

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**PEROVSKİTE GÜNEŞ HÜCRELERİNDE ELEKTRON TAŞIMA
MALZEMELERİ YAPISININ VE KOMPOZİSYONUN SCAPS-1D
SİMÜLASYON PERSPEKTİFİNDEN İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Cihan ATAŞ

Fizik Anabilim Dalı

KASIM 2023

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**PEROVSKİTE GÜNEŞ HÜCRELERİNDE ELEKTRON TAŞIMA
MALZEMELERİ YAPISININ VE KOMPOZİSYONUN SCAPS-1D
SİMÜLASYON PERSPEKTİFİNDEN İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Cihan ATAŞ

Fizik Anabilim Dalı

Tez Danışmanı: Dr. Öğr. Üyesi Nagihan DELİBAŞ

Ortak Danışman: Prof. Dr. Aligholi NİAEİ

KASIM 2023

Cihan ATAŞ tarafından hazırlanan “Perovskite Güneş Hücrelerinde Elektron Taşıma Malzemeleri Yapısının ve Kompozisyonunun SCAPS-1D Simülasyon Perspektifinden İncelenmesi” adlı tez çalışması 06.11.2023 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği ile Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı’nda Yüksek Lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

Tez Jürisi

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

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

Jüri Üyesi : **Prof. Dr. Ali ÇORUH**
Sakarya Üniversitesi

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

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

ETİK İLKE VE KURALLARA UYGUNLUK BEYANNAMESİ

Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Lisansüstü Eğitim-Öğretim Yönetmeliğine ve Yükseköğretim Kurumları Bilimsel Araştırma ve Yayın Etiği Yönergesine uygun olarak hazırlamış olduğum “PEROVSKİTE GÜNEŞ HÜCRELERİNDE ELEKTRON TAŞIMA MALZEMELERİ YAPISININ VE KOMPOZİSYONUN SCAPS-1D SİMÜLASYON PERSPEKTİFİNDEN İNCELENMESİ” başlıklı tezin bana ait, özgün bir çalışma olduğunu; çalışmamın tüm aşamalarında yukarıda belirtilen yönetmelik ve yönergeye uygun davrandığımı, tezin içerdiği yenilik ve sonuçları başka bir yerden almadığımı, tezde kullandığım eserleri usulüne göre kaynak olarak gösterdiğimi, bu tezi başka bir bilim kuruluna akademik amaç ve unvan almak amacıyla vermediğimi ve 20.04.2016 tarihli Resmi Gazete’de yayımlanan Lisansüstü Eğitim ve Öğretim Yönetmeliğinin 9/2 ve 22/2 maddeleri gereğince Sakarya Üniversitesi’nin abonesi olduğu intihal yazılım programı kullanılarak Enstitü tarafından belirlenmiş ölçütlere uygun rapor alındığını, çalışmamla ilgili yaptığım bu beyana aykırı bir durumun ortaya çıkması halinde doğabilecek her türlü hukuki sorumluluğu kabul ettiğimi beyan ederim.

(06/11/2023)

Cihan Ataş

Eşime ve Çocuklarıma

TEŐEKKÜR

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

Çalışmalarım boyunca tecübelerini ve desteğini paylaşan değerli hocam Prof. Dr. Aligholi NİAEİ'e çok teşekkür ederim.

Tezin her aşamasında yardımlarını esirgemeyen Turgut Süleymanođlu ve S. Reza Hosseini arkadaşlarıma da teşekkürü bir borç bilirim.

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

Ayrıca bu tez çalışması Sakarya Üniversitesi LÜTEP 2022-7-24-118 nolu proje kapsamında desteklendiđi için Bilimsel Araştırma Projeleri Koordinatörlüğüne teşekkürlerimi sunarım.

Cihan ATAŐ

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ETİK İLKE VE KURALLARA UYGUNLUK BEYANNAMESİ.....	v
TEŞEKKÜR.....	ix
İÇİNDEKİLER.....	xi
KISALTMALAR.....	xiii
SİMGELER.....	xv
TABLO LİSTESİ.....	xvii
ŞEKİL LİSTESİ.....	xix
ÖZET.....	xxi
SUMMARY.....	xxiii
1. GİRİŞ.....	1
1.1. Yenilenebilir Enerji Kaynakları.....	2
1.2. Güneş Pilleri.....	3
1.2.1. Güneş pilleri çalışma mekanizması.....	4
1.2.2. Güneş pili teknolojilerinin türleri.....	6
1.3. Perovskit Güneş Pilleri.....	7
1.3.2.1. Doğrudan yapıli perovskit güneş pilleri.....	10
1.3.2.2. Ters yapıli perovskite güneş pilleri.....	11
1.3.3.1. Emici tabaka.....	12
1.3.3.3. Boşluk transfer tabakası (HTM).....	15
1.4. Elektrotlar.....	15
1.5. Perovskit Güneş Piliinin Yapılarının Optimizasyonu.....	16
1.6. Çevrenin Etkileri.....	17
1.7. Çok Kriterli Karar Verme.....	17
1.8. Araştırma Geçmişii.....	18
1.9. Araştırma Amacı.....	22
2. MATERYAL VE YÖNTEM.....	23
2.1. Güneş Hücresi Kapasite Simülatör Programı (SCAPS -1D).....	23
2.2. SCAPS-1D Programına Genel Bir Bakış.....	24
2.3. Sayısal Simülasyonlar.....	24
2.4. Güneş Pili Parametreleri.....	25
2.4.1. Güneş pili çift diyot devre modeli.....	26
2.4.2. Güneş pili i-v (akım-gerilim) karakteristiği.....	27
2.4.3. Doldurma faktörü.....	30
2.4.4. Verimlilik.....	31
2.4.5. Güneş pillerinde parazitik dirençler.....	32
2.4.6. Paralel direnç.....	33
2.4.7. Sıcaklığın etkisi.....	34
2.4.8. Işık şiddetinin etkisi.....	35
2.4.9. Kuantum verimliliği.....	35
2.4.10. Spektral yanıt (sr).....	36
2.4.11. Açık devre gerilimi düşümü (ocvd).....	38

2.4.12. Rekombinasyon	39
2.5. Meta Kararlı Kusurlar	40
2.6. Açma ve Yükleme	40
2.7. Programın Çalıştırılması	41
2.8. Emici Tabaka Bandı Gab Varvasyonun Etkisine Örnek	41
2.9. SCAPS-1D Kullanılarak Grafen Temaslı Perovskit Güneş Pillerinin Simülasyon Analizi.....	42
2.10. SCAPS-1D Programında Kullanılan Ayarlar	43
2.11. Maliyet Endeksi Veritabanı	44
2.12. Bu Çalışmadaki Örnekler.....	44
3. SONUÇLAR VE TARTIŞMA.....	45
3.1. Giriş	45
3.2. Gereç ve Yöntemler	48
3.3. Sentezde Kullanılan Numuneler	49
3.4. Rekombinasyon Grafikleri:.....	52
3.5. Performans Grafikleri:	53
3.6. Bulgular ve Yorum	62
3.6.1. Psc yapı seçimi	62
3.6.2. Katman özelliği optimizasyonu	66
3.6.2.1. Perovskit kalınlığı.....	66
3.6.2.2. ETM kalınlığı	68
3.6.2.3. HTM kalınlığı	68
3.6.2.4. Perovskit katkılama	69
3.6.2.5. ETM katkılama	70
3.6.2.6. HTM katkılama.....	70
3.6.3. Çalışma noktası optimizasyonu	71
3.6.3.1. Sıcaklık	71
3.6.3.2. Seri direnç.....	71
3.6.3.3. Şönt direnci.....	72
3.6.3.4. Yansıma	72
3.6.4. Yapılandırma optimizasyonu.....	73
3.6.4.1. Tandem PSC'ler	73
3.6.4.2. Kompozit PSC'ler	78
3.6.5. Nihai I-V sonuçları	79
3.6.6. Veri doğruluk tespiti.....	81
KAYNAKLAR.....	83
ÖZGEÇMİŞ	93

KISALTMALAR

ABX₃	: Perovskite genel denklemi
CIGS	: Amorf silikon, bakır indiyum, galyum selenit
CaTiO₃	: Kalsiyum Titanat
CdTe	: Kadmiyum tellürit
CO₂	: Karbondioksit
Cl	: Klor
I	: İyot
eV	: Elektron Volt
CH (NH₂)₂⁺	: Aminyum
Cs⁺	: Sezyum
Sn²⁺	: Kalay
Pb²⁺	: Kurşun iyonları
Ge²⁺	: Germanyum
Rb⁺	: Rubidyum
CH₃NH₃⁺	: Metilamonyum
Br⁻	: Brom iyonları
TiO₂	: Titanyum oksit
SnO₂	: Kalay oksit
WOC	: Açık devre voltajı
ISC	: Kısa devre akımı
FF	: Doldurma faktörü
QE	: Kuantum verimliliği
PCE	: Güç dönüştürme verimliliği
CsPbX₃	: Sezyum kurşun halid bileşikleri
BiFeO₃	: Bizmut ferrit
P3HT	: Politiyofen
ZnO	: Çinko Oksit
ELIS	: Elektronik ve Bilgi Sistemleri Bölümü
SRH	: Auger Radiant ve Shockley Reedhall
RGO	: Perovskit/Grafen

SİMGELER

C	: Karbon
Co	: Kobalt
Cu	: Bakır
Fe	: Demir
I	: Akım
La	: Lantanyum
Mn	: Mangan
Ni	: Nikel
O	: Oksijen
SE	: İkincil elektrik
T(t)	: Zaman
V	: Hız

TABLO LİSTESİ

Sayfa

Tablo 1.1. Perovskit güneş pilinin araştırılmasında yardım eden kişiler ve yaptığı araştırmalar	19
Tablo 2.1. Perovskit güneş pilinin her bir katmanında ikinci aşamada kullanılan malzemeler	44
Tablo 3.1. PSC'lerin aktif katmanlarının oluşturan malzemelerinin kısa bir özeti	47
Tablo 3.2. SA-1 Çalışmada ele alınan farklı PSC yapılarının performans parametreleri.....	49
Tablo 3.3. Çalışmada kullanılan metilamonyum bazlı emicilerin elektriksel özellikleri.....	58
Tablo 3.4. Çalışmada kullanılan formamidiniim esaslı emicilerin elektriksel özellikleri.....	59
Tablo 3.5. Çalışmada kullanılan elektron taşıma katmanlarının malzemelerinin elektriksel özellikleri [103-106].....	60
Tablo 3.6. Çalışmada kullanılan boşluk taşıma katmanlarının malzemelerinin elektriksel özellikleri [103-106].....	61
Tablo 3.7. Bu çalışmada ele alınan farklı PSC yapılarının performans parametreleri	62
Tablo 3.8. Optimum elde edilen PSC yapıları	63
Tablo 3.9. S1-S5 yapılarının aktif katmanları için elde edilen optimum kalınlıkların bir özeti	65
Tablo 3.10. S1-S5 yapılarının aktif katmanları için elde edilen optimum katkılama yoğunluklarının bir özeti	69
Tablo 3.11. S1-S5 yapılarının aktif katmanları için elde edilen optimum seri ve şönt dirençlerinin bir özeti	71
Tablo 3.12. Aktif tabakalarda tandem yapıların kullanılmasına ilişkin fotovoltaik parametreler	72
Tablo 3.13. Tandem emicilerin farklı kalınlıklarında kullanılması üzerine fotovoltaik parametreler	74
Tablo 3.14. Tandem ETM'lerin farklı kalınlıklarında fotovoltaik parametreler	76
Tablo 3.15. Tandem HTM'lerin farklı kalınlıklarının kullanılması üzerine fotovoltaik parametreler	77
Tablo 3.16. S3 yapısı için farklı PSC konfigürasyonlarının fotovoltaik parametreleri	78
Tablo 3.17. S3 yapısı için farklı PSC konfigürasyonlarının fotovoltaik parametreleri	80

ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa

Şekil 1.1. Geleneksel ve yenilenebilir enerji kaynakları.	1
Şekil 1.2. Türkiye’de kurulu gücün enerji kaynaklarının türlerine göre payları.	2
Şekil 1.3. Güneş pili toplama işlemi (soldan sağa: hücre, modül, panel ve dizi).....	3
Şekil 1.4. Güneş Pili çalışma mekanizması.....	4
Şekil 1.5. Katı cisim bandı teorisinin şeması	5
Şekil 1.6. Farklı katılarda (iletken, yarı iletken ve yalıtkan) şematik bant boşluğu.....	5
Şekil 1.7. Farklı nesil güneş pillerinin bölünmesinin ağaç diyagramı	7
Şekil 1.8. Tek değerli katyonlarda sırasıyla ABX ₃ (A, B ve X) genel formülüne sahip perovskit kristal yapısı.....	8
Şekil 1.9. Perovskit güneş pillerinin yapıları iki genel kategoriye ayrılabilir: doğrudan ve ters çevrilmiş	10
Şekil 1.10. Doğrudan perovskit güneş pillerinin mezogözenekli yapılar için ters modda perovskit güneş pillerinin genel şeması.....	11
Şekil 1.11. Perovskit güneş pilinin katmanları.....	12
Şekil 1.12. Perovskit Güneş Pili Katmanlarının Şematik Eksenel Şeması	14
Şekil 1.13. Fotoğraf-Kont Lev A. Perovskiy, Gustav Rose, perovskit minerali.....	18
Şekil 2.1. Scaps-1D genel bir bakış	25
Şekil 2.2. Çift diyot modelinin devre şeması	26
Şekil 2.3. Bir güneş pilinin akım-gerilim karakteristiği	28
Şekil 2.4. Karanlık I-V ve aydınlık I-V karakteristiği.....	28
Şekil 2.5. Kısa devre akımı, güneş pili I-V karakteristiği	29
Şekil 2.6. Açık devre gerilimi, güneş pili I-V karakteristiği	30
Şekil 2.7. Akım-gerilim fonksiyonu olarak doldurma faktörleri.....	31
Şekil 2.8. Bir güneş pili devresi seri direnç (RS) ve şönt dreci (RSH)	32
Şekil 2.9. Bir güneş pilinde şönt direncinin dolum faktörüne etkisi, hücre alanı 1cm ² , T=300K, RSH=30 ohm.cm ²	33
Şekil 2.10. Sıcaklığın bir güneş pilinin I-V karakteristiği üzerine etkisi	34
Şekil 2.11. Kuantum verimliliği örnek grafik	36
Şekil 2.12. Bir silikon güneş pilinin spektral yanıtı	37
Şekil 2.13. Teorik olarak açık devre gerilimi azalma eğrisi.....	38
Şekil 3.1. Perovskit güneş pilininin basit bir şematik görünümü.....	46
Şekil 3.2. SB 1- HTM'den ETM'ye hücre mesafesinin bir fonksiyonu olarak S1-S5 PSC yapılarının rekombinasyon yolu çizimleri.....	52
Şekil 3.3. Perovskite kalınlığının bir fonksiyonu olarak fotovoltaiik parametrelerin ve rekombinasyon faktörünün değişimi	53
Şekil 3.4. ETM kalınlığının bir fonksiyonu olarak fotovoltaiik parametrelerin ve rekombinasyon faktörünün değişimi.....	53
Şekil 3.5. HTM kalınlığının bir fonksiyonu olarak fotovoltaiik parametrelerin ve rekombinasyon faktörünün değişimi.....	54
Şekil 3.6. Perovskite katkılama yoğunluğunun bir fonksiyonu olarak fotovoltaiik parametrelerin ve rekombinasyon faktörünün değişimi.....	54

Şekil 3.7. ETM Katkılama yoğunluğunun bir fonksiyonu olarak fotovoltaiik parametrelerin ve rekombinasyon faktörünün deęiřimi.....	55
Şekil 3.8. HTM katkılama yoğunluğunun bir fonksiyonu olarak fotovoltaiik parametrelerin ve rekombinasyon faktörünün deęiřimi.....	55
Şekil 3.9. Sıcaklıđın bir fonksiyonu olarak fotovoltaiik parametrelerin ve rekombinasyon faktörünün deęiřimi.....	56
Şekil 3.10. Seri direncin bir fonksiyonu olarak fotovoltaiik parametrelerin ve rekombinasyon faktörünün deęiřimi.....	56
Şekil 3.11. Şönt direncinin bir fonksiyonu olarak fotovoltaiik parametrelerin ve rekombinasyon faktörünün deęiřimi.....	57
Şekil 3.12. Yansımanın bir fonksiyonu olarak fotovoltaiik parametrelerin ve rekombinasyon faktörünün deęiřimi.....	57
Şekil 3.13. Katman özellik optimizasyon grafikleri.....	67
Şekil 3.14. Kompozit PSC grafikleri.....	79
Şekil 3.15. S3 PSC yapısının optimizasyonunun farklı aşamalarına ait I-V grafikleri.....	81

PEROVSKITE GÜNEŞ HÜCRELERİNDE ELEKTRON TAŞIMA MALZEMELERİ YAPISININ VE KOMPOZİSYONUN SCAPS-1D SIMULASYON PERSPEKTİFİNDEN İNCELENMESİ

ÖZET

Güneş pili endüstrisi, çevre dostu ve düşük maliyetli elektrik üretim süreçleri nedeniyle, yenilenemeyen enerji kaynaklarının özellikle fosil yakıtların yerine, kullanımı her geçen gün artmaktadır. Bugün kullandığımız ve neredeyse %70'ine yakın enerji sağladığımız fosil yakıtlar her geçen gün tükenmekte, çevreye ve atmosfere ciddi sorunlar yaşatmaktadır. Nükleer santraller, kömür ve diğer geleneksel kaynaklar kullanılırken, atmosfer tabakası üzerindeki zararlı gazlar ve seraların etkisi küresel iklim değişikliğine yol açmaktadır. Bu sorunlar canlılar üzerinde farklı hastalıklara ve diğer doğa olaylarına neden olmaktadır. Son yıllarda, çevresel etkileri azaltmak amacıyla, güneş enerjisi gibi yenilenebilir enerji kaynaklarının kullanılmasını önermiştir. Bu nedenle, yenilenebilir kaynaklardan enerji üretimi nedeniyle güneş pillerinin kullanılması düşünülmüştür.

Perovskit güneş pilleri, benzersiz özellikleri nedeniyle son yıllarda araştırmacılar tarafından fark edilen en verimli güneş pilleri arasındadır. Bu nedenle bu tez çalışmasında bu hücreler araştırılmaya çalışılmış ve simülasyon aşaması yardımıyla bu hücrelerin performansları ölçülmüş ve tahmin edilmiştir. Aynı zamanda bilinen farklı güneş pilleri arasındaki perovskit güneş pilleri ile yapılan araştırmalarda yüksek performansları ve düşük üretim maliyetleri sebebiyle hızlı bir büyüme yaşanmıştır. Perovskit güneş pilleri tipik olarak; emici, taşıyıcı katmanlar ve elektrotlar gibi bazı ana katmanlardan oluşur.

Perovskit tabakası tarafından emilen ışık, electron ve boşlukların oluşumuna yol açar. Bu yük taşıyıcıları daha sonra electron ve boşluk taşıma katmanları ile elektrotlara taşınır. Hücre yapısındaki küçük moleküller, polimerik ve inorganik HTL'ler gibi çeşitli HTL türleri vardır. Ayrıca bu farklı seçenekler, tek yapılı, tandem ve kompozit gibi çeşitli konfigürasyonlarda olabilir. Bu çalışmada, üç yaygın HTL tipi, Spiro-OMeTAD, P3HT ve Cu₂O oluşturulmuş, bunların farklı kompozit, tandem ve tek formlardaki hücre performansı üzerindeki etkileri araştırılmış olup sonuçları karşılaştırılmıştır.

Bu tip hücreler, her katman için çeşitli farklı malzemelere sahip farklı aktif katmanlar içerir, bu da perovskit güneş pillerinin farklı polimerik ve polimerik olmayan yapılarının oluşturulmasına izin verir. Bu hücrelerin araştırılması iki aşamada gerçekleştirilebilir: Simülasyon veya Deneysel. Perovskit güneş pillerinin yapılarında farklı polimerlerin rolüne odaklanan bu çalışmada, SCAPS-1D simülasyon programını kullanarak bu güneş pillerinin performansı elde edilmiştir.

INVESTIGATION OF ELECTRON TRANSPORT MATERIALS STRUCTURE AND COMPOSITION IN PEROVSKITE SOLAR CELLS FROM SCAPS-1D SIMULATION PROSPECTUS

SUMMARY

Human beings have always been in search of a continuous and continuous kind of energy from primitive times to the present day in order to survive. This quest has continued from fossil fuels to renewable energy sources. The most important feature of renewable energy sources is that they are friendly to the universe we live in and the environment, which is our living space, with the provision of recycling.

The fossil fuels we use today, to which we provide almost 70% energy, are depleted day by day and cause serious problems to the environment and the atmosphere. While nuclear power plants, coal and other traditional resources are used, harmful gases and greenhouses effect on the atmospheric layer lead to global climate change. These problems cause different kinds of diseases and other natural phenomena on living creatures.

Renewable energy source types are the opposite of traditional non-renewable energy types. In addition to receiving its important source from the sun, since there is almost no toxic gas released on living things and into the atmosphere, living things have turned to solar energy cells as an unlimited energy source for the continuity of their lives. First, solar cells, which started as photovoltaics, were rapidly stepped into renewable energy types by creating different modules by switching from single mono systems to polymer systems.

Perovskite solar cells are among the most efficient solar cells noticed by researchers in recent years due to their unique properties. For this reason, in this thesis, these cells were tried to be investigated and the performance of these cells was measured and estimated with the help of the simulation stage. In the thesis, perovskite solar cells are fully introduced and the materials used in each layer of these cells are tried to be examined. In this section, we tried to address the challenges of selecting these materials based on the factors of efficiency, cost and environmental impact. The properties of the materials used in the layers of perovskite solar cells that fall into the corresponding simulation software are summarized. In addition, explanations of the simulation software and tools used in this research are presented and all aspects are investigated. The software for solar cell design in this research is SCAPS-1D software, which ensures the efficiency of the solar cell. Like the study of all other types of solar cells, the study of PSCs can be carried out in both the experimental and simulation phases. The simulation can give appropriate information about the effective parameters of developing a solar cell. It will help results in experimental stages. For example, with regard to the rapid optimization process that can be carried out in a solar cell simulation software, with the optimization of the thickness of a specific layer, experiments can be carried out around the optimized values obtained

There are many tools for the simulation of solar cells, the most important of them are SCAPS-1D, SILVACO, AMPS-1D, COMSOL, GPVDM etc... The simulation tool used in this thesis is the SCAPS-1D software, which measures the performance of the cell. In addition, in this research, the cost indices and environmental effects of cells will be investigated. The SCAPS-1D software used in this research is the latest version of the software, an updated version in May 2020 (SCAPS version 3.8)

In determining the performance of perovskite solar cells (including transport layers and adsorbent layers), many parameters such as the thickness of the layers, band gaps, electron search, dielectric constant are effective. However, in the electron and hole layers (electrodes), the working function of the desired electrode determines its performance. Simulation is a crucial technique for gaining in-depth knowledge of physical operation, the applicability of the proposed physical explanation, and the impact of physical changes on the performance of solar cell devices. There are certain criteria and these headings that are emphasized in the results and data analysis researches. Recombination graphs, performance grafices, ETM, HTM thicknesses, ETM and perovskite additives, hot shunt resistors and reflective analyzes will help us to make the best analysis. The tier feature of PSCs took place in several stages, including point of work and configuration optimization. The results of the property optimization of the active layers, in relation to recombination problems, showed that it is better to choose a cell with relatively high absorbent thicknesses, low thicknesses of transport materials and low active layer doping densities. The effect of perovskite thickness variation has been investigated. For this section, the effect of perovskite thickness variation from 100 nm-1000 nm on photovoltaic parameters and recombination factor is given in diagrams of recombination paths at different absorbent thicknesses. The effect of ETM thickness variation has been investigated in the thickness range of 40 nm-140 nm. It is understood that increasing the thickness of the ETM has an overall negative impact on the performance of the PSC. This can be attributed to late transport between the absorber and pre-contact due to the wider distance. Considering the effect of HTM thickness. The thickness range of 50 nm-400 nm was chosen. light passes over the ETMs, but is absorbed by the perovskite layer before reaching the HTM layer. Therefore, electron hole formation is not affected by the variation of HTM thickness. Increasing the doping intensity of the absorbent layer helps to produce more load carriers. However, it also leads to more load recombination after a threshold value. The effect of the doping variation on ETM was investigated in the range of $10^{15-10^{22}}$ $1/cm^3$. It is seen that each of the structures exhibits different behaviors from the others. Therefore, we can not find a specific behavior for them. But there may be different reasons for this uncertainty. It may be due to SCAPS-1D calculation error at some specific doping intensities. Regarding the concept that HTM is not required to be transparent, higher values of the doping intensity can lead to better transport of the holes to metal contact. The results of the HTM doping intensity change in the range of $10^{15-10^{22}}$ $1/cm^3$ confirm this point. The temperature of solar cells is one of the important conditions that must be properly calibrated. Its optimization can help to conduct experimental studies in more favorable situations. In this case, it seems that the simulation process can be used well. Therefore, in the current case, we have chosen the temperature range of 300-400 K to find an optimal temperature. Sand shunt resistance represent the resistance of a cell to manufacturing and recombination processes, respectively. It is clear that the low and high values will be the optimum quantities for the series and shunt resistors, respectively. However, in this case, the effect of series resistance has been investigated in the range of 0.1-1 $\Omega.cm^2$. Higher

shunt resistance values are analyzed for a solar cell. As the shunt resistance increases, the cell will move closer to the ideal solar cell with infinite shunt resistance. To confirm this concept, we considered a relatively large data range of 10^{-2} - $10^5 \Omega \cdot \text{cm}^2$ for the investigation of the shunt resistance effect. The configuration and number of layers in the PSC structure can significantly affect the performance of the cell. Each active layer of a PSC can be configured in single, tandem or composite forms. So far, one or two of the investigated parts of this study have been carried out in single configurations of active layers. That is, only one material was used for each of the active layers. However, in some cases, more than one material can be used for each layer. As a summary of previous research for the PSC structure, it appears that single FASnI₃ configurations for perovskite, tandem arrangement for ETC, and composite structure for HTM reveal optimum efficiency for each situation. Therefore, all of them were transferred to the data that was analyzed in a single simulation as the final step. Based on these results, it is seen that all optimization steps, including layer feature, operating points, and configuration optimizations, have a positive impact on the overall performance of the PSCs, which are considered to be the baseline. Total productivity increased by about 1%. The area under the I-V curve of a solar cell represents its performance. From the given I-V charts, it is clear that this area is increasing with the further advancement of optimization processes. This confirms the total positive process of the current study.

Some theoretical research around the simulation of perovskite solar cells using the SCAPS-1D simulation package is presented. Regarding the wide variety of structures that can be created of perovskite solar cells, this work was based on the selection of suitable PSCs among the proposed structures. These 8 different MA-based and FA-based absorbents were considered. Furthermore, some organic and inorganic materials, including TiO₂, ZnO and PCBM as ETCs and CuSCN, PEDOT: PSS and Spiro-OMeTAD as ETCs, are thought to form 72 unique PSC structures. Of these PSCs, 5 structures were selected as good data (efficiency over 20%) for further investigation. For this, the optimization of the mentioned good data structures was carried out on the basis of the appropriate layer feature, point of operation and configuration selection. The available results have been successfully completed.

1. GİRİŞ

Elektrik enerjisi şüphesiz dünyadaki en önemli temel enerji türlerinden biridir. Son yıllarda ileri teknolojilerin ortaya çıkması nedeniyle bu tür enerjilere olan ihtiyaç her zamankinden daha fazla artmıştır. Temel olarak, bu tür bir enerji, bir sistem tarafından iş yapma yeteneği olarak tanımlanır. Elektrik enerjisinin amacı elektrik üretim alanındadır. Son yıllarda elektrik üretimi konusunda birçok çözüm önerilmektedir. Bu kaynaklar arasında Şekil 1.1’de görüldüğü gibi fosil yakıtlar, nükleer enerji, biyokütle enerjisi, hidroelektrik enerji, dalga enerjisi, gelgit enerjisi, hidrojen enerjisi, jeotermal enerji, rüzgar enerjisi, güneş enerjisi bulunur [1].



Şekil 1.1. Geleneksel ve yenilenebilir enerji kaynakları.

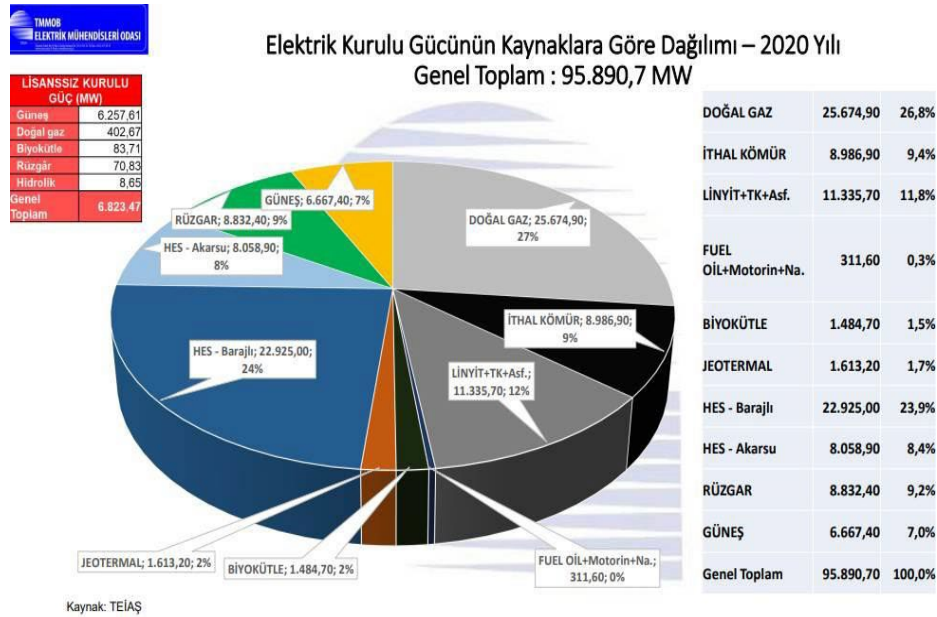
Yukarıdaki örneklere göre, elektrik enerjisi kaynaklarının türleri yenilenebilir ve yenilenmeyen kaynaklar olarak ikiye ayrılır. Söz konusu enerjiler arasında fosil yakıt kaynakları, yüksek enerji üretim verimlilikleri nedeniyle elektrik üretiminin en önemli ana kaynağıdır. Fosil yakıtların çevresel ve küresel bir tehdit oluşturması ile birlikte ve bu kaynakların yapısında kullanılan malzemeler nedeniyle bunların kullanım süreci çevre üzerinde birçok zararlı etkiye sahip olmakta ve atmosfere çok fazla atık ve Karbondioksit (CO₂) salınımı meydana getirmektedir. Fosil yakıtlarının kullanımdaki zararlı etkenler sebebiyle, enerji kaynağı sınırsız olan yenilenebilir güneş enerjisi farklı

kaynak arayışına zemin hazırlamıştır. Ayrıca bu yakıtların kaynaklarında kullanılan malzemeler nedeniyle bunların kullanım süreci çevre üzerinde birçok zararlı etkiye sahip olmakta ve atmosfere çok fazla atık ve toksik madde getirmektedir. Bu nedenle, yenilenemeyen kaynakların kullanımındaki bu sorunlar nedeniyle, araştırmacılar rüzgar, hidroelektrik, güneş enerjisi ve benzeri yenilenebilir kaynakları kullanmaya daha meyilli olmuşlardır [2,3].

