ne kadar yüksek olursa hücre performansı o kadar iyidir (Mandong 2019).

I_m ve V_m değerlerinin birbirlerine yakın büyüklükte olması durumunda P_m en yüksek değerini alacağı için FF değeri I-V eğrisinin bir kareye ne kadar benzediğinin bir göstergesidir. Bir güneş hücresinin FF'si direnç kayıplarına bağlıdır. Hiçbir kaybı olmayan ideal bir güneş hücresinin FF'si 1'dir. Ancak pratikte böyle bir değere ulaşmak mümkün değildir. Dolayısıyla FF değerinin 1'e oldukça yakın olması arzu edilir (Shah et al. 2023).

3.2.4. Güneş hücresi verimliliği

Güneş hücresinin verimi, elektriksel çıkış gücü P_m 'nin, güneş hücresine uygulanan güneşten alınan giriş gücü P_{in} 'e oranı şeklinde ifade edilir. Denklem 3.4 kullanılarak η , Denklem 3.5'deki gibi elde edilir.

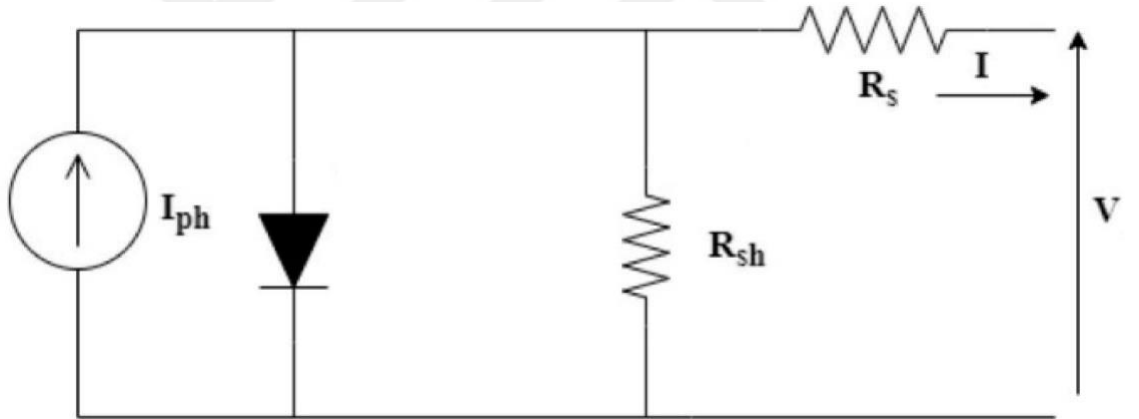
$$\eta = \frac{I_{sc}V_{oc}FF}{P_{in}} \quad (3.5)$$

Güneş hücresi verimi η , güneş hücresinin güneş ışığını elektrik enerjisine dönüştürme kabiliyetini ölçmek için kullanılan güç dönüşüm verimliliği olarak ifade edilir.

Güneş hücrelerinde kullanılmakta olan bir diğer verimlilik ise kuantum verimliliğidir. Kuantum verimliliği, belirli bir dalga boyundaki absorbe edilen foton sayısının, elektron veya ışık yoluyla dönüştürülen foton sayısına oranı olarak hesaplanabilir (Kalyani and Dhoble 2015).

3.3. Güneş Hücresi Eşdeğer Devresi

Güneş hücreleri basit bir eşdeğer devre kullanılarak analiz edilebilir. Şekil 3.6'da örnek bir güneş hücresi eşdeğer devresi gösterilmektedir.

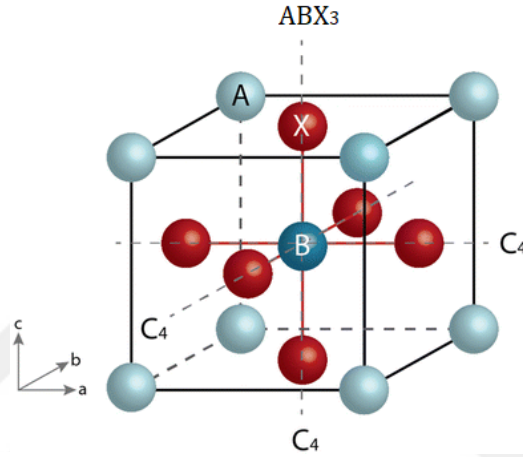


Şekil 3.6. Güneş hücresi eşdeğer devresi

Eşdeğer devrede seri direnç (R_s), şönt direnç (R_{sh}) ve şönt dirence paralel sabit akım kaynağı (I_{ph}) bulunmaktadır. Seri direnç temel olarak yarı iletken malzemelerin ve metalik kontakların direncinden kaynaklanır. Şönt direnç ise bağlantı bölgesindeki kristal kusurları nedeniyle oluşur. Şekil 3.6'da gösterilen eşdeğer devre, güneş hücrelerinin çıkış performansını anlamak için gerekli olan J_{sc} , V_{oc} , R_s , R_{sh} ve FF gibi önemli parametreleri içerir (Koide et al. 2006).

3.4. Perovskit Malzemeler

Perovskit terimi kalsiyum titanyum oksid (CaTiO_3) kristal yapısına sahip, ABX_3 genel formülü ile karakterize edilen bir grup bileşiği tanımlamak için kullanılır. Şekil 3.7’de ABX_3 genel formüllü perovskit kristal yapısının şematik bir şeklini göstermektedir.



Şekil 3.7. ABX_3 formülüne sahip perovskit kristal yapısı

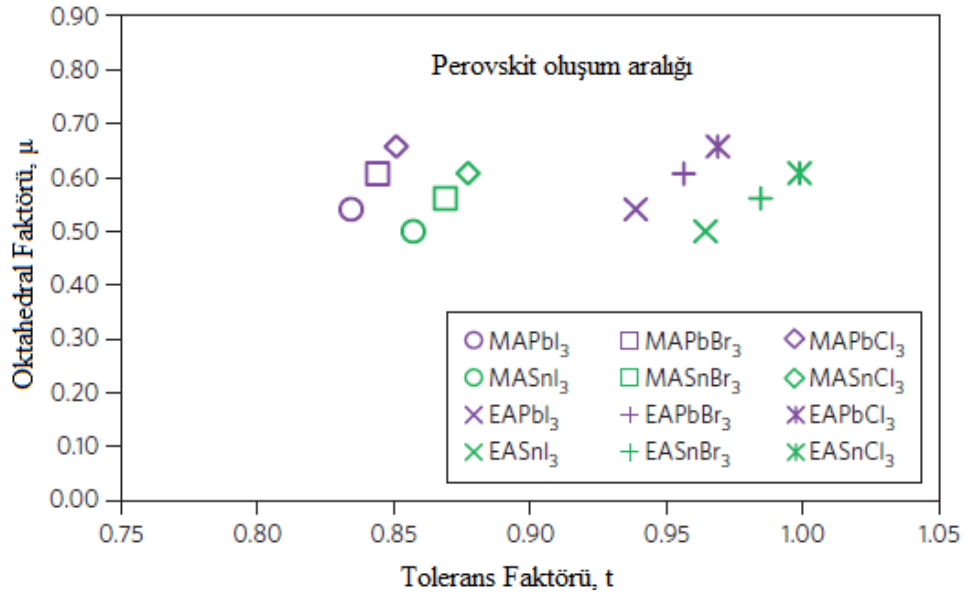
ABX_3 formülünde, A, organik katyonlar MA olarak da adlandırılan metilamonyum (CH_3NH_3^+) veya inorganik Cs^+ , K^+ ve Rb^+ iyonları ya da bunların karışımı olabilen tek değerlikli katyonları gösterir. B ve X ise sırasıyla iki değerlikli bir metal katyonunu (Pb^{2+} veya Sn^{2+}) ve halojenür anyonunu (Cl^- , Br^- veya I^-) temsil eder (Dou et al. 2022).

Perovskit oluşturmak için A, B ve X'in iyonik yarıçaplarının Denklem 3.6 ile verilen tolerans faktörünü (t) ve Denklem 3.7 ile verilen oktahedral faktörünü (μ) karşılaması gerekmektedir.

$$t = \frac{R_A + R_B}{\sqrt{2(R_B + R_X)}} \quad (3.6)$$

$$\mu = \frac{R_B}{R_X} \quad (3.7)$$

Denklem 3.6 ve 7’de R_A , R_B ve R_x sırasıyla A, B ve X’in iyonik yarıçaplarıdır. Tolarans ve oktahedral faktör hesaplamaları perovskit kristalinin oluşması için gerekli aralığı belirtmektedir. Tolerans faktörü 0,81 ve 1,11 aralığında olduğunda ve oktahedral faktörün 0,44 ve 0,9 aralığına olduğunda perovskit kristalini oluşmaktadır (Green et al. 2014). Şekil 3.8’de farklı perovskitler için tolerans ve oktahedral faktör aralıkları gösterilmektedir.

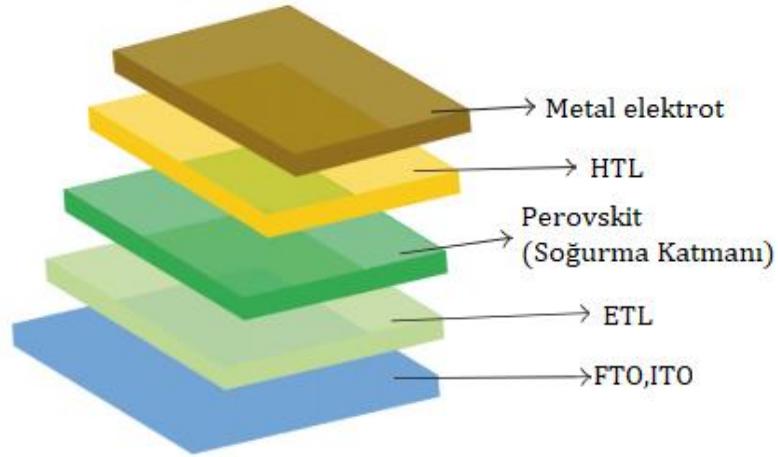


Şekil 3.8. Farklı perovskitler için tolerans ve oktahedral faktörleri

Perovskitler, inorganik ve halojenür perovskit olmak üzere iki sınıfa ayrılmıştır. İnorganik perovskitler, yüksek açık devre gerilimine sahip metilamonyum oksit ile üretilirler. Halojenür perovskitler, genel formülü ABX_3 ile ifade edilir. Burada X’e ait halojen elementleri iyodür (I), bromür (Br), klorür (Cl) içerir ve halojenür perovskitler geniş bir optik emilim aralığına sahip olup, yüksek verimlilikleri ile bilinirler (Sahoo et al. 2018).

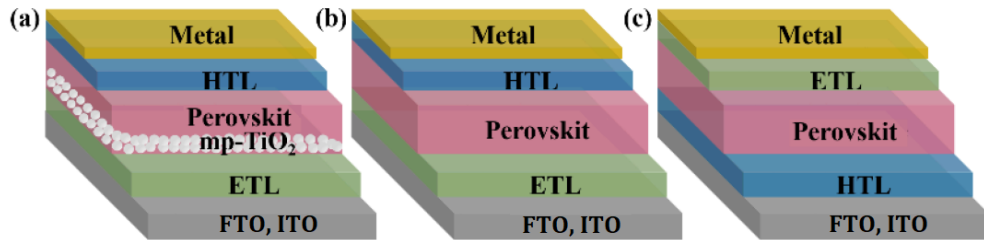
3.4.1. Perovskit güneş hücrelerinin yapısı ve çalışması

Tipik çok katmanlı perovskitler güneş hücreleri beş temel bileşene sahiptir. Bunlar perovskit ışık soğurucu katmanı, elektron taşıma katmanı, boşluk taşıma katmanı, şeffaf elektrot ve arka elektrot olarak sıralanabilir (Zhou et al. 2018). Şekil 3.9’da basit perovskit güneş hücrelerine ait katman yapısı gösterilmiştir.



Şekil 3.9. Basit perovskit güneş hücresinin katman yapısı

Perovskit güneş hücreleri, mezoskopik ve düzlemsel yapı olmak üzere iki temel yapıda oluşturulmaktadır. Düzlemsel yapı tamamen düzlemsel katmanlardan oluşurken, mezoskopik olarak adlandırılan yapı ise gözenekli bir katman içermektedir. Tipik olarak mezoskopik bir yapı NIP yapıdadır. Burada N ile n-tipi malzemeden oluşan elektron taşıyıcı katman, I ile katkısız katman ve P ile p-tipi malzemeden oluşan boşluk taşıyıcı katman simgelenmektedir (Kim et al. 2012). Düzlemsel tip perovskit güneş hücreleri ise NIP düzlemsel ve PIN düzlemsel olmak üzere iki farklı yapıda oluşturulur (Wang et al. 2019). Şekil 3.10'da perovskitlere ait mezoskopik NIP yapısı, düzlemsel NIP yapısı, düzlemsel PIN yapısı gösterilmektedir.