1.1. Yenilenebilir Enerji Kaynakları

İnsan oğlu yaşamını sürdürebilmek için ilkel zamanlara kadar sürekli ve devamlılık gerektiren enerji tür arayışlarında her zaman bulunmuşlardır. Bu arayış fosil yakıtlardan başlayıp yenilenebilir enerji kaynaklarına kadar devam etmiştir.

Yenilenebilir enerji kaynaklarının en önemli özelliği ise geri dönüşüm sağlanması olması ile birlikte içinde yaşadığımız evrenin ve yaşam alanımız olan çevrenin dostu olmasıdır. Günümüzde kullandığımız ve neredeyse %70 enerji sağladığımız fosil yakıtlar günden güne tükenmekte olması yanı sıra çevreyi ve atmosferi ciddi derecede sorunlar meydana getirmektedir. Nükleer santral, kömür ve diğer geleneksel kaynaklar kullanımı yapılırken atmosfer tabakasına zararlı gazlar ve seralar etkisi küresel iklim değişikliğine yol açmaktadır. Bu sorunlar yaşayan canlılar üzerinde farklı tür hastalıklar ve diğer doğa olaylarına sebep olmaktadır.



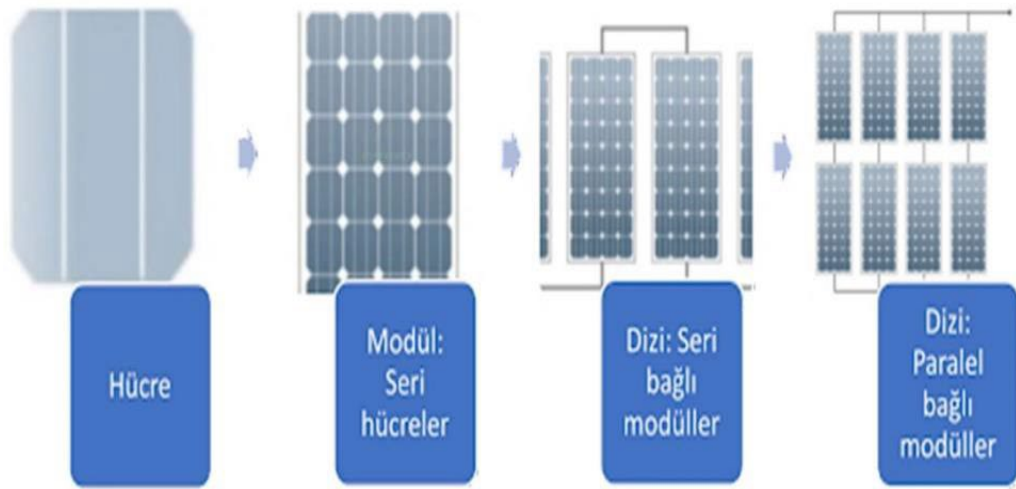
Şekil 1.2. Türkiye’de kurulu gücün enerji kaynaklarının türlerine göre payları.

Yenilenebilir enerji kaynak türleri geleneksel yenilenemeyen enerji türlerinin tam tersi durum arz etmektedir.

Önemli kaynağını güneşten almasının yanı sıra canlılar üzerinde ve atmosfere salınan zehirli gaz yok denecek kadar az olduğu için canlılar yaşamlarının sürekliliği sınırsız enerji kaynağı olarak güneş enerji pillerine yönelmişlerdir. Şekil 1.2 de ise Türkiye’de ki Elektrik kurum TEİAŞ göre 2020 yılında geleneksel ve yenilenebilir enerji paylarına göre yapılmış olan ölçek verilmiştir.

1.2. Güneş Pilleri

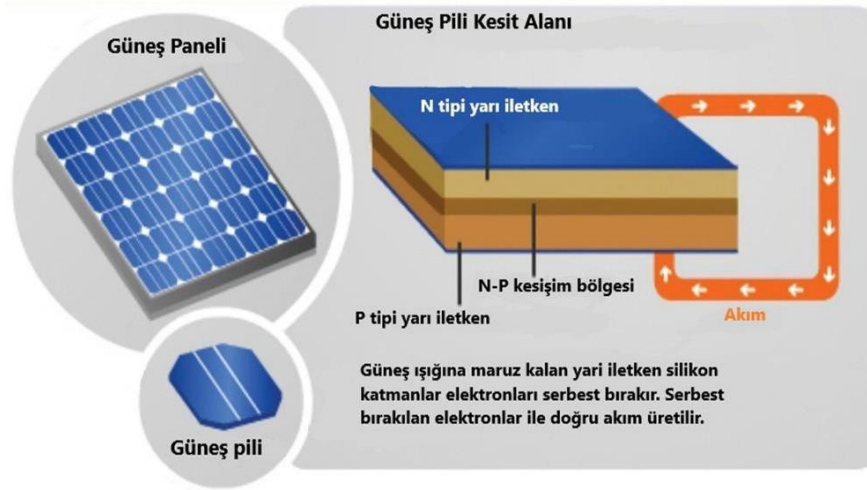
Güneş enerjisinden elektrik üretiminin temel ilkesi fotovoltaiik etki ile açıklanmaktadır. Fotovoltaiik etki, 1839 yılında Edmond Becquerel tarafından ışığa maruz kaldığında küçük miktarda elektrik üreten malzemeler olduğunun farkedilmesiyle keşfedilmiştir. Fotovoltaiik çalışma ilkesi şu şekilde sıralanır: Yarıiletken güneş hücresinin ışını(foton) absorbe etmesi elektronların hareketiyle akım oluşmaktadır. Elektronlar elektrotlar aracılığıyla toplanılır doğru akımı oluşturur, oluşan bu doğru akımı daha sonra alternatif akıma çevrilerek elektrik üretilir.



Şekil 1.3. Güneş pili toplama işlemi (soldan sağa: hücre, modül, panel ve dizi) Bir tane hücrenin vermiş olduğu enerji oldukça küçüktür. Daha fazla enerjinin karşılanması için, hücreler bir araya getirilerek modüller oluşturulur. Bu modüllerden istenen enerji ve voltajın karşılanması için modüller isteğe göre seri veya paralel olmak üzere aşağıdaki şekil 1.3’te bağlanılarak paneller meydana getirilir [4].

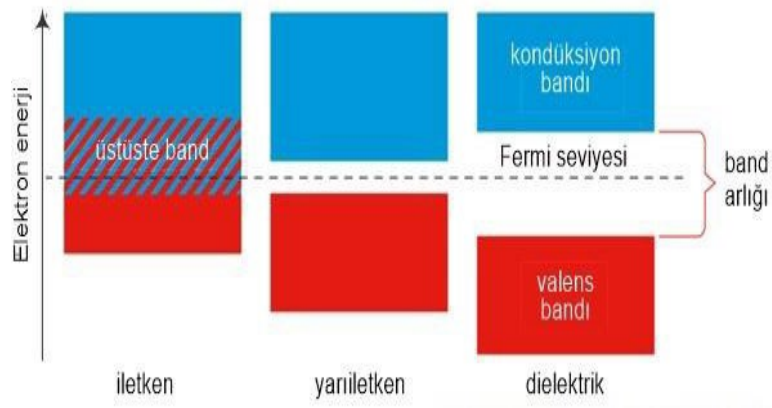
1.2.1. Güneş pilleri çalışma mekanizması

Işık enerjisini güneş pilleri tarafından elektrik enerjisine dönüştürme işlemi, fotovoltaik mekanizması tarafından yapılır, bu nedenle bu mekanizmanın genel bir çerçevesini bilmek gerekli görmektedir. Güneş pillerinin nasıl çalıştığını incelemeden önce, güneş pillerinin çalışma prensipleri ile ilgili bazı temel kavramları açıklamak gerekir.



Şekil 1.4. Güneş Pili çalışma mekanizması

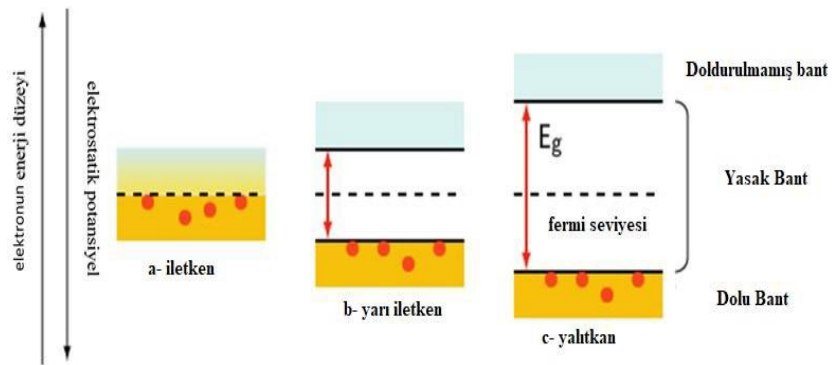
Katı cisim bant teorisi: katı cisimlerin parçacık yapısı ve atom oluşturan parçacıkların konumu ve çeşitli tanımlara göre katı cisimdeki elektronların konumunu daha iyi ele alır. Bu teoriye göre, herhangi bir katı nesne, elektronların yerleri olan bir dizi enerji orbitalinden veya seviyesinden oluşur. Bu hizalanmaların kümesi enerji bantlarını oluşturur. Aslında her enerji çubuğu çok sayıda enerji seviyesinden oluşur. Bu kavramın şematik formu yukarıda Şekil 1.4'te gösterilmiştir. Bu şekil 1.4'te gösterildiği gibi, bu bantlar arasında elektronların bulunmasına izin verilmeyen boşluklar vardır. Buna enerji boşluğu denir [5]. Aşağıda şekil 1.5'te Katı cisim bant teorisinin şeması görmekteyiz.



Şekil 1.5. Katı cisim bantı teorisinin şeması

Kapasite bantı, bir elektronun bulunduğu son banttır ve iletim bantı, elektronların olmadığı ilk banttır. Bu iki bant arasındaki enerji boşluğu, bant boşluğu olarak bilinir. Elektron volt birimi (eV) cinsinden ölçülen bu bant boşluğunun değerine göre katı cisimler üç iletken grubuna ayrılabilir: metaller, yarı iletkenler ve izolatörler. İletken nesnelere veya metallerde, bu bant boşluğu yoktur ve kapasite ve iletim bantları bazı örtüşmelere sahiptir ve elektronlar bu iki bant arasında serbestçe hareket edebilir, bu nedenle bu malzemelerin işlevi serbest elektronlar olacaktır. İzolatörlerde bu bant boşluğu çok daha büyük bir sayıdır bu da elektrik ve fotoelektrik uygulamalarda kullanılmasını olanaksız kılar. Yarı iletkenlerdeki bu bantların sayısı nispeten eşsizdir.

Şekil 1.6'da bu üç katı halin göreceli biçimde şematik karşılaştırmasını aşağıda göstermektedir.



Şekil 1.6. Farklı katılarda (iletken, yarı iletken ve yalıtkan) şematik bant boşluğu. Yarı iletken malzemeler nispeten ılımlı bir bant boşluğuna sahip olduklarından, bu malzemelerde kapasite bantı ile iletim bantı arasında elektron transferi yapmak mümkündür. Enerji veya fotonlar yarı iletken katıya yayıldığında, kapasite bantındaki

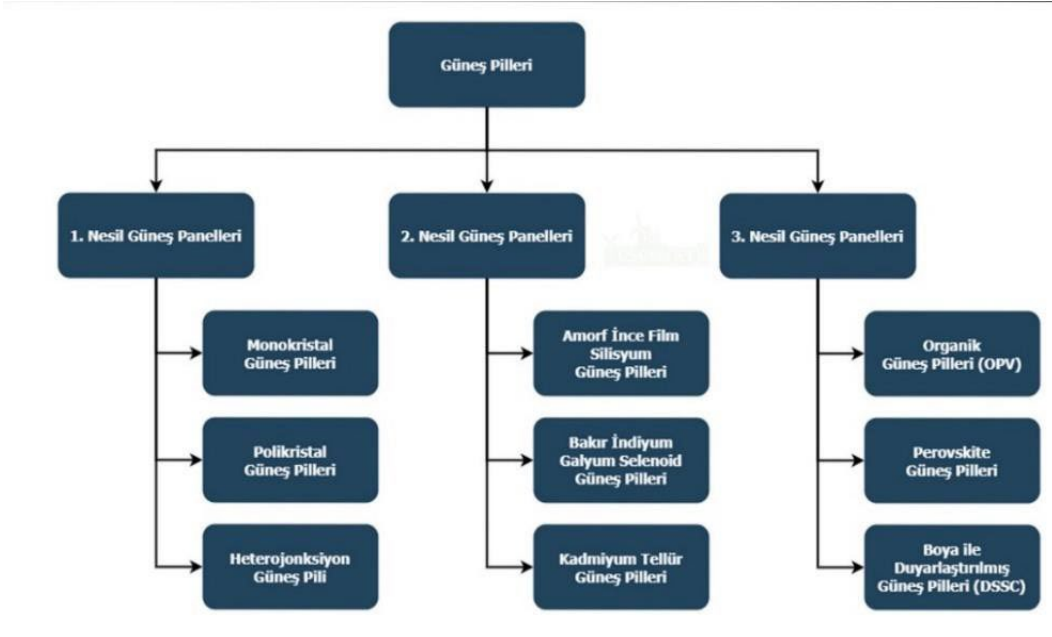
elektron uyarılma eğilimindedir ve bant boşluğundan daha yüksek bant veya iletim bandına geçecektir. Bu geçişin bir sonucu olarak, pozitif yüke sahip bir boşluk olarak adlandırılan kapasite bandında bir elektron pozisyonu kalacaktır [5]. Bu elektron ve boşluk çiftinin oluşumu, güneş pillerinde yük toplama gibi birçok işlemin temelini oluşturacaktır.

Ek veya serbest elektronların bulunduğu bir yarı iletken n-tipi yarı iletken denir ve ek bir boşluğa sahip bir p-tipi yarı iletken p-tipi yarı iletken denir. Katkılama gibi yöntemlerle pozitif veya negatif yarı iletkeni dönüştürülebilir. Örneğin, silikonun kristal yapısına beş serbest elektronlu fosfor eklenerek tek bir N-tipi yarı iletken serbest elektronlara sahiptir ve enerji uygulayarak bu elektronlar serbestçe hareket eder. Buna karşılık, üç serbest elektronlu Bor atomunu silikon yapıya dönüştürmek mümkündür [6].

İçinde fazladan veya serbest elektronların bulunduğu bir yarı iletken n-tipi yarı iletken denir ve ek boşluklu bir yarı iletken p-tipi yarı iletken denir. Daha önce de belirtildiği gibi, silikon güneş pilleri ilk kullanılacak hücreler arasındaydı ve güneş pillerinin çalışmasının temeli bu tür hücrelerden esinlenmiştir. Bu tip hücreler, N tipi ve p tipi iki yarı iletken silikon arasındaki bir bağ ile oluşturulur. Silikon hücrelerin yapısı diyotlara bağlanabilir ancak bu hücrelerde güneş ışığı elektriğin hareketliliğinden ve üretiminden sorumludur. P tipi yarı iletken n-tipi yarı iletkeni bağlandığında, n-yarı iletken elektronların bir kısmı, birleşim bölgesindeki bazı p-yarı iletken boşluklarıyla birleşerek birbirlerini nötralize edecek ve elektriksel olarak nötr bir bölge oluşturacaktır. Şekil 1.6'da bu alanın şemasını göstermektedir [7].

1.2.2. Güneş pili teknolojilerinin türleri

Yıllar geçtikçe, çeşitli fotovoltaik teknolojilerin gelişimi neredeyse üç farklı nesle ayrılabilir [8] . Birinci nesil güneş pilleri, yüksek verimlilik üretebilen ancak aynı zamanda yüksek üretim maliyetine dayanmaktadır.



Şekil 1.7. Farklı nesil güneş pillerinin bölünmesinin ağaç diyagramı.

Maliyetleri düşürmek amacıyla, amorf silikon, bakır indiyum galyum selenit hücreleri (CIGS) ve kadmiyum tellürit (CdTe) bazlı ikinci nesil güneş pilleri inşa edilmiştir. Bununla birlikte, ikinci nesil güneş pillerinin performansının genellikle birinci nesil modellere kıyasla zayıf olduğu bildirilmiştir ve bu da ortaya çıkan üçüncü nesil güneş pili teknolojilerinin geliştirmesine yol açmıştır. Yukarıda Şekil 1.7 'de farklı nesil güneş pillerinin tüm sınıflandırması bir ağaç diyagramı olarak verilmiştir [9].

1.3. Perovskit Güneş Pilleri

Perovskit güneş pilleri, benzersiz özelliklere sahip yeni nesil güneş pilleridir. Bu hücrelerin verimliliği yüksektir ve silikon hücrelerle karşılaştırılabilir. Ayrıca, bu hücreler nispeten daha düşük işletme maliyetlerine sahiptir ve daha düşük sıcaklıklarda üretilebilir. Bu hücrelerin asıl sorunu, son zamanlarda polimerler de dahil olmak üzere yapısal stabilizatörlerin kullanımı gibi çeşitli çözeltilere uygulanan stabilitelelerdir. Bu tip hücre, ışığı emen ve elektronlar ve boşluklar üreten perovskit emici bir tabakaya dayanır.

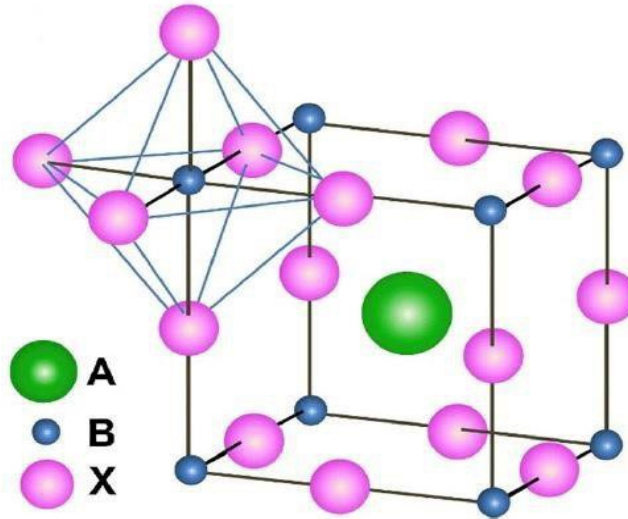
A katyonunda genellikle Lantanyum, B katyonunda ise genellikle (Mn, Ni, Co, Cu, Pd) gibi geçiş elementleri kullanılmaktadır.

1.3.1. Perovskit

Perovskit, kalsiyum titanattan (kimyasal formül CaTiO_3) oluşan bir titanyum oksit

kalsiyum mineralidir. Adı ayrıca, perovskit yapısı olarak bilinen aynı tip kristal yapı CaTiO_3 'e (genel formül ABX_3) sahip çeşitli bileşiklere de uygulanır [10]. Çeşitli mühendislik malzemelerinin geliştirilmesine izin veren bu formüle birçok farklı katyon dahil edilebilir [11].

Perovskitlerin başlıca uygulamalarından biri, ilk bölümde belirtildiği gibi, üretim süreçlerinin basitliği ve nispeten daha düşük maliyetlerin yanı sıra kabul edilebilir performansları nedeniyle son yıllarda araştırmacılar tarafından dikkate alınan perovskit güneş pilleridir. Yukarıdakilere ek olarak, perovskit güneş pillerinin kullanımlarını birçok araştırmacı için çekici bir konu haline getiren göze çarpan özelliklerinden bazıları şunlardır: ayarlanabilir bant aralığı, yüksek emme katsayıları, yüksek elektron penetrasyonu ve boşluk penetrasyon uzunluğu ve daha düşük sıcaklıklarda kaplama yetenekleri [12]. Perovskit güneş pillerinde kullanılan perovskitlerin genel formülü, A'nın tek değerli bir katyon, B'nin iki değerli katyonik ve X'in bir halojen olduğu ABX_3 'tür [13]. Perovskit güneş pillerinde kullanılan en yaygın monovalent katyonlar metilamonyum (CH_3NH_3^+) [12], aminyum ($\text{CH}(\text{NH}_2)_2^+$) [14], sezyum (Cs^+) [15] ve rubidyum (Rb^+) [15] 'dir. Kurşun iyonları (Pb^{2+}) [12], kalay (Sn^{2+}) [16] ve germanyum (Ge^{2+}) [17] esas olarak bu güneş pillerinde iki değerli katyonlar olarak kullanılır.



Şekil 1.8. Tek değerli katyonlarda sırasıyla ABX_3 (A, B ve X) genel formülüne sahip perovskit kristal yapısı

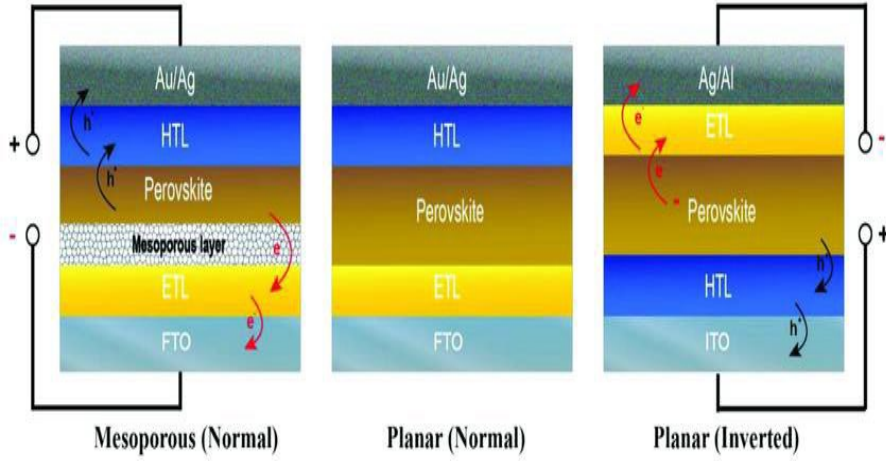
Son olarak, perovskit güneş pillerinde anyon olarak kullanılan halojenler genellikle iyot (I-), klor (Cl-) ve brom iyonlarını (Br-) [18] içerir. Güneş pillerinde kullanılan perovskit iyonlarının toplam kapasiteleri, perovskitin nötr bir malzeme olduğunu

göstermektedir [12]. Yukarıda Şekil 1.8 'de güneş pillerinde kullanılan perovskitlerin kristal yapısını ABX_3 genel formülü ile göstermektedir. Bu nedenle, nötr bir tabaka olan perovskit tabakasında elektron ve boşlukların oluşması nedeniyle bu tabaka silikon güneş pillerindeki boş bölgeye benzetilebilir. Bununla birlikte, mekanizmanın temeli bu iki nesil güneş pilinde farklılık gösterir. Perovskit güneş hücrelerinde, bu tip hücrelerin düşük kalınlığı nedeniyle (nanometrelerde) elektron penetrasyonu baskın mekanizmadır silikon güneş pilleri aydınlatma koşullarında diyotların performansına benzer şekilde işlev görür.

1.3.2. Perovskit Güneş Pillerinin Yapısı

Perovskit malzeme, perovskit güneş pillerinde emici bir tabaka olarak kullanılır. Işık bu katmana yayıldıktan ve ışığı emdikten sonra, elektron deliği çifti önceki bölümde açıklanan mekanizmalarla üretilecektir. Bundan sonra, yük taşıyıcıları perovskit tabakası tarafından yük toplama için ilgili elektrotlara aktarılır. Perovskit tabakası tek başına yük transferini hızlandırmak ve sistem performansını artırmak için yükü transfer etme yeteneğine sahip olsa da perovskit güneş pilleri genellikle perovskit tabakası ile karşılık gelen elektrotlar arasında elektron taşıma katmanları ve boşluklar kullanır. Elektron taşıma ve boşluk katmanları, silikon hücrelerdeki n-tipi yarı iletkenlere ve p-tipi yarı iletkenlere karşılık gelir. Elektron transferine ve boşluğuna ek olarak, transfer katmanları zıt yükleri bloke etmekten ve böylece sistemin verimliliğini arttırmaktan sorumludur. Elektron ve boşlukların üretiminden sonra elektronlar elektron transfer tabakası (ETM) ile negatif elektroda (katot) aktarılır ve boşluklar boşluk taşıma tabakası (HTM) tarafından pozitif elektroda (anot) aktarılır ve yük toplama işlemi gerçekleştirilir [19, 20].

Aşağıdaki şekil 1.9' da elektrotların ışığa maruz kaldığına bağlı olarak, perovskit güneş pillerinin yapıları iki genel kategoriye ayrılabilir: doğrudan ve ters çevrilmiş. Ek olarak, mezogözenekli taşıma katmanlarının emici tabakanın etrafında kullanılıp kullanılmadığına bağlı olarak, iki yapının her biri iki tip plaka ve mezogözenekli tipe ayrılabilir.



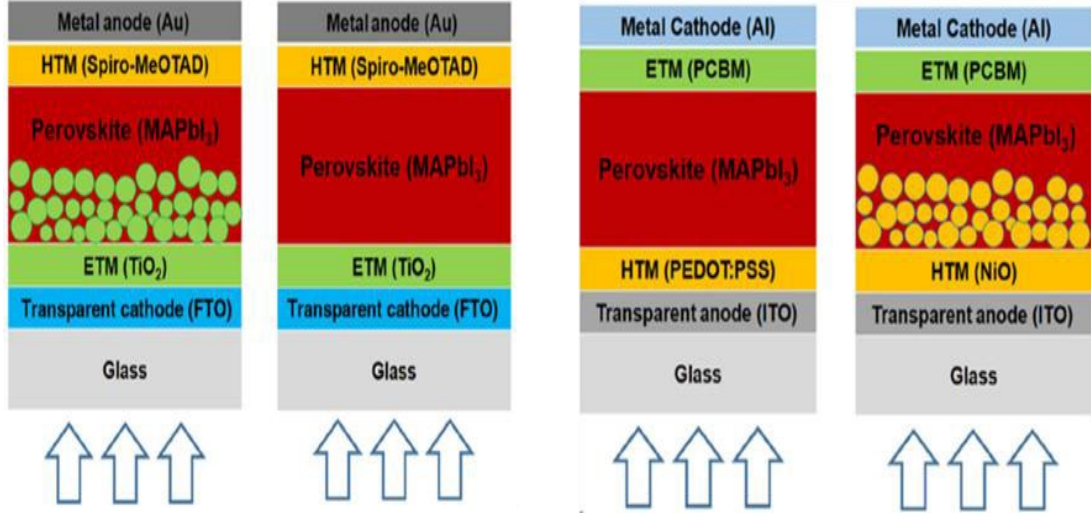
Şekil 1.9. Perovskit güneş pillerinin yapıları iki genel kategoriye ayrılabilir: doğrudan ve ters çevrilmiş

1.3.2.1. Doğrudan yapılı perovskit güneş pilleri

Perovskit güneş pilleri aslında renge duyarlı hücrelerin (DSSC) değiştirilmiş bir şeklidir, ancak DSSC hücrelerinde taşınan boya ve elektrolitler yerine, katı tabakalar perovskit hücrelerinde adsorban ve taşıma katmanları olarak kullanılır. Güneş pillerinin bölünmesinde de durum bundan yanadır. İlk doğrudan yapılı Perovskit güneş pili veya N-I-P, boya yerine perovskit katı adsorbanının kullanıldığı sıvı elektrolitlere dayalı bir güneş pildir [21]. Perovskit güneş pillerini kullanmaya yönelik teşvikler, sıvı elektrolitlerin katı hal boşluğu taşıyıcıları ile değiştirilmesiyle mezogözenekli yapılar oluşturulduğunda artmıştır [22]. Katmanların bu tip perovskit güneş pili yapısına yerleştirilme şekli, yapının şeffaf bir cam katot ile başlaması ve ardından elektron transfer malzemeleri (ETM'ler) ile devam etmesidir. Yapı daha sonra perovskit içeren mezogözenekli bir metal oksit ile kaplanır, ardından boşluk taşıma malzemesi (HTM) ile kaplanır ve metal bir anot ile kaplanır. Perovskit güneş pillerindeki bu erken atılım, fotovoltaik araştırmacılar için önemli bir alan sağladı ve böylece perovskit güneş pillerinin diğer konfigürasyonlarının geliştirilmesine yol açtı [12]. Plaka yapısı, ışık emici tabakanın ETM ve HTM arasında bulunduğu mezogözenekli yapının evrimleşmiş bir şeklidir. Mezogözenekli bir metal oksit tabakasının yokluğu, plaka modunun daha basit bir genel yapısına yol açar. Katmanların ortak yüzeylerinde korozyonu önlemek için plaka yapısının şekillendirme katmanlarının dikkatli bir şekilde kontrol edilmesiyle, mezogözenekli yapıyla karşılaştırılabilir yüksek verimler elde edilebilir [23]. Şekil 1.10' da sol tarafta düz durumun mezoporöz ve plaka yapılarının genel şemasını göstermektedir.