Şekil 3.10. (a) Mezoskopik NIP yapısı, (b) düzlemsel NIP yapısı ve (c) düzlemsel PIN yapısı.

Perovskit güneş hücrelerinde boşluk ve elektronları toplamak için şeffaf bir elektrot ve arka elektrota ihtiyaç vardır. Şeffaf elektrot olarak FTO (flor katkılı kalay oksit) ve ITO (kalay katkılı indiyum oksit) gibi iletken oksitler, arka elektrot için yaygın olarak altın (Au) ve gümüş (Ag) kullanılır (Ke et al. 2015).

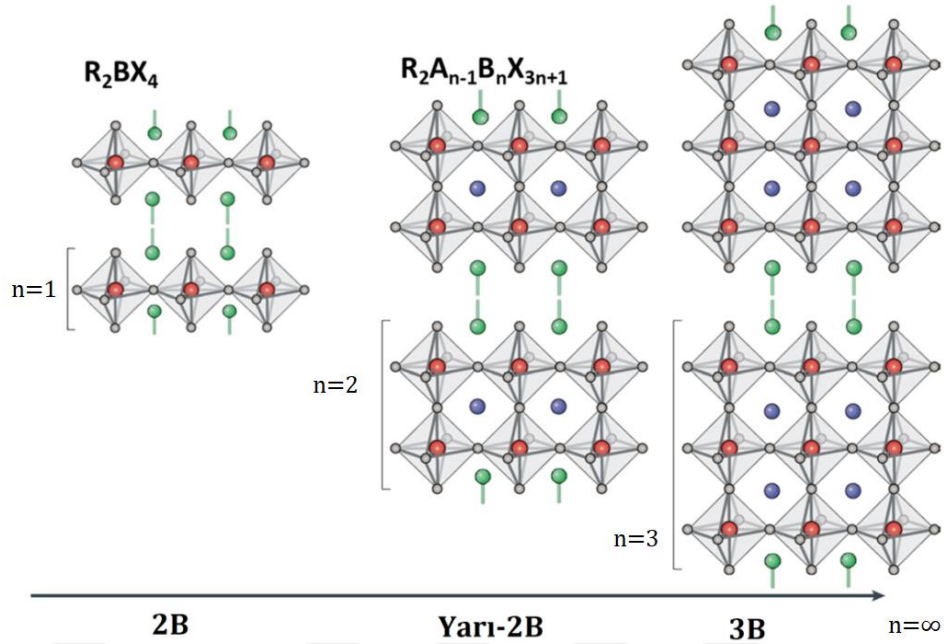
Soğurucu katman olarak kullanılan MAPbI_3 olarak da adlandırılan metilamonyum kurşun iyodür ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$), iyi performans ve düşük üretim maliyeti göstermesi nedeniyle güneş hücresi endüstrisindeki en popüler halojenür perovskitlerden biridir. Ancak Metilamonyum kurşun iyodür, nem ve oksijene karşı kararsız olan 3B perovskit malzemelerden biri olarak kabul edilir. 3B halojenür perovskitlerin stabilitesini arttırmak için 2B Ruddlesden-Popper halojenür perovskitler kullanılır. 2B Ruddlesden-Popper halojenür perovskitler, nem direncini artıran nem engelleyici katman görevini görür (Adihetty et al. 2021). En sık kullanılan 100 yönelimli katmanlı 2B perovskitler, iki ana türe ayrılır; Ruddlesden-Popper (RP) perovskitler ve Dion-Jacobson (DJ) faz perovskitler. RP-fazı 2B perovskitler, organik ara katyonların çift tabakalarından oluşur. İnorganik perovskit tabakaları, butilamonyum (BA) ve fenil etil amonyum (PEA) gibi monoamonyum katyonlarıyla ilişkilidir. Komşu katyonlar arasında Van der Waals mesafesi bulunur. RP-fazı 2B perovskitlerinde hidrofobik zincirler perovskit tabakalarını nem penetrasyonundan koruyabilir (Kumar et al. 2022). 3B MAPbI_3 perovskit üzerine benzilamin çözeltisi uygulanmasıyla katmanın üst yüzeyinde 2B perovskit olan butilamonyum kurşun iyodür (BA_2PbI_4) oluşturulabilir. Yapılan işlem sonucu, benzilamin moleküllerinin hem film yüzeyinde hem de tane sınırlarında kusur durumlarını iyi bir şekilde pasifleştirebildiğini ortaya çıkarılmıştır (Zhou et al. 2017).

Güneş hücresinin yüksek verimlilikle ve uzun süre çalışabilmesi için HTL ve ETL katmanlarının yüksek elektron-boşluk mobilitesi, perovskit ve elektrot ile iyi hizalanmış enerji seviyesi, yüksek termal stabilite, neme dayanıklılık ve düşük maliyet özelliklerine sahip olması gerekir. En çok kullanılan ETL malzemeleri titanyum dioksit (TiO_2), kalay dioksit (SnO_2) ve çinko oksit (ZnO) gibi metal oksitleri içerir (Dou et al. 2022). SnO_2 , TiO_2 ve diğer ETL malzemeleri ile karşılaştırıldığında, SnO_2 'nin daha az fotokatalitik aktivite, üstün kimyasal stabilite ve UV direnci özellikleri gösterdiği görülür. SnO_2 , oldukça yüksek elektron hareketliliği ve iletkenliğe sahiptir. Bu özellikler güneş hücresindeki elektron taşıma verimliliğini artırır ve rekombinasyon kaybını azaltır. SnO_2 , geniş bir optik bant aralığına (3.6–4.0 eV) ve tüm görünür spektrum boyunca yüksek geçirgenliğe sahiptir. Bu özellikler, spektrumundaki çoğu ışığın SnO_2 'den geçmesini ve ardından perovskit tabakası tarafından emilmesini

sağlar. Böylece güneş hücresinin etkin bir şekilde güneş ışığını absorbe etmesi garantilenir (Jiang et al. 2018).

HTL malzemeleri olarak spiro-OMeTAD, Poly (3-hexylthiophene-2, 5-diyl) (P3HT), poli(triarylamin) (PTAA), NiO (Nikel oksit), Poli Polistiren sülfonat (poly(3,4-ethylenedioxythiophene) polystyrene sulfonate) (PEDOT:PSS) vb. malzemeler kullanılmaktadır. Düzlemsel PIN yapılarda yaygın olarak kullanılan PEDOT:PSS, hidrofobik PEDOT ve hidrofilik PSS bileşenlerinden oluşan bir polimer elektrolittir ve görünür dalga boyu aralığında yüksek şeffaflık ve yüksek iletkenlik avantajlarına sahiptir. Ancak PEDOT:PSS'nin higroskopik ve asidik yapısı, aktif katmanın ve ITO elektrotunun bozulmasına ve ayrışmasına neden olur ve güneş hücrelerinin stabilitesini azaltır (Dou et al. 2022). Düzlemsel NIP yapılarda spiro-OMeTAD en çok kullanılan HTL'lerden biridir. Spiro-OMeTAD, uygun cam geçiş sıcaklığı ($T_g=120^\circ\text{C}$), çözünürlük, iyonizasyon potansiyeli, absorpsiyon spektrumu, katı hal morfolojisi ve yüksek cihaz performansı nedeniyle perovskit güneş hücrelerinin üretimi için de en uygun HTL malzemelerinden biridir (Huang et al. 2016). Ayrıca, önemli HTL malzemelerinden biri olan NiO, düşük sıcaklıkta işlenebilir, 2B ve 3B perovskitlerle valans bandı konumunun mükemmel eşleşmesi ile yüksek bir bant aralığı sağlar ve iyi boşluk toplama yeteneğine sahiptir. Bu özelliklerinin yanı sıra ihmal edilebilir J-V histerезisi göstermesi NiO'ı tercih edilebilir bir HTL malzemesi olarak öne çıkarmaktadır (Kumar et al. 2022).

2B ve yarı 2B boyutlu perovskitlerin, soğurucu katman olan 3B perovskit ile birlikte kullanılması güneş hücresinin stabilitesini iyileştirebilir. 2B ve yarı 2B boyutlu perovskitler, ABX_3 kimyasal formülüne sahip 3B perovskitin A ile gösterilen katyonunun, büyük boyutlu bir organik iyonla değiştirilmesi sonucunda metal katyon-halojen oktahedranın inorganik tabakasının ayrılması ile oluşturulabilir. Metal katyon-halojen oktahedranın inorganik tabakasının ayrılması, inorganik çerçevedeki boşluğun daha büyük boyutlu organik katyonunu barındıramayacak kadar büyük olmamasından kaynaklanır. Metal katyon-halojen oktahedranın inorganik katmanının ayrılması ve 3B yapıyı belirli yönlerde genişlemeye zorlaması ile 2B ve yarı 2B boyutlu perovskitler oluşturulabilir. Şekil 3.11'de 2B perovskit, yarı-2B perovskit ve 3B perovskitlere ait kristal yapılar gösterilmektedir.



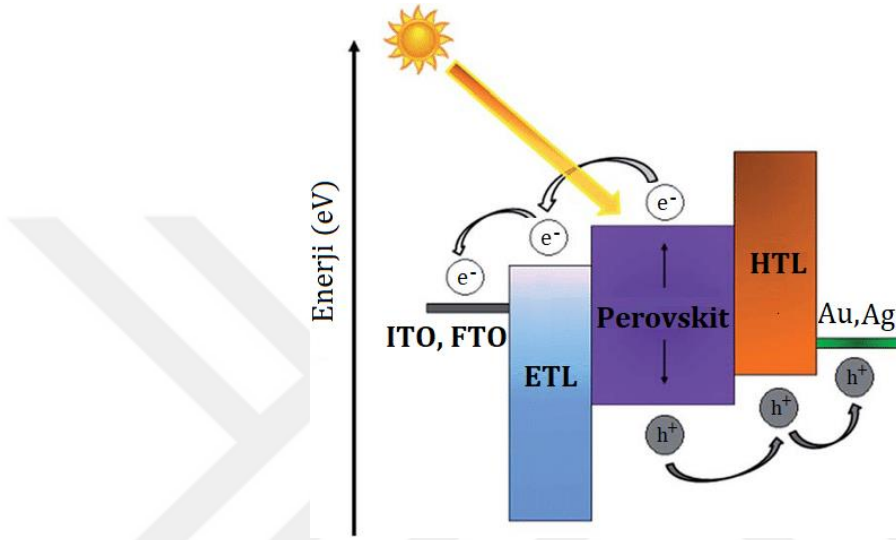
Şekil 3.11. 2B, Yarı-2B ve 3B perovskit kristal yapıları

2B halojenür perovskit, $(\text{RNH}_3)_2\text{A}_{n-1}\text{B}_n\text{X}_{3n+1}$ formülü ile ifade edilir. Burada R organik fonksiyonel grupları temsil ederken n ise istiflenmiş köşe paylaşımlı oktahedral katmanların sayısını temsil eder. Şekil 3.11’de gösterildiği gibi $n=1$ olduğunda saf 2B bir yapı oluşmaktadır. $n=\infty$ olduğunda ise 3B bir yapı oluşur. n’nin diğer tamsayı değerleri için yarı 2B yapılar ortaya çıkmaktadır (Zang and Zhu 2021).

Perovskit yapısında farklı metal katyonları ve halojen anyonları bulunabilir. Örneğin 2B perovskit, köşe paylaşımlı PbI_6 oktahedral inorganik katmanları arasına sıkıştırılmış büyük hacimli bir organik ligand molekülünden oluşur. Organik katyonun hidrofobik doğası, suyun yapıya girmesini engellemeye yardımcı olur ve perovskitin bozulmasını önler ve stabilitenin artmasını sağlar. Bununla birlikte, 2B yapıdaki büyük hacimli organik katyonların varlığı, yük taşınmasını engellemektedir. Bu nedenle, sadece soğurucu katman olarak 2B perovskit malzemeler içeren güneş hücreleri, saf 3B perovskit bazlı güneş hücrelerine kıyasla daha düşük verimliliğe sahip olur. Dolayısıyla, genellikle 2B perovskitler, perovskit güneş hücrelerinin aktif katmanlarında birincil soğurucu olarak kullanılmaz (Kore et al. 2021).

Ancak, 2B perovskitlerin genellikle hidrofobik olan daha büyük ve daha az uçucu organik katyonları birleştirme kabiliyetine sahip olmaları, 2B perovskit içeren yapıların kimyasal ve termal stabilitesini artırır. Ayrıca 2B halojenür perovskitler çok

yönlüdür. Yani, farklı türdeki halojenürler, metalleri ve organik katyonları ayrı gruplar halinde veya farklı özelliklere sahip sonsuz sayıda olası malzeme dizisi sağlamak için kombinasyonlar halinde kullanılabilirler (Kumar et al. 2021). 2B perovskitlerin bu çok yönlülüğü, foto dedektörler, transistörler, ışık yayan diyotlar ve güneş hücreleri gibi farklı uygulamalarda kullanılmasına yol açmıştır (Lan et al. 2019). Şekil 3.12’de basit bir perovskit güneş hücresinin bant diyagramı ve taşıyıcıların hareketleri gösterilmiştir.



Şekil 3.12. Basit bir perovskit güneş hücresi bant diyagramı ve taşıyıcı hareketleri

Şekil 3.12’de görüldüğü gibi perovskit tabakasına yeterli enerjiye sahip bir foton ($E_{hv} > E_g$) düştüğünde foton, yarı iletkenin değerlik bantındaki elektronları (e^-) iletim bandına çıkarır ve değerlik bantında bir boşluk (h^+) bırakır. Elektrik alan etkisiyle elektron ve boşluklar birbirinden ayrılır. ETL ve HTL, güneş ışınımı tarafından üretilen taşıyıcıların transferinden sorumludur. Elektronlar, ETL katmanından boşluklar ise HTL katmanından geçerek dış devre üzerinde birleşirler (Batmunkh et al. 2015).

3B perovskit ve 2B perovskit katmanlarının, tek bir güneş hücresinde birleştirilmesiyle elde edilen 2B/3B yapılar güneş hücrelerinin kararlılığı artırabilmektedir. 2B malzemelerin kimyası 3B perovskitlerinkine benzer olsa da 2B/3B perovskitler, her iki malzemenin de ayrı ayrı sahip olamayacağı yeni davranışlar sergileyebilirler (Metcalf et al. 2023).

3.5. Simülasyon Yazılımları

Güneş hücrelerinin geliştirilmesi için yapılan çalışmalar fazla zaman ve enerji tüketilmesine neden olur. Bu sorunun üstesinden gelebilmek için farklı güneş hücresi yapılarının modellemesinin ve nümerik analizinin yapılabildiği çeşitli yazılımlar geliştirilmiştir. Son yıllarda yapılan çalışmalarda sıkça kullanılan yazılımlar COMSOL (Zandi et al. 2020), SILVACO ATLAS (Hima et al. 2019), AMPS (Hamri et al. 2019), wxAMPS (Bag et al. 2020) ve SCAPS-1D'dir (Burgelman et al. 2000).

Güneş hücresi simülasyonunda kullanılabilecek yazılımlardan biri olan SCAPS-1D ilk olarak Gent Üniversitesi'nde kullanıma sunulmuştur. Yazılım, kullanıcının parametreleri ayarlayabildiği veya sonuçların gösterildiği bir dizi panel halinde düzenlenmiştir. Bu yazılım kullanılarak hesaplanan genel çıktılar akım-voltaj (I-V), kapasite-voltaj (C-V), kapasite-frekans (C-f) ve kuantum verimliliği (QE) şeklindedir (Burgelman et al. 2000).

Simülasyonlarda her bir katmana ait girilen parametre değerlerinin yanı sıra rekombinasyon modeli panelinden rekombinasyon türü ve değerleri de girilebilmektedir. SCAPS-1D yazılımında, ışınsal, Auger ve Shockley-Read-Hall (SRH) rekombinasyon olmak üzere farklı rekombinasyon türü seçilebilir. Işınsal rekombinasyon, iletim bantından gelen bir elektronun değerlik bantındaki bir boşlukla yeniden birleşmesi sonucu oluşur ve bir foton yayılır. Auger rekombinasyonu ise, iletim bantındaki bir elektron ile değerlik bantındaki boşluğun yeniden birleşip enerji yaydığı ve daha sonra yayılan enerjinin iletim bantındaki başka bir elektrona aktarıldığı rekombinasyon türüdür. SRH rekombinasyonunda, bantlar arasında geçiş yapan bir elektron, yarı iletken malzemesindeki bir katkı maddesi veya kusur nedeniyle oluşan bir enerji seviyesinden geçer. Bu enerji seviyeleri, tuzak seviyeleri olarak bilinir. Elektronlar veya boşluklar bu tuzak seviyelerine yakalandıklarında, yeniden birleşme süreci başlar. Bu süreç, genellikle ışıma yapmayan bir süreçtir, yani bir foton yayılmaz. Bunun yerine, ortaya çıkan enerji genellikle malzemenin içinde ısı olarak dağılır. SRH, silisyum ve diğer dolaylı bant aralıklı malzemelerdeki baskın rekombinasyon türüdür. Kristal yapı kusurları, 3B MAPI'de ışınsal ve Auger rekombinasyonunu desteklemez. Nokta kusurlar ise SRH rekombinasyona neden olur (Brakkee and Williams 2020).

SCAPS-1D yazılımında hesaplamalar karanlık ve aydınlık koşullarda, ayrıca farklı sıcaklık ve aydınlatma koşullarında hesaplanıp elde edilebilir (Khoshsirat and Yunus 2013). SCAPS-1D modelleme ile yaygın olarak I-V parametreleri elde etmek için modelleme yapılır. Cihaz, yapısındaki bir tabakanın ya da tabakadaki bir özelliğin etkisini araştırmak için cihaz modellenir, performans karakterizasyon sonuçları elde edilir ve incelenen özelliğin cihaz performansına etkisi araştırılarak deneysel sonuçlarla karşılaştırılması amacıyla kullanılabilir. Güneş hücreleri için Jsc, Voc, FF, PCE gibi fotovoltaiik parametrelerinin değişimi incelenebilir (Gürlek 2019).

SCAPS-1D, temel yarı iletken denklemlerini kullanarak, elektronlar ve boşluklar için Poisson denklemlerini, J-V grafiğini elde etmek içinse elektron-boşluk süreklilik denklemlerini ve elektron-boşluk taşıyıcı denklemlerini çözmektedir (Mouchou et al. 2021). Poisson denklemi Denklem 3.8'deki gibidir (Mouchou et al. 2021).

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = \frac{e}{\epsilon_0 \epsilon_r} (p(x) - n(x) + N_D - N_A + \rho_p - \rho_n) \quad (3.8)$$

Denklem 3.8'de $\varphi(x)$ elektrostatik potansiyeli, e elektrik yükünü, ϵ_0 vakum geçirgenliğini ve ϵ_r bağıl geçirgenliği p ve n sırasıyla boşluk ve elektron konsantrasyonlarını, N_D ve N_A donör ve akseptör konsantrasyonlarını ρ_p ve ρ_n sırasıyla boşlukların ve elektronların dağılımını ifade etmektedir.

Denklem 3.9'da elektron süreklilik ve Denklem 3.10'da ise boşluk süreklilik denklemleri verilmektedir.

$$\frac{dJ_n}{dx} = G - R \quad (3.9)$$

$$\frac{dJ_p}{dx} = G - R \quad (3.10)$$

Bu denklemlerde J_n ve J_p elektron ve boşlukların oluşturduğu akım yoğunluklarını, R rekombinasyon oranını ve G ise jenerasyon oranını ifade etmektedir.

Yarı iletkenlerdeki sürüklenme ve difüzyon olayları taşıyıcıları hareketlendirir ve akım oluşumuna neden olur. Oluşan elektron ve boşluk akım yoğunlukları, Denklem 3.11 ve 12'deki gibi ifade edilebilir. Denklem 3.11'de elektron taşıyıcı denklemi ve Denklem 3.12'de ise boşluk taşıyıcı denklemi verilmiştir.

$$J_n = D_n \frac{dn}{dx} + \mu_n n \frac{d\phi}{dx} \quad (3.11)$$

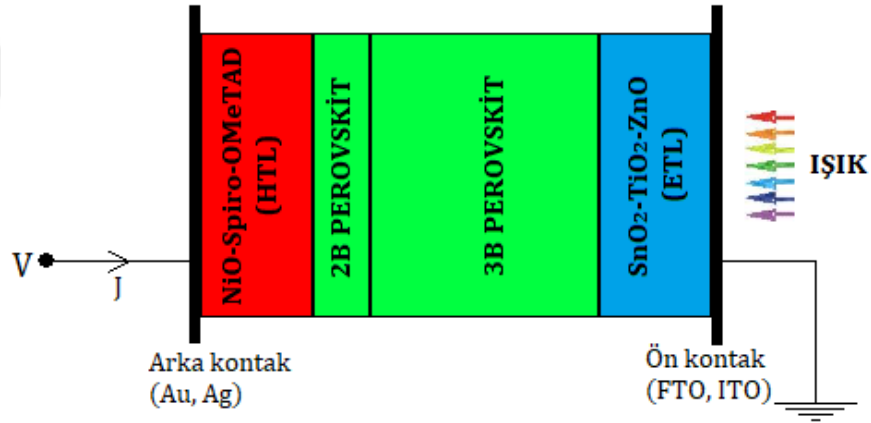
$$J_p = D_p \frac{dp}{dx} + \mu_p p \frac{d\phi}{dx} \quad (3.12)$$

Denklemlerde D_n , D_p sırasıyla elektron ve boşluk difizyon katsayısını μ_n , μ_p ise elektron ve boşluk mobilitelerini ifade eder (Mouchou et al. 2021).

4. ARAŞTIRMA BULGULARI ve TARTIŞMA

Bu bölümde, perovskit güneş hücresinin yapısında kullanılabilecek farklı ETL ve HTL malzemelerinin karşılaştırmalı analiz sonuçları, 3B perovskit katman kalınlığının değişimi ve farklı değerlere sahip kusur yoğunluklarının etkisi, V_{oc} , J_{sc} , FF ve PCE parametreleri üzerinden sunulmuştur. Ayrıca, 2B perovskit tabakasının kalınlık değişiminin güneş hücrelerinin kararsızlık problemleri üzerindeki etkisi değerlendirilmiştir. Literatürden elde edilen parametre değerleri ile yapı için en uygun ETL ve HTL malzemeleri seçilmiştir. Soğurucu katmanlarda 3B perovskit malzeme için $MAPbI_3$ kullanılırken 2B perovskit malzeme için BA_2PbI_4 kullanılmıştır.

FTO/ETL/3B perovskit/2B perovskit/HTL/Au yapı için karşılaştırılan ETL (Spiro-OMeTAD, NiO) ve HTL (SnO_2 , TiO_2 , ZnO) katman malzemeleri yapı içerisinde Şekil 4.1'de gösterilmiştir.



Şekil 4.1. Simülasyonda kullanılan perovskit güneş hücresinin yapısı

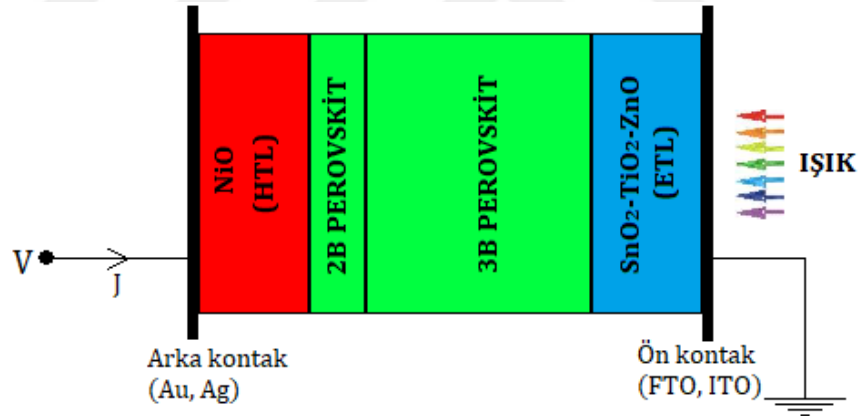
Tüm simülasyonlar, SCAPS-1D kullanılarak AM1.5G güneş spektrumu aydınlatması (1000 W/m^2) ile ve 300 K sıcaklığı için gerçekleştirilmiştir. Işınımsal ve Auger rekombinasyonu derin kusur yoğunluğuyla değişmediğinden bu çalışmadaki simülasyonlarda, Shockley-Read-Hall (SRH) rekombinasyonu dikkate alınmıştır. Farklı malzeme performanslarına ait simülasyon ile elde edilen sonuçlar kullanılarak optimum güneş hücre tasarımı oluşturulmuştur. ETL ve HTL malzemelerinin karşılaştırılmasında literatürdeki çalışmalardan elde edilen parametre değerlerinde sabit kalınlık değerleri

kullanılmıştır. 3B perovskit ve 2B perovskit malzemelerin kalınlık etkisi analizinde ise bu katmanlara ait parametre kalınlık değerleri değişkenlik göstermiştir.