1.3.2.2. Ters yapılı perovskite güneş pilleri

Ters bir yapıya sahip perovskit güneş pillerinin yapısı veya p-i-n olarak adlandırılır, organik güneş pillerinden türetilir [25]. Bu yapılandırılmada, HTM katmanı ETM katmanından önce katmanlanır [26].

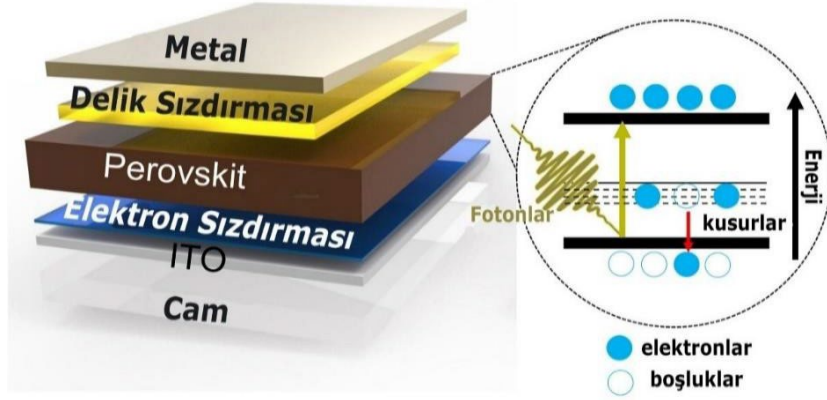


Şekil 1.10. Doğrudan perovskit güneş pillerinin mezogözenekli yapılar için ters modda perovskit güneş pillerinin genel şeması

Perovskit tabakasının boşlukları taşıyabildiğini kanıtladılar ve buna göre ilk perovskit ters plaka yapısını sundular [27]. Bu keşif ve ilerleme, ters yapı katmanlarında organik ve inorganik malzemelerin kullanımı için daha fazla araştırmaya yol açtı ve ters mezogözenekli yapılar inşa etmek için oksit durumlu kavitsiyonel taşıyıcıları kullanma fırsatı oluşturdu [20, 28]. Şekil 1.10' da sağ tarafta plakanın genel bir şemasını ve ters konfigürasyonun mezogözenekli yapılarını göstermektedir.

1.3.3. Perovskit Güneş Pilinin Katmanlarının İncelenmesi

Perovskit güneş pilleri genellikle emici tabaka (perovskit), elektron taşıma tabakası (ETM), boşluk transfer tabakası (HTM) ve iki süpernatant ve arka elektrot (anot ve katot) dahil olmak üzere üç aktif tabakadan (Şekil 1.11) oluşur. Bu katmanların her biri, silikon hücreler de dahil olmak üzere diğer güneş pillerine kıyasla perovskit güneş pillerinin yapı çeşitliliğini artıran farklı tiplere sahiptir. Aşağıda, her katmanda kullanılan malzeme türlerini ve bunları kullanmanın avantajlarını ve dezavantajlarını açıklayacağız.



Şekil 1.11. Perovskit güneş pilinin katmanları

1.3.3.1. Emici tabaka

Daha önce tartışıldığı gibi, perovskit güneş pillerinde ışığı emmek için kullanılan perovskitler genellikle tek değerli bir katyon, iki değerli bir katyon ve bir halojenür iyonu içerir. Şu anda $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$, ışığı emme etkisi için en yaygın perovskit malzemesidir. Bununla birlikte, katyonla karıştırılmış perovskitler halojenür karışımları ve karışık halojenür katyon perovskitleri gibi diğer perovskit malzemeleri, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ perovskitlerine göre avantajları olduğu için giderek daha fazla dikkat çekmektedir. Ek olarak, araştırmacılar kurşun toksisitesini önlemek için kurşun iki değerli katyonlar için alternatif malzemeler bulmaya çalışıyorlar [12].

Yukarıdakilere göre, perovskit tabakasının her bir iyon bileşeninin optimizasyonu, güneş pillerinin performansında etkili faktörlerden biri olacaktır. Örneğin, metilamonyum (CH_3NH_3), daha iyi performans nedeniyle perovskit tabakası sentezinde kullanılan en popüler monovalent katyondur. Bununla birlikte, metilamonyum bant boşluğunun güneş pillerinin bant aralığı (1.1 eV-1.4 eV) için en uygun bölgede olmadığı ve yaklaşık 1.6 eV olduğu göz önüne alındığında, daha büyük iyon yarıçapına ve daha küçük bant aralığına sahip başka bir monovalent katyonun seçilmesi ve dolayısıyla daha iyi adsorbsiyon daha yüksek verimlilik sağlayacaktır [29]. Ayrıca, metilamonyum bazlı perovskitler düşük zamansal ve termal stabilite gösterir [30]. Çalışmalar, metilamonyum yerine aminyum (NH_2)²⁺ formunu kullanarak, bant boşluğunun optimal bant boşluğuna yaklaştığını ve yüksek ışık emilimine yol açtığını göstermiştir [31]; Ayrıca, sistemin termal kararlılığı artar [32]. Ek olarak, periyodik tablo veya alkali metallerin ilk grubundaki elementler, özellikle

sezyum (Cs^+) ve rubidyum (Rb^+), perovskitlerde monovalent katyonlar olarak da kullanılabilir [15].

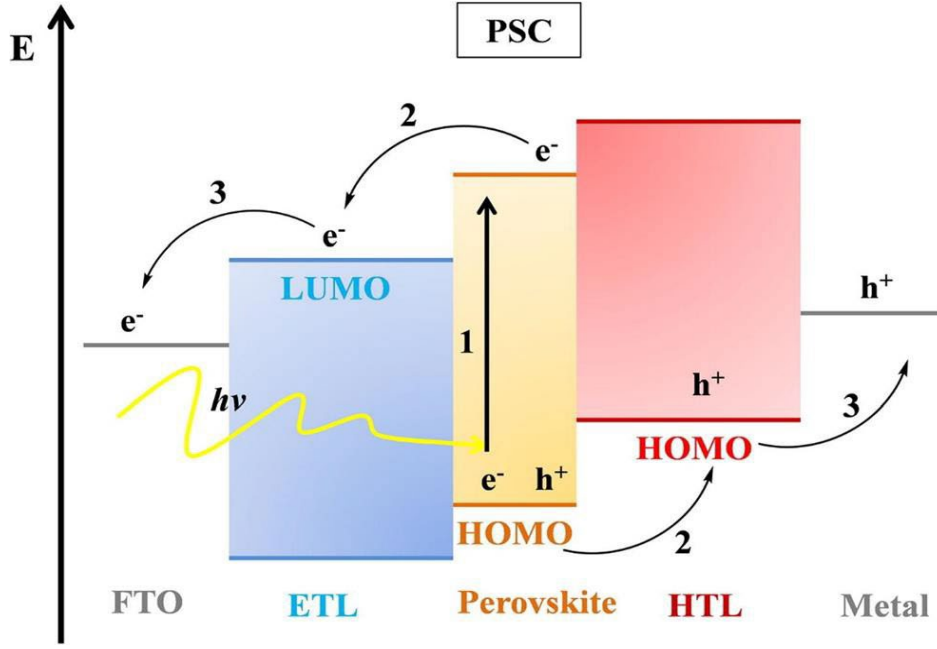
Perovskit tabakasında iki değerli katyon seçimi ile ilgili zorluklar da vardır. Son çalışmaların sonuçları, iki değerli katyon olarak kurşun (Pb^{2+}) kullanımının diğer katyonlardan daha iyi verimlilik gösterdiğini göstermiştir [12]. Bununla birlikte, kurşunun toksisitesi ve yıkıcı çevresel etkileri, kesin seçimini şüpheyle yapmıştır. Genel olarak, kurşundan sonra, kalay iyonu (Sn^{2+}) en iyi iki değerli katyon alternatifi olarak bilinir. Bununla birlikte, kalay kullanımı belirli bir süre sonra kalay oksidasyonu gibi sorunlara da neden olur [16].

Genel olarak, klor, brom ve iyot anyonları veya bu iyonların bir kombinasyonu, güneş pillerinin perovskit anyonu olarak kullanılır. Perovskitlerdeki halojen iyonlarının değiştirilmesi veya karıştırılması, optik-elektronik özelliklerini düzenleyebilir [12]. Çalışmalar, iyonik halojenür boyutu arttıkça bant boşluğunun azaldığını göstermiştir. Fotovoltaik açıdan bakıldığında, her perovskit yapısının belirli avantajları vardır. Örneğin, $CH_3NH_3PbI_3$ ve $CH_3NH_3PbBr_3$ sırasıyla tek bantlı boşluk emiciler ve tandem veya tandem yapı uygulamaları için uygundur, $CH_3NH_3PbCl_3$ ise ışık yayan cihazlar için daha kullanışlıdır [33].

1.3.3.2. Elektron taşıma tabakası (ETL)

Elektron taşıma tabakası ETL boşlukları tıkamaktan ve elektronları karşılık gelen elektrota aktarmaktan sorumludur. Bununla birlikte, uygun elektron taşıma katmanının bazı özelliklere sahip olması gerekir. Bu tabaka, elektronların hızlı transferi için yüksek elektron hareketliliğine sahip olmalıdır. Ayrıca elektronların alt bantlarda kalma eğilimi nedeniyle iletim bandı ve bu tabakanın kapasitesi perovskit tabakasından ve boşluk taşıma tabakasından daha düşük olmalıdır [34]. Bu, aşağıdaki şekil 1.12'de açıkça gösterilmiştir.

Elektron taşıma tabakasının perovskit güneş pillerinin yapısındaki temel rolü göz önüne alındığında, bu tabaka için en uygun malzemeyi seçmek gerekli görünmektedir. Elektron taşıma tabakasında kullanılan malzemeler iki gruba (organik ve inorganik) kategoriye ayrılır [12]. Bu kategorilerin her birinin bir açıklaması olacaktır.



Şekil 1.12. Perovskit Güneş Pili Katmanlarının Şematik Eksenel Şeması

Elektron taşıma tabakası çoğu fotovoltaik güneş pili, elektronları anoda aktarmak için seçici bir temas tabakası görevi gören elektron taşıma tabakası (ETL) olarak geçiş metali elementlerinin oksitlerini kullanır. Bu oksitler inorganik elektron taşıyan tabakalar olarak sınıflandırılır. Bu tip elektron taşıma katmanları, genellikle şeffaf malzemeler oldukları için doğrudan bir yapıya sahip perovskit hücrelerinde yaygın olarak kullanılır [12]. Elektron taşıma tabakasında kullanılan en ünlü mineral tabakaları aşağıda verilecektir.

Titanyum dioksit (TiO₂): Şu anda, mükemmel elektron taşıma özellikleri ve nispeten daha iyi verimliliği nedeniyle, titanyum dioksit (TiO₂), n-i-p perovskit güneş pillerinin yapısında kullanılan en yaygın elektron taşıma malzemesidir. Bu malzemenin sentez işleminin, yapısının uçucu bileşiklerinin uzaklaştırılması için 500 ° C'de sinterleme ile ilgili yüksek hassasiyeti ve bu malzemenin neme duyarlılığı nedeniyle, sentez sürecinde birçok husus göz önünde bulundurulmalıdır [35]. Bu sorunu çözmek ve TiO₂ sentez işleminin duyarlılığını azaltmak için çalışmalar ve çabalar yapılmıştır [36-38]. Yukarıdakilere ek olarak, TiO₂ tabakası daha az stabilite ve daha az elektron hareketliliği gösterir [39].

Çinko oksit (ZnO): TiO₂ tabakası ile ilgili problemler göz önüne alındığında, diğer malzemelere yönelmek mantıklı görünmektedir. Son yıllarda TiO₂ replasmanı için önerilen malzemelerden biri, yüksek elektron hareketliliği gösteren ve düşük sıcaklıkta

yapma sürecinde mümkün olan çinko oksit (ZnO) [40]. Bununla birlikte, TiO₂ biraz daha düşüktür ve ayrıca kimyasal olarak kararsızdır [41].

Kalay oksit (SnO₂): Son zamanlarda, kalay oksit (SnO₂), geniş bant aralığı, yüksek şeffaflığı ve yüksek elektron hareketliliği nedeniyle umut verici bir elektron taşıma tabakası olarak değerlendirilmiştir [12]. Yukarıdaki özelliklere göre, TiO₂ gibi yaygın bir malzeme yerine SnO₂ kullanımı etrafında çalışmalar yapılmış ve nispeten iyi sonuçlar elde edilmiştir. Ayrıca inorganik elektron taşıyıcı olarak da kullanılabilir. Bu malzemeler iyi optik-elektriksel özellikler sergiler ve iyi sonuçlar verebilir. Bununla birlikte, performansları önceki malzemelerden daha düşüktür [12].

1.3.3.3. Boşluk transfer tabakası (HTM)

Elektron taşıma tabakası gibi ve zıt yüklü boşluk taşıma tabakası, elektronları bloke etme ve boşlukları bir perovskit güneş hücresindeki karşılık gelen elektrota aktarma rolünü oynar. Elektron taşıma tabakası gibi, bu katman da bir güneş pilinin performansı üzerinde önemli bir etkiye sahiptir ve bu nedenle bunun için doğru malzemeyi seçmek önemlidir. İdeal bir HTM bazı temel özelliklere sahip olmalıdır [42]. Örneğin, işgal edilen moleküler devresinin (HOMO) en yüksek enerji seviyesi, verimli boşluk transferi, iyi boşluk hareketliliği ve yüksek termal ve fotokimyasal stabilite için perovskit tabakası ile orantılı olmalıdır [12].

1.4. Elektrotlar

Bu bölümün başında tartışıldığı gibi, genel olarak, güneş pillerindeki elektrotlar yük toplanmasından sorumludur ve iki tip katot (negatif elektrotlar) ve anotlar (pozitif elektrotlar) olarak ayrılır. Perovskit güneş pilindeki katot elektrodu, elektron taşıma katmanından elektrotları toplama rolüne sahiptir ve anot elektrodu, boşluk taşıma katmanından boşluk toplama rolüne sahiptir. Perovskit güneş pillerinin (taşıma katmanları ve adsorban tabakaları dahil) performansının belirlenmesinde, katmanların kalınlığı, bant boşlukları, elektron arama, dielektrik sabiti gibi birçok parametre etkilidir. Elektron ve boşluk katmanlarında (elektrotlar), istenen elektrotun çalışma fonksiyonu performansını belirler. Katı hal fiziğinde, çalışma fonksiyonu, bir elektronu bir katıdan katı yüzeyin hemen dışındaki bir vakumdaki bir noktaya çıkarmak için gereken minimum termodinamik çalışmadır (yani, enerji) (burada hemen, nihai elektronun konumunun atomik ölçekte yüzeyden uzak olduğu, ancak

yine de bir vakumdaki ortam elektrik alanlarından etkilenmeyen katıya çok yakın olduğu anlamına gelir) [43].

Yukarıdaki açıklamalara göre Güneş pillerinde kullanılan elektrotların düşük bir çalışma fonksiyonuna sahip olması daha iyidir, böylece istenen hücre yüksek performansa sahiptir. Elektrot olarak kullanılan malzemeyi optimize etmek için tek gereklilik bu değildir. Örneğin, gümüşün çalışma fonksiyonu altıninkinden daha azdır [44]. Ancak zamanla gümüşte meydana gelen oksidasyon süreci hücre fonksiyonunu azaltır.

Perovskit güneş pillerinde kullanılan negatif elektrotlar genellikle flor katkılı kalay oksit (FTO) ve indiyum katkılı kalay oksit (ITO) gibi iletken camdır. Pozitif elektrotlar, genellikle altın, gümüş, alüminyum vb. dahil olmak üzere uygun çalışma fonksiyonuna sahip metalleri içerir. Ar. Elektrotlar arasında, FTO ve altın elektrotlar genellikle sırasıyla katot ve anot için diğer malzemelerden daha iyi sonuçlar verir [6].

1.5. Perovskit Güneş Pili Yapılarının Optimizasyonu

Bir perovskit güneş pilinin her katmanındaki çok çeşitli malzeme kategorileri nedeniyle, birçok hücre yapısı oluşabilir. Bu nedenle, bu tip hücrelerde optimal bir yapı seçmek gerekli görünmektedir. Her katmanda uygun malzemenin seçilmesi ve kategorize edilmesi için önceki bölümlerde sunulan açıklamalara göre, genel olarak, her katmanın optimum malzeme karar göstergeleri maliyet, sentez ve verimlilik olmak üzere üç kategoriye ayrılabilir. Söz konusu katmanların her birinin sentez ve kaplama yöntemi, çalışma sıcaklığı, kullanılan malzemelerin toksisitesi ve özellikleri gibi farklı faktörlere tabidir. Yaşam Döngüsü Değerlendirmesi adı verilen daha genel bir endekse dahil edilebilir. Diğer herhangi bir yaşam döngüsü çalışması gibi, katmanların sentezi ve bunların birikmesi, bazıları küresel ısınmayı, maddenin toksisitesini vb [45]. İçerecek olan birkaç küçük göstergeye bölünecektir. Bu kısmi endekslerin toplanması, her bir yapının malzeme maliyeti ve verimliliğinin genel endeksleri ve bunların rekombinasyon oranları ile birlikte, optimizasyon sürecinin temelini oluşturacaktır. Genel olarak endeksler ile yapılan bu optimizasyonun amacı, daha az çevresel yıkıcılığa, daha düşük işletme maliyetlerine ve daha yüksek sistem verimliliğine ve performansına sahip bir yapı elde etmektir. Sistemin kararlılık endeksi de araştırılabilir ki bu elbette sistemin verimliliği ile doğrudan bir ilişkisi vardır ve bağımsız bir gösterge değildir bu nedenle verimlilik endeksinin kullanılması yeterlidir [46].

1.6. Çevrenin Etkileri

"Sürdürülebilir kalkınma"ya ulaşmak, toplum için malzeme ve hizmet üretimi için çevresel etkilerin ölçülmesine ve karşılaştırılmasına yardımcı olacak yöntem ve araçlar gerektirir. Bu ürünler bir ihtiyacı karşılamak için oluşturulur ve kullanılır. Her ürünün, ürün tasarımı/geliştirilmesi ile başlayan, ardından kaynak çıkarma, üretim (malzeme üretimi ve imalat/tedarik), kullanım/tüketim ve son olarak faaliyetlerin ömrünün sona erdiği (atıkların toplanması, yeniden kullanılması, geri dönüşümü, bertarafı) bir ömrü vardır. Bir ürünün ömrü boyunca tüm faaliyetler veya süreçler, kaynak tüketiminden, malzemelerin doğal çevreye yayılmasından ve diğer çevresel değişimlerden kaynaklanan çevresel etkilere neden olur [47].

1.7. Çok Kriterli Karar Verme

Her katmanda aralarından seçim yapabileceğiniz yaklaşık yüzlerce farklı malzemeyle, tüm bu yapıları test etmek için simülasyon veya deneysel araçlar kullanarak malzemelerin en uygun şekilde karıştırıldığı yapıları bulmaya çalışmak zaman alıcı ve maliyetli olacaktır. Bu nedenle, bu problemi çözmek ve deneysel çalışmalarda sunum için en uygun yapıyı elde etmek için çok amaçlı optimizasyon süreci önerilmektedir.

Optimizasyon, istenen uygulamaya bağlı olarak istenen işlevi veya endeksi en aza indirgeyerek veya en üst düzeye çıkararak bir malzemenin veya durumun parametresini veya özelliklerini optimize eden ve en iyi değeri veya cevabı sağlayan problemleri değerlendirmek ve tasarlamak için uygun bir araçtır. Göstergelerin veya fonksiyonların sayısının birden fazla olduğu ve amacın tüm bu göstergeler için en uygun durumları dikkate almak olduğu durumlarda, çok amaçlı optimizasyon dikkate alınacaktır. Başka bir deyişle, çok amaçlı optimizasyon sürecindeki genel amaç, aynı anda bir dizi maksimum ve minimum fonksiyonla optimum bir çözüm elde etmektir. Çok amaçlı optimizasyonda gösterge olarak mevcut minimum ve maksimum fonksiyonlar kümesi göz önüne alındığında, mevcut modlardan bir dizi optimum çözüm elde edilecektir. Bu genellikle çok amaçlı optimizasyon sürecinde bir sorun olarak görülür. Nesnel fonksiyonların ve göstergelerin eşit öneme sahip olduğu durumlarda, farklı karar verme yöntemlerinin kullanılması önerilir.

1.8. Araştırma Geçmişi

1.8.1. Perovskit güneş pilleri ile ilgili yapılan literatür çalışmalar

İlk perovskit minerali (Şekil 1.13), Prusyalı mineral bilimci Gustav Rose (1839) tarafından Ural bölgesinde yer alan Akhmatov madeninden çıkarılıp kendisine gönderilen klorit bakımından zengin bir kayaç parçasında bulunmuştur. Mineralin ismi Rus meclisinde bakanlık yaparken arkeoloji, madencilik ve taş işçiliği konusunda reformların yapılmasında önemli rol alan Napolyon Savaşları gazisi Kont Lev A. Perovski (1792–1856) onuruna atfedilmiştir.



Şekil 1.13. Fotoğraf-Kont Lev A. Perovski, Gustav Rose, perovskit minerali.

Mineralin keşfinden sonra ilerleyen yıllarda kalsiyum titanat (CaTiO_3) yapısında perovskit kristali sentezlenerek patenti alınmıştır. Farklı iyonlar kullanılarak oluşturulan oksit yapısındaki perovskit kristallerinin araştırmaları yapılmıştır. BaTiO_3 , PbTiO_3 , SrTiO_3 , BiFeO_3 gibi perovskit yapıları ferroelektrik özellikleri nedeniyle fotovoltaik sistemlerde uygulama bulmaya başlamış ancak yarı iletken özelliklerinin iyi olmaması nedeniyle yaygınlaşmamıştır. Ancak halid perovskit kristali (ABX_3 ; A: katyon, B: divalent metal katyonu, X: halojen anyon) oksit formuna göre güneş hücreleri için kullanılabilinecek uygun yarıiletken özellik göstermiştir. İlk olarak 1893 yılında Wells sezyum kurşun halid bileşikleri CsPbX_3 ($X = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) üzerine önemli bir çalışma yapmıştır. Daha sonra Møller CsPbX_3 yapısının yüksek sıcaklıkta bozulmuş tetragonal yapıdan kübik faza geçtiğini kanıtlamıştır. Sezyum yerine farklı katyonlar $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ ve kurşun yerine kalay kullanılarak $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnBr}_3$ ($x=0-3$) [28], farklı perovskit yapıları oluşturulmuştur.

Tablo 1.1. Perovskit güneş pilinin araştırılmasında yardım eden kişiler ve yaptığı araştırmalar

S. No	Yıl	Grup	Konu
1	2009	Miasaka ve ark [23].	İlk perovskit güneş pilini araştırdılar. Perovskit uyarılılaştırılmış hücreler (PSSC) adı verilen hücreleri sentezlediler ve yapıda boyalar yerine katı bir perovskit emici tabaka kullanıldı.
2	2012	Kim ve ark [24].	Kim ve meslektaşları bu sorunu 2012 yılında katı bir boşluk taşıma katmanı Spiro-OMeTAD sağlayarak çözdüler.
3	2016	Tan ve ark [48].	Farklı polimer HTM katmanları PTAA, MEH-PPV, P3HT, PTV ve PCPDTBT ve polimerik olmayan Spiro-OMeTAD, CuI kullanmanın MAPbI ₃ bazlı perovskit güneş pilinin temel parametreleri üzerindeki etkisini araştırmıştır.
4	2016	Bansal ve ark [49].	ETM katman malzemeleri için TiO ₂ , CdS, ZnO(0.3)S(0.7), ZnO, ZnSe, ZnS ve HTM katman malzemeleri için Spiro-OMeTAD malzemeleri, Cu ₂ O, CuSCN, NiO, CsSnI ₃ 'ü dikkate aldılar ve HTM için Spiro-OMeTAD katmanını sabitleyerek ve tüm ETM'leri test ederek ve ETM için TiO ₂ 'yi sabitleyerek ve tüm HTM'leri test ederek verimliliği hesapladılar.
5	2017	Mandapu ve ark [50].	İki kat boşluklu taşıyıcı ve farklı polimer elektronlar PEDOT: PSS ve PCBM içeren MAPbI ₃ bazlı perovskit güneş pilleri üzerinde çalışılmış ve emici tabakanın kusurlarının kalınlığının ve yoğunluğunun ve transfer katmanlarının safsızlığının güneş pilinin temel parametreleri üzerindeki etkisini araştırmıştır.

Tablo 1.1. (Devamı) Perovskit güneş pilinin araştırılmasında yardım eden kişiler ve yaptığı araştırmalar

S. No	Yıl	Grup	Konu
6	2017	Ramelia ve ark	Silikon hücrelerle birleştirilmiş MAPbI ₃ perovskit hücrelerinin bir simülasyon çalışması, 2017 yılında [51]. Ramelia ve ark tarafından gerçekleştirilmiştir. Simülasyonu üç modelde (1) sadece silikon hücreler (2) TiO ₂ taşıma katmanına sahip perovskit kuplajlı silikon hücreler ve (3) TiO ₂ tabakası olmadan gerçekleştirdiler.
7	2018	Timurid ve ark	2018 yılında, Timurid ve ark boşluk taşıma katmanlarını değiştirmek için yeni fikirler ortaya koydu ve bazı bakır tuzlarının (CuSbS ₂ ve CuInS ₂) program tarafından kullanılmasının verimliliğini ölçtüler. Kendi analizlerinin Spiro-OMeTAD'inkinden biraz daha yüksek olduğunu gösterdi.
8	2019	Raoui ve ark	2019 yılında Raoui ve meslektaşları, SCAPS-1D programı ile bakır tuzları ve Spiro-OMeTAD gibi diğer alternatif malzemeleri kullanarak HTM polimer tabakasının P3HT polimer ile kullanımını araştırdılar. Ayrıca Spiro-OMeTAD'ı HTM olarak sabitleyerek TiO ₂ , ZnO ve SnO ₂ gibi çeşitli ETM katmanlarını test ettiler.
9	2019	Chauduri ve ark	Chauduri ve ark SCAPS-1D programını kullanarak PEDOT: PSS polimer boşluk taşıma katmanına sahip bir perovskit güneş pilinin parametrelerini incelediği ve her birinin değerlerini optimize ettiği 2019 yılında başka bir çalışma yapılmıştır.

Tablo 1.1. (Devamı) Perovskit güneş pilinin araştırılmasında yardım eden kişiler ve yaptığı araştırmalar

S. No	Yıl	Grup	Konu
10	2019	Razaghi ve ark [55].	2019 yılında Razaghi ve ark. adsorban tabakada iki eşzamanlı perovskit kullanımı etrafında COMSOL programında simülasyon kullanarak üç boyutlu bir çalışma yürütmüştür.
11	2020	Abdul Al Hussein ve ark [56].	Abdul Al Hussein ve ark. tarafından yapılan bir 2020 çalışması, bu kez PANI / SWCNTS nanokompozitini kullanarak, boşluk taşıma tabakasında polimer malzemelerin kullanımına baktı. İki tip HTM kullanarak perovskit güneş pilleri ürettiler ve simüle ettiler.
12	2020	Abdelalaziz ve ark [57].	Perovskit hücrelerinde yeni monovalent katyonun etkisi 2020 yılında Abdelalaziz ve ark. tarafından araştırılmıştır. Bu çalışmada metilamonyum (MA) yerine amidinyum (FA) formu, kurşun yerine kalay kullanılmıştır.
13	2020	Timurid ve ark [58].	2020 yılında, Timurid ve ark TiO ₂ elektron taşıma katmanını farklı lityum yüzdeleriyle yoğunlaştırmak için yeni bir fikir ortaya attılar. Lityum eklenmesinin elektron taşınımını iyileştireceğini ve titanyum dioksitteki hareket direncini azaltacağını öne sürüyorlar.
14	2020	Singh ve ark [59].	Farklı x-25, 0.1878, 0.125, 0.0625 ve 0 için Mg(x)O Zn(1-x) Mg(x)O adı verilen yeni bir elektron taşıma katmanı, 2020 yılında CsPbI ₂ Br perovskite dayalı olarak Singh ve ark. tarafından gerçekleştirilmiştir.

1.9. Arařtırma Amacı

Perovskit güneř pilleri, benzersiz özellikleri nedeniyle son yıllarda arařtırmacılar tarafından fark edilen en verimli güneř pilleri arasındadır. Bu nedenle bu tezde bu hücreler arařtırılmaya çalıřılmış ve simülasyon aşaması yardımıyla bu hücrelerin performansı ölçülmüş ve tahmin edilmiştir. Bu tezin ikinci bölümünde perovskit güneř pilleri tam olarak tanıtılmaya ve bu hücrelerin her bir tabakasında kullanılan malzemeler incelenmeye çalıřılmıştır. Bu bölümde, bu malzemelerin verimlilik, maliyet ve çevresel etki faktörlerine dayanarak seçilmesinin zorluklarını ele almaya çalıřtık. Üçüncü bölümde, ilgili simülasyon programına giren perovskit güneř pillerinin katmanlarında kullanılan malzemelerin özellikleri özetlenmiştir. Ayrıca bu arařtırmada kullanılan simülasyon program ve araçlarına ilişkin açıklamalar sunulmuş ve tüm yönleriyle arařtırılmıştır. Bu arařtırmada güneř pili tasarımı ve verimliliğinin simülasyonu SCAPS-1D programı ile yapılmıştır.

2. MATERYAL VE YÖNTEM

2.1. Güneş Hücresi Kapasite Simülatör Programı (SCAPS -1D)

Gelen ışık fotonlarının enerjisinin bir p-n yarı iletken bağlantı cihazı tarafından elektrik enerjisine doğrudan dönüştürülmesi, fotovoltajik (PV) etkisi olarak bilinir. Chapin ve ark [65]. 1954 yılında silikon güneş pillerini %6'lık bir dönüşüm oranıyla sunmuş, PV'lerin yeni bir çağının başlangıcı olarak kabul edilmiştir. Bu fenomen zaten bir yüzyıldan fazla bir süredir biliniyordu. Bu konseptte, güneş hücreleri, özellikle uzay endüstrisi için, uzak konum cihazlarına sürekli güç sağlamanın çok etkili bir yolu olarak hızla kabul edilmiştir. Tabi ki, bu fotovoltajik uygulaması günlük hayatımızda var olan diğer kullanımlara hızla yayıldı. Güneş pillerinin yapısı, özellikleri ve çalışma prensipleri dünya çapında kapsamlı bir şekilde incelenmiş ve literatürde bildirilmiştir [66]. Foton enerjisi, kullanımdaki yarı iletkenin enerji bant aralığından daha büyük olduğunda veya onunla eşleştiğinde, malzeme tarafından emilebilir. Fotonun emilimi sonucu kazanılan enerji, elektronu valans bandından serbestçe hareket edebileceği iletim bandına uyarır bir deliğin arkasında bırakmak (elektron yokluğu). Elektron deliği çiftinin üretimi depletion bölgesinde (güneş pilinin p-n kavşağındaki temas alanı) olduğunda, bu alandaki mevcut alan onları dış (sol ve wright) kontaklarda toplanabilecekleri yerde ayıracaktır.