4.1. Simülasyon Sonuçları

4.1.1. ETL katman seçimi

Simülasyon programında FTO/ETL/3B perovskit/2B perovskit/HTL/Au güneş hücresi yapısında uygun ETL katman malzemesini bulmak için 2B perovskit 20 nm’de, 3B perovskit 390 nm’de ve HTL katman malzemesi olan NiO 75 nm’de parametre değerleri sabit tutulmuştur. Güneş hücresi yapılarında en çok tercih edilen ETL malzemeleri olarak TiO_2 , ZnO ve SnO_2 kullanılmış, karşılıklı olarak analizleri sağlanmış ve elde edilen sonuçlar karşılaştırılmıştır. Farklı ETL malzemelerinin karşılaştırmasında kullanılan güneş hücresinin yapısı Şekil 4.2’de verilmiştir.



Şekil 4.2. Farklı ETL katmanlar için perovskit güneş hücresinin yapısı

ETL ve HTL malzemesinin seçiminde çalışmalardan elde edilen Çizelge 4.1'deki parametrelerde sabit kalınlık değerleri kullanılmıştır. 3B perovskit ve 2B perovskit katman malzemelerinin kalınlık analizinde ise 2B perovskit ve 3B perovskit katman kalınlık değerleri değişken alınmıştır.

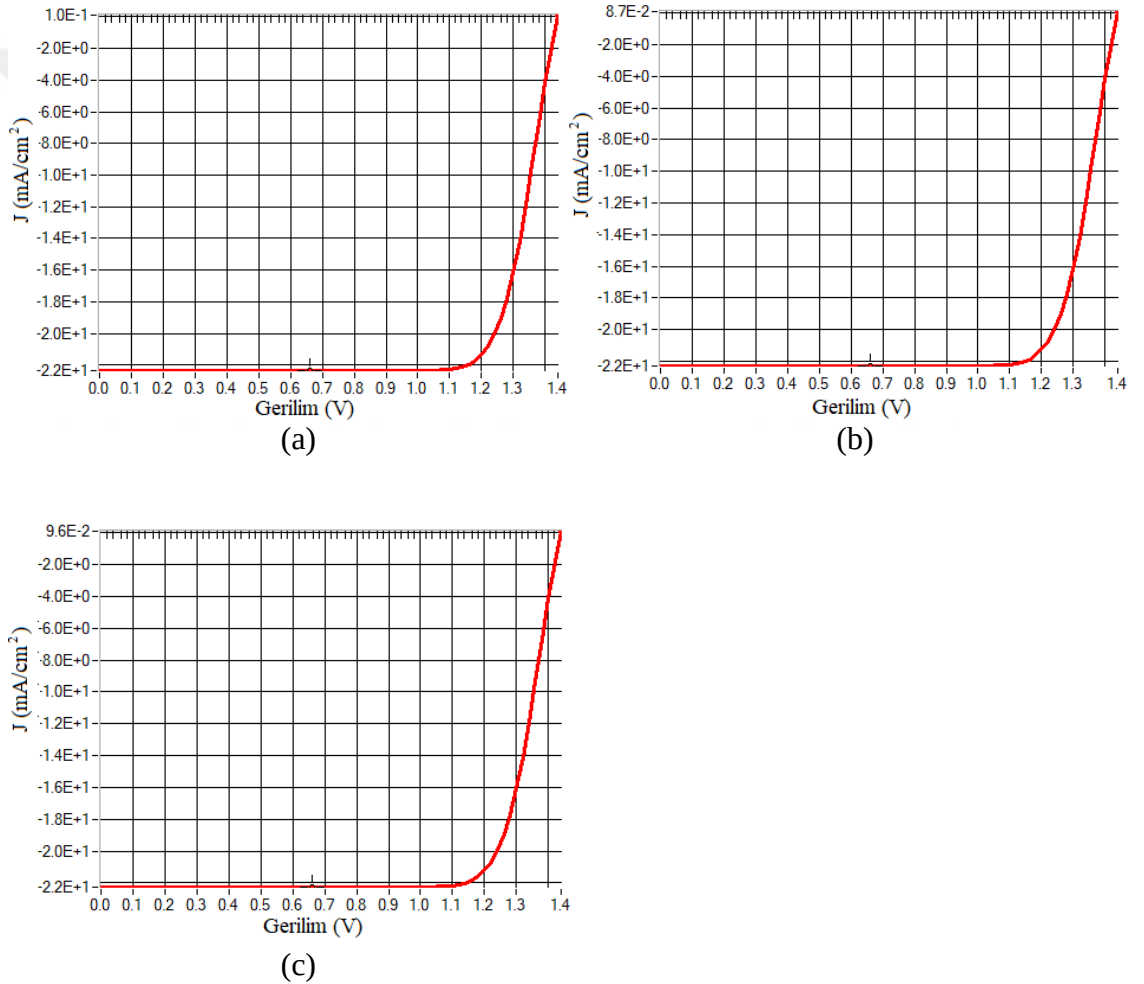
ETL katman malzemeleri olan TiO_2 , ZnO ve SnO_2 (Rahman et al. 2019) için, HTL katman malzemesi olan NiO (Zhou et al. 2014), Spiro OMeTAD (Karthick et al.

2021) ve soğurucu katmanlar olan 2B perovskit BA_2PbI_4 ve 3B perovskit MAPbI_3 (Kumar et al. 2021) için kullanılan parametreler Çizelge 4.1'deki gibidir.

Çizelge 4.1. NiO, Spiro-OMeTAD (HTL), 2B-3B soğurucu katmanlar ve TiO_2 , ZnO, SnO_2 ETL'e ait parametreler.

Parametreler	2B	3B	NiO	Spiro-OMeTAD	TiO_2	ZnO	SnO_2
E_g (eV)	2,40	1,55	3,7	2,9	3,3	3,2	3,6
Kalınlık (nm)	20 (Değişken)	390 (Değişken)	75	150	80	80	80
Elektron ilgisi- E_{ea} (eV)	3,0	3,9	1,5	2,2	4,2	4,10	3,93
Dielektrik sabiti (ϵ)	5,0	6,51	12	3	10	8,1	8
İletim bandındaki durum yoğunluğu- N_c ($1/\text{cm}^3$)	$1,01 \times 10^{18}$	$2,05 \times 10^{18}$	9×10^{17}	$2,2 \times 10^{19}$	$2,5 \times 10^{18}$	$4,5 \times 10^{18}$	$3,16 \times 10^{18}$
Valans banttaki durum yoğunluğu- N_v ($1/\text{cm}^3$)	$1,01 \times 10^{19}$	$1,81 \times 10^{19}$	4×10^{18}	$2,2 \times 10^{19}$	1×10^{18}	1×10^{18}	$2,5 \times 10^{19}$
Elektron termal hızı (cm/s)	$1,01 \times 10^7$	$1,01 \times 10^7$	$1,01 \times 10^7$	$1,01 \times 10^7$	$1,01 \times 10^7$	$1,01 \times 10^7$	$1,01 \times 10^7$
Boşluk termal hızı (cm/s)	$1,01 \times 10^7$	$1,01 \times 10^7$	$1,01 \times 10^7$	$1,01 \times 10^7$	$1,01 \times 10^7$	$1,01 \times 10^7$	$1,01 \times 10^7$
Donör yoğunluğu N_D (cm^{-3})	0	$1,1 \times 10^{17}$	0	0	1×10^{19}	1×10^{19}	1×10^{19}
Alıcı yoğunluğu N_A (cm^{-3})	$1,5 \times 10^{17}$	$1,1 \times 10^{14}$	$1,1 \times 10^{17}$	1×10^{18}	0	0	0
Elektron mobilitesi - μ_e (cm^2/Vs)	$2,0 \times 10^{-4}$	2	$1,1 \times 10^2$	1×10^{-4}	0,1	300	15
Boşluk mobilitesi - μ_b (cm^2/Vs)	$2,0 \times 10^{-4}$	2	$1,1 \times 10^2$	1×10^{-4}	0,1	1	0,1

En iyi performansı elde etmek için, ETL katmanının FTO alt katmanını tamamen kaplaması gerekmektedir, ancak aynı zamanda yüksek seri direnç oluşturmaması için yeterince ince olmalıdır (Jiang et al. 2017). Bu çalışmada, ETL katman kalınlıkları 80 nm olarak belirlenmiştir. Her bir ETL malzemesi için seçilen aynı kalınlık değerinde hücre performansı J-V grafiği üzerinden karşılıklı olarak analiz edilmiştir. Perovskit güneş hücresi yapısı içerisinde SnO_2 'nin ETL malzemesi olarak seçilmesi durumunda Şekil 4.3 (a)'da, TiO_2 'nin ETL malzemesi olarak seçilmesi durumunda Şekil 4.3 (b)'de ve ZnO 'nun ETL malzemesi olarak seçilmesi durumunda Şekil 4.3 (c)'de gösterilen J-V grafikleri elde edilmiştir.



Şekil 4.3. (a) SnO_2 ETL katmanı, (b) TiO_2 ETL katmanı, (c) ZnO ETL katmanına sahip yapılar için J-V grafikleri.

Simülasyon programı kullanılarak farklı ETL malzemelerine ait J-V grafikleri elde edilmiştir. Her bir ETL malzemesi için elde edilen açık devre gerilimi, kısa devre akımı, dolgu faktörü ve güç dönüşüm verimliliği üzerinden ETL malzemeleri karşılıklı olarak analiz edilmiştir.

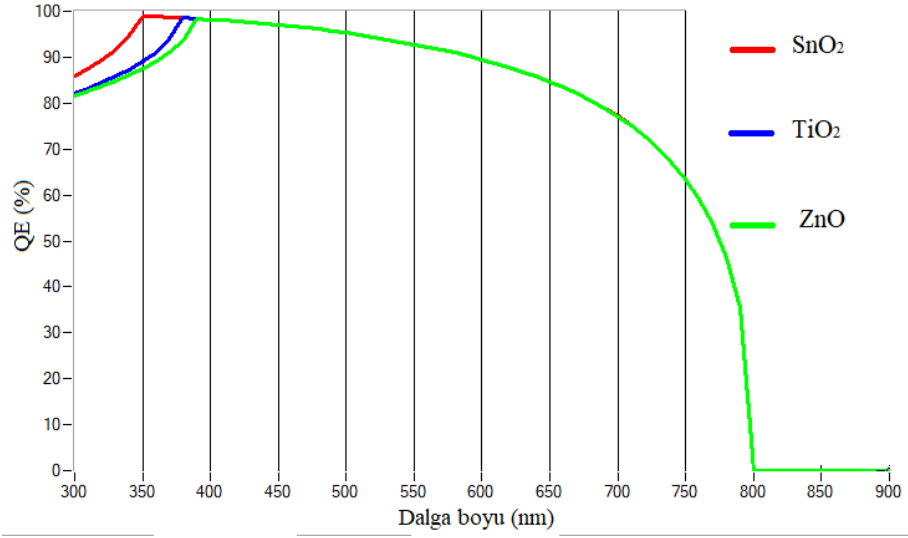
ETL katmanı olarak SnO₂, TiO₂ ve ZnO kullanılması durumunda elde edilen açık devre gerilimi, kısa devre akımı, dolgu faktörü ve güç dönüşüm verimliliği değerleri Çizelge 4.2’ deki gibidir.

Çizelge 4.2. Farklı ETL katmanları için elde edilen sonuçlar

ETL	Voc (V)	Jsc (mA/cm ²)	FF (%)	PCE (%)
SnO ₂	1,43	22,35	79,77	25,65
TiO ₂	1,43	22,29	79,66	25,56
ZnO	1,43	22,27	79,64	25,52

Elde edilen sonuçlar çok benzer olsa da SnO₂ malzemesinin kullanılması durumunda tüm durumlar için daha yüksek J_{sc} , FF ve PCE değerleri elde edilmiştir. SnO₂’nin, MAPbI₃ ile daha iyi bant hizalamasına sahip olması daha iyi sonuçların elde edilmesini sağlamıştır. Ayrıca, uygun bant hizalaması, hücrenin daha yüksek kuantum verimliliğini oluşturmasını sağlayan taşıyıcı toplama verimliliğini artırmıştır.

SnO₂’nin iyi bant hizalaması sayesinde daha yüksek V_{oc} , FF ve PCE sahip olması literatürle uyumludur (Rahman et al. 2019). ETL katmanı olarak SnO₂, TiO₂ ve ZnO kullanılması durumunda QE’nin dalga boyu ile değişimi Şekil 4.4’te gösterildiği gibidir.

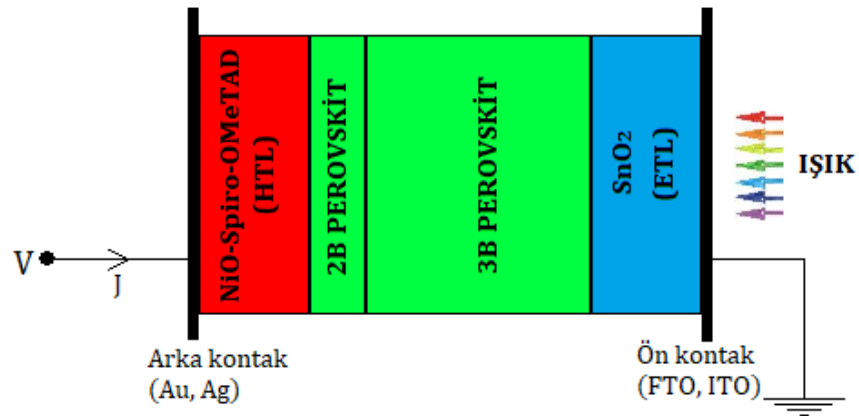


Şekil 4.4. Farklı ETL malzemeleri için QE'nin dalga boyu ile değişimi

Simülasyon sonuçları yapının 300-400 nm dalga boyu aralığında yüksek kuantum verimliliği oluşturduğunu göstermektedir. ETL katmanı olarak SnO₂ kullanılması durumunda en iyi sonuç elde edilmiştir.

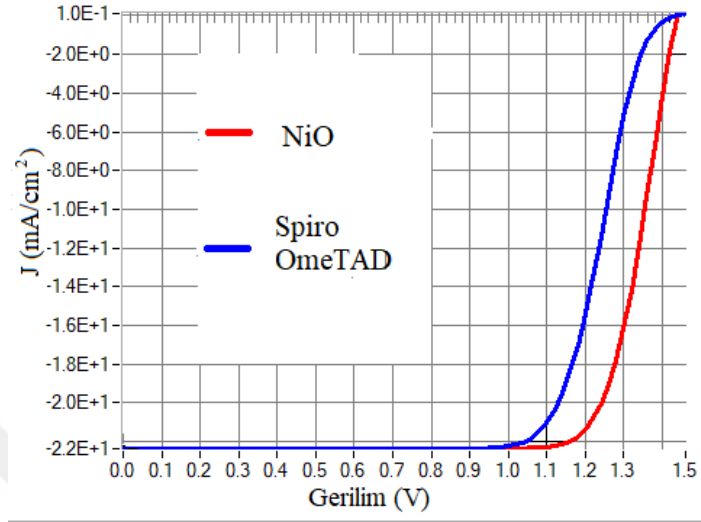
4.1.2. HTL katman seçimi

SnO₂'nin ETL katmanı olarak kullanıldığı yapıda organik HTL (Spiro OMeTAD) ve inorganik HTL (NiO) katmanları kullanılarak güneş hücresinin performansı analiz edilmiştir. Farklı HTL katmalarının simülasyonunda kullanılan yapı Şekil 4.5'de gösterilmektedir.



Şekil 4.5. Farklı HTL katmanları için perovskit güneş hücresinin yapısı

Perovskit yapıda Spiro-OMeTAD ve NiO'nun HTL olarak seçilmesi durumunda, Çizelge 4.1'de belirtilen parametre değerlerine karşılık, Şekil 4.6'da gösterilen J-V grafikleri elde edilmiştir.



Şekil 4.6. Spiro-OMeTAD ve NiO'nun HTL katmanı olarak kullanılması durumunda elde edilen J-V grafikleri.

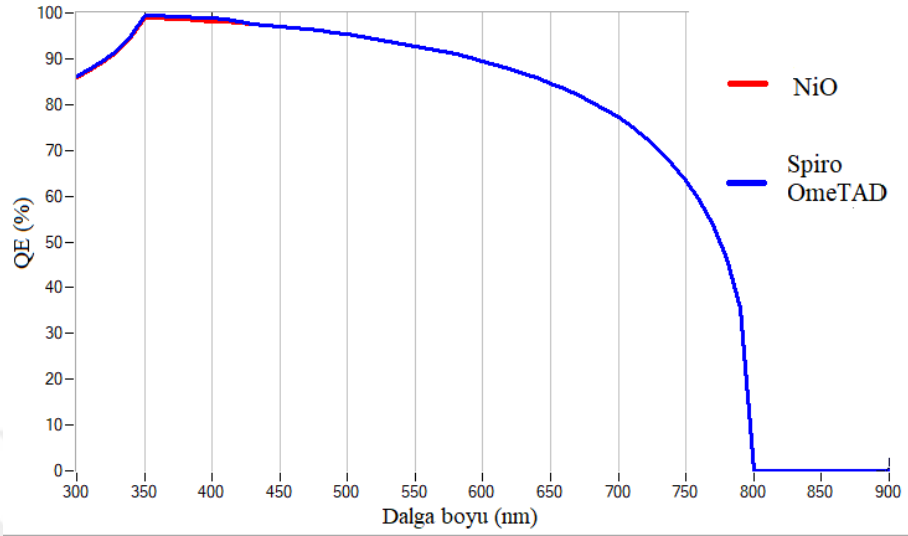
Çizelge 4.3'de Spiro OMeTAD ve NiO HTL tabakaları için elde edilen sonuçlar gösterilmektedir. Sonuçlar, NiO'nun 2B ve 3B perovskit katmanla daha uyumlu oluşu ve yüksek bant aralığı nedeniyle özellikle *FF* ve *PCE* değerlerinin Spiro OMeTAD'a göre daha iyi sonuçlar oluşturduğunu göstermektedir.

Çizelge 4.3. Spiro-OMeTAD ve NiO'e HTL katmanları için elde edilen sonuçlar

HTL	Voc (V)	Jsc (mA/cm ²)	FF (%)	PCE (%)
Spiro-OMeTAD	1,44	22,35	72,09	23,21
NiO	1,43	22,35	79,77	25,65

Spiro-OMeTAD'ın düşük performansının bir nedeni de bu malzemedeki düşük boşluk mobilitesidir (1×10^{-4} cm²/Vs). Literatürde yapılan çalışmalarda da NiO, Spiro OMeTAD'a göre daha iyi sonuçlar vermiştir (Casas et al. 2017). Ayrıca literatüre uyumlu olarak inorganik HTL katmanı (NiO) kullanıldığında cihazın verimliliğinin arttığı görülmüştür. Literatüre göre inorganik HTL katmanı iyi stabilite, yüksek şeffaflık

ve bant hizalama özellikleri de göstermektedir (Jayan and Sebastian 2021). Farklı HTL katmanları için QE 'nin dalga boyu ile değişimi Şekil 4.7'de gösterildiği gibidir.



Şekil 4.7. Farklı HTL katmanları için QE 'nin dalga boyu ile değişimi

Şekil 4.7'ye göre Spiro-OMeTAD ve NiO HTL katmanları içeren yapılar 350 nm dalga boyunda yüksek QE değeri oluşturmakta ve dalga boyuna bağlı olarak QE değerleri benzer biçimde değişmektedir.

4.1.3. 3B perovskit katman kalınlığının etkisi

FTO/ETL (SnO_2)/3B perovskit/2B perovskit/HTL (NiO), yapıya sahip perovskit güneş hücresinde, 3B perovskit MAPbI_3 katman kalınlıklarının bu tez çalışması için sınır değerleri literatürde deneysel çalışmalardan elde edilen değerlere göre belirlenmiştir. Literatürde yer alan deneysel çalışmalar incelendiğinde 3B perovskit kalınlığının 90 nm ve 900 nm aralığında üretilebildiği görülmüştür (Yadav et al. 2023; Lee et al. 2023). Simülasyonlarda 3B MAPbI_3 katman kalınlığı 90 nm ve 900 nm aralığında seçilmiş ve 3B MAPbI_3 katman kalınlık değişiminin güneş hücresinin performansı üzerine etkisi incelenmiştir. 3B perovskit katmanının kalınlık etkisi incelenirken 2B perovskit katman kalınlığı Çizelge 4.1'deki gibi 20 nm'de sabit olarak alınmıştır. V_{oc} , J_{sc} , FF ve PCE değerleri Çizelge 4.4' de gösterildiği gibi elde edilmiştir.

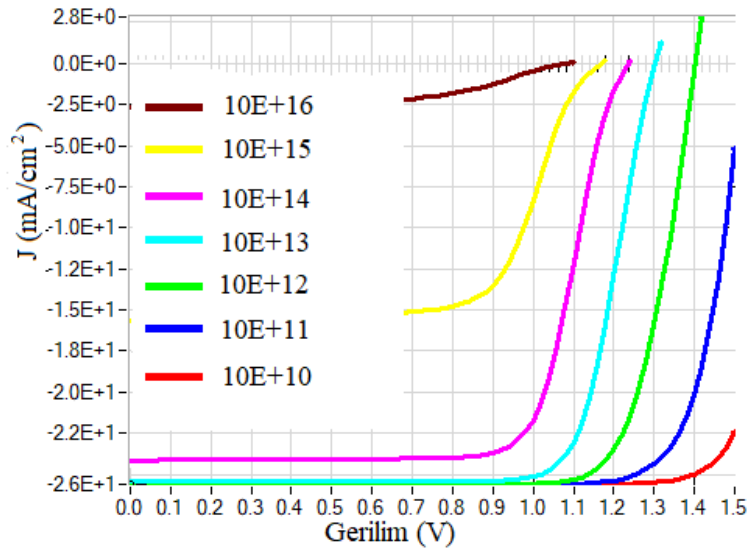
Çizelge 4.4. 3B provskit katman kalınlığının değiştirilmesi ile elde edilen Voc, Jsc, FF ve PCE değerleri.

3B PSC katman kalınlığı (nm)	Voc (V)	Jsc (mA/cm ²)	FF (%)	PCE (%)
90	1,47	10,68	81,98	12,93
200	1,46	17,30	80,57	20,36
300	1,44	20,57	80,03	23,84
400	1,43	22,50	79,75	25,81
500	1,42	23,69	79,59	26,95
600	1,42	24,46	79,49	27,65
700	1,41	24,98	79,44	28,08
800	1,40	25,34	79,40	28,34
900	1,40	25,59	79,38	28,50

Voc ve FF, seri direncin artması nedeniyle kalınlık arttıkça azalmıştır. Soğurucu katman kalınlığının artması ışık Emilimi artıracak için akım yoğunluğunu Jsc, kalınlığın artışı ile artmıştır. Kalınlığın 90 nm'den 200 nm'ye artırılması ile J_{SC}'de önemli bir artış görülmüş, 500 nm kalınlıktan sonra J_{SC}'deki artış daha da yavaşlamıştır. İnce katmanlarda taşıyıcıların daha kısa mesafelerde hareket etmesi nedeniyle Jsc artar. Ancak kalın katmanlarda, rekombinasyon ve optik kayıpların artması nedeniyle bu artış sınırlanır ve doyma noktasına ulaşır. PCE'nin maksimum olduğu değer kalınlığın 900 nm olduğu durumda ortaya çıkmıştır. 3B katmanın kalınlık artışıyla elde edilen sonuçlar, literatürdeki çalışmalarla uyumludur (Rahman et al. 2019; Kumar et al. 2021).

4.1.4. Kusur yoğunluğu etkisi

Perovskit hücre modeli, 3B-MAPI katmanındaki derin kusur yoğunluğunu değiştirerek simüle edilmiştir. 2B perovskit katmanı çok düşük nokta ve arayüzey kusur yoğunluğu göstermektedir (Heo et al. 2019). Dolayısıyla 2B perovskit katmanına herhangi bir kusur dahil edilmemiştir. 3B perovskit katman kalınlığı en iyi sonucu veren 900 nm seçilmiştir. 3B-MAPI katmanında kusur yoğunluğu değerinin 10¹⁰ cm⁻³ ile 10¹⁶ cm⁻³ arasındaki değişimi sonucunda elde edilen J-V grafiği Şekil 4.8'de sunulmaktadır.



Şekil 4.8. 3B-MAPI katmanında farklı derin kusur yoğunluklarına ait J-V grafikleri

Kusur yoğunluğuna bağlı olarak güneş hücresinin V_{oc} , J_{sc} , FF ve PCE değerlerinin değişimi Çizelge 4.5’deki gibidir.