Güneş pilleri kavramı basit olsada, yapımı ve geliştirilmesi çok fazla zaman ve enerji tüketir. Bu sorunun üstesinden gelmek için, bazı gruplar çeşitli programlar geliştirmeye başlamış ve bu güneş mahzenlerinin modellenmesi üzerinde çalışmışlardır. Programların karmaşıklık seviyesi birinden diğerine değişir ve çoğunlukla tanıtılan çıktı verilerine bağlıdır. Son yıllarda en sık kullanılan programlar COMSOL [67], SILVACO ATLAS [68], AMPS [69], wxAMPS [70] ve SCAPS [71-76]'dir.

Bu yazılımlar arasında SCAPS programının çok geniş çıktı ve giriş verisi yelpazesine sahip yeni başlayanlar için çok kolay olduğu düşünülmektedir [72]. Bu yazıda, bu programı tanıtmayı ve çoklu işlevleri hakkında kısa bir açıklama yapmayı amaçladık.

2.2. SCAPS-1D Programına Genel Bir Bakış

SCAPS-1D programının ilk versiyonu 1998 yılında Belçika'daki Gent Üniversitesi, Elektronik ve Bilgi Sistemleri Bölümü'nde (ELIS) Marc Burgelman grubu tarafından geliştirilmiştir. Bundan sonra bu yılın sonlarına kadar 50'den fazla versiyon geliştirilmiştir (SCAPS 3.3.10) [77,78].

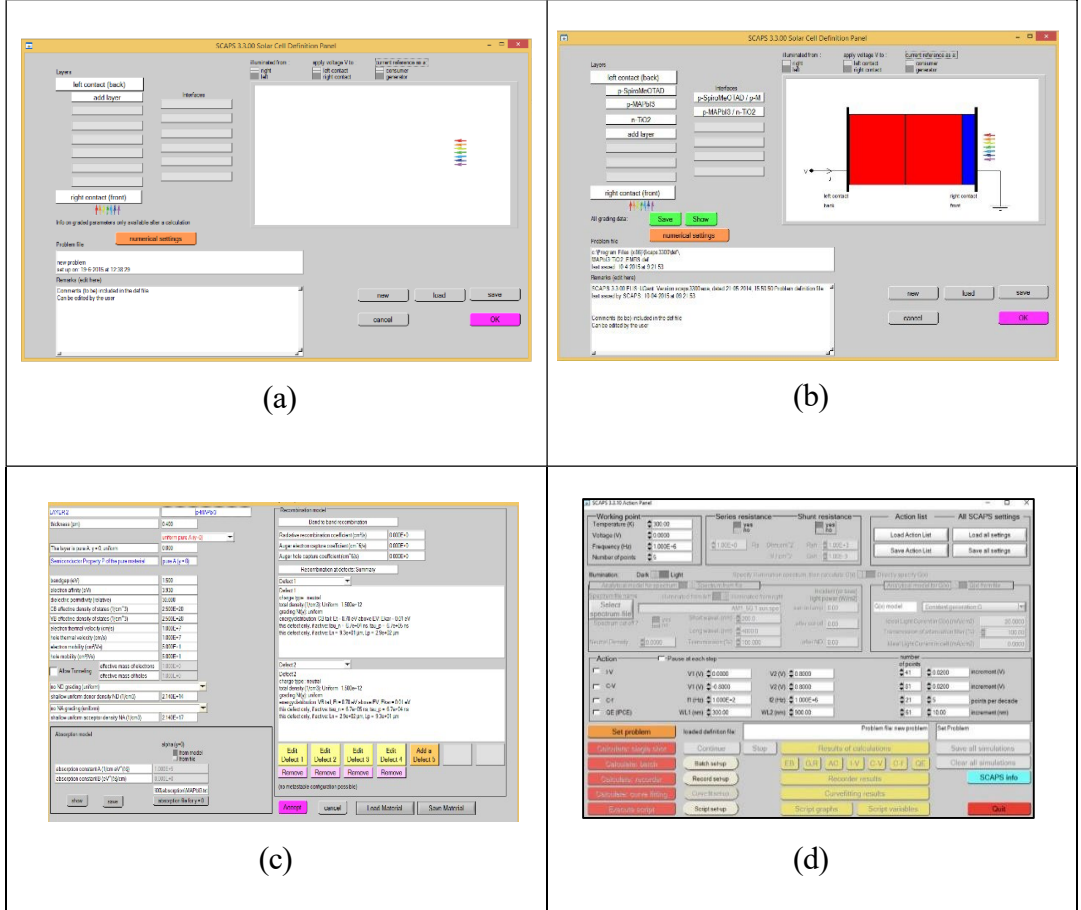
SCAPS-1D programının doğru kullanılabilmesi için bazı önemli adımların göz önünde bulundurulması gerekmektedir. Bu açıklama bölümünde sunulan örnek, SCAPS-1D paketinden alınmıştır.

Program, akım-gerilim I-V, kapasite-gerilim (C-V), kapasite-frekans (C-f) ve kuantum verimliliği (QE) şeklinde sonuçlar sağlayabilir. I-V diyagramları aracılığıyla açık devre voltajı (V_{OC}), kısa devre akımı (I_{SC}), doldurma faktörü (FF) ve güç dönüştürme verimliliği (PCE) dahil olmak üzere güneş pilinin fotovoltaiik parametreleri Toplu hesaplama işlevselliği, katmanların ve katman malzemelerinin parametrelerini - optimize etmek için bu programda da mümkündür. Bu tür bir hesaplamada, program bir katmanın farklı kalınlıkları gibi katmanların farklı parametre değerlerinde hesaplamaları kontrol edebilir [60].

2.3. Sayısal Simülasyonlar

Simülasyon, fiziksel operasyon, önerilen fiziksel açıklamanın uygulanabilirliği ve fiziksel değişikliklerin güneş pili cihazlarının performansı üzerindeki etkisi hakkında derinlemesine bilgi edinmek için çok önemli bir tekniktir. Güneş pilleri simülasyonu için çeşitli simülasyon modelleri (SCAPS, AMPS, SCAP vb.) bulunmaktadır. SCAPS (Güneş hücresi kapasite simülatörü), Belçika Gent Üniversitesi Elektronik ve Bilgi Sistemi bölümünde bir grup güneş pili araştırmacısı tarafından geliştirilen yedi yarı iletken giriş katmanına sahip tek boyutlu simülasyon programıdır. Simülasyon çalışmaları olmadan bir güneş pili tasarlamak hem pratik hem de zaman ve para kaybıdır. Sadece riski, zamanı ve parayı en aza indirmekle kalmaz, aynı zamanda güneş pili performansını optimize etmek için katman özelliklerini ve rolünü analiz eder. Bir cihazı simüle etmek için tüm temel giriş parametreleri, gerçek bir muadili gibi davranacak şekilde iyi tanımlanmalıdır. Perovskit bazlı güneş pilleri, CIGS gibi inorganik yarı iletken güneş pilleri ile benzer bir yapı kullanmıştır ve perovskitte Wannier tipi eksiton bulunur. Böylece, 1D simülatörü gibi SCAPS, perovskit bazlı güneş pillerini simüle etmek için kullanılabilir.

Önceki bölümlerde tartışıldığı gibi, güneş pillerinin incelenmesi simülasyonun iki aşamasında yapılır. Simülasyon programlarında bazı basitleştirici koşulların uygulanmasının yanı sıra deneysel çalışmalarda deneyin farklı bölümlerinin ideal olmayan koşullarının uygulanması nedeniyle, simülasyon sonuçları her zaman daha yüksek verim sağlamaktadır [62-64]. Katmanların kalınlığı üzerindeki yansıma değerinin hesaplanması ampirik araştırmalar yardımıyla yapılmıştır [61].



Şekil 2.1. Scaps-1D genel bir bakış

2.4. Güneş Pili Parametreleri

Karakterizasyon, güneş pilleri ve fotovoltaik malzemelerin araştırılmasında kritik bir bölümdür. Çünkü belirli koşullar altında bu pillerin özellikleri kolaylıkla etkilenebilir. Bu nedenle bir güneş pilini karakterize etmek, bir hücreyi bilmek, yani onun davranışını, verimlilik durumunu ve performansını etkileyen kusurların veya parazitik unsurların varlığını tanımlayabilen tüm bilgileri toplamak gerekir. Bu güneş pillerini karakterize etmek ve elektronik davranışları hakkında detaylı bilgi elde edebilmek

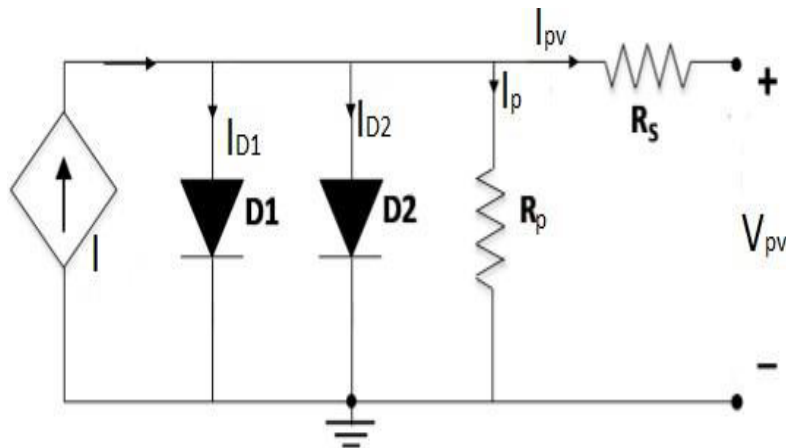
için, güneş pilleri çalışma prensibine en uygun devre modelini oluşturmak ve bu devre modeli için kullanılan parametreleri bilmemiz gerekir.

Bu bölümde güneş pilleri ile ilgili önemli kavramlar tanıtılmıştır.

- ✓ I-V eğrisi
- ✓ Kısa devre akımı
- ✓ Açık devre gerilimi
- ✓ Doldurma faktörü
- ✓ Verimlilik
- ✓ Direnç etkileri
- ✓ Kuantum verimi (QE)
- ✓ Açık Devre Gerilim Düşüşü (OCVD)
- ✓ Rekombinasyon

2.4.1. Güneş pili çift diyot devre modeli

Bir güneş pilinin elektronik davranışını anlamak için, hücrenin ideal elektrik bileşenlerini tanımlayan eşdeğer bir devre modeli oluşturmak faydalıdır. Yıllar içinde güneş pilini en iyi şekilde temsil eden birkaç model geliştirilmiştir. En doğru tanımlardan biri, hücreyi karakterize eden tüm ana etkileri dikkate alan bir çift diyot devre modelidir [114].



Şekil 2.2. Çift diyot modelinin devre şeması

Çift diyot modelinde, birinci diyot PN-bağlantısını temsil eder ve ikinci diyot, bağlantının rekombinasyonunu temsil eder. Tek diyot modelinde idealite faktörü (n) sabit bir değer olarak alınır, ancak gerçekte idealite faktörü voltajın bir fonksiyonudur. Cihazda rekombinasyon baskın olduğunda idealite faktörü 1'e yaklaşır. Bununla birlikte, düşük voltajlarda, bağlantı noktasındaki rekombinasyon etki artar ve idealite faktörü 2'ye yaklaşır. Bu nedenle, tek diyotlu devre modeline kıyasla birincisine paralel olarak ikinci bir diyot eklenir ve idealite faktörü 2 olarak ayarlanarak bağlantı rekombinasyonu çift diyot olarak modellenmiştir [115]. Ayrıca dirençlerdeki dağılıma gücünü görüntülemek ve güneş pilinin azalan verimini görmek için seri ve paralel direnç eklenmiştir.

Aydınlatma altında diyot aşağıda verilmiştir.

$$I = I_L - I_{01} \left\{ \exp \left[\frac{q(V+I.R_S)}{kT} \right] - 1 \right\} - I_{02} \left\{ \exp \left[\frac{q(V+I.R_S)}{2kT} \right] - 1 \right\} - \frac{V+I.R_S}{R_{shunt}}$$

Aydınlatma altında ışık yoğunluğu, ikinci diyotun etkilerini sınırlar. Karanlıkta pratik ölçümler yapılır.

$$I = I_{01} \left\{ \exp \left[\frac{q(V-I.R_S)}{kT} \right] - 1 \right\} + I_{02} \left\{ \exp \left[\frac{q(V-I.R_S)}{2kT} \right] - 1 \right\} + \frac{V-I.R_S}{R_{shunt}}$$

Yukarıda verilen denklemleri basitleştirmek için eksi bir (-1) terimi telafi edilir.

Bu sayede, aydınlatma altında denklem aşağıdaki gibidir.

$$I = I_L - I_{01} \exp \left[\frac{q(V+I.R_S)}{kT} \right] - I_{02} \exp \left[\frac{q(V+I.R_S)}{2kT} \right] - \frac{V+I.R_S}{R_{shunt}}$$

Karanlık ortamda denklem aşağıda gösterilmiştir.

$$I = I_{01} \exp \left[\frac{q(V-I.R_S)}{kT} \right] + I_{02} \exp \left[\frac{q(V-I.R_S)}{2kT} \right] + \frac{V-I.R_S}{R_{shunt}}$$

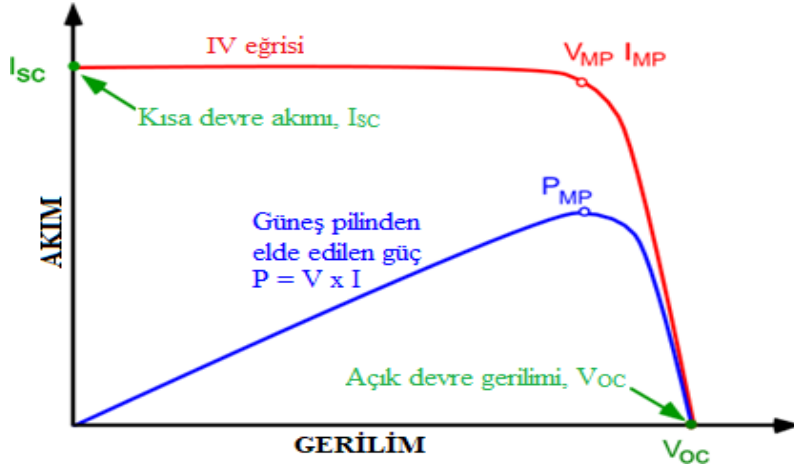
2.4.2. Güneş pili i-v (akım-gerilim) karakteristiği

Bir fotovoltaik güneş pilinin I-V eğrisi, akım-gerilim karakteristiğini gösterir ve güneş enerjisi dönüşüm yeteneği hakkında ayrıntılı bilgi verir.

Bir güneş pili tarafından üretilen akımın genel ifadesi

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

Yukarıdaki denklemde $e^{qV/kT}$, yarı-nötr bölgelerdeki rekombinasyon akımını temsil ederken, $e^{qV/2kT}$ tükenme bölgesindeki rekombinasyonu temsil eder.

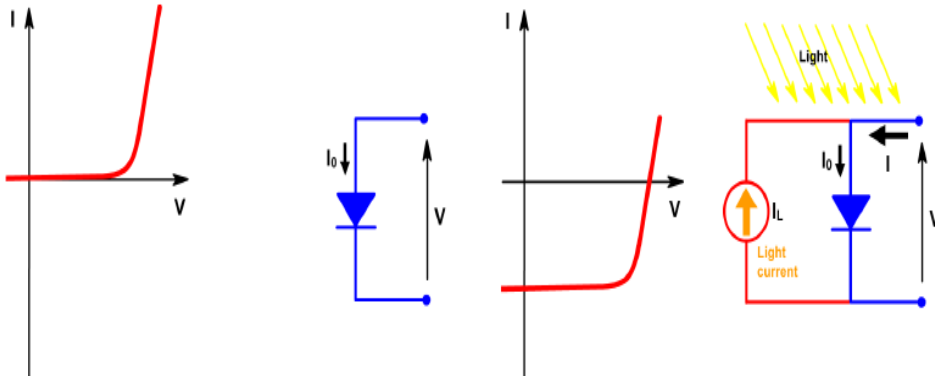


Şekil 2.3. Bir güneş pilinin akım-gerilim karakteristiği

Şekil 2.3 güneş pili için birkaç önemli parametreyi göstermektedir. Kısa devre akımı (ISC), açık devre gerilimi (VOC), verimlilik (η) ve doldurma faktörü (FF) gibi parametreler akım- devre karakteristiği ile belirlenir.

Hücresinin aydınlatılması, diyottaki normal akımlara eklenir, böylece diyot yasası

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



Şekil 2.4. Karanlık I-V ve aydınlık I-V karakteristiği

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

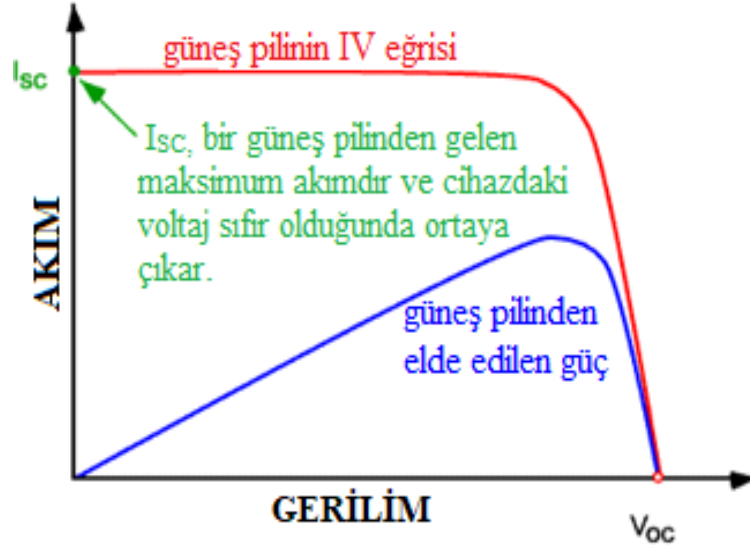
Aydınlatma olmadan bir güneş pili, büyük bir diyotla aynı elektriksel özelliklere sahiptir. Pil üzerinde ışık parladığında, hücre güç üretmeye başlar ve IV eğrisi değişir.

Yukarıdaki denklemde -1 (eksi bir) değeri genellikle ihmal edilebilir. Üstel terim, 100 mV'nin altındaki gerilimler dışında genellikle 1'den büyüktür. Ayrıca, düşük

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

gerilimlerde ışık ile üretilen akım (IL), I0 terimine hakimdir, bu nedenle -1 (eksi bir) değeri aydınlatma altında gerekli değildir ihmal edilir.

Kısa devre akımı, ISC (JSC), bir güneş pilinin uçları arasındaki gerilimin sıfır olması durumunda gözlenen akımdır. Kısa devre akımı, ışık tarafından üretilen taşıyıcıların üretilmesi ve toplanmasından kaynaklanmaktadır. Şekilde gösterildiği gibi, ISC güneş pilinden gelen maksimum akımdır.



Şekil 2.5. Kısa devre akımı, güneş pili I-V karakteristiği

Kısa devre akımının bağlı olduğu faktörler [117];

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

Açık devre gerilimi, VOC, bir güneş hücresinden sağlanan maksimum gerilimdir. VOC, akım sıfır olduğunda devrede görülen gerilimdir ve VOC, güneş pilinde net akımı sıfıra eşitleyerek hesaplanır.

$$V_{OC} = \frac{nkT}{q} \ln \left(\frac{I_L}{I_0} + 1 \right)$$

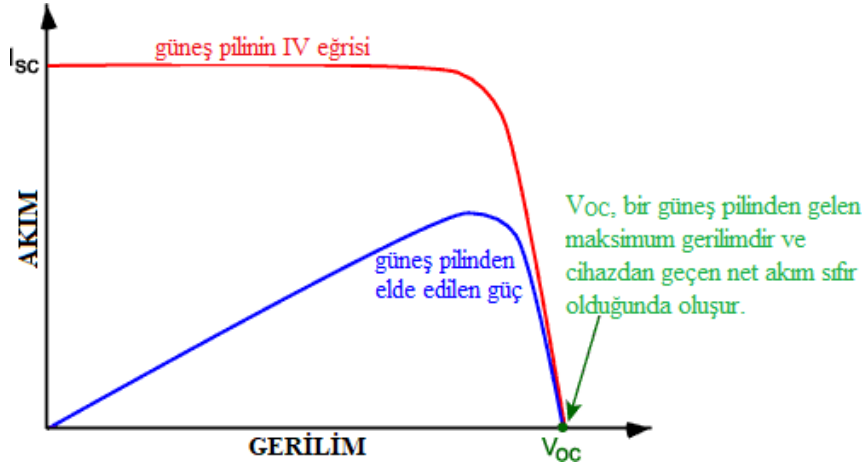
Denklemden görülebileceği gibi VOC, güneş pilinin doyma akımına ve üretilen akıma bağlıdır. Doyma akımı I_0 , güneş pilindeki rekombinasyona bağlıdır. Bu nedenle, VOC, cihazdaki rekombinasyon miktarının bir ölçüsü olarak adlandırılabilir [118].

2.4.3. Doldurma faktörü

Doldurma faktörü, "FF" ile gösterilir, bir güneş pilinin kalitesinin bir ölçüsüdür. Yukarıda açıklanan ISC ve VOC, bir güneş pilinden gelen maksimum akım ve voltajdır. Ancak bu noktalarda güneş pilinden gelen güç sıfırdır. Doldurma faktörü, güneş pilinden elde edilen maksimum gücün ISC ve VOC çarpımlarının oranı olarak tanımlanır, doldurma faktörü 1 değerine ne kadar yakınsa pil o kadar verimli demektir.

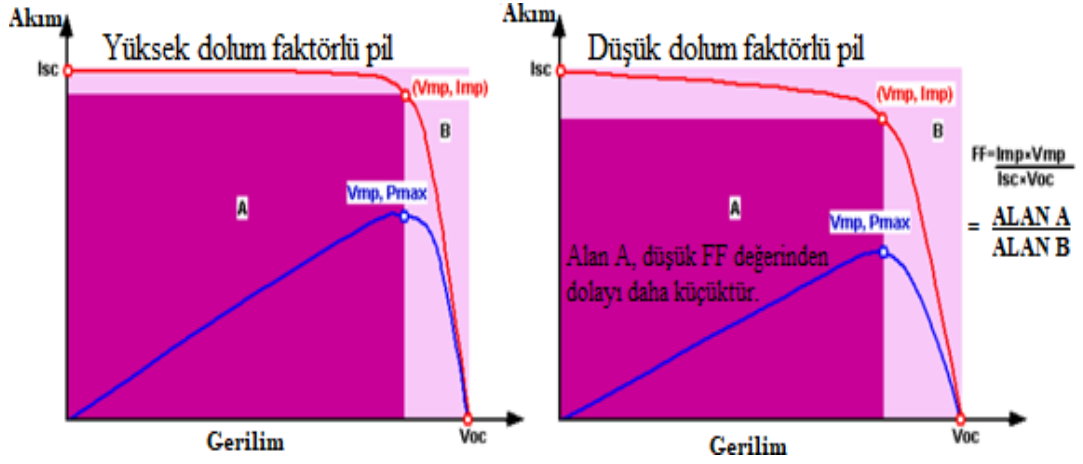
Doldurma faktörü

$$FF = \frac{V_{mp} \cdot I_{mp}}{V_{OC} \cdot I_{SC}}$$



Şekil 2.6. Açık devre gerilimi, güneş pili I-V karakteristiği

Şekil 2.6'daki grafikten de görülebileceği gibi, daha büyük dolun faktörü değeri daha yüksek çıkış gücü verir. Bir güneş hücresinin maksimum teorik dolun faktörü, güneş hücresinden gelen gücün voltaja göre diferansiyelinin sifira eşit olduğu yeri bularak belirlenebilir.



Şekil 2.7. Akım-gerilim fonksiyonu olarak doldurma faktörleri

$$\frac{d(IV)}{dV} = 0$$

Elde edilen ;

$$V_{MP} = V_{OC} - \frac{nkT}{q} \ln \left(\frac{qV_{MP}}{nkT} + 1 \right)$$

Bu denklemlerdeki önemli bir faktör, bunların olası bir maksimum doldurma faktörü değerini temsil etmeleridir ve pratikte, parazitik direnç kayıpları nedeniyle doldurma faktörü teorik denkleme kıyasla daha düşük olacaktır.

2.4.4. Verimlilik

Güneş pili verimliliği, fotovoltaiik etkiler yoluyla güneş pili tarafından elektriğe dönüştürülebilen fotonun (güneş ışığı) enerjisidir. Bir güneş pilinin verimliliği, bir hücreyi diğeriyle karşılaştırmamızı sağlayan önemli bir parametredir. Güneş pilinin sıcaklığı ve gelen güneş ışığının yoğunluğu verimi etkileyen faktörlerdir. Bu nedenle, bir hücrenin verimini diğeriyle karşılaştırmak için aynı koşulların dikkatlice uygulanması gerekir.

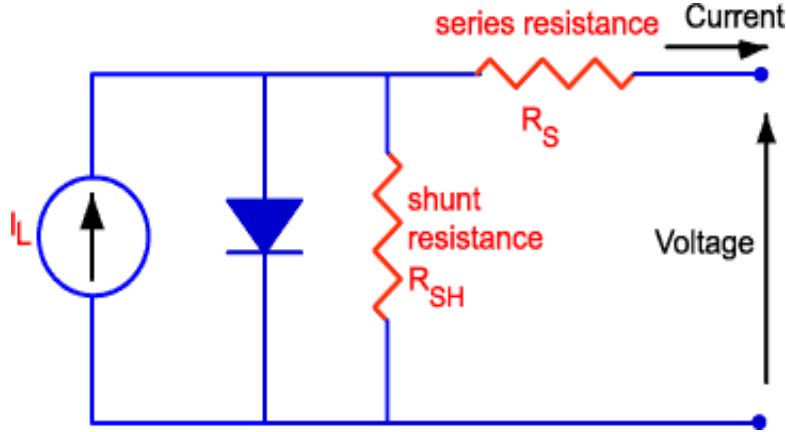
Bir güneş pilinin verimliliği;

$$P_{max} = V_{OC} \cdot I_{SC} \cdot FF$$

$$\eta = \frac{V_{OC} \cdot I_{SC} \cdot FF}{P_{in}}$$

2.4.5. Güneş pillerinde parazitik dirençler

Seri direnç ve şönt direnci, güneş hücresindeki en iyi bilinen parazitik dirençlerdir. Bu direnç etkileri, dirençlerdeki gücü dağıtarak güneş pilinin verimini düşürür. Seri ve şönt dirençleri, güneş pilinin geometrisinden etkilenir. Bu parazitik dirençler, doldurma faktörünü azaltarak güneş pili üzerinde olumsuz etkilere sahiptir.



Şekil 2.8. Bir güneş pili devresi seri direnç (R_S) ve şönt dreci (R_{SH})

Bir güneş hücresindeki seri direncin nedenleri şunlardır [121];

- Akımın güneş hücresi tabanı boyunca hareketi,
- Hücredeki metal kontak ile silikon arasındaki temas direnci
- Üst ve arka metal kontaktarın direnci

Güneş pilinin doldurma faktörü, esas olarak bu seri dirençten etkilenir ve bu direncin çok yüksek değeri kısa devre akımını azaltabilir. Güneş hücresinden gelen maksimum güç aşağıda gösterilmiştir.

$$P'_{MP} \approx V_{MP}I_{MP} - I_{MP}^2R_S = V_{MP}I_{MP} \left(1 - \frac{I_{MP}}{V_{MP}}R_S\right) = P_{MP} \left(1 - \frac{I_{SC}}{V_{OC}}R_S\right)$$

$$P'_{MP} = P_{MP} \left(1 - \frac{R_S}{R_{CH}}\right)$$

Normalize edilmiş bir seri direncin tanımlanması

$$r_S = \frac{R_S}{R_{CH}}$$

Seri direncin bir güneş pilinin çıkış gücü üzerindeki etkisini yaklaşık olarak aşağıda gösterilmiştir.

$$P'_{MP} = P_{MP}(1 - r_s)$$

Açık voltaj gerilimi ve kısa devre akımının seri dirençten etkilenmediği var sayıldığında, seri direncin doldurma faktörü üzerindeki etkisi gösterilmiştir.