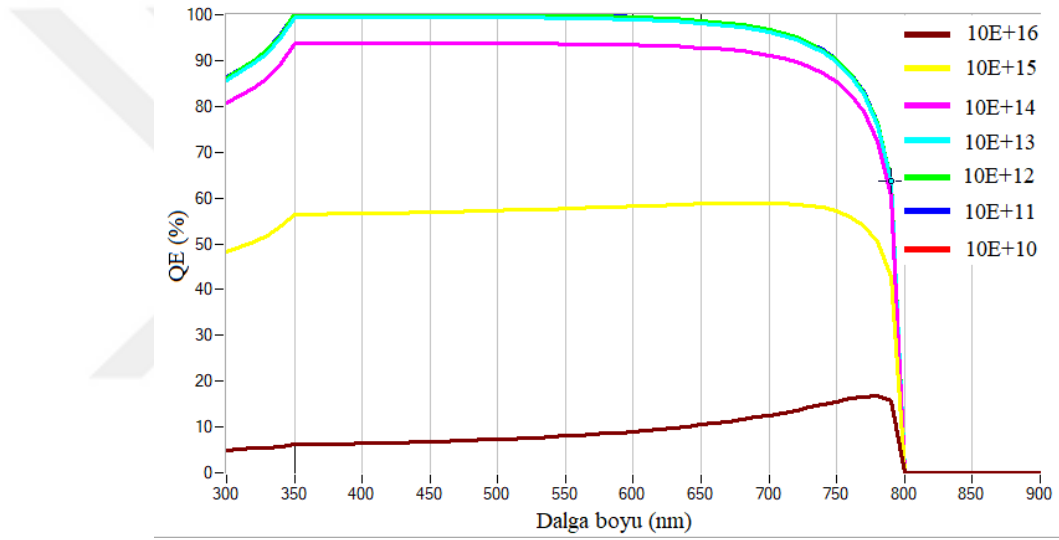
Çizelge 4.5. Farklı kusur yoğunlukları için elde edilen V_{oc} , J_{sc} , FF ve PCE değerleri

Kusur Değerleri	V_{oc} (V)	J_{sc} (mA/cm ²)	FF (%)	PCE (%)
1E+10	1,72	25,60	77,50	34,22
1E+11	1,51	25,60	79,94	31,08
1E+12	1,40	25,59	79,38	28,50
1E+13	1,30	25,45	78,47	26,03
1E+14	1,23	24,13	74,21	22,13
1E+15	1,17	16,60	66,91	12,22
1E+16	1,08	2,6	51,98	1,46

Çizelge 4.5’e göre hücre modelinin V_{oc} değeri, 3B-MAPI katmanındaki derin kusur yoğunluğunun artışı ile düşmüştür. Derin kusurlar, malzemenin performansını sınırlayan temel faktörlerdir. Bu durum, 3B-MAPI için de geçerlidir. Dolayısıyla, derin kusur yoğunluğunun yüksek olması güneş hücresi performansının düşmesine neden olmaktadır (Brakkee and Williams 2020). FF dolgu faktörü değeri 10^{11} – 10^{13} cm⁻³ derin kusur yoğunluğu aralığında önemli bir değişiklik göstermemiştir. Ayrıca, yüksek V_{oc} ve FF elde etmek için derin kusur yoğunluğunun 10^{13} cm⁻³ değerini aşmaması gerektiği görülmektedir. Güneş hücresinin J_{sc} akım yoğunluğu, 10^{14} cm⁻³ derin kusur

yoğunluğuna kadar önemli bir değişiklik göstermemiştir. Elde edilen sonuçlar literatürle uyumludur (Adihetty et al. 2021). Voc ve FF değerlerinin 10^{10} - 10^{13} cm^{-3} aralığında yüksek çıkması kusur yoğunluğunun bu aralıkta kabul edilebilir değer olarak elde edildiğini göstermiştir. Ayrıca, halojenür perovskitlerin tek kristalli durumlarında kusur yoğunluklarının 10^{12} cm^{-3} civarında olduğu literatürde rapor edilmiştir (Siekman et al. 2021). Elde edilen simülasyon sonuçları literatürle uyumludur.

3B-MAPI katmanının kusur yoğunluğunun 10^{10} - 10^{16} cm^{-3} aralığında değişimi ile QE değerinin dalga boyuna bağlı değişimi Şekil 4.9'da gösterildiği gibi elde edilmiştir.



Şekil 4.9. 3B-MAPI katman için QE değerinin dalga boyu ile değişimi

Kusur yoğunluğunun artması kuatum verimliliği üzerinde olumsuz etki göstermiştir. Şekil 4.9'da gösterildiği gibi kusur yoğunluğu 10^{10} - 10^{14} cm^{-3} aralığında benzer sonuçlar gösterirken 10^{14} cm^{-3} 'ten sonra QE'de belirgin bir düşüş gözlemlenmiştir. Kusurlar, güneş hücrelerindeki ışığın emilmesiyle üretilen yük taşıyıcıları için rekombinasyon merkezlerini oluşturmaktadır. Kusur yoğunluğu arttığında, daha fazla rekombinasyon merkezinin varlığına bağlı olarak SRH rekombinasyon hızı da artar. Sonuç olarak, güneş hücresinin terminallerine daha az yük taşıyıcısı ulaşabilir (Borah et al. 2024).

4.1.5. 2B perovskit katman kalınlığının etkisi

2B BA_2PbI_4 katmanı üzerine literatürde yer alan deneysel çalışmalar incelendiğinde 2B perovskit kalınlığının 9 nm ve 337 nm aralığında üretilebildiği görülmüştür (Jang et al. 2021; Wang et al. 2023). 2B perovskit kalınlığının çok yüksek olması durumunda cihaz performansı düşeceği için simülasyonlarda 2B BA_2PbI_4 katman kalınlığı 9 nm ve 140 nm aralığında seçilmiş ve kalınlık değişiminin güneş hücresinin performansı üzerine etkisi incelenmiştir. 2B perovskit katman kalınlığının değiştirilmesi ile elde edilen sonuçlar Çizelge 4.6’da sunulduğu gibidir.

Çizelge 4.6. 2B perovskit katmanının farklı kalınlıkları için elde edilen sonuçlar

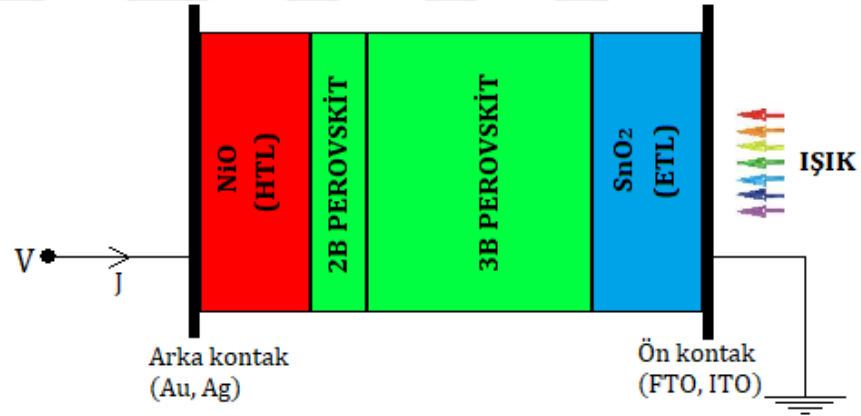
2B PSC katman kalınlığı (nm)	Voc (V)	Jsc(mA/cm ²)	FF	PCE (%)
9	1,40	25,59	79,59	28,58
30	1,40	25,59	79,46	28,53
50	1,40	25,59	78,98	28,36
70	1,40	25,59	78,27	28,10
90	1,40	25,59	77,57	27,85
120	1,40	25,59	76,50	27,47
140	1,40	25,59	75,78	27,21

Çizelge 4.6’dan görüldüğü gibi 2B katmanının kalınlığının artması ile yük taşıyıcı rekombinasyonu artmış, artan kalınlık değerleri için FF ve PCE değerleri düşmüştür.

En iyi güneş hücresi performansı 2B katman kalınlığının 9 nm olduğu durum için elde edilmiştir. Bu durum, 2B perovskit katmanının, 3B perovskit katmanına göre daha düşük taşıyıcı mobilitesine ve difüzyon uzunluğuna sahip olması nedeniyle 2B perovskitin kalınlığı arttıkça, üretilen taşıyıcıların rekombinasyon olasılığının artması ile açıklanabilir (Kumar et al. 2021). Ancak, ince 2B perovskit tabakası yüzey tuzaklarını pasifleştirir ve güneş hücresini tuzakların etkilerine, neme, oksijene ve diğer çevresel faktörlere karşı koruma görevi görür (Kumar et al. 2022).

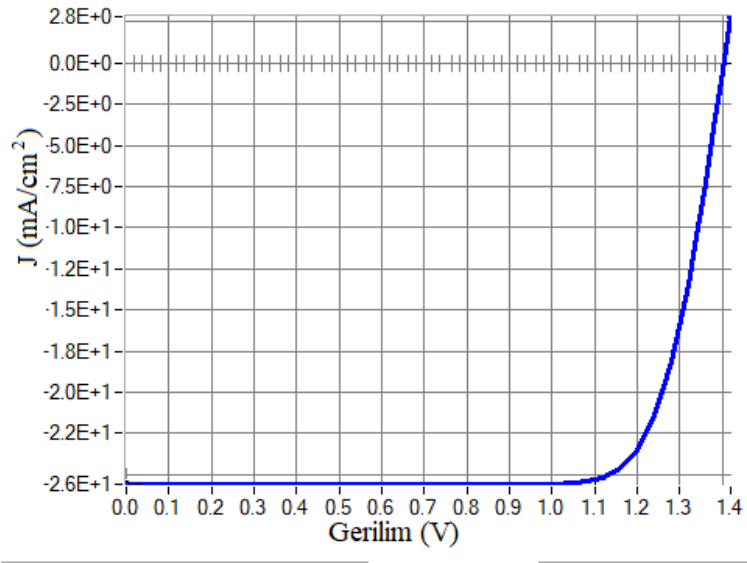
4.2. Optimum Cihaz Yapısı

SCAPS-1D kullanılarak FTO/SnO₂/3B perovskit/2B perovskit/NiO/Au katmanlarından oluşan NIP yapıya sahip optimum güneş hücresi oluşturulmuştur. Katmanlarda kullanılan malzemelerin karşılıklı analizlerinde 75 nm kalınlığındaki NiO, HTL katmanı olarak, 80 nm kalınlığındaki SnO₂ ise ETL katmanı olarak en uygun katman malzemeleri seçilmiştir. 2B perovskit BA₂PbI₄'ün ve 3B perovskit MAPbI₃'ün kalınlık etkisi yapı içerisinde incelenmiş 2B perovskit kalınlığı 9 nm'de, 3B perovskit kalınlığı ise 900 nm'de en iyi sonuçları vermiştir. 3B perovskit katmandaki kusur yoğunluğu değeri 10¹⁰-10¹⁶ cm⁻³ aralığında incelenmiş ve 10¹² cm⁻³ değeri kusur yoğunluğu değeri olarak ele alınmıştır. Şekil 4.10'da elde edilen optimum güneş hücresi yapısı gösterilmektedir.



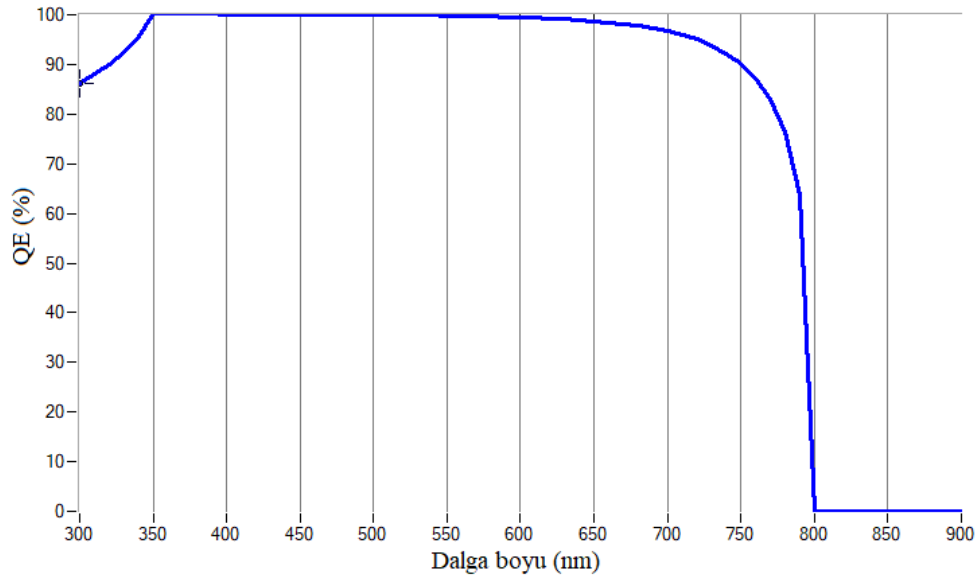
Şekil 4.10. Optimum 2B/3B perovskit güneş hücresi yapısı

Optimum 2B/3B güneş hücresi yapısına ait J-V grafiği Şekil 4.11'de gösterilmektedir.



Şekil 4.11. Optimum 2B/3B perovskit güneş hücresine ait J-V grafiği

2B katmanlar genellikle yüzey tuzaklarını pasifleştirerek stabiliteyi artırır ve taşıyıcı kayıplarını azaltır. Dolayısıyla, 2B/3B perovskit güneş hücreleri, her iki malzemenin avantajlarını birleştirerek performansı artırabilir. Bu durumda hem yüksek QE değeri hem de daha iyi stabilite elde edilebilir. Şekil 4.12’de optimum 2B/3B perovskit güneş hücresine ait QE, dalga boyu değişimi gösterilmektedir.



Şekil 4.12. Optimum 2B/3B perovskit güneş hücresine ait QE, dalga boyu değişimi

Şekil 4.12’e göre optimum 2B/3B perovskit güneş hücresinden 350 nm dalga boyunda maksimum QE değeri elde edilmiştir. Optimum perovskit güneş hücresinin

simülasyonu sonucunda V_{oc} 1,40 V, J_{sc} 25,59 mA/cm², FF %79,59 ve PCE %28,58 olarak elde edilmiştir.



5. SONUÇ ve ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında, FTO/ETL/3B Perovskit/2B Perovskit/HTL/Au yapıdaki bir perovskit güneş hücresinin performansı SCAPS-1D yazılımı kullanılarak incelenmiş ve yüksek performans gösteren bir perovskit güneş hücresi önerilmiştir. Yapı içinde yüksek performans sergileyen 3B perovskit olan MAPbI₃ ve 3B perovskitin kusur durumlarını pasifleştiren ve stabilitesini artıran 2B perovskit olan BA₂PbI₄ soğurucu katmanları kullanılmıştır.

ETL katmanının etkisinin araştırılması için yapılan çalışmalarda en sık kullanılan SnO₂, TiO₂ ve ZnO malzemeleri karşılaştırılmıştır. Seri direncin yüksek olmaması için ETL katman kalınlığı 80 nm olarak belirlenmiştir. Yapıda, soğurucu katmanlar olan 3B-2B perovskit ve HTL (NiO) malzemesi sabit tutularak farklı ETL malzemelerine ait JV grafikleri elde edilmiştir. *Voc*, *Jsc*, *FF* ve verim sonuçları incelendiğinde, aynı kalınlıktaki SnO₂, TiO₂ ve ZnO için yakın değerler elde edilmesine rağmen, en iyi sonuçların SnO₂ için elde edildiği görülmüştür. Bu durum, SnO₂ ve 3B perovskit katmanları arasındaki iyi bant hizalaması ile açıklanabilir. Ayrıca, QE sonuçlarına göre SnO₂ kullanılan yapı daha düşük dalga boylarında, TiO₂ ve ZnO kullanılan yapılara göre daha yüksek QE elde etmesini sağlamıştır.

HTL katmanının etkisinin araştırılması için yapılan çalışmalarda HTL katmanı olarak en sık kullanılan organik Spiro-OMeTAD ve inorganik NiO malzemeleri karşılaştırılmıştır. 3B-2B perovskit yapısı ve ETL malzemesi olarak SnO₂ kullanılmaya devam edilerek simülasyonlar gerçekleştirilmiştir. Literatüre göre HTL katmanı olarak Spiro-OMeTAD sıklıkla kullanılsa da simülasyon sonuçları NiO'nun HTL katmanı olarak daha iyi sonuçlar verdiğini göstermiştir. Spiro-OMeTAD'ın NiO'ya göre daha kötü sonuçlar vermesi Spiro-OMeTAD'ın düşük boşluk mobilitesinden (1×10^{-4} cm²/Vs) kaynaklanmaktadır. Ayrıca, inorganik NiO HTL katmanının yüksek stabilitesi, yüksek şeffaflığı ve iyi bant hizalaması güneş hücresinin verimliliğini arttırmıştır. Spiro-OMeTAD ve NiO'nun HTL katmanı olarak kullanıldığı güneş hücresi yapılarında PCE değerleri sırasıyla %23,21 ve %25,65 olarak elde edilmiştir.

3B perovskit katmanının kalınlık değişiminin etkisi incelendiğinde, kalınlık arttıkça daha fazla ışık Emilimi sağlandığı için *PCE* ve *Jsc* değerlerinin arttığı görülmüştür. *Voc* ve *FF* değerleri ise kalınlık arttıkça seri direncin artması nedeniyle azalmıştır. Özellikle kalınlığın artışı ile ışık daha etkili soğurulacağı için *Jsc* değeri hızlı bir artış gösterir, ancak kalınlığın çok yükseltilmesiyle *Jsc* değerinin artış hızı azalmaktadır. Ayrıca, kusur yoğunluğunun 3B MAPI perovskit katman üzerine etkisi 10^{10} - 10^{16} cm⁻³ aralığında değiştirilmesiyle incelenmiştir. Işınım ve Auger rekombinasyonu derin kusur yoğunluğuyla değişmediğinden, güneş hücresinin simülasyonunda Shockley-Read-Hall rekombinasyonunun etkisi dikkate alınmıştır. Kusur yoğunluğunun artışı, rekombinasyonu artırarak güneş hücresi performanslarını düşürmüştür. Ayrıca, kusur yoğunluğundaki artış, güneş hücresinin QE değeri üzerinde de olumsuz etki oluşturmıştır.

2B BA₂PbI₄ perovskit katman kalınlığının etkisi, katman kalınlığı 9 nm ile 140 nm arasında değiştirilerek incelenmiştir. 2B perovskitin kalınlığı arttıkça performansın düşmesi, taşıyıcıların rekombinasyon olasılığının artırmasıyla açıklanabilir. İnce 2B perovskit, geniş bant aralığına sahip olduğu için elektronların tuzaklara yakalanma ihtimalini azaltır ve güneş hücresini çevresel etmenlerden korur. Dolayısıyla seçilecek olan 2B katmanın düşük kalınlıklarda seçilmesi önerilmiştir. Bu çalışmada en iyi sonuçlar, 2B katman kalınlığının 9 nm olarak seçilmesi durumunda elde edilmiştir. Ayrıca, 2B perovskit malzemenin 3B perovskit katman ile birlikte kullanılmasıyla elde edilen 2B/3B hibrit yapının, perovskit güneş hücrelerinin kimyasal ve termal kararlılık sorunlarına çözüm sağlayabildiği literatürdeki çalışmalardan bilinmektedir.

Simülasyon sonuçları kullanılarak FTO/SnO₂/3B perovskit/2B perovskit/NiO/Au katmanlarından oluşan NIP yapıdaki optimum güneş hücresi oluşturulmuştur. Yapıda 75 nm kalınlığındaki NiO, HTL katmanı olarak, 80 nm kalınlığındaki SnO₂ ise ETL katmanı olarak seçilmiştir. 2B perovskit olan BA₂PbI₄'ün, 3B perovskit olan MAPbI₃ üzerinde kaplama katmanı olarak beraber kullanıldığı yapıda, 2B perovskit kalınlığı 9 nm, 3B perovskit kalınlığı ise 900 nm olarak kabul edilmiştir. 3B perovskit katmandaki kusur yoğunluğu değeri ise 10¹² cm⁻³ olarak ele alınmıştır.

Oluşturulan optimum perovskit güneş hücresinin SCAPS-1D simülasyonu sonucunda, V_{oc} 1,40 V, J_{sc} 25,59 mA/cm², FF %79,59 ve PCE %28,58 değerleri elde edilmiştir. Bu sonuçlar, önerilen güneş hücresi yapısının literatürdeki benzer 2B/3B güneş hücresi çalışmalarına göre oldukça rekabetçi olduğunu göstermektedir.

Son on yılda perovskit güneş hücrelerinin güç dönüşüm verimliliği, önemli ölçüde artış göstermiştir. 2B/3B perovskit güneş hücreleri fotovoltaik alanında devrim niteliğinde yenilikler sunarak yüksek verimlilik ve düşük üretim maliyetleri gibi avantajlar sağlamaktadır. Özellikle 2B katmanların kullanılması ile çözülen stabilite problemi sayesinde kararlı güneş hücreleri oluşturulabilir. Bu teknolojiye dair yapılacak araştırma ve geliştirme çalışmaları ile çeşitli iyileştirmeler sağlanarak, perovskit güneş hücrelerinin daha geniş çapta benimsenmesi sağlanabilir.

KAYNAKLAR

- Adihetty, N. L., Ratnasinghe, D. R., Attygalle, M. L. C., Narayan, S. and Jha, P. K. 2021. The effect of deep defects on the efficiency variation of CH₃NH₃PbI₃ perovskite solar cells. In 2021 Moratuwa Engineering Research Conference (MERCon), 659-663, Moratuwa, Sri Lanka.
- Akın, S. 2019. Yüksek verimli ve uzun dönem kararlı perovskit güneş hücrelerinin üretimi için perovskit/spiro-OMeTAD arayüzeyinin tiol molekülleri ile modifikasyonu. *Avrupa Bilim ve Teknoloji Dergisi*, (17), 727-735.
- Bag, A., Radhakrishnan, R., Nekovei, R. and Jeyakumar, R. 2020. Effect of absorber layer, hole transport layer thicknesses, and its doping density on the performance of perovskite solar cells by device simulation. *Solar Energy*, 196, 177-182.
- Batmunkh, M., Shearer, C.J., Biggsac M.J. and Shapter, J.G. 2015. Nanocarbons for mesoscopic perovskite solar cells. *Journal of Materials Chemistry A*, 3, 9020-9031.
- Borah, C. K., Borah, L. N., Hazarika, S. and Phukan, A. 2024. Modelling and optimization of “n-i-p” structured CdS/MASnI₃/CdTe solar cell with SCAPS-1D for higher efficiency. *Journal of Electronic Materials*, 53, 1942–1955.
- Brakkee R. and M. R. Williams. 2020. Minimizing defect states in lead halide perovskite solar cell materials. *Applied Sciences*, 10, 3061.
- Burgelman, M., Nollet, P. and Degraeve, S. 2000. Modelling polycrystalline semiconductor solar cells. *Thin Solid Films*, 361–362, 527-532.
- Casas, G. A., Cappelletti, M. A., Cédola, A. P., Soucase, B.M and Blancá, E. L. P. 2017. Analysis of the power conversion efficiency of perovskite solar cells with different materials as hole-transport layer by numerical simulations. *Superlattices and Microstructures*, 107, 136-143.
- Danladi, E., Egbugha, A. C., Obasi, R. C., Tasie, N. N., Achem, C. U., Haruna, I. S. and Ezech, L. O. 2023. Defect and doping concentration study with series and shunt resistance influence on graphene modified perovskite solar cell: a numerical investigation in SCAPS-1D framework. *Journal of the Indian Chemical Society*, 100 (5), 101001.
- Dou, Q., Whatley, T., Syed, T., Wei, W. and Wang, H. 2022. Carbon nanomaterials–polymer composites for perovskite solar cells: preparation, properties and applications. *Journal of Materials Chemistry A*, 10 (37), 19211-19230.
- Duan, C. and Dai, J. 2022. Improved p-i-n MAPbI₃ perovskite solar cells via the interface defect density suppression by PEABr passivation. *Opt. Express*, 30 (21), 38104-38114.