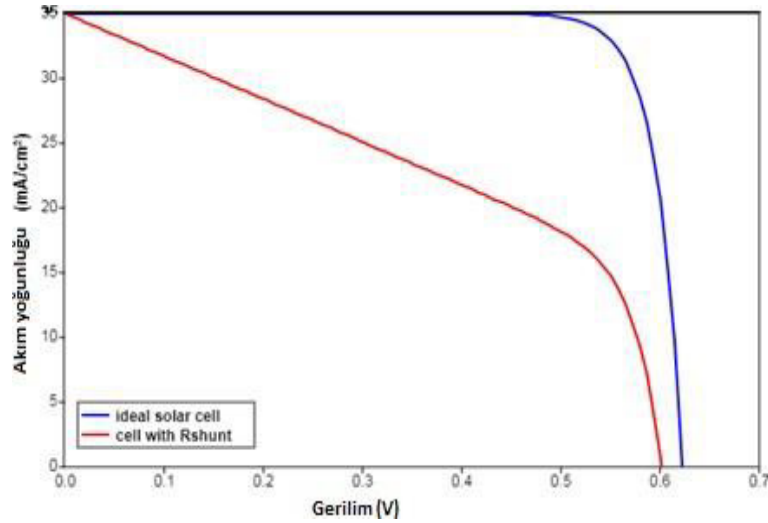
$$FF' = FF(1 - r_s)$$

$$V'_{OC}I'_{SC}FF' = V_{OC}I_{SC}FF(1 - r_s)$$

2.4.6. Paralel direnç

Paralel direnç (şönt direnci) RSH, bir güneş hücresinde önemli güç kayıplarına yol açar. Bu direnç, güneş pilinde üretilen ışık için alternatif bir akım yolu sağlayarak güç kayıplarına neden olur. Bu alternatif akım yolu, güneş pilinden geçen akım miktarını azaltır ve güneş pilinin voltajını düşmesine neden olur. Paralel direnç etkisinde bir güneş pili için aşağıda gösterilmiştir.

$$I = I_L - I_0 \exp \left[\frac{qV}{nkT} \right] - \frac{V}{R_{SH}}$$



Şekil 2.9. Bir güneş pilinde şönt direncinin dolun faktörüne etkisi, hücre alanı 1cm², T=300K, RSH=30 ohm.cm²

Bir güneş pilinden elde edilebilecek maksimum güç aşağıda gösterilmiştir.

$$P'_{MP} \approx V_{MP}I_{MP} - \frac{V_{MP}^2}{R_{SH}} = V_{MP}I_{MP} \left(1 - \frac{V_{MP}}{I_{MP} R_{SH}} \right) = P_{MP} \left(1 - \frac{V_{OC}}{I_{SC} R_{SH}} \right)$$

$$P'_{MP} = P_{MP} \left(1 - \frac{R_{CH}}{R_S} \right)$$

Normalize edilmiş bir paralel direncin tanımlanması

$$P'_{MP} = P_{MP} \left(1 - \frac{1}{r_{SH}}\right)$$

OCV ve ISC'nin şönt direncinden etkilenmediğini varsayarsak,

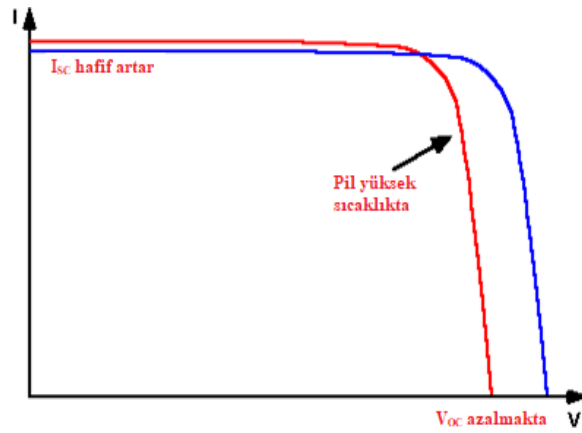
$$FF' = FF \left(1 - \frac{1}{r_{SH}}\right)$$

$$V_{OC} I_{SC} r_r = V_{OC} I_{SC} r_r \left(1 - \frac{1}{r_{SH}}\right)$$

şönt direncinin doldurma faktörüne (FF) etkisi

2.4.7. Sıcaklığın etkisi

PV güneş pilleri sıcaklığa duyarlıdır çünkü sıcaklık artışı güneş pili yarı-iletkeninin bant aralığını azalmasına neden olur [123]. Bir güneş pilinde, I_0 'ın sıcaklığa olan bağımlılığı sebebiyle VOC sıcaklık ile azalır.



Şekil 2.10. Sıcaklığın bir güneş pilinin I-V karakteristiği üzerine etkisi

P-N bağlantısı I_0 için;

$$I_0 = qA \frac{Dn_i^2}{LN_D}$$

n_i ; sıcaklıktan etkilenen iç taşıyıcı konsantrasyonudur.

D, azınlık akım taşıyıcısının yayılımıdır.

N_D safsızlığı temsil eder, L azınlık taşıyıcı difüzyon uzunluğudur.

n_i için;

$$n_i^2 = 4 \left(\frac{2\pi kT}{h^2}\right)^3 (m_e^* m_h^*)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_{G0}}{kT}\right) = BT^3 \exp\left(-\frac{E_{G0}}{kT}\right)$$

m_e ve m_h sırasıyla elektronların ve deliklerin etkili kütleleridir.

E_{G0} , mutlak sifıra doğrusal olarak ekstrapolasyon edilen bant aralığıdır, B , sıcaklıktan bağımsız sabittir.

I_0 'ın VOC üzerindeki etkisi, I_0 'ın V_{oc} içine aktararak hesaplanabilir.

$$V_{OC} = \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{I_{SC}}{I_0} \right) = \frac{kT}{q} [\ln I_{SC} - \ln I_0] = \frac{kT}{q} \ln I_{SC} - \frac{kT}{q} \ln \left[B' T^\gamma \exp \left(-\frac{qV_{G0}}{kT} \right) \right] =$$

$$\frac{kT}{q} \left(\ln I_{SC} - \ln B' - \gamma \ln T + \frac{qV_{G0}}{kT} \right)$$

$E_{G0} = qV_{G0}$ eşitliği sağlandığında, dV_{OC} / dT 'nin dI_{SC} / dT 'ye bağlı olmadığını varsayarsak, dV_{OC} / dT şu şekilde bulunabilir.

$$\frac{dV_{OC}}{dT} = \frac{V_{OC} - V_{G0}}{T} - \gamma \frac{k}{q}$$

bir güneş pilinin sıcaklık hassasiyetinin pilin VOC değerine bağlı olduğunu göstermektedir.

2.4.8. Işık şiddetinin etkisi

Işık yoğunluğu, VOC, ISC, verimlilik, dolun faktörü (FF), seri ve şönt dirençlerinin etkileri dahil olmak üzere güneş pili parametrelerini etkileyen önemli bir faktördür. Bir güneş hücresindeki ışık yoğunluğu, güneş sayısı olarak adlandırılır; burada 1 güneş spektrumu, AM 1.5 veya 1 kW / m²'de standart aydınlatmaya karşılık gelir [124].

2.4.9. Kuantum verimliliği

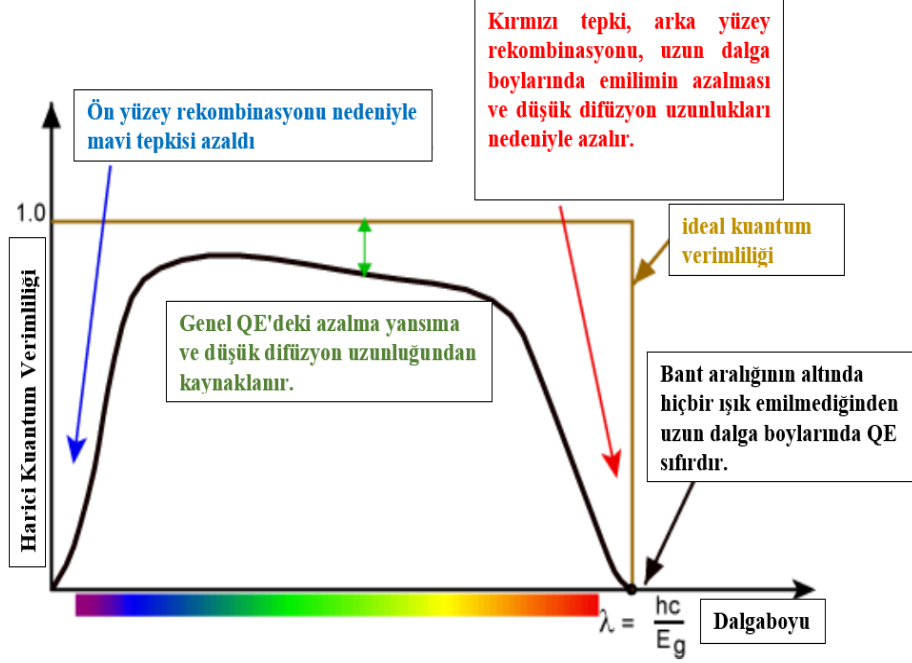
Kuantum verimliliği (QE), güneş pili tarafından toplanan yüklerin güneş hücresi üzerindeki gelen fotonların sayısına oranı olarak tanımlanır [125]. Bu parametre bize bir güneş pilinin kalitesi hakkında temel bilgileri verir. Kuantum verimliliği, (foton) ışığın elektronlara dönüşümünün verimliliğini ölçmemize olanak sağlar. Kuantum verimliliği çoğu zaman farklı bir dalga boyu aralığı ile ölçülür, çünkü bir fotonun enerjisi arasındaki ilişki dalga boyuyla ters orantılıdır [125]. Genellikle bir güneş pilinin iki tür kuantum verimi dikkate alınır. Dış kuantum verimi (EQE), hücrenin optik kayıplarını içeren bir kuantum verimliliğidir.

$$EQE = \frac{\text{elektron/s}}{\text{foton/s}} = \frac{(\text{akım})/(\text{elektron yükü})}{(\text{fotonların toplam gücü})/(\text{fotonların enerjisi})}$$

Eşitlik görüldüğü gibi, dış kuantum verimliliği ışığın emilmesine ve yüklerin toplanmasına bağlıdır.

İç kuantum verimi, yansıtılmayan fotonların toplanabilir taşıyıcılar üretebileceği verimliliği ifade eder [125].

$$IQE = \frac{\text{elektron/s}}{\text{emilen fotonlar/s}} = \frac{EQE}{1-\text{Yansım}}a$$



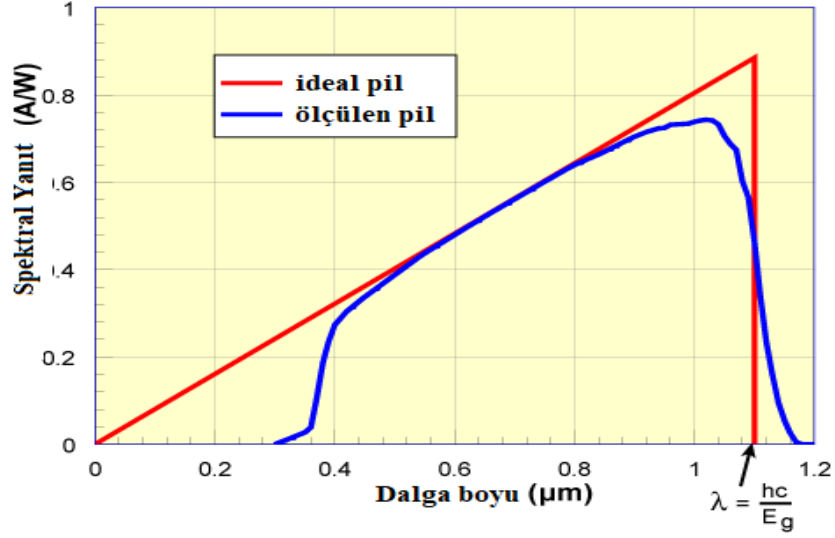
Şekil 2.11. Kuantum verimliliği örnek grafik

Fotonların yansımadan dolayı kaybolmadığını düşünürsek ideal bir güneş pili için dış kuantum verimi (EQE) eğrisi şekil 2.11'de gösterilmiştir. Aslında, ideal kuantum verimliliği yukarıdaki şekilden görüldüğü gibi kare şekle sahiptir. Ancak, bir güneş hücresinin kuantum verimi, yük taşıyıcılarının harici bir devreye giremediği rekombinasyon etkileri nedeniyle azalır [125]. Bant aralığının altındaki enerjiye sahip fotonlar soğurulmaz, bunların kuantum verimliliği sıfırdır.

2.4.10. Spektral yanıt (sr)

Spektral yanıt, güneş pili tarafından üretilen akımın güneş piline gelen güce oranıdır [46]. Bu parametre, yukarıda açıklanan kuantum verimliliğine benzerdir.

Bilinen bir kavram olarak, bir güneş pilinde foton, elektron ve diğer yük taşıyıcıların daha yüksek bir enerji durumu elde etmesine neden olarak elektron-delik çifti oluşturur.



Şekil 2.12. Bir silikon güneş pilinin spektral yanıtı

Daha düşük dalga boyunda bir foton daha yüksek bir enerjiye sahiptir. Bir güneş pilindeki foton elektron-delik çifti oluşturur ve kalan fazla enerji ısı üreten fononlar oluşturur. Bu ısı, bir güneş pilinin verimini ve güç çıkışını azaltır. Bu nedenle, fotonların enerjisi tam olarak kullanılamaz, çünkü daha düşük dalga boyundaki enerji fazlalığı ve foton enerjisinin bant aralığından daha düşük olması elektronları uyaramaz. Bunlar, bir güneş pilindeki güç kayıplarını temsil eder [126].

Yukarıdaki grafikte silikon güneş pilinin cam altındaki spektral tepkisini görüyoruz. 400 nm'nin altındaki kısa dalga boyunda cam, ışığın çoğunu emer ve spektral yanıt çok düşüktür. Orta dalga boylarında hücre ideale yaklaşıyor. Uzun dalga boylarında yanıt sifıra döner [126]. Kuantum verimliliği ve spektral yanıt ikisi de güneş pili analizinde kullanılan parametrelerdir. Bununla birlikte, spektral yanıtın avantajı, doğrudan ölçülebilmesidir. Bu hesaplanmış parametreden sonra kuantum verimliliğini bilmek için kullanılır.

QE'yi SR'ye dönüştüren denklem aşağıda gösterilmiştir.

$$SR = \frac{q\lambda}{hc} QE$$

$$SR(A/W) = \frac{QE \cdot \lambda(nm)}{1239.8}$$

h, c ve q fiziksel sabitler olduğundan, elde edilen yeni formül;

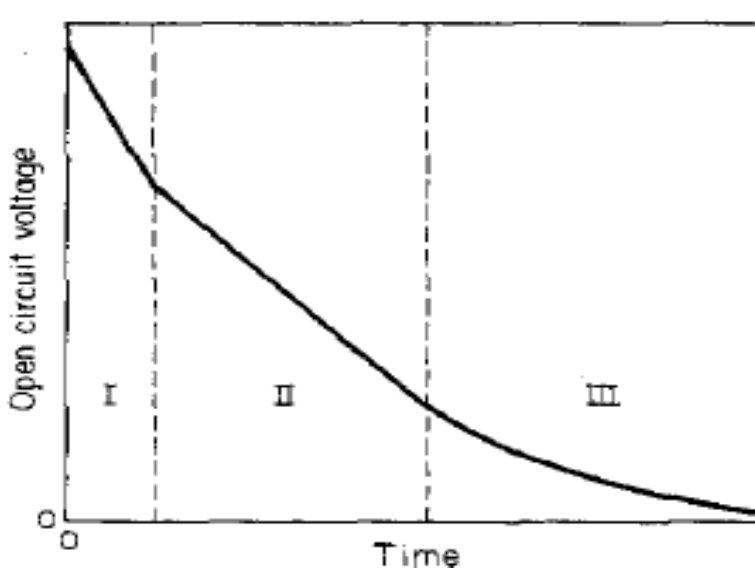
2.4.11. Açık devre gerilimi düşümü (ocvd)

Foton ile üretilen fazla azınlık taşıyıcılarının ömrü, güneş pili tasarımında önemli bir parametredir. Bir fotovoltaik hücrenin toplam enerji dönüşüm verimliliği, hücrenin temel bölge azınlık taşıyıcı ömrüne kritik olarak bağlıdır [127].

OCVD, p-n bağlantısının taban bölgesi içindeki fazla azınlık taşıyıcı ömrünü belirlemeye yönelik bir tekniktir [127].

Gerilim grafiğini gözlemleyerek, azınlık taşıyıcılarının yaşam süreleri hakkında önemli bilgiler elde etmek mümkün olacaktır, aslında, teoriden biliyoruz ki, bir p-n jonksiyonun açık devre gerilimi (VOC), taşıyıcıların yaşam süresine bağlıdır.

Bir silikon hücre düşünürsek, VOC'nin iniş bölümünü şekil 2.13'te gösterildiği gibi üç alana bölebiliriz.



Şekil 2.13. Teorik olarak açık devre gerilimi azalma eğrisi

İlk bölge, yüksek seviyeli geçiş durumunu gösterir, burada fazla azınlık taşıyıcı konsantrasyonu, hücrenin baz bölgesindeki denge durumu çoğunluk taşıyıcı konsantrasyonunu aşar [127]. Bu bölümde eğri doğrusaldır ve taşıyıcı ömür şu şekilde hesaplanabilir.

$$\tau = \frac{2kT}{q} \left| \frac{1}{dV_{OC}/dt} \right|$$

Burada k ; Boltzman sabiti, T ; sıcaklık ve q ; elektron yüküdür.

Bozunma eğrisinin ikinci bölgesi, bazdaki fazla azınlık taşıyıcı konsantrasyonunun termal dengeden daha büyük olduğu andaki geçiş durumuna karşılık gelir. Ancak

$$\tau = \frac{2kT}{q} \left| \frac{1}{dV_{OC}/dt} \right|$$

termal denge çoğunluk taşıyıcı konsantrasyonundan daha azdır [127]. Eğri halen doğrusaldır.

Bozunma eğrisinin üçüncü bölgesinde, denge durumunda geçiş ve azınlık taşıyıcılarının konsantrasyonu, çoğunluk taşıyıcılarından çok daha düşüktür.

$$\tau = \frac{kT}{q} \left(e^{\frac{qV_0}{kT}} - 1 \right) e^{-\frac{t}{\tau}}$$

Yukarıda açıklanan model silikon hücreler için geçerlidir, ancak bu model kullanılan yarı iletken tipine göre değişiklik gösterebilir.

2.4.12. Rekombinasyon

Foton enerjisi ile yarı iletkende elektron ve delik çifti oluşur. Bu mekanizmanın tersi bir işlemle, bir elektron bir delikle yeniden birleşir ve enerji ısı veya ışık üretmek için bırakılır [128]. Buna rekombinasyon denir. Yani rekombinasyon fotonun verdiği enerji ile serbest kalmış bir elektronun kontaklara ulaşmaya kadar sahip olduğu enerjisi koruyamaması ve bir boşlukla birleşerek yok olması olayıdır. Üç temel rekombinasyon vardır. Bunlar;

Radyatif rekombinasyon, doğrudan bant aralıklı yarı iletkenlerde hakim olan rekombinasyon mekanizmasıdır [129].

Işınımsal rekombinasyonda, iletim bandından gelen bir elektron doğrudan değerlik bandındaki bir delikle birleşir ve bir foton salgılar, yayılan foton, bant boşluğuna benzer bir enerjiye sahiptir [129].

Auger rekombinasyonu, üç taşıyıcı içerir. Bir elektron ve bir delik yeniden birleşir, ancak enerjisi ısı veya foton olarak yaymak yerine, enerji iletim bandındaki bir elektron olan üçüncü bir taşıyıcıya verilir. Bu elektron daha sonra termal olarak iletim bandına geri döner [130]. Auger rekombinasyonu, hücrenin katkılama işleminin neden olduğu yüksek taşıyıcı konsantrasyonlarında daha belirgindir.

Shockley-Read-Hall rekombinasyonu, hücre içinde olan kusurlar yoluyla oluşan SRH rekombinasyonu olarak adlandırılır. Bu olay tamamen saf, bozulmamış

materyalde meydana gelmez. SRH rekombinasyonu iki aşamalı bir süreçtir. Bunlar; Hücredeki kristal kafesteki kusurlar yoluyla sokulan bir elektron (veya delik), yasak bölgedeki bir enerji durumu tarafından yakalanır. Bu kusurlar kasıtsız olarak ortaya çıkabilir veya kasıtlı olarak malzemeye eklenebilir, örneğin bir malzeme katkılanması ile eğer bir delik (veya bir elektron), termal olarak iletim bandına yeniden yayılmadan önce aynı enerji durumuna hareket ederse, rekombinasyon yeniden olur [131].

2.5. Meta Kararlı Kusurlar

Bu çalışmada, perovskit bazlı güneş pili üç giriş katmanı ile simüle edilmiştir; iki katmanın p-tipi olduğu durumlarda, biri boşluk taşıma malzemesi ve Elektron bloke edilmiş katmandır (örneğin HTM), bir başka düşük katkılı organik kurşun halojenür perovskit, aktif/emici katman olarak kullanılır. Boşlukları tıkayan Elektron Taşıma Malzemesi (ETM) olarak N tipi şeffaf iletken oksit kullanılabilir. Simülasyonlar, güneş pili cihazlarını optimize etmek ve bireysel katmanın rolünü gerçekleştirmek için farklı malzemeler kullanılarak Güneş altında gerçekleştirilmiştir.

2.6. Açma ve Yükleme

Masaüstünde veya dosya yöneticisinde programı veya scaps3310.exe dosyasını açın. Açılan Window SCAPS eylem panelidir. Şekil 2.1- (d) Soldaki "Sorunu ayarla" düğmesine tıklayın ve ardından sağ alt köşedeki "yükle" yi seçin. Güneş Pili Tanımlama Paneli. Daha önce tanımlanmış güneş pillerinden "örnek CIGS.def" dosyasını seçip yükleyeceğiz.

"Katman Özellikleri Paneli" nin sağında, optik bant boşluğu, dielektrik geçirgenlik gibi katmanın farklı elektriksel özelliklerini oluşturabiliriz, elektron afinitesi, elektron/boşluk hareketliliği ve kalınlığı da vardır. Sağa doğru, malzemenin emilimi bir modelden veya programın adsorbsiyon kütüphanesindeki daha önce mevcut dosyalardan ayarlanabilir. Bu panelin sol tarafındaki kusur üç farklı tipe ayrılmıştır: Banttan banda geçişi sağlayan burğu ve ışınımsal rekombinasyon, ayrıca SRH (Shockley-Read-Hall) rekombinasyonu. Bu modelde, $10 * E18$ kusur yoğunluğuna sahip nötr, tek ve düzgün bir kusur seviyesi getirerek sadece SRH rekombinasyonunu set ederler. Bir katmanın tüm çeşitli özelliklerini ayarladıktan sonra, "Kabul Et" düğmesine tıklayarak değişikliği kaydedebilir. Sağdaki yapının her iki tarafında

(yukarı ve aşağı), arka ve ön kontakların özelliklerini de değiştirebilir ve ayrıca farklı katmanlar arasındaki arayüzlerde belirli bir kusur yoğunluğu tanımlanabilir.

2.7. Programın Çalıştırılması

Güneş pilinin simülasyon modelini tamamladıktan sonra, bizi eylem paneline geri götürecek olan "Tamam" düğmesine tıklayarak programı test etmeye başlamanın zamanı geldi.

"Eylem paneli" nin sol üst köşesinde, hesaplama işlemi sırasında sabit olacak voltaj ve sıcaklık gibi çalışma noktalarını tanımlayabiliriz. Aydınlatma modu sırasında, güneş pili tipine ve güneş pilinin isteyeceği istenen dalga boyu ragnasına göre farklı spektrum türleri tanımlanabilir.

Önceden tanımlanmış güneş pilinin I-V özelliklerini hesaplamak istiyoruz, bu yüzden I-V onay kutusunu seçeceğiz. Hesaplama sona erdiğinde, aşağıdaki şekil 2.2 (a)'da olduğu gibi I-V Panelini open etmek için sağdaki I-düğmesine tıklayarak sonuçları görebiliriz. I-V grafiği ve Voc ve Jsc gibi I-V özellikleri arayüzde görülebilir ve bunları "Kaydet" e tıklayarak da kaydedebiliriz.

Kalınlık gibi belirli bir özelliğin Voc üzerindeki etkisini incelemek için bu özelliği "Bach kurulumu" Düğmesini Şekil 2.2 (a) kullanarak değiştirebilir ve ardından " hesapla Bach" düğmesine basın.

2.8. Emici Tabaka Bandı Gab Varvasyonun Etkisine Örnek

Bu durumda, CIGS emici tabakasının optik bant boşluğu değerlerini 0,9 eV'den 1,6 eV'ye değiştireceğiz ve Voc ve J üzerindeki etkisini gözlemleyeceğiz. Güneş pilinin sc'si. Şekil 2.2 (b)'de, artan bant aralığı, Voc değerlerinin 0,3 eV'den 0,9 eV'ye değişmesine neden olmuştur. Böylece, programın güneş pili parametrelerinin değişimini tespit edebildiğini ve çıktı verileri üzerindeki etkisini artırabildiğini görebiliriz. Ayrıca Şekil 2.2 (b)'de Voc'un aksine Jsc değerlerinin, 43,4 mA /cm'den düştüğü bant boşluğunun arttırılmasıyla azaldığını görebiliyoruz. 2 ila 19mA/cm2 arasında bu gözlemler birçok makalede iyi açıklanmıştır [79].

2.9. SCAPS-1D Kullanılarak Grafen Temaslı Perovskit Güneş Pillerinin Simülasyon Analizi

Grafen arka temaslı bir perovskit hücrede düşük performansın nedenini anlamak için SCAPS-1D simülasyon platformunu kullanarak cihaz özelliklerinin simülasyonlarını gerçekleştirdik. Perovskit/grafen (RGO) arayüzünde artan kusur konsantrasyonunun ve ayrıca grafen kalınlığının hücrenin akım yoğunluğu, voltajı, doldurma faktörü ve dönüşüm verimliliği üzerindeki etkisi araştırıldı. Grafen nano yapısını, SCAPS simülasyon platformuna yerleştirmeyi sağlamak için hücrenin üst tarafında bir boşluk taşıma katmanı olarak düzlemsel bir p-tipi katmana dönüştürdük. Simülasyon analizi, literatürde bildirilen deneysel verilerle karşılaştırıldı. Simülasyon ve deneylerin voltaj ve doldurma faktörü hemen hemen aynıdır, ancak simülasyon analizinde akım yoğunluğu daha yüksek görünmektedir, bu da kusurlu bir kalınlığı ve grafen tabakası tarafından emilimi hatırlatmaktadır. Grafen ayrıca Spiro-MeOTAD ile karşılaştırıldı ve hem boşluk taşıma katmanı hem de arka temas olarak hareket edecek umut verici bir malzeme olduğunu gösterdi. Deneysel süreç, sonuçlarımıza grafen elektrotlu yüksek performanslı bir hücre üretme yöntemi olarak bakarak geliştirilebilir. Böyle bir hibrit yapının, yüksek konsantrasyondaki tuzak yoğunluğunun taşıyıcı toplamayı engellediği grafen ve perovskit kavşağında kusurlu arayüzden muzdarip olduğu gösterilmiştir.

Bu araştırmada kullanılan programın son sürümünün özellikleri aşağıdaki gibidir:

- Bir güneş pilinin 7 katmanına kadar simülasyon kapasitesi (artı iki elektrot katmanı) katmanlar için birçok parametre tanımlanabilir (örneğin bant boşluğu, elektro kaplama, dielektrik sabiti, safsızlık yoğunluğu, kusur yoğunluğu, elektron ve boşluğun termal hızı, elektron hareketliliği ve boşluğu) ve ayrıca kalibre edilebilir. Auger Radiant ve Shockley Reedhall (SRH) dahil olmak üzere tüm rekombinasyon mekanizmaları bu programda tanımlanmıştır.
- Birçok kusur kategorisi türü (katmanlı kusurlar ara katman kusurları vb. dahil) tanımlanabilir. Elektrotların elektriksel ve optik özellikleri (çalışma fonksiyonu ve yansıtma oranı gibi) ayarlanabilir. Sıcaklık ve frekans gibi çalışma noktaları bu programda özelleştirilebilir.
- Program, akım-voltaj I-V, kapasite-voltaj (C-V), kapasite-frekans (C-f) ve kuantum verimliliği (QE) şeklinde sonuçlar sağlayabilir. Açık devre voltajı (VOC) kısa devre akımı (ISC) doldurma faktörü (FF) ve güç dönüştürme

verimliliği (PCE) dahil olmak üzere güneş pilinin fotovoltaiik parametreleri I-V diyagramları aracılığıyla hesaplanabilir (program bunu otomatik olarak yapar). Çoğunlukla katmanların ve malzeme katmanlarının parametrelerini optimize etmek için kullanılan bu programda toplu hesaplamalar yapmak da mümkündür. Bu tür bir hesaplamada program, bir katmanın farklı kalınlıkları gibi katman parametresinin farklı değerlerindeki hesaplamaları inceleyebilir [59].

- Hücre katmanları için yukarıdaki parametrelerden bazılarını girerek (örneğin, safsızlık yoğunluğu, N-D., N-, A--). SCAPS-1D programı denklemleri aynı anda çözer ve istenen hücreyi oluşturur. SCAPS-1D programı, çalışma sıcaklığı gibi çalışma koşullarının simülasyonunda ve kalibrasyonunda gerekli eğrileri belirledikten sonra, simülasyon sonuçlarını belirli bir grafik ve üretim eğrileri ve yüklerin rekombinasyonu şeklinde sunar. Programın çalışma koşulları ile ilgili olarak, aşağıdaki bölümlerde daha fazlası açıklanacaktır. Bu programın hesaplama temeli, sonlu elemanlar yöntemine (FEM) dayanmaktadır. Daha fazla bilgi Ek 1'de verilmiştir.

2.10. SCAPS-1D Programında Kullanılan Ayarlar

Önceki bölümlerde tartışıldığı gibi, güneş pillerinin incelenmesi simüle edilmiş laboratuvarın iki aşamasında yapılır. Simülasyon programlarında bazı basitleştirici koşulların uygulanması ve deneysel çalışmalarda deneyin farklı bölümlerinin ideal olmayan koşulları göz önüne alındığında, simülasyon sonuçları her zaman daha yüksek verim sağlamaktadır [110-112]. Bu basit terimlerden bazıları SCAPS-1D gibi bazı simülasyon programlarında atlanabilir. Bölüm 2.9'da verilen açıklamalara göre, paralel ve seri direncin tanımları, Şekil 2.2 (d)'nin yansıma eğrisi, SCAPS-1D programının bu parametrelerden herhangi birini uygulamadaki yeteneklerine göre, ilk kez bu çalışmada, bu araştırmanın tüm çalışmalarında simülasyon hesaplamalarının temeli, ideal olmayan ve yakın koşullar uygulanmıştır. Bu çalışmada daha önceki çalışmalara dayanarak ideal olmayan koşulları uygulamaya çalıştık. Rekombinasyon uygulamak için, rekombinasyon katsayılarını hesaplamak için, elektronların ve boşlukların ömrü ve safsızlık yoğunlukları önceki referanslara dayanarak elde edilmiştir. Katmanların kalınlığı üzerindeki yansıma değerinin hesaplanması ampirik

arařtırmalar yardımıyla yapılmıřtır [58]. Paralel ve seri direnç deęerleri de önceki belgelerden türetilmiřtir.

Yukarıdaki kurulumlara ek olarak, SCAPS-1D ile simülasyonda bazı alıřma noktası ayarları dikkate alınmalıdır. Bu nedenle bu alıřmada sistemin alıřma sıcaklıęı 300 K olup, programda A.M.1.5 G'ye eřit güneř spektrumu (dikey Dünya eksenli güneř ışığının 48° radyasyon açısına eřdeęer) dikkate alınmıřtır.

2.11. Maliyet Endeksi Veritabanı

Maliyet endeksi, bir perovskit güneř pilinin her katmanı için en uygun malzemeyi seçmek için üç etkili göstergeden biridir. Maliyet hesaplaması, her katmanın sentez yönteminde ölçü birimine göre yapılır. Katmanların gramı başına maliyet miktarı, yukarıda açıklanan Ecoinvent veritabanından türetilmiřtir. Fiyatlar ABD dolarına (USD) dayanmaktadır.

2.12. Bu alıřmadaki Örnekler

Bu yazıda üç olgu incelenmiřtir. 1. SCAPS-1D programında kullanılan ideal ve ideal olmayan olası durumların performans sonuçları ile önceki alıřmalarla karşılaştırma arasındakiler arařtırılmıřtır. 2. daha düşük maliyet, daha iyi performans, daha az çevresel etkiye VE en iyi malzemelerle iyi bir yapıya sahip olmak için çok amaçlı optimizasyon yaklaşımı ile SCAPS-1D aracı; programı kullanılmıřtır. 3. Son aşamada boşluk taşıma katmanlarının ve ayrıca polimer bağlantıların kullanılmasının etkisi, SCAPS-1D programı kullanılarak incelenmiřtir. Perovskit güneř pilinin her bir katmanında ikinci aşamada kullanılan malzemeler ařaęıda Tablo 2.1 'deki gibidir:

Tablo 2.1. Perovskit güneř pilinin her bir katmanında ikinci aşamada kullanılan malzemeler

Arka elektrot için altın	Sabit malzemelerdir
inko elektrot için FTO cam	
Perovskit tabakası	CH ₃ NH ₃ PbI ₃
	CH ₃ NH ₃ SnI ₃
Bořluk taşıma katmanı	P3HT ve PEDOT: PSS polimer
Polimer olmayan katmanlar	Spiro-OMeTAD ve CuSCN
Elektron taşıma katmanı	PCBM organik tabakası
	TiO ₂ ve ZnO inorganik katmanları

3. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

3.1. Giriş

Bu çalışma, bir güneş pilinin ortak olarak kabul edilen bazı organik-inorganik yapıları arasından uygun PSC yapısını araştırılmaktadır. Bu, performans verilerinin kötüden iyiye sınıflandırılması ve daha fazla araştırma için iyi verilerin taranmasıyla gerçekleştirildi. Bu işlem, hücrenin performansını artırmak amacıyla gerçekleştirildi. PSC'lerin katman özelliği, çalışma noktası ve uygulama dahil üzere çeşitli aşamalarda gerçekleşti. Aktif katmanların özellik optimizasyonunun sonuçları, rekombinasyon problemleri ile ilgili olarak, nispeten yüksek emici kalınlıklara, düşük taşıma malzemeleri kalınlıklarına ve düşük aktif tabaka katkılama yoğunluklarına sahip bir hücre seçmenin daha iyi olduğunu göstermiştir. Simülasyon sonuçları daha düşük sıcaklıklar ve seri dirençler ve daha yüksek şönt dirençleri önerilmiştir. Son I-V sonuçları, tandem ETM katmanı, kompozit HTM tabakası ve tek perovskit tabakası kullanan hücrenin nispeten daha uygun performanslar bildirdiğini göstermiştir.

PSC'lerin çalışma mekanizmaları, elektronlar üreten perovskit bazlı bir emici tabakaya ve elektrik üretimine yol açan boşluklara dayanmaktadır. PSC'lerin çalışmasının ilk yıllarında, araştırmacılar genellikle önemli ölçüde daha yüksek performanslarıyla ilgili olarak metilamonyum kurşun bazlı perovskitler kullandılar [80, 81]. Bu PSC yapılarının kullanılması, stabilite sorunlarına da yol açan tehlikeli çevresel etkilere yol açmıştır [83-84]. Bu, kurşunsuz PSC'leri tekrar incelemek için araştırmalar yapılması gerektiği düşünülmüştür.

Perovskit emici tabakaya ek olarak, diğer katmanlar bir PSC yapısında bulunmalıdır. Yük taşıma ve yük toplama katmanları içerirler. Elektronlar ve boşluklar da dahil olmak üzere emiciden üretilen iki farklı yük ile ilgili olarak, emici tabaka hariç bahsedilen diğer katmanlar şunlardır: elektron taşıma malzemesi (ETM), boşluk taşıma malzemesi (HTM), metal elektrot (Anot), şeffaf cam elektrot (Katot). Bir PSC yapısında, emici katman, ETM ve HTM katmanları bir PSC'nin aktif katmanlarıdır. Bu nedenle, elektrotlara göre daha önemlidirler ve PSC'ler etrafındaki araştırmaların yenilikleri genellikle aktif katman varyasyonuna dayanmaktadır. Özet olarak, bir PSC'nin aktif katmanlarının en önemli iyonlarından ve malzemelerinden bazıları Tablo

3.1'de listelenmiştir. Ayrıca, aşağıdaki şekil 3.1'de bir PSC yapısının şematik bir görünümünü temsil etmek için gösterilmiştir.

Perovskit emici tabakaya ek olarak, diğer katmanlar bir PSC yapısında bulunmalıdır. Yük taşıma ve yük toplama katmanları içerirler. Elektronlar ve boşluklar da dahil olmak üzere emiciden üretilen iki farklı yük ile ilgili olarak, emici tabaka hariç bahsedilen diğer katmanlar şunlardır: elektron taşıma malzemesi (ETM), boşluk taşıma malzemesi (HTM), metal elektrot (Anot), şeffaf cam elektrot (Katot). Bir PSC yapısında, emici katman, ETM ve HTM katmanları bir PSC'nin aktif katmanlarıdır. Bu nedenle, elektrotlara göre daha önemlidirler ve PSC'ler etrafındaki araştırmaların yenilikleri genellikle aktif katman varyasyonuna dayanmaktadır. Özet olarak, bir PSC'nin aktif katmanlarının en önemli iyonlarından ve malzemelerinden bazıları Tablo 3.1'de listelenmiştir. Ayrıca, aşağıdaki şekil 3.1'de bir PSC yapısının şematik bir görünümünü temsil etmek için gösterilmiştir.



Şekil 3.1. Perovskit güneş pilininin basit bir şematik görünümü

Diğer tüm güneş pili tipleri çalışması gibi, PSC'lerin çalışması da hem deneysel hem de simülasyon aşamalarında gerçekleştirilebilir [60]. Simülasyon, bir güneş pili geliştirmenin etkili parametreleri hakkında uygun bilgi verebilir ve deneysel aşamalarda sonuçlara yardımcı olacaktır.

Tablo 3.1. PSC'lerin aktif katmanlarının oluşturan malzemelerinin kısa bir özeti

Aktif katman	İyon/Malzeme Kategorisi	Örnekler	Açıklama	Referans
Perovskit	Tek Değerlikli Katyon	Metilamonyum (MA): CH_3NH_3^+	Basit sentez ve katman biriktirme, yüksek verimlilik	[80]
		Formamidinyum (FA): $\text{HC}(\text{NH}_2)^{2+}$	Daha büyük bir kafese, daha optimum bant aralığına, termal olarak daha kararlı	[88, 89]
		Sezyum (Cs^+)	Mükemmel termal kararlılık, ideal bant aralığına sahip değildir	[90]
	İki Değerli Katyon	Kurşun (Pb^{2+})	Mükemmel performans, çevresel toksisite	[80]
		Kalay (Sn^{2+})	Ekotoksisite, kendiliğinden katkılama ve oksidasyon problemleri yoktur	[80]
		Germanyum (Ge^{2+})	Çok düşük verimlilik	[87, 91]
Halojenür iyonu	İyot (I^-)	Tek bant aralığı emiciler için uygun daha optimum bant aralığı	[92, 93]	
	Klor (Cl^-)	Daha geniş bant aralığına sahip olmak, ışık yayan cihazlar için daha kullanışlıdır	[92, 93]	
	Brom (Br^-)	Tandem uygulamalar için uygundur	[92, 93]	

Tablo 3.1. (Devamı) PSC'lerin aktif katmanını oluşturan malzemelerinin kısa bir özeti

Aktif katman	İyon/Malzeme Kategorisi	Örnekler	Açıklama	Referans
Elektron Taşıma Malzemesi	Anorganik	Geçiş metali oksitler (TiO ₂ , ZnO, SnO ₂ , WO ₃ , vb.)	En uygulanabilir, daha fazla verimlilik	[80]
	Organik	Fullerenler ve türevleri (PCBM, C60)	İyi bant aralığı hizalaması, yeterli elektron hareketliliği	[80]
	Küçük moleküller	Spiro-OMeTAD	Nispeten basit işleme ve kapsamlı değiştirilebilirlik	[80]
Boşluk Taşıma Malzemesi	Polimer	PEDOT: PSS, P3HT, PTAA, PANI	Daha ucuz, mükemmel film oluşturma özelliklerine sahip	[94]
	Anorganik	CuSCN, Cu ₂ O	Yüksek stabilite, yüksek dahili şarj hareketliliği ve genellikle düşük maliyet	[95]

3.2. Gereç ve Yöntemler

Önceki bölümde belirtilen hedeflere ulaşmak için SCAPS-1D (Solar Cell Capacitance Simulator- one dimensional) simülasyon ele alınmıştır [100]. Bu program ilk olarak Belçika'daki Gent Üniversitesi Elektronik ve Bilgi Sistemleri Bölümü'nde (ELIS) MarcBurgelman ve ark. aracılığıyla geliştirilmiştir [101]. Bu simülasyon aracı, bir güneş pilinin maksimum yedi katmanını simüle edebilir. SCAPS-1D simülasyonunun sonuçları, akım-gerilim (I-V), kapasitans-gerilim (C-V), kapasitans-frekans (C-f), Kuantum verimliliği (QE), üretim-rekombinasyon grafikleri hakkında bilgi vermektedir. Simülasyon, güneş pillerinin elektron ve boşluk sürekliliği denklemlerini ve Poisson denklemini aynı anda çözmeye dayanmaktadır [102]. Denklemlere ve diğer simülasyon özel ayarlarına göre, simülasyonunu gerçekleştirebilmesi için programa bazı birincil özellikler verilmelidir. Bu özellikler, aktif katmanlar için Tablo 3.4-3.6'da

verilen maddeleri ve sıcaklık, hava kütlesi, ön temasta yansıma, seri ve şönt dirençleri gibi diğer bazı çalışma noktalarını içermektedir. Bu çalışma 300 K sıcaklıkta ve A.M.1.5G hava kütlesinde gerçekleştirilmiştir. Yansıma ve dirençler sonraki bölümlerde tartışılacaktır. Tablo 3.4-3.6 da farklı malzeme adayları için aktif katmanların özelliklerini temsil etmektedir.

3.3. Sentezde Kullanılan Numuneler

Tablo 3.2. SA-1 Çalışmada ele alınan farklı PSC yapılarının performans parametreleri

Number	HTM	ETM	Perovskite (Absorber)	PCE (%)	J _{sc} (mA/cm ²)	V _{oc} (V)	FF (%)
1	CuSCN	PCBM	FA _{0.85} CS _{0.15} Pb(I _{0.85} Br _{0.15}) ₃	11.54	16.27	7.79	9.10
2	CuSCN	PCBM	FA _{0.85} CS _{0.15} PbI ₃	15.63	17.97	1.06	82.16
3	CuSCN	PCBM	FAPbI ₃	15.43	19.60	1.02	77.17
4	CuSCN	PCBM	FASnI ₃	20.66	23.63	1.10	79.28
5	CuSCN	PCBM	MAPbI ₃	14.88	18.50	0.97	82.71
6	CuSCN	PCBM	MAPbI _{3-x} Cl _x	15.88	19.57	1.04	77.79
7	CuSCN	PCBM	MASnBr ₃	3.27	4.55	9.29	7.74
8	CuSCN	PCBM	MASnI ₃	18.30	25.49	0.94	76.09
9	CuSCN	TiO ₂	FA _{0.85} CS _{0.15} Pb(I _{0.85} Br _{0.15}) ₃	15.63	21.88	0.00	0.00
10	CuSCN	TiO ₂	FA _{0.85} CS _{0.15} PbI ₃	20.41	23.07	1.09	81.21
11	CuSCN	TiO ₂	FAPbI ₃	16.38	23.22	1.04	67.54
12	CuSCN	TiO ₂	FASnI ₃	26.03	27.75	1.13	83.16
13	CuSCN	TiO ₂	MAPbI ₃	16.81	22.51	0.99	75.38
14	CuSCN	TiO ₂	MAPbI _{3-x} Cl _x	16.63	21.72	1.06	72.19
15	CuSCN	TiO ₂	MASnBr ₃	4.79	9.27	0.00	0.00
16	CuSCN	TiO ₂	MASnI ₃	13.45	27.10	0.96	51.50
17	CuSCN	ZnO	FA _{0.85} CS _{0.15} Pb(I _{0.85} Br _{0.15}) ₃	2.18	21.83	0.00	0.00
18	CuSCN	ZnO	FA _{0.85} CS _{0.15} PbI ₃	13.96	23.02	1.25	48.69
19	CuSCN	ZnO	FAPbI ₃	13.09	23.33	0.98	57.26
20	CuSCN	ZnO	FASnI ₃	13.00	27.64	1.05	44.94
21	CuSCN	ZnO	MAPbI ₃	12.99	22.51	5.51	10.48
22	CuSCN	ZnO	MAPbI _{3-x} Cl _x	12.07	22.60	1.58	33.82
23	CuSCN	ZnO	MASnBr ₃	4.36	9.14	0.00	0.00
24	CuSCN	ZnO	MASnI ₃	16.14	28.35	0.94	60.41
25	PEDOT:PSS	PCBM	FA _{0.85} CS _{0.15} Pb(I _{0.85} Br _{0.15}) ₃	9.14	16.83	0.85	63.83
26	PEDOT:PSS	PCBM	FA _{0.85} CS _{0.15} PbI ₃	12.33	18.44	0.90	74.66
27	PEDOT:PSS	PCBM	FAPbI ₃	12.82	19.74	0.90	71.95
28	PEDOT:PSS	PCBM	FASnI ₃	15.18	20.42	1.03	72.43
29	PEDOT:PSS	PCBM	MAPbI ₃	12.44	17.04	0.93	78.29
30	PEDOT:PSS	PCBM	MAPbI _{3-x} Cl _x	13.26	17.27	1.02	75.21
31	PEDOT:PSS	PCBM	MASnBr ₃	3.54	7.18	0.85	57.72
32	PEDOT:PSS	PCBM	MASnI ₃	15.53	25.38	0.90	67.85
33	PEDOT:PSS	TiO ₂	FA _{0.85} CS _{0.15} Pb(I _{0.85} Br _{0.15}) ₃	12.45	22.68	0.87	62.98

Tablo 3.2. (Devamı) SA 1-Bu çalışmada ele alınan farklı PSC yapılarının performans parametreleri

Number	HTM	ETM	Perovskite (Absorber)	PCE (%)	J _{sc} (mA/cm ²)	V _{oc} (V)	FF (%)
34	PEDOT:PSS	TiO ₂	FA _{0.85} CS _{0.15} PbI ₃	16.22	23.71	0.92	73.98
35	PEDOT:PSS	TiO ₂	FAPbI ₃	13.34	23.08	0.92	62.56
36	PEDOT:PSS	TiO ₂	FASnI ₃	17.58	22.56	1.05	74.20
37	PEDOT:PSS	TiO ₂	MAPbI ₃	12.74	19.66	0.95	68.08
38	PEDOT:PSS	TiO ₂	MAPbI _{3-x} Cl _x	13.14	18.40	1.04	68.77
39	PEDOT:PSS	TiO ₂	MASnBr ₃	4.66	12.57	0.89	41.79
40	PEDOT:PSS	TiO ₂	MASnI ₃	10.80	26.81	0.92	43.74
41	PEDOT:PSS	ZnO	FA _{0.85} CS _{0.15} Pb(I _{0.85} Br _{0.15}) ₃	12.41	22.66	0.86	63.51
42	PEDOT:PSS	ZnO	FA _{0.85} CS _{0.15} PbI ₃	9.93	23.68	1.10	38.24
43	PEDOT:PSS	ZnO	FAPbI ₃	9.78	23.16	1.64	25.72
44	PEDOT:PSS	ZnO	FASnI ₃	6.71	22.91	1.00	29.28
45	PEDOT:PSS	ZnO	MAPbI ₃	10.49	20.03	2.08	25.23
46	PEDOT:PSS	ZnO	MAPbI _{3-x} Cl _x	9.56	19.51	1.27	38.63
47	PEDOT:PSS	ZnO	MASnBr ₃	4.69	12.44	0.88	42.75
48	PEDOT:PSS	ZnO	MASnI ₃	12.84	28.03	1.87	24.47
49	Spiro-OMeTAD	PCBM	FA _{0.85} CS _{0.15} Pb(I _{0.85} Br _{0.15}) ₃	9.59	16.13	1.02	58.54
50	Spiro-OMeTAD	PCBM	FA _{0.85} CS _{0.15} PbI ₃	12.94	17.87	1.04	69.50
51	Spiro-OMeTAD	PCBM	FAPbI ₃	14.20	19.62	1.01	71.45
52	Spiro-OMeTAD	PCBM	FASnI ₃	20.28	23.61	1.10	77.88
53	Spiro-OMeTAD	PCBM	MAPbI ₃	14.78	18.54	0.97	81.84
54	Spiro-OMeTAD	PCBM	MAPbI _{3-x} Cl _x	15.87	19.69	1.04	77.16
55	Spiro-OMeTAD	PCBM	MASnBr ₃	2.51	4.52	0.94	58.71
56	Spiro-OMeTAD	PCBM	MASnI ₃	17.21	25.48	0.94	71.74
57	Spiro-OMeTAD	TiO ₂	FA _{0.85} CS _{0.15} Pb(I _{0.85} Br _{0.15}) ₃	13.18	21.86	1.04	58.15
58	Spiro-OMeTAD	TiO ₂	FA _{0.85} CS _{0.15} PbI ₃	17.16	23.05	1.07	69.55
59	Spiro-OMeTAD	TiO ₂	FAPbI ₃	15.00	23.22	1.04	62.35
60	Spiro-OMeTAD	TiO ₂	FASnI ₃	25.44	27.75	1.13	81.30
61	Spiro-OMeTAD	TiO ₂	MAPbI ₃	16.69	22.58	0.99	74.48
62	Spiro-OMeTAD	TiO ₂	MAPbI _{3-x} Cl _x	16.66	21.92	1.06	71.61
63	Spiro-OMeTAD	TiO ₂	MASnBr ₃	4.18	9.26	0.93	48.78
64	Spiro-OMeTAD	TiO ₂	MASnI ₃	12.44	27.02	0.96	47.90
64	Spiro-OMeTAD	TiO ₂	MASnI ₃	12.44	27.02	0.96	47.90
65	Spiro-OMeTAD	ZnO	FA _{0.85} CS _{0.15} Pb(I _{0.85} Br _{0.15}) ₃	0.00	0.00	0.00	0.00

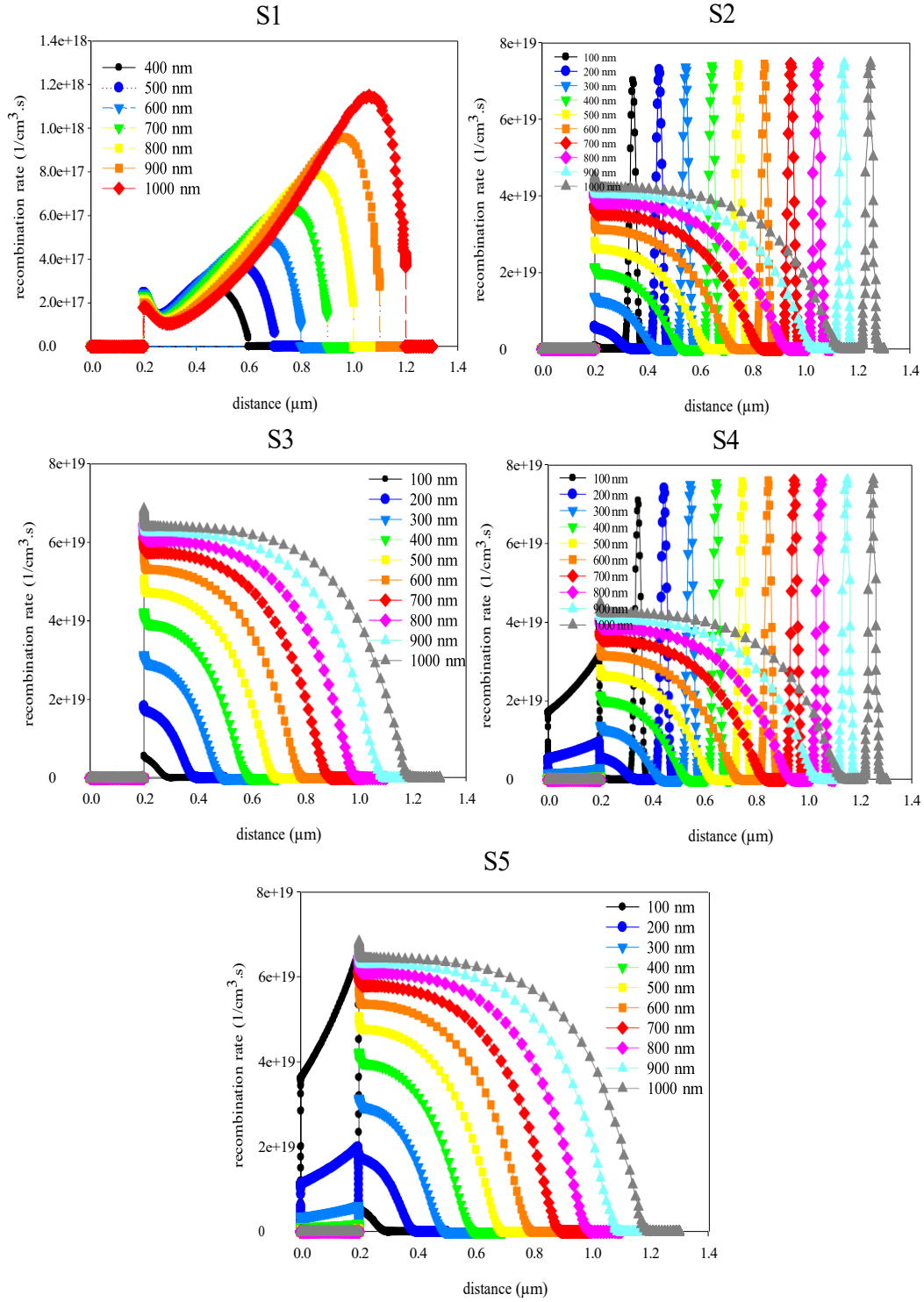
Tablo 3.2. (Devamı) SA 1-Bu çalışmada ele alınan farklı PSC yapılarının performans parametreleri

Number	HTM	ETM	Perovskite (Absorber)	PCE (%)	J _{sc} (mA/cm ²)	V _{oc} (V)	FF (%)
66	Spiro-OMeTAD	ZnO	FA _{0.85} CS _{0.15} PbI ₃	11.09	23.02	1.39	34.73
67	Spiro-OMeTAD	ZnO	FAPbI ₃	11.44	23.29	1.77	27.71
68	Spiro-OMeTAD	ZnO	FASnI ₃	12.63	27.63	1.02	44.72
69	Spiro-OMeTAD	ZnO	MAPbI ₃	13.02	22.57	5.04	11.45
70	Spiro-OMeTAD	ZnO	MAPbI _{3-x} Cl _x	12.07	22.75	1.51	35.01
71	Spiro-OMeTAD	ZnO	MASnBr ₃	4.23	9.13	0.93	49.96
72	Spiro-OMeTAD	ZnO	MASnI ₃	14.67	28.23	1.93	26.97

Renk Durumu:

- ✓ **Yeşil**: iyi veri, %20'nin üzerinde verimlilik
- ✓ **Sarı**: normal veriler, %10 ila %20 arasında verimlilik
- ✓ **Kırmızı**: kötü veri, verimlilik %10'un altında
- ✓ **Mor**: mantıksız ve aralık dışı veriler

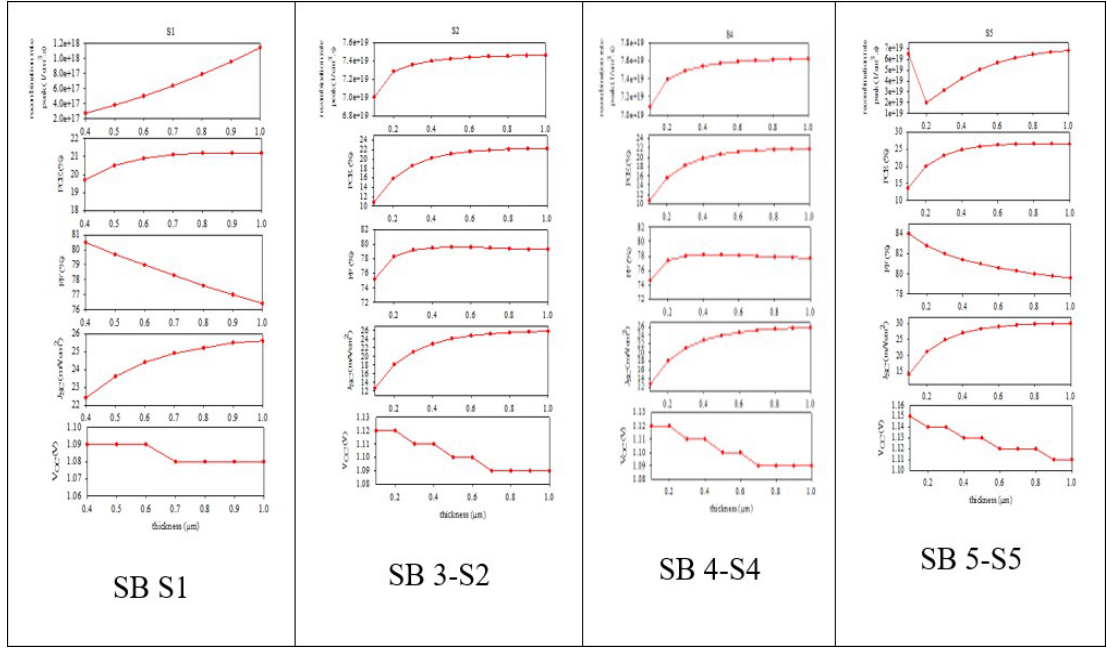
3.4. Rekombinasyon Grafikleri:



Şekil 3.2. SB 1- HTM'den ETM'ye hücre mesafesinin bir fonksiyonu olarak S1-S5 PSC yapılarının rekombinasyon yolu çizimleri

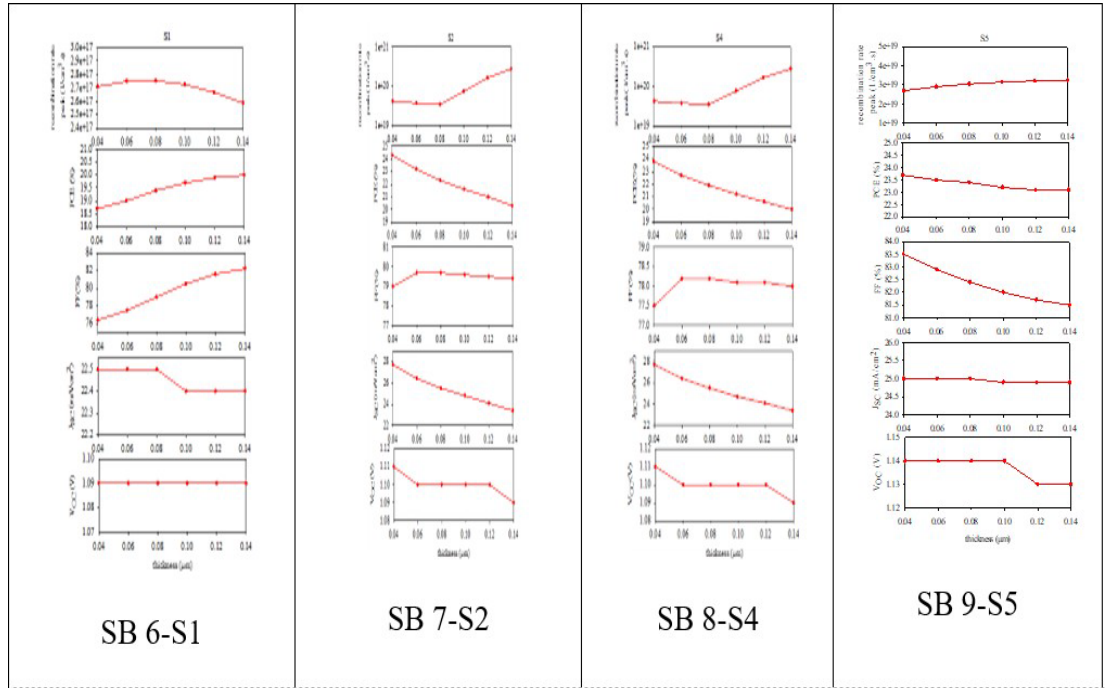
3.5. Performans Grafikleri:

3.5.1. Perovskit kalınlığı



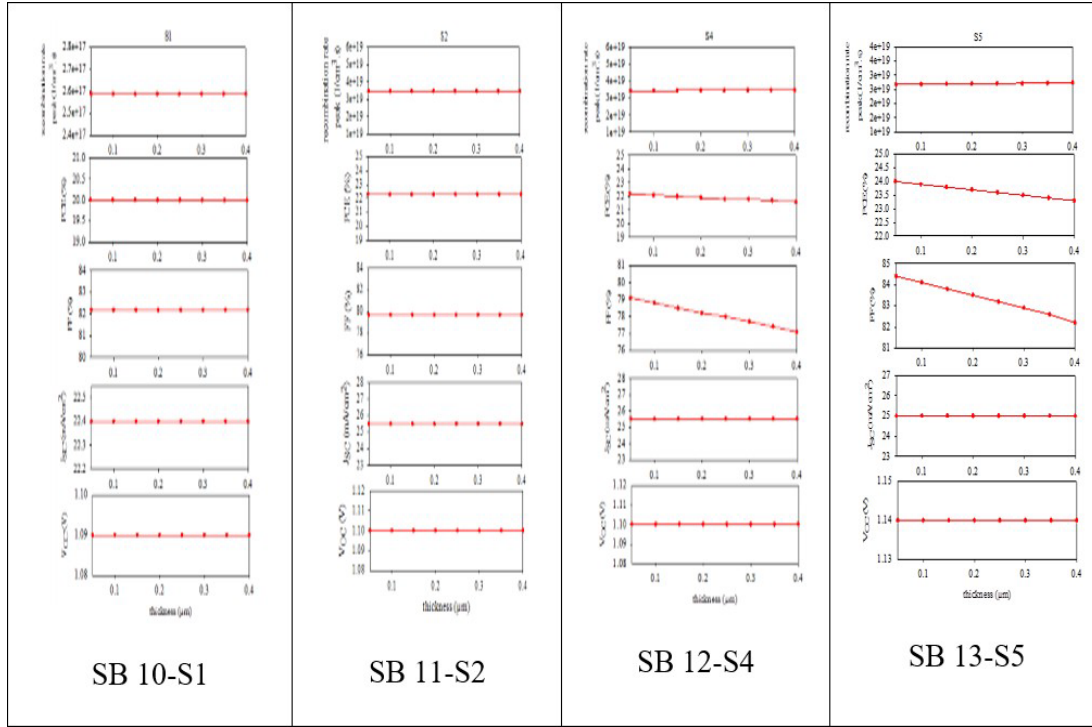
Şekil 3.3. Perovskite kalınlığının bir fonksiyonu olarak fotovoltaiik parametrelerin ve rekombinasyon faktörünün değişimi

3.5.2. ETM kalınlığı



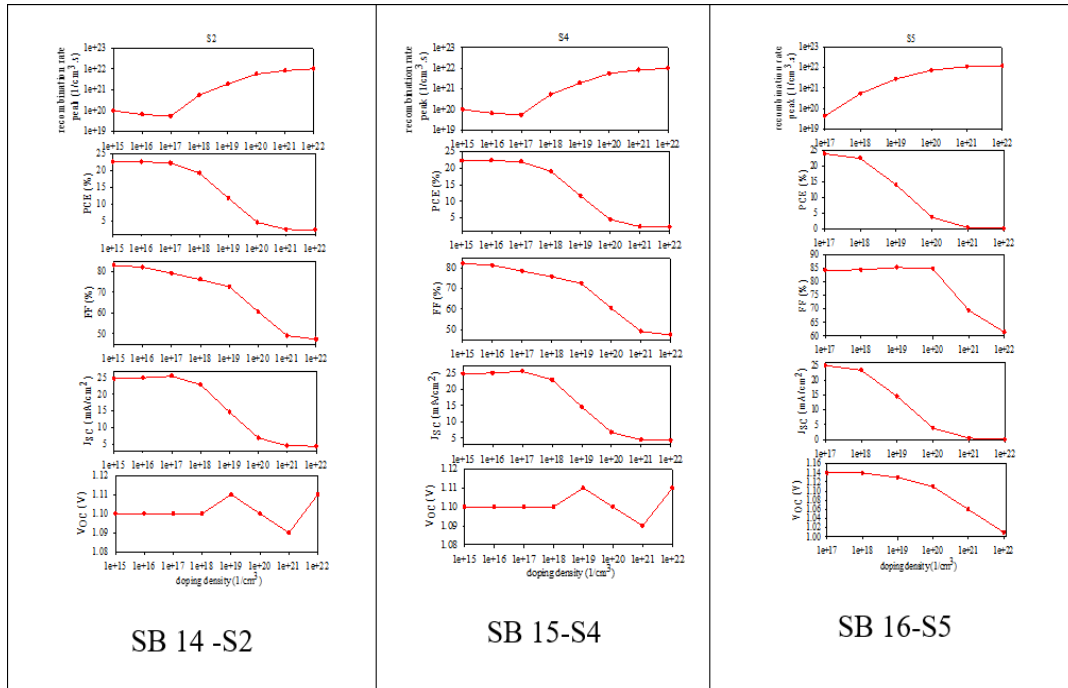
Şekil 3.4. ETM kalınlığının bir fonksiyonu olarak fotovoltaiik parametrelerin ve rekombinasyon faktörünün değişimi

3.5.3. HTM kalınlığı



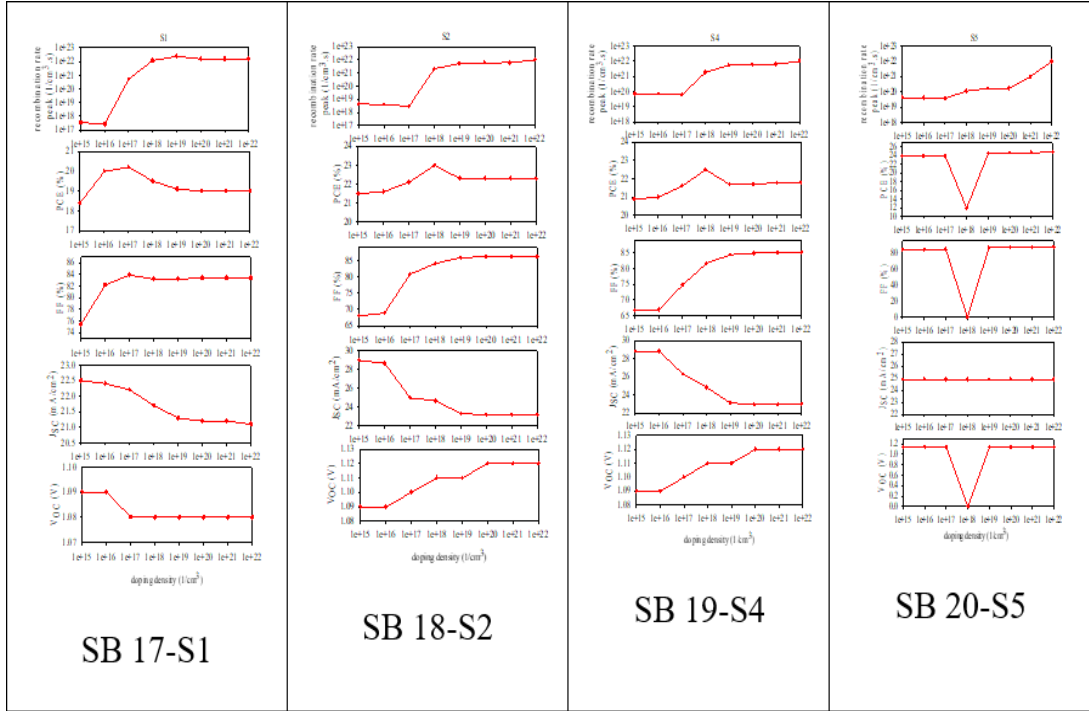
Şekil 3.5. HTM kalınlığının bir fonksiyonu olarak fotovoltaiik parametrelerin ve rekombinasyon faktörünün değişimi

3.5.4. Perovskit katkılama



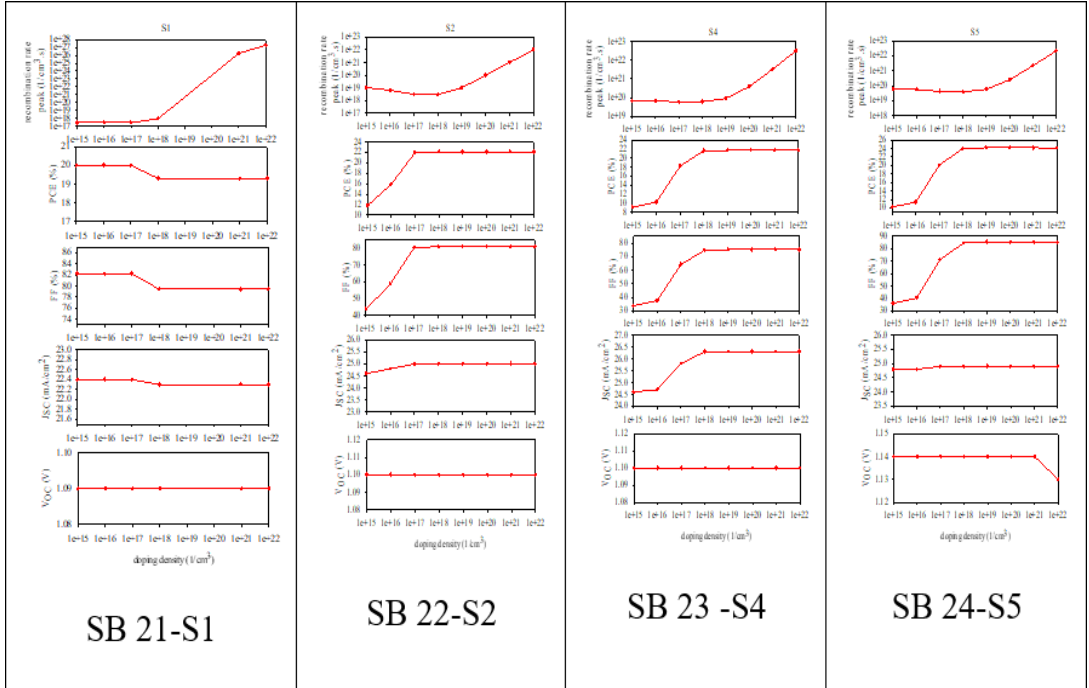
Şekil 3.6. Perovskite katkılama yoğunluğunun bir fonksiyonu olarak fotovoltaiik parametrelerin ve rekombinasyon faktörünün değişimi

3.5.5. ETM katkılama



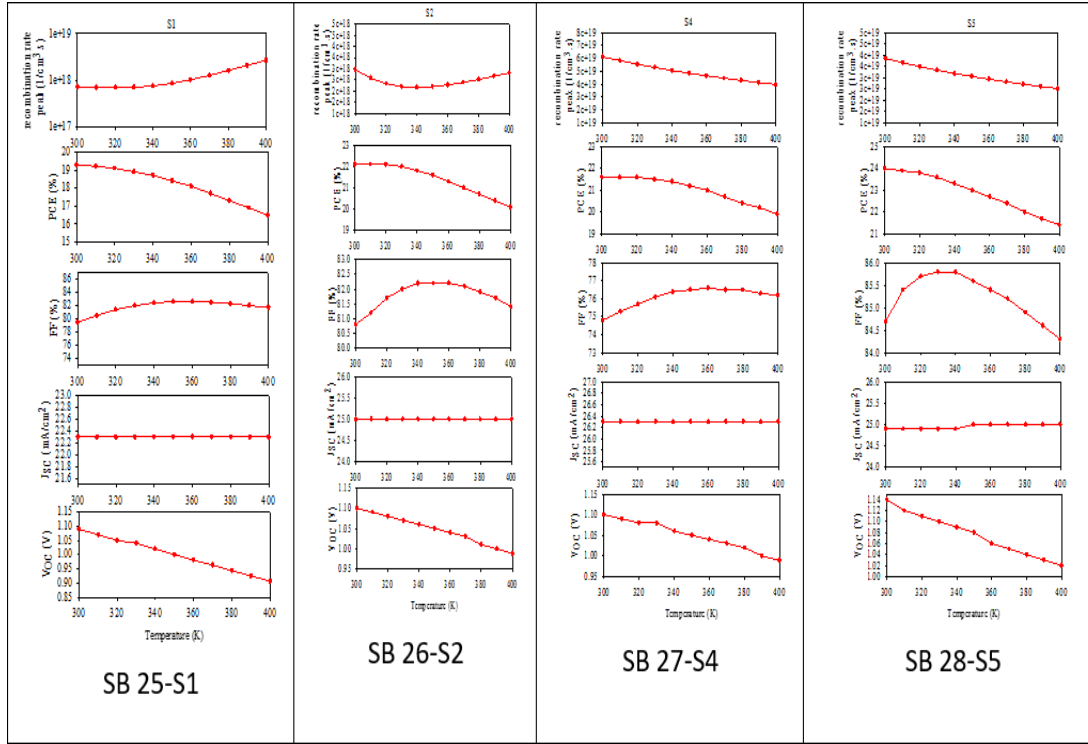
Şekil 3.7. ETM Katkılama yoğunluğunun bir fonksiyonu olarak fotovoltaiik parametrelerin ve rekombinasyon faktörünün değişimi

3.5.6. HTM katkılama



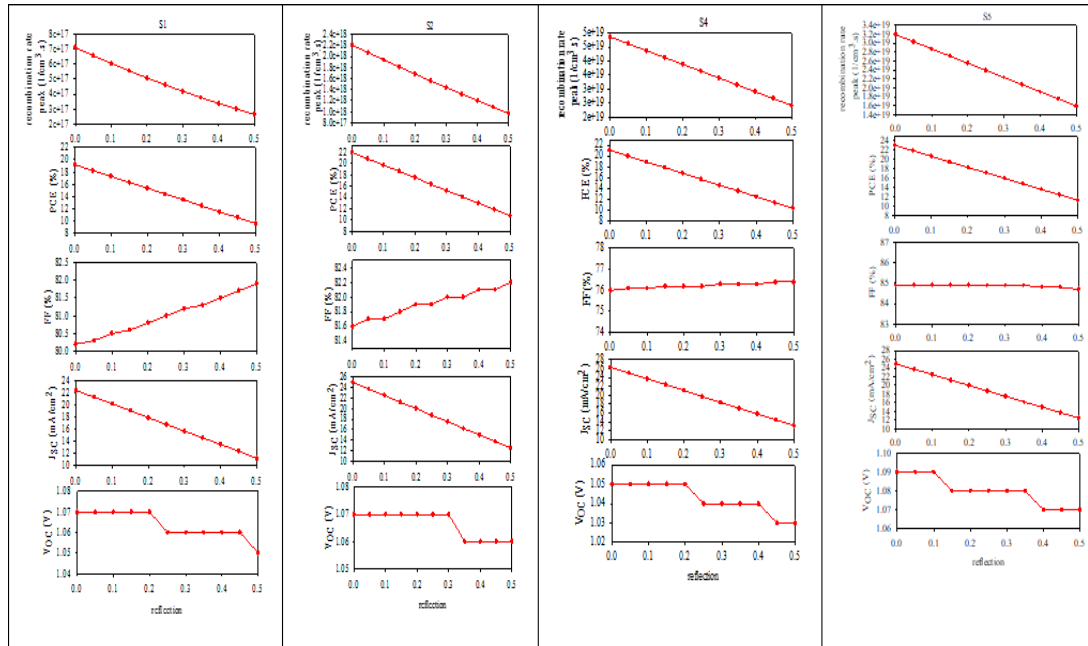
Şekil 3.8. HTM katkılama yoğunluğunun bir fonksiyonu olarak fotovoltaiik parametrelerin ve rekombinasyon faktörünün değişimi

3.5.7. Sıcaklık



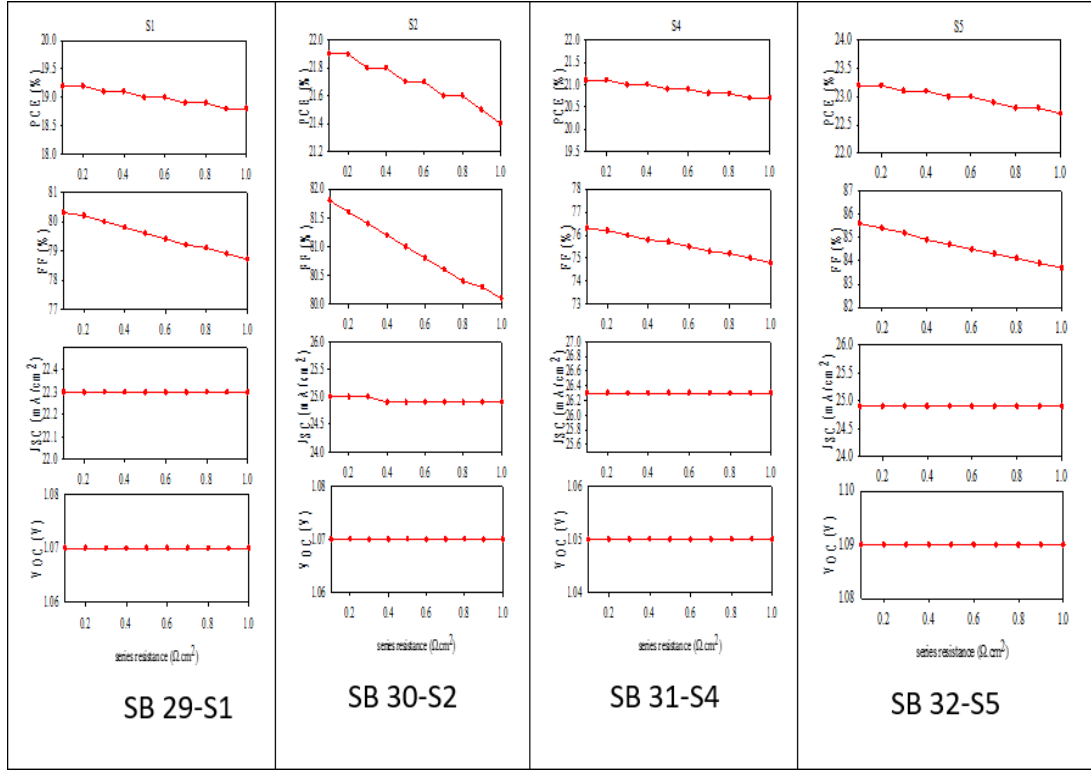
Şekil 3.9. Sıcaklığın bir fonksiyonu olarak fotovoltaiik parametrelerin ve rekombinasyon faktörünün değişimi

3.5.8. Seri Direnç



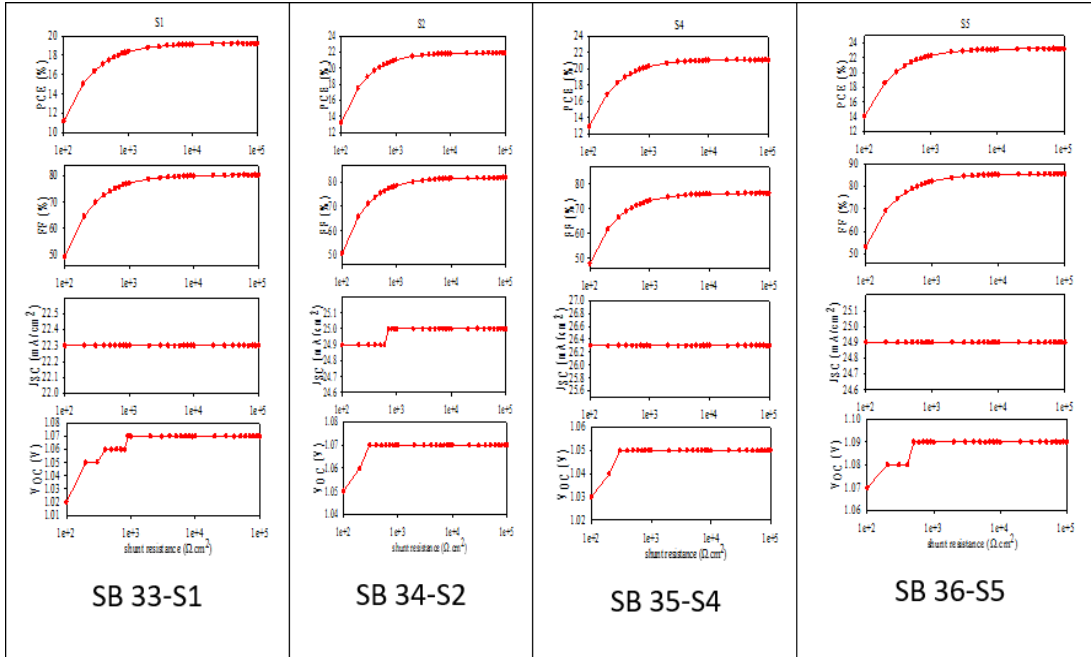
Şekil 3.10. Seri direncin bir fonksiyonu olarak fotovoltaiik parametrelerin ve rekombinasyon faktörünün değişimi

3.5.9. Şönt direnci



Şekil 3.11. Şönt direncinin bir fonksiyonu olarak fotovoltaiik parametrelerin ve rekombinasyon faktörünün değişimi

3.5.10. Yansıma



Şekil 3.12. Yansımanın bir fonksiyonu olarak fotovoltaiik parametrelerin ve rekombinasyon faktörünün değişimi

Tablo 3.3. Çalışmada kullanılan metilamonyum bazlı emicilerin elektriksel özellikleri

Özellikler	MAPbI ₃ [103,106]	MASnI ₃ [106,107]	MASnBr ₃ [106, 107]	MAPbI ₃ - xCl _x [106, 108]
Kalınlık (nm)	450	450	450	450
Bant aralığı (eV)	1.55	1.3	2.15	1.5
Elektron afinitesi (eV)	3.93	4.17	4.17	3.9
Dielektrik geçirgenlik	6.5	8.2	10	10
CB etkili durum yoğunluğu (1/cm ³): N _C	1.66×10 ¹⁹	1×10 ¹⁸	2.5×10 ¹⁹	2.75×10 ¹⁸
VB etkili durum yoğunluğu (1/cm ³): N _V	5.41×10 ¹⁹	1×10 ¹⁸	2.5×10 ¹⁹	3.9×10 ¹⁸
Elektron Termal Hızı (cm/s)	1×10 ⁷	1×10 ⁷	1×10 ⁷	1×10 ⁷
Boşluk termal hızı (cm/s)	1×10 ⁷	1×10 ⁷	1×10 ⁷	1×10 ⁷
Elektron hareketliliği (cm ² /Vs)	50	1.6	1.6	10
Boşluk hareketliliği (cm ² /Vs)	50	1.6	1.6	10
Donör yoğunluğu N _D (1/cm ³)	0	0	0	0
Alıcı yoğunluğu N _A (1/cm ³)	3×10 ¹⁶	3×10 ¹⁶	3.2×10 ¹⁵	3×10 ¹⁶
Kusur yoğunluğu N _t (1/cm ³)	1×10 ¹³	1×10 ¹³	1×10 ¹³	1×10 ¹³
Işınsal rekombinasyon katsayısı (cm ³ /s)	4.17×10 ⁹	1.33×10 ⁹	1.25×10 ⁸	4.17×10 ⁹
Burgu elektron yakalama katsayısı (cm ⁶ /s)	1.39×10 ²⁵	4.44×10 ²⁶	3.91×10 ²⁴	1.39×10 ²⁵
Burgu deliği yakalama katsayısı (cm ⁶ /s)	1.39×10 ²⁵	4.44×10 ²⁶	3.91×10 ²⁴	1.39×10 ²⁵

Tablo 3.4-3.6 verilerine göre, performanslarını araştırmak için her katman için farklı organik ve inorganik iyon ve malzeme türleri düşünülmüştür.

Tablo 3.4. Çalışmada kullanılan formamidiniim esaslı emicilerin elektriksel özellikleri

Özellikler	MAPbI ₃ [103,106]	MASnI ₃ [106,107]	MASnBr ₃ [106, 107]	MAPbI _{3-x} Cl _x [106, 108]
Kalınlık (nm)	450	450	450	450
Bant aralığı (eV)	1.55	1.3	2.15	1.5
Elektron afinitesi (eV)	3.93	4.17	4.17	3.9
Dielektrik geçirgenlik	6.5	8.2	10	10
CB etkili durum yoğunluğu (1/cm ³): N _C	1.66×10 ¹⁹	1×10 ¹⁸	2.5×10 ¹⁹	2.75×10 ¹⁸
VB etkili durum yoğunluğu (1/cm ³): N _V	5.41×10 ¹⁹	1×10 ¹⁸	2.5×10 ¹⁹	3.9×10 ¹⁸
Elektron Termal Hızı (cm/s)	1×10 ⁷	1×10 ⁷	1×10 ⁷	1×10 ⁷
Boşluk termal hızı (cm/s)	1×10 ⁷	1×10 ⁷	1×10 ⁷	1×10 ⁷
Elektron hareketliliği (cm ² /Vs)	50	1.6	1.6	10
Boşluk hareketliliği (cm ² /Vs)	50	1.6	1.6	10
Donör yoğunluğu N _D (1/cm ³)	0	0	0	0
Alıcı yoğunluğu N _A (1/cm ³)	3×10 ¹⁶	3×10 ¹⁶	3.2×10 ¹⁵	3×10 ¹⁶
Kusur yoğunluğu N _t (1/cm ³)	1×10 ¹³	1×10 ¹³	1×10 ¹³	1×10 ¹³
Işınsal rekombinasyon katsayısı (cm ³ /s)	4.17×10 ⁹	1.33×10 ⁹	1.25×10 ⁸	4.17×10 ⁹
Burgu elektron yakalama katsayısı (cm ⁶ /s)	1.39×10 ²⁵	4.44×10 ²⁶	3.91×10 ²⁴	1.39×10 ²⁵
Burgu deliği yakalama katsayısı (cm ⁶ /s)	1.39×10 ²⁵	4.44×10 ²⁶	3.91×10 ²⁴	1.39×10 ²⁵

Tablo 3.5. Çalışmada kullanılan elektron taşıma katmanlarının malzemelerinin elektriksel özellikleri [103-106].

Özellikler	TiO ₂	ZnO	Sonuç
Kalınlık (nm)	100	100	100
Bant aralığı (eV)	3.2	3.3	1.8
Elektron afinitesi (eV)	3.9	4.6	3.9
Dielektrik geçirgenlik	9	9	7
CB etkili durum yoğunluğu (1/cm ³): N _C	1×10 ¹⁹	2.2×10 ¹⁸	1.5×10 ¹⁸
VB etkili durum yoğunluğu (1/cm ³): N _V	1×10 ¹⁹	1.8×10 ¹⁹	2.4×10 ¹⁹
Elektron Termal Hızı (cm/s)	1×10 ⁷	1×10 ⁷	1×10 ⁷
Boşluk termal hızı (cm/s)	1×10 ⁷	1×10 ⁷	1×10 ⁷
Elektron hareketliliği (cm ² /Vs)	20	100	80
Boşluk hareketliliği (cm ² /Vs)	10	25	4
Donör yoğunluğu N _D (1/cm ³)	1×10 ¹⁶	1×10 ¹⁸	2×10 ¹⁷
Alıcı yoğunluğu N _A (1/cm ³)	0	0	0
Kusur yoğunluğu N _t (1/cm ³)	0	0	0
Işınsal rekombinasyon katsayısı (cm ³ /s)	2×10 ⁸	3.33×10 ⁷	2.78×10 ⁹
Burgu elektron yakalama katsayısı (cm ⁶ /s)	2×10 ²⁴	3.33×10 ²⁵	1.39×10 ²⁶
Burgu deliği yakalama katsayısı (cm ⁶ /s)	2×10 ²⁴	3.33×10 ²⁵	1.39×10 ²⁶

Elektrotlar için SCAPS-1D gerekli bilgi, FTO ve Au katmanları için sırasıyla 4.4eV ve 5.1eV olan çalışma değerleridir. Bu çalışmada yukarıdaki tabloda verilen 72 yapı için tablo-şekil verileri optimize edildi.

Tablo 3.6. Çalışmada kullanılan boşluk taşıma katmanlarının malzemelerinin elektriksel özellikleri [103-106].

Özellikler	Spiro-OMeTAD	PEDOT: PSS	CuSCN
Kalınlık (nm)	200	200	200
Bant aralığı (eV)	3.06	1.5	3.6
Elektron afinitesi (eV)	2.05	3.6	1.7
Dielektrik geçirgenlik	3	10	1
CB etkili durum yoğunluğu ($1/\text{cm}^3$): N_C	2.8×10^{19}	1×10^{21}	2.2×10^{19}
VB etkili durum yoğunluğu ($1/\text{cm}^3$): N_V	1×10^{19}	1×10^{21}	1.8×10^{18}
Elektron Termal Hızı (cm/s)	1×10^7	1×10^7	1×10^7
Boşluk termal hızı (cm/s)	1×10^7	1×10^7	1×10^7
Elektron hareketliliği (cm^2/Vs)	1×10^4	1	100
Boşluk hareketliliği (cm^2/Vs)	2×10^4	40	25
Donör yoğunluğu N_D ($1/\text{cm}^3$)	0	0	0
Alıcı yoğunluğu N_A ($1/\text{cm}^3$)	1×10^{18}	1×10^{19}	1×10^{18}
Kusur yoğunluğu N_t ($1/\text{cm}^3$)	0	0	0
Işınsal rekombinasyon katsayısı (cm^3/s)	1×10^8	5.5×10^{11}	2×10^{10}
Burgu elektron yakalama katsayısı (cm^6/s)	1×10^{26}	5.56×10^{30}	2×10^{28}
Burgu deliği yakalama katsayısı (cm^6/s)	1×10^{26}	5.56×10^{30}	2×10^{28}

Bu çalışmada Tablo 3.6-3.7 gerçekleştirilen tüm simülasyonlar için, altın (Au) ve Florürlü kalay oksit (FTO) sırasıyla metal temas ve ön temas olarak kabul edilmektedir.

Tablo 3. 7. Bu çalışmada ele alınan farklı PSC yapılarının performans parametreleri

HTM	courage	Perovskit (Emici)	PCE (%)	J _{sc} (mA/cm ²)	V _{oc} (V)	FF (%)
CuSCN	courage	FA _{0.85} Cs _{0.15} PbI ₃	15.63	17.97	1.06	82.16
CuSCN	courage	FASnI ₃	20.66	23.63	1.10	79.28
CuSCN	TiO ₂	FA _{0.85} Cs _{0.15} PbI ₃	20.41	23.07	1.09	81.21
CuSCN	TiO ₂	FAPbI ₃	16.38	23.22	1.04	67.54
CuSCN	TiO ₂	FASnI ₃	26.03	27.75	1.13	83.16
CuSCN	ZnO	MASnI ₃	16.14	28.35	0.94	60.41
PEDOT:PSS	courage	FA 0.85 Cs 0.15 Pb(I 0.85 Br 0.15) ₃	9.14	16.83	0.85	63.83

3.6. Bulgular ve Yorum

Simülasyon analizleri, mevcut çalışma dört farklı aşamaya dayanmaktadır. Aşağıda, belirtilen aşamaların sonuçlarının yorumları sunulacaktır.

3.6.1. Psc yapı seçimi

Tablo 3.1 açıklamalarına göre, PSC'lerde bir perovskit materyali için, MA⁺, FA⁺, Cs⁺, Pb²⁺, Sn²⁺, I⁻, Br⁻ ve Cl⁻ iyonları en çok kullanılan ve yüksek verimli element ve iyonlardır. Bu nedenle, Tablo 3.4 ve Tablo 3.5'te belirtilen literatür verilerini kullanarak, iyonların her birinin performansını araştırmak için 8 farklı emici göz önünde bulundurduk. Soğurucular MAPbI₃, MASnI₃, MASnBr₃, MAPbI_{3-x}Cl_x, FASnI₃, FAPbI₃, FA 0.85 Cs 0.15 PbI₃, FA 0.85 Cs 0.15 Pb (I_{0.85}Br_{0.15})₃ içerir. Tablo 3.1 açıklamalarına ve ayrıca giriş bölümünde bahsedilen HTM ve ETM katmanlarının sınıflandırılmasına göre hem ETM hem de HTM katmanları için 3 farklı katman ele alınmıştır. ETM katmanı için TiO₂, ZnO ve PCBM malzemelerini ve HTM katmanı için Spiro-OMeTAD, PEDOT: PSS, CuSCN malzemelerini içerir. Bu, 72 benzersiz PSC yapısının oluşumuna yol açar. İlk aşamada, SCAPS-1D toplu etüt seçenekleri kullanılarak, bu PSC yapılarının performans parametreleri araştırılmıştır. Sonuçlar Tablo 3.8'da verilmiştir.

Tablo 3.8. Optimum elde edilen PSC yapıları

HTM	courage	Perovskit (Emici)	PCE (%)	J _{sc} (mA/cm ²)	V _{oc} (V)	FF (%)
CuSCN	courage	FA _{0.85} Cs _{0.15} PbI ₃	15.63	17.97	1.06	82.16
CuSCN	courage	FASnI ₃	20.66	23.63	1.10	79.28
CuSCN	TiO ₂	FA _{0.85} Cs _{0.15} PbI ₃	20.41	23.07	1.09	81.21
CuSCN	TiO ₂	FAPbI ₃	16.38	23.22	1.04	67.54
CuSCN	TiO ₂	FASnI ₃	26.03	27.75	1.13	83.16
CuSCN	ZnO	MASnI ₃	16.14	28.35	0.94	60.41
PEDOT:PSS	courage	FA 0.85 Cs 0.15 Pb(I 0.85 Br 0.15) ₃	9.14	16.83	0.85	63.83
PEDOT:PSS	courage	FA _{0.85} Cs _{0.15} PbI ₃	12.33	18.44	0.90	74.66
PEDOT:PSS	courage	MAPbI _{3-x} Cl _x	13.26	17.27	1.02	75.21
PEDOT:PSS	courage	MASnBr ₃	3.54	7.18	0.85	57.72
PEDOT:PSS	courage	MASnI ₃	15.53	25.38	0.90	67.85
PEDOT:PSS	TiO ₂	FAPbI ₃	13.34	23.08	0.92	62.56
PEDOT:PSS	TiO ₂	MASnBr ₃	4.66	12.57	0.89	41.79
PEDOT:PSS	TiO ₂	MASnI ₃	10.80	26.81	0.92	43.74
PEDOT:PSS	ZnO	FA _{0.85} Cs _{0.15} PbI ₃	9.93	23.68	1.10	38.24
Spiro-OMeTAD	courage	FA 0.85 Cs 0.15 Pb(I 0.85 Br 0.15) ₃	9.59	16.13	1.02	58.54
Spiro-OMeTAD	courage	FA _{0.85} Cs _{0.15} PbI ₃	12.94	17.87	1.04	69.50
Spiro-OMeTAD	courage	FASnI ₃	20.28	23.61	1.10	77.88
Spiro-OMeTAD	courage	MAPbI _{3-x} Cl _x	15.87	19.69	1.04	77.16

Tablo 3.8.(Devamı) Optimum elde edilen PSC yapıları

HTM	courage	Perovskit (Emici)	PCE (%)	Jsc (mA/cm ²)	Voc (V)	FF (%)
Spiro-OMeTAD	courage	MASnBr ₃	2.51	4.52	0.94	58.71
Spiro-OMeTAD	TiO ₂	FA _{0.85} CS _{0.15} PbI ₃	17.16	23.05	1.07	69.55
Spiro-OMeTAD	TiO ₂	FASnI ₃	25.44	27.75	1.13	81.30
Spiro-OMeTAD	TiO ₂	MAPbI ₃	16.69	22.58	0.99	74.48
Spiro-OMeTAD	TiO ₂	MASnBr ₃	4.18	9.26	0.93	48.78
Spiro-OMeTAD	ZnO	FASnI ₃	12.63	27.63	1.02	44.72

Ancak, bu Tablo S A1'de (ek veri A) sunulan tamamlama sonuçlarının yalnızca küçük bir bölümünü gösterir. Tablo S A 1'in verileri, iyi sonuçlar (yeşil renk%20'den yüksek verimlilik), normal sonuçlar (sarı renk%10 ila%20 arasında verimlilik), kötü sonuçlar (verimlilik %10'dan düşük) ve mantıksız sonuçlar (mor renk, mantıksal olmayan veya aralık dışı sonuçlar) dahil olmak üzere dört farklı duruma ayrılmıştır. Tablo 3.8, iyi, normal ve kötü sonuçların küçük bir karışımını temsil etmektedir. Bununla birlikte, iyi sonuçlar Tablo 3.9'de de toplanmıştır. Bu çalışmanın diğer aşamaları iyi sonuçlar temelinde olacak ve veri optimizasyonu Tablo 3.9 PSC yapıları üzerinde gerçekleştirilecektir.

Tablo 3.8'e ve tamamen Tablo SA1'e göre, aşağıdaki maddeler sonuçlandırılabilir:

- HTM malzemeleri söz konusu olduğunda, CuSCN tabanlı ve PEDOT: PSS tabanlı PSC yapıları, sırasıyla diğerlerine göre en iyi ve en kötü verimlilik ortalamasını temsil eder.
- ETM malzemeleri söz konusu olduğunda, TiO₂ bazlı ve ZnO bazlı PSC yapıları, sırasıyla diğerlerine göre en iyi ve en kötü verimlilik ortalamasını temsil eder.

- Tek değerli katyonlar söz konusu olduğunda, formam idinuim bazlı PSC yapıları diğerlerine göre daha iyi verimlilik ortalamasını temsil eder. Dahası, tüm iyi sonuçlar FA tabanlı PSC'lere dayanmaktadır.
- İki değerli katyonlar söz konusu olduğunda, kurşun bazlı PSC yapıları, kalay bazlı olanlara göre daha iyi verimlilik ortalamasını temsil eder. Bununla birlikte, iyi sonuçların çoğu Sn tabanlı PSC'lere dayanmaktadır.
- Halojenür iyonları söz konusu olduğunda, iyot bazlı PSC yapıları diğerlerine göre daha iyi verimlilik ortalamasını temsil eder. Ayrıca, iyot / klor karışımli olanlar kabul edilebilir sonuçları temsil ediyordu. Öte yandan, brom bazlı PSC'ler önemli ölçüde kötü performanslar göstermiştir (ortalama %4 verimlilik).

Tablo 3.8 ve Tablo SA1'den elde edilen ortalama raporlarla ilgili olarak, TiO₂ ETM'si, CuSCN HTM'si ve FAPbI₃ emicisi olan bir PSC yapısı önerilmektedir. Bununla birlikte, elde edilen önerilen PSC yapısının doğrulanması için, iyi sonuçlar (verimlilik %20'den yüksek) yardımcı olabilir.

Tablo 3.9 sonuçlarına göre, ETM ve HTM durumunda, iki optimum PSC yapısının önerilen ortalama PSC yapısıyla eşleştiği görülmektedir. Bununla birlikte, Tablo 3.9'nin elde edilen emicileri önerilen yapıya göre farklılık göstermektedir. Ayrıca, Tablo 3.8'dan önerilen CuSCN / FAPbI₃ / TiO₂ PSC yapısının %16,38'lik bir verimlilik ortaya koyduğu ve iyi sonuçlar sınırından yaklaşık %4 sapmaya sahip olduğu görülmektedir.

Tablo 3.9. S1-S5 yapılarının aktif katmanları için elde edilen optimum kalınlıkların bir özeti

Yapı	Perovskit kalınlık	ETM kalınlık	HTM kalınlık
S1	140 nm	400 nm	50 nm
S2	80 nm	600 nm	50 nm
S3	40 nm	500 nm	50 nm
S4	80 nm	600 nm	50 nm
S5	40 nm	300 nm	50 nm

Tablo 3.9 şu sonuca varılabilir:

- HTM'lerin c asında, CuSCN bazlı hücreler diğer HTM adayları arasında en yüksek katkıya sahiptir. Dahası, PEDOT: PSS tabanlı hücrelerin iyi sonuçlarda herhangi bir rolü yoktur.
- ETM'lerin c azında, TiO₂ bazlı hücreler diğer ETM adayları arasında en yüksek katkıya sahiptir. Dahası, ZnO bazlı hücrelerin iyi sonuçlarda herhangi bir rolü yoktur.
- Emiciler söz konusu olduğunda, FASnI 3 bazlı yapılar diğerlerinden önemli ölçüde daha fazla porsiyona sahiptir ve FA 0.85 Cs_{0.15}PbI₃ bazlı PSC'ler dışında, başka hiçbir emici %20'den daha yüksek bir verim vermez.

3.6.2. Katman özelliği optimizasyonu

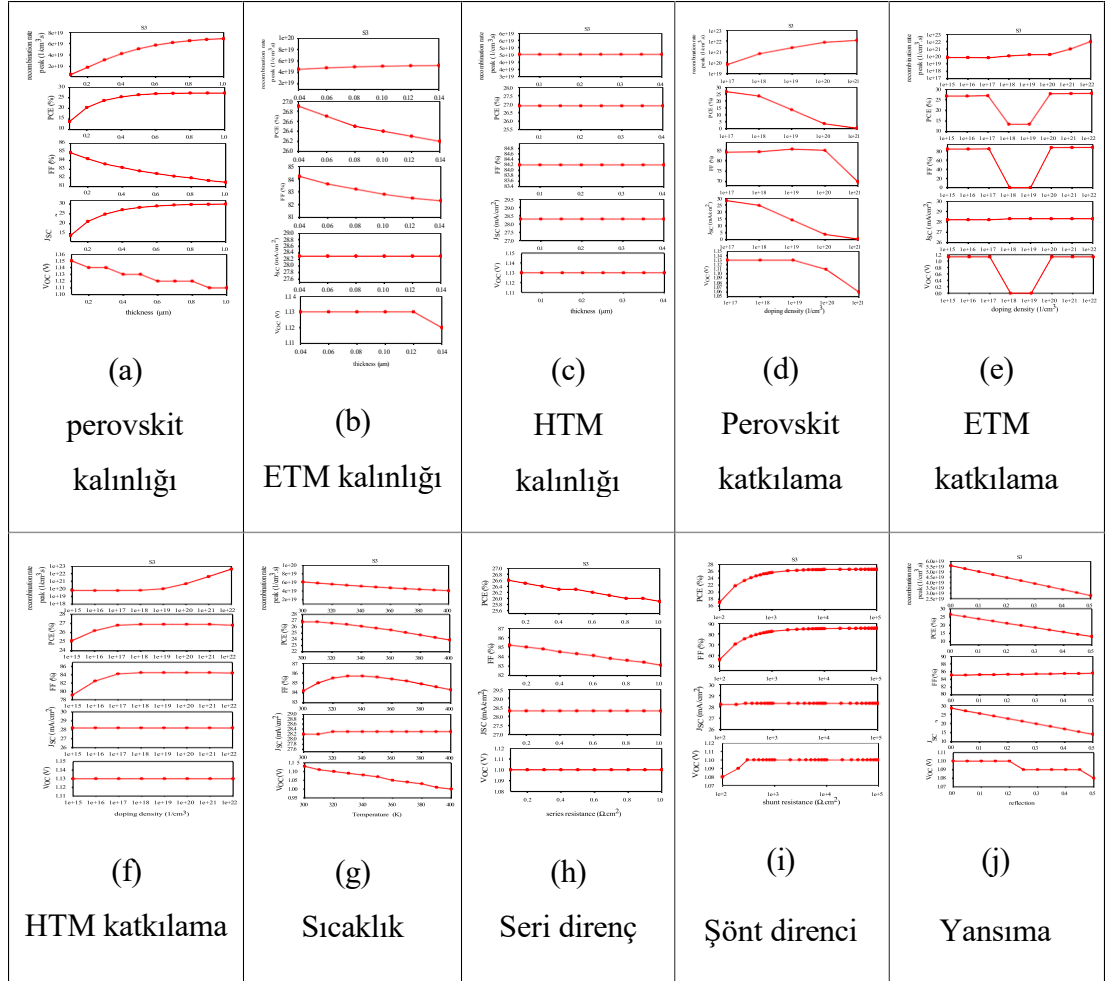
İkinci aşamada, Tablo 3.9'de tüm PSC'lerin adayları olarak belirtilen optimum PSC yapılarının, katman özellikleri açısından optimize edildiği düşünülmektedir. Bunun için, kalınlıkları ve katkılama yoğunluğu dahil olmak üzere aktif tabakaların önemli parametrelerinin varyasyonunun etkisi araştırılmıştır. Aşağıda, fotovoltaik parametreler ve rekombinasyon faktörünün varyasyonu, S1-S5 yapıları için katman özelliklerinin fonksiyonları olarak gösterilecektir (Tablo 3.9). Fotovoltaik parametreler, Tablo 3.8-3.9 ve Tablo SA1'de verilen performans faktörlerini ifade eder. Ayrıca, rekombinasyon faktörü, her bir özellik değerinin rekombinasyon yolu grafiklerinde oluşturulan rekombinasyon tepe noktasını ifade eder. Her yapı için çok sayıda veri ve diyagramla ilgili olarak, burada yalnızca S3 yapı sonuçlarının raporlanacağı ve geri kalanının Ek Veri B'de verileceği belirtilmektedir. Aşağıda daha fazla tartışma yapılacaktır.

3.6.2.1. Perovskit kalınlığı

SCAPS-1D toplu çalışması kullanılarak, perovskit kalınlığı değişiminin etkisi araştırılmıştır. Bu bölüm için, 100 nm-1000 nm'den perovskit kalınlığı değişiminin fotovoltaik parametreler ve rekombinasyon faktörü üzerindeki etkisi, S3 için Şekil 3.3 'te ve S1, S2, S4 ve S5 yapıları için Şekil 3.3 SB 2-SB 5 diyagramlarında verilmiştir. Ayrıca, farklı emici kalınlıklarındaki rekombinasyon yolları Şekil 3.2 SB1'de verilmiştir. (Bu grafik sadece perovskit kalınlığı değişimi için verilmiştir ve diğer rekombinasyon yolu grafikleri buna benzer. Bu nedenle, onları sunmadık). Daha

önce de belirtildiği gibi, Şekil 3.3 ve Şekil SB2-SB 5'te bildirilen rekombinasyon faktörleri, Şekil 3.2 SB1 diyagramının zirveleridir.

Şekil 3.13 (a)'dan perovskit kalınlığı artışının performans parametreleri üzerinde genel olarak olumlu bir etkiye sahip olduğu görülebilir. Bununla birlikte, rekombinasyon oranı zirvesi de artacaktır [110]. Perovskit kalınlığı arttıkça, elektron deliği üretimi de artacaktır. Diğer taraftan, ir rekombinasyon olasılığı artacaktır. V_{OC} ve J_{SC} , sırasıyla yükün rekombinasyonunu ve oluşumunu ifade eder. Bu, Şekil 3.13 (a) ve Şekil 3.3 SB2-SB5 diyagramlarının davranışlarını kanıtlayacaktır. Şekil 3.13 (a)'daki verimlilik grafiğine göre, verimlilik artış oranı 500 nm kalınlığından sonra azalır. Bu, diğer taraftaki rekombinasyon geliştirmesi ile ilgili uygun kalınlığın seçilmesine yardımcı olur. Bu nedenle, 500 nm kalınlığının perovskit kalınlığı için optimum bir seçim olabileceği görülmektedir.



Şekil 3.13. Katman özellik optimizasyon grafikleri

3.6.2.2. ETM kalınlığı

ETM kalınlık deęişiminin etkisi 40 nm-140 nm kalınlık aralıęında arařtırılmıřtır. Sonular, Őekil 3.13 (b) iin Őekil 3.4 ve S1, S2, S4 ve S5 yapıları iin Őekil 3.4 SB 6-SB 9 diyagramlarında raporlanmıřtır.

Őekil 3.4 diyagramlarının davranıřlarından, ETM kalınlıęının arttırılmasının PSC'nin performansı üzerinde genel olarak olumsuz bir etkiye sahip olduęu anlařılmaktadır. Bu, daha geniř mesafe nedeniyle emici ile ön temas arasındaki ge tařımaya baęlanabilir [111]. Ayrıca, kalınlık artıřı ile rekombinasyon oranının artacaęı aıktır. Őekil 3.4 SB7-SB9, Őekil 3.13(b) ile benzer bir davranıř sergilemektedir ve belirtilen gerekeler bunlar iin de uygulanabilir. Ancak, davranıř Őekil SB6'da gsterilen S1 PSC yapısı iin tamamen tersidir. Bu kesinlikle bahsedilen optimum yapılar arasındaki emici farkından kaynaklanmaktadır. Bununla birlikte, S2-S5 yapıları sz konusu olduęunda, 40 nm kalınlıęında daha fazla verimlilik ve daha az rekombinasyona gre, bu kalınlık optimum seim iin uygun olabilir. Bu, S1 iin tamamen tersidir. Bu nedenle, 140 nm kalınlıęı seildi.

3.6.2.3. HTM kalınlığı

nceki arařtırmalara benzer Őekilde, HTM kalınlıęı etkisi gz nnde bulundurulur. Bunun iin 50 nm-400 nm kalınlık aralıęı seildi. Sonular, S3 iin Őekil 3.5 diyagramları ve S1, S2, S4 ve S5 PSC yapıları iin Őekil 3.5 SB10-SB 13 diyagramları biimlerinde verilmiřtir.

Őekil 3.13 (c) ve Őekil 3.5 SB10-SB13'ten grlebileceęi gibi, HTM'lerin dikkate alınan kalınlık aralıęındaki PSC'lerin performans parametrelerinde nemli bir deęiřiklik meydana gelmemektedir. ETM katmanına raęmen, HTM katmanının, PSC'lerin konfigrasyonları nedeniyle perovskit tabakası tarafından ıřık emiliminin kalitesini etkilemedięine dikkat edilmelidir. Bařka bir deyiřle, ıřık ETM'lerin zerinden geer, ancak HTM tabakasına ulařmadan nce perovskit tabakası tarafından emilir. Bu nedenle, elektron delięi oluřumu HTM kalınlıęının deęiřiminden etkilenmez [60].

zel olarak, S1-S5 PSC yapılarının aktif katmanları iin optimum seilen kalınlıklar Tablo 3.10'da toplanmıřtır.

Tablo 3.10. S1-S5 yapılarının aktif katmanları için elde edilen optimum katkılama yoğunluklarının bir özeti

Yapı	Perovskit optimum katkılama yoğunluğu	ETM optimum katkılama yoğunluğu	HTM optimum katkılama yoğunluğu
S1	$1.3 \times 10^{16} \text{ 1/cm}^3$	10^{16} 1/cm^3	10^{15} 1/cm^3
S2	10^{16} 1/cm^3	10^{17} 1/cm^3	10^{18} 1/cm^3
S3	10^{17} 1/cm^3	10^{17} 1/cm^3	10^{17} 1/cm^3
S4	10^{17} 1/cm^3	10^{17} 1/cm^3	10^{18} 1/cm^3
S5	10^{17} 1/cm^3	10^{17} 1/cm^3	10^{18} 1/cm^3

3.6.2.4. Perovskit katkılama

Bir tabakanın katkılama yoğunluğu, bir malzemenin diğer önemli parametrelerinden biridir. Bir malzemedeki safsızlıkların konsantrasyonunu ifade eder. Bu safsızlıklar sırasıyla pozitif ve negatif katkılamakat için alıcı veya donör tiplerde olabilir. Bu nedenle, katkılama yoğunluğunun değeri, bir malzeme üzerindeki yük konsantrasyonu ile doğrudan bir ilişkiye sahiptir. Bu nedenle, değeri hücrenin performansını da etkileyecektir.

Bu çalışmada perovskit katkılama yoğunluğunun S3 yapısı için 10^{17} - 10^{21} 1/cm^3 katkılama yoğunluk aralığında etkisi araştırılmıştır. Şekil 3.13 (d), sonuçları performans ve rekombinasyon parametrelerinin biçimlerinde göstermektedir. Benzer görev, Şekil 3.6 SB14-SB16'da gösterildiği gibi S2, S4 ve S5 yapıları için de gerçekleştirilmiştir. (Tablo 3.5'te görülebileceği gibi, FA0.85Cs0.15PbI3 perovskit tabakası inert bir materyaldir ve eşit donör ve alıcı yoğunluklarına sahiptir. Bu nedenle, araştırmamayı tercih ettik)

Şekil 3.13 (d) ve Şekil 3.6 SB14-SB16'nın diyagramları, katkılama yoğunluğunun değişimi ile neredeyse benzer davranışları ortaya koymaktadır. Diyagramlar, dikkate alınan yapıların performans parametreleri için azalan davranışı temsil eder. Bu, rekombinasyon artışına bağlanabilir. Emici tabakanın katkılama yoğunluğunun artırılması, daha fazla yük taşıyıcısının üretilmesine yardımcı olur. Bununla birlikte, bir eşik değerinden sonra da daha fazla yük rekombinasyonuna yol açar. Elde edilen

sonuçlarla ilgili olarak, en düşük aralık yoğunluğunun, bu çalışmada kullanılan tüm S1-S5 PSC yapıları için optimum değer olduğu görülmektedir.

3.6.2.5. ETM katkılama

Perovskit katkılama varyasyonuna benzer şekilde, taşıma katmanlarının optimum katkılama yoğunluklarını bulmak da daha iyidir. Olguda ETM katkılama varyasyonunun etkisi $10^{15-10^{22}}$ /cm³ aralığında araştırıldı. Sonuçlar, S3 için Şekil 3.13 (e) diyagramları ve S1, S2, S4 ve S5 PSC yapıları için Şekil 3.7 SB17-SB20 diyagramları şeklinde gösterilmiştir.

Şekil 3.13 (e) ve Şekil 3.7 SB17-SB20'de belirtilen diyagramlara göre, yapıların her birinin diğerlerinden farklı davranışlar sergilediği görülmektedir. Bu nedenle, onlar için belirli bir davranış bulamayız. Ancak bu belirsizliğin farklı sebepleri olabilir. Bazı özel katkılama yoğunluklarındaki SCAPS-1D hesaplama hatasından kaynaklanıyor olabilir. Aktif katmanların yapılar arasındaki farkı, bunun için başka bir gerekçe olabilir. Bununla birlikte, S3 yapısı durumunda, verimlilik ve rekombinasyon grafiklerine göre, 10^{17} /cm³'lük donör yoğunluğunu seçtik.

3.6.2.6. HTM katkılama

HTM katkılama, PSC performansını etkileyen diğer önemli parametrelerden biridir. HTM'nin şeffaf olmasının gerekli olmadığı kavramı ile ilgili olarak, katkılama yoğunluğunun daha yüksek değerleri, boşlukların metal temasa daha iyi taşınmasına yol açabilir. HTM katkılama yoğunluğu değişiminin $10^{15-10^{22}}$ /cm³ aralığındaki sonuçları bu konuyu doğrulamaktadır. Sonuçlar, S3 için Şekil 3.13 (f) diyagramlarında ve S1, S2, S4 ve S5 PSC yapıları için Şekil 3.8 SB21-SB24'te bildirilmiştir.

Diyagramlardan, S1-S5 PSC yapılarının performans eğrilerinin genel olarak artan bir davranışa sahip olduğu açıktır. Rekombinasyon grafikleri de benzer bir davranışı temsil eder. Bu nedenle, HTM için uygun katkılama yoğunluğunun seçimi için bir karar verilmelidir. S3 durumunda, bir eşik değerinden sonra verimliliğin artmadığı görülebilir. Bu nedenle 10^{17} /cm³ değerinin HTM katkılama yoğunluğu için uygun bir seçim olabileceği görülmektedir.

Daha iyi bir içgörüyeye sahip olmak için, aktif tabakaların katkılama yoğunlukları için S1-S5 yapılarının optimum değerleri Tablo 3.11'de özetlenmiştir.

Tablo 3. 11. S1-S5 yapılarının aktif katmanları için elde edilen optimum seri ve şönt dirençlerinin bir özeti

PSC yapısı	Optimum seri direnç ($\Omega.cm2$)	Optimum şant direnci ($\Omega.cm2$)
S1	0.1	2×10^4
S2	0.1	2×10^4
S3	0.1	2×10^4
S4	0.1	10^4
S5	0.1	5×10^3

3.6.3. Çalışma noktası optimizasyonu

İncelenen söz konusu katman parametrelerine ek olarak, önemleri açısından bazı simülasyon genel koşulları da göz önünde bulundurulmalıdır. Aşağıda, bu genel koşullardan bazıları tartışılacaktır.

3.6.3.1. Sıcaklık

Güneş pillerinin sıcaklığı, uygun şekilde kalibre edilmesi gereken önemli koşullardan biridir. Optimizasyonu, deneysel çalışmaların daha uygun durumlarda yapılmasına yardımcı olabilir. Bu durumda simülasyon sürecinin iyi kullanılabilceği görülmektedir. Bu nedenle, mevcut durumda, optimum bir sıcaklık bulmak için 300-400 K sıcaklık aralığını seçtik. S3 için Şekil 3.13 (g) ve S1, S2, S4 ve S5 için Şekil 3.9 SB25-SB28'in sonuçları, sıcaklığın PSC'lerin performans parametreleri üzerindeki etkisini göstermektedir.

S1-S5 yapılarının söz konusu sonuçlarına göre, sıcaklık artışı ile genel olarak azalan bir davranışın görülebildiği açıktır. Bu nedenle, daha düşük sıcaklıkların seçilmesi daha iyi performans sonuçlarına yol açacaktır. İncelenen tüm yapılar için 300 K sıcaklığını dikkate aldık. Bu, daha fazla ısı dağılımına ve daha düşük performansa yol açan yüksek sıcaklıklarda yük taşıyıcılarının daha yüksek hareketliliğine bağlanabilir.

3.6.3.2. Seri direnç

Güneş pillerinin çalışma mekanizmaları, devrelerinde bulunan parazit dirençlerden dolayı sorun yaşanmaktadır. Bu dirençler seri ve şönt dirençleri içerir. Elektronlar ve boşlukların üretimi ve rekombinasyon mekanizmaları ile ilgilidirler. Genel olarak, seri ve şönt direnci, bir hücrenin sırasıyla üretim ve rekombinasyon işlemlerine karşı direncini temsil eder [90, 113]. Düşük ve yüksek değerlerin sırasıyla seri ve şönt dirençleri için optimum miktarlar olacağı açıktır. Ancak bu durumda seri direncin etkisi 0.1-1 $\Omega.cm2$ aralığında araştırılmıştır. Sonuçlar S3 için Şekil 3.13 (h)'de ve S1,

S2, S4, S5 PSC yapıları için Şekil 3.10 SB29-SB32'de gösterilmiştir. Belirtilen dirençlerin rekombinasyon üzerinde herhangi bir özel etkisi olmadığı unutulmamalıdır. Bu nedenle, bunları bildirmemeyi tercih ettik.

Son paragrafta belirtildiği gibi, seri dirençleri için daha düşük değerler arzu edilir. Şekil 3.13 (h) ve Şekil 3.10 SB29-SB32'nin sonuçları da bu konuyu doğrulamaktadır.

3.6.3.3. Şönt direnci

Daha önce de belirtildiği gibi, bir güneş pili için daha yüksek şant direnç değerleri analiz edilir. Şönt direnci arttıkça, hücre sonsuz şant direncine sahip ideal güneş hücresine daha fazla yaklaşacaktır. Bu kavramı doğrulamak için, şönt direnci etkisinin araştırılması için 10^{-2} - 10^5 $\Omega \cdot \text{cm}^2$ 'lik nispeten geniş bir veri aralığını göz önünde bulundurduk. Ancak, bir eşik değerinden sonra, artış artık olmayacaktır. S3 için Şekil 3.13 (i) ve S1, S2, S4, S5 için Şekil 3.11 SB33-SB37 diyagramları da bu konuyu doğrulamaktadır. Daha iyi bir bilgiye sahip olmak için, dirençlerin optimizasyonunun sonuçları S1-S5 PSC yapıları için Tablo 3.12'de toplanmıştır.

Tablo 3.12. Aktif tabakalarda tandem yapıların kullanılmasına ilişkin fotovoltaiik parametreler

Yapı kodu	Yapı formülasyonu	V_{oc} (V)	J_{sc} (mA/cm ²)	FF (%)	PCE (%)
TP1	Au/CuSCN/ FASnI 3/ FA 0,85 Cs _{0,15} PbI ₃ /TiO ₂ /FTO	1.08	26.66	61.49	17.69
TP2	Au/CuSCN/FA 0,85 Cs _{0,15} PbI 3/ FASnI ₃ /TiO ₂ /FTO	1.04	3.24	82.12	2.76
TE1	Au/CuSCN/FASnI ₃ /PCBM/TiO ₂ /FTO	1.13	28.26	84.58	26.93
TE2	Au/CuSCN/ FASnI ₃ / TiO ₂ /PCBM/ FTO	1.12	26.43	83.16	24.57
TH1	Au/CuSCN/Spiro-OMeTAD/FASnI ₃ /TiO ₂ /FTO	1.13	28.23	83.51	26.56
TH