- Green, M., Ho-Baillie, A. and Snaith, H. 2014. The emergence of perovskite solar cells. *Nature Photonics*, 8, 507.
- Gürlek, A. K. 2019. MOCVD ile üretilen ince film CDTe güneş hücresi ve mini modül fotovoltaiik cihazlarının performans karakterizasyonu ve SCAPS modellemesi. Doktora Tezi, Çukurova Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Ana Bilim Dalı, 127, Adana.
- Hamri, Y. Z., Bourezig, Y., Medles, M., Ameri, M., Toumi, K., Ameri, I., Al-Douri, Y. and Voon, C. H. 2019. Improved efficiency of Cu (In, Ga) Se₂ thin film solar cells using a buffer layer alternative to CdS. *Solar Energy*, 178, 150-156.
- Heo, S., Seo, G., Cho, K. T., Lee, Y., Paek, S., Kim, S., Seol, M., Kim, S. H., Yun, D. J., Kim, K., Park, J., Lee, J., Lechner, L., Rodgers, T., Chung, J. W., Kim, J. S., Lee, D., Choi, S. H. and Nazeeruddin, M. K. 2019. Dimensionally engineered perovskite heterostructure for photovoltaic and optoelectronic applications. *Advanced Energy Materials*, 9, 1902470.
- Hima, A., Lakhdar, N., Benhaoua, B., Saadoune, A., Kemerchou, I. and Rogti, F. 2019. An optimized perovskite solarcell designs for high conversion efficiency. *Superlattices and Microstructures*, 129, 240-246.
- Huang, L., Hu, Z., Xu, J., Zhang, K., Zhang, J., Zhang, J. and Zhu, Y. 2016. Efficient and stable planar perovskite solar cells with a non-hygroscopic small molecule oxidant doped hole transport layer. *Electrochimica Acta*, 196, 328-336.
- Huang, Y., Yuan, Z., Yang, J., Yin, S., Liang, A., Xie, G., Feng, C., Zhou, Z., Qifan, X., Pan, Y., Huang, F. and Chen, Y. 2023. Highly efficient perovskite solar cells by building 2D/3D perovskite heterojunction in situ for interfacial passivation and energy level adjustment. *Science China Chemistry*, 66 (4), 449–458.
- Jang, Y. W., Lee, S., Yeom, K. M., Jeong, K., Choi, K., Choi, M. and Noh, J. H. 2021. Intact 2D/3D halide junction perovskite solar cells via solid-phase in-plane growth. *Nature Energy*, 6 (1), 63-71.
- Jayan, K. D. and Sebastian, V. 2021. Comprehensive device modelling and performance analysis of MASnI₃ based perovskite solar cells with diverse ETM, HTM and back metal contacts. *Solar Energy*, 217, 40-48.
- Jiang, Q., Zhang, L., Wang, H., Yang, X., Meng, J., Liu, H., Yin, Z., Wu, J., Zhang, X. and You, J. 2017. Enhanced electron extraction using SnO₂ for high-efficiency planar-structure HC(NH₂)₂PbI₃-based perovskite solar cells. *Nat Energy* 2, 16177.
- Jiang, Q., Zhang, X. and You, J. 2018. SnO₂: a wonderful electron transport layer for perovskite solar cells. *Small*, 14 (31), 1801154.
- Jiang, X., Zhang, J., Ahmad, S., Tu, D., Liu, X., Jia, G., Guo, X. and Li, C. 2020. Dion-Jacobson 2D-3D perovskite solar cells with improved efficiency and stability. *Nano Energy*, 75, 104892.

- Kalyani, N. T. and Dhoble, S. J. 2015. Novel materials for fabrication and encapsulation of OLEDs. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 44, 319-347.
- Karthick, S., Boucle, J. and Velumani, S. 2021. Effect of bismuth iodide (BiI₃) interfacial layer with different HTL's in FAPI based perovskite solar cell-SCAPS-1D study. *Sol. Energy*, 218, 157-168.
- Ke, W., Fang, G., Wan, J., Tao, H., Liu, Q., Xiong, L., Qin, P., Wang J., Lei, H., Yang, G., Qin, M., Xingzhong, Z. and Yan, Y. 2015. Efficient hole-blocking layer-free planar halide perovskite thin-film solar cells. *Nat Commun*, 6, 6700.
- Khoshsirar, N. and Md Yunus, N. A. 2013. Numerical simulation of CIGS thin film solar cells using SCAPS-1D. In 2013 IEEE Conference on Sustainable Utilization and Development in Engineering and Technology (CSUDET), 63-67, Selangor, Malaysia.
- Kızıloğlu, V. 2015. Ara bant yapılı güneş pil veriminin ara bandın doluluk oranıyla değişimi. Yüksek lisans tezi. Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Elektrik Elektronik Mühendisliği Ana Bilim Dalı, 59, Ankara.
- Kietzke, T. 2007. Recent advances in organic solar cells. *Advances In OptoElectronics*, 12, 1-15.
- Kim, H., Lee, C., Im, J., Lee, K., Moehl, T., Marchioro, A., Moon, S., Humphry-Baker, R., Yum, J., Moser, J. E., Gratzel, M., Park N. 2012. Lead iodide perovskite sensitized all-solid-state submicron thin film mesoscopic solar cell with efficiency exceeding 9%, *Scientific Reports*, 2-591.
- Koh, T. M., Shanmugam, V., Guo, X., Lim, S. S., Filonik, O., Herzig, E. M., Buschbaum, P. M., Swamy, V., Chien, S. T., Mhaisalkar, S. G. and Mathews, N. 2018. Enhancing moisture tolerance in efficient hybrid 3D/2D perovskite photovoltaics. *Journal of Materials Chemistry A*, 6 (5), 2122-2128.
- Kore, B. P., Zhang, W., Hoogendoorn, B. W., Safdari, M. and Gardner J. M. 2021. Moisture tolerant solar cells by encapsulating 3D perovskite with long-chain alkylammonium cation-based 2D perovskite. *Commun Mater* 2, 100.
- Koide, N., Islam, A., Chiba, Y. and Han, L. 2006. Improvement of efficiency of dye-sensitized solar cells based on analysis of equivalent circuit. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 182 (3), 296-305.
- Kumar, A., Singh, S., Mohammed, M. K. A. and Shalan, A. E. 2021. Effect of 2D perovskite layer and multivalent defect on the performance of 3D/2D bilayered perovskite solar cells through computational simulation studies. *Solar Energy*, 223, 193-201.
- Kumar, A., Singh, S., Srivastava, K., Sharma, A. and Sharma, D. K. 2022. Performance and stability enhancement of mixed dimensional bilayer inverted perovskite

(BA₂PbI₄/MAPbI₃) solar cell using drift-diffusion model. *Sustainable Chemistry and Pharmacy*, 29, 100807.

- Lan, C., Zhou, Z., Wei, R. and Ho, J. C. 2019. Two-dimensional perovskite materials: from synthesis to energy-related applications. *Materials Today Energy*, 11, 61-82.
- Lee, K. S., Kim, Y.-H., Kim, I. S. and Kim, E. K. 2023. Electrical properties and defect analysis of MAPbI₃ thin films grown on TiO₂ layer through a two-step drying process. *Thin Solid Films*, 782, 140018.
- Li, Q., Hao, Y., Cui, Y., Wang, J., Hu, J., Yu, F., Li, X. and Guan, Z. 2022. Computer-aided measurement technology for Cu₂ZnSnS₄ thin-film solar cell characteristics. *Open Physics*, 20 (1), 342-348.
- Liu, Y., Kim, B. J., Wu, H., Boschloo, G. and Johansson, E. M. J. 2021. Efficient and stable FAPbBr₃ perovskite solar cells via interface modification by a low-dimensional perovskite layer. *ACS Applied Energy Materials*, 4 (9), 9276-9282.
- Liu, Z., Chen, Y., Li, J., Yao, W., Luo, T. and Li, D. 2024. Probing local structural phase transition at the surface of (BA)₂PbI₄ via interlayer exciton emission. *Advanced Functional Materials*, 34, 2312074.
- Ma, C., Leng, C., Ji, Y., Wei, X., Sun, K., Tang, L., Yang, J., Luo, W., Li, C., Deng, Y., Feng, S., Shen, J., Lu, S., Du, C. and Shi, H. 2016. 2D/3D perovskite hybrids as moisture-tolerant and efficient light absorbers for solar cells. *Nanoscale*, 43.
- Mandong, A. M. 2019. Design and simulation of single, double, and multi-layer antireflection coating for crystalline silicon solar cell. Yüksek Lisans Tezi, Karadeniz Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Elektrik-Elektronik Mühendisliği Ana Bilim Dalı, 44, Trabzon.
- Meskini, M. and Asgharizadeh, S. 2024. Performance simulation of the perovskite solar cells with Ti₃C₂ MXene in the SnO₂ electron transport layer. *Scientific Reports*, 14, 5723.
- Metcalf, I., Sidhik, S., Zhang, H., Agrawal, A., İkna, J., Hou, J., Hatta, J. and Mohit, A. D. 2023. Synergy of 3D and 2D perovskites for durable, efficient solar cells and beyond. *Chemical Reviews*, 123 (15), 9565-9652.
- Mi, D., Kim, J.H., Kim, H. U., Xu, F. and Hwang, D. H. 2014. Fullerene derivatives as electron acceptors for organic photovoltaic cells. *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, 14, 1064-1804.
- Mouchou, R. T., Jen, T. C., Laseinde, O. T. and Ukoba, K. O. 2021. Numerical simulation and optimization of p-NiO/n-TiO₂ solar cell system using SCAPS. *Materials Today: Proceedings*, 38 (2), 835-841.
- Ortiz-Cervantes, C., Carmona-Monroy, P. and Solis-Ibarra, D. 2019. Two-dimensional halide perovskites in solar cells: 2D or not 2D, *ChemSusChem*, 12 (10), 1560.

- Rahman, M. S., Miah, S., Marma, M. S. W. and Sabrina, T. 2019. Simulation-based investigation of inverted planar perovskite solar cell with all metal oxide inorganic transport layers. In 2019 International Conference on Electrical, Computer and Communication Engineering (ECCE), 1-6, Cox's Bazar, Bangladesh.
- Raj, A., Kumar, M. and Anshul, A. 2021. Recent advancement in inorganic-organic electron transport layers in perovskite solar cell: Current status and future outlook. *Materials Today Chemistry*, 22, 100595.
- Sahoo, S. K., Manoharan, B. and Sivakumar, N. 2018. Chapter 1 - introduction: why perovskite and perovskite solar cells?, In: *Perovskite Photovoltaics*. Thomas, S. and Thankappan, A. (eds), Academic Press, 1-24, New York.
- Sampaio, P. G. V. and Gonzalez, M. O. A. 2017. Renewable and sustainable energy reviews. *Photovoltaic Solar Energy: Conceptual Framework*, 74, 590-601.
- Shah, N., Shah, A. A., Leung, P. K., Khan, S., Sun, K., Zhu, X. and Liao, Q. 2023. A review of third generation solar cells. *Processes*, 11 (6), 1852.
- Sharma, S., Jain, K. K. and Sharma A. 2015. Solar cells: In research and applications-a review. *Materials Sciences and Applications*, 6, 1145-1155.
- Siekmann, J., Ravishankar, S. and Kirchartz, T. 2021. Apparent defect densities in halide perovskite thin films and single crystals. *ACS Energy Letters*, 6 (9), 3244-3251.
- Wang, R., Múcahid, M., Duan, Y., Wang, Z. K., Xue, J. and Yang, Y. 2019. A review of perovskites solar cell stability. *Advanced Functional Materials*, 29, 1808843.
- Wang, Y., He, C., Tan, Q., Tang, Z., Huang, L., Liu, L., Yin, J., Jiang, Y., Wang, X. and Pan, A. 2023. Exciton–phonon coupling in two-dimensional layered (BA)₂PbI₄ perovskite microplates. *RSC Advances*, 13 (9), 5893-5899.
- Yadav, C., Kumar, M., Lodhi, K. and Kumar, S. 2023. Methyl ammonium iodide via novel PECVD process for the growth of 2-step vacuum based perovskite (MAPbI₃) thin films. *Materials Today Communications*, 36, 106736.
- Yang, T., Ma, C., Cai, W., Wang, S., Wu, Y., Feng, J., Wu, N., Li, H., Huang, W., Ding, Z., Gao, L., Liu, S. and Zhao, K. 2023. Amidino-based Dion-Jacobson 2D perovskite for efficient and stable 2D/3D heterostructure perovskite solar cells. *Joule*, 7 (3), 574-586.
- Yao, K., Wang, X., Xu, Y. X. and Li, F. 2015. A general fabrication procedure for efficient and stable planar perovskite solar cells: Morphological and interfacial control by in-situ-generated layered perovskite. *Nano Energy*, 18, 165-175.

- Zandi, S., Saxena, P. and Gorji, N. E. 2020. Numerical simulation of heat distribution in RGO-contacted perovskite solar cells using COMSOL. *Solar Energy*, 197, 105-110.
- Zhang, F. and Zhu K. 2021. Breakthrough: phase-pure 2D perovskite films. *Joule*, 5 (1), 14-15.
- Zhang, Y., Yang, Z., Ma, T., Ai, Z., Bao, Y., Shi, L., Qin, L., Cao, G., Wang, C. and Li, X. 2024. Device physics and design principles of mixed-dimensional heterojunction perovskite solar cells. *Small Science*, 4 (3), 2300188.
- Zhou, H., Chen, Q., Li, G., Luo, S., Song, T. B., Duan, H. S., Hong, Z., You, J., Liu, Y. and Yang, Y. 2014. Interface engineering of highly efficient perovskite solar cells. *Science*, 345, 542-546.
- Zhou, Y., Wang, F., Cao, Y., Wang, J. P., Fang, H. H., Loi, M. A., Zhao, N. and Wong, C. P. 2017. Benzylamine-treated wide-bandgap perovskite with high thermal-photostability and photovoltaic performance. *Advancet Energy Mater*, 7, 1701048.
- Zhou, D., Zhou, T., Tian, Y., Zhu, X. and Tu, Y. 2018. Perovskite-based solar cells: Materials, methods, and future perspectives. *Journal of Nanomaterials*, 2018, 15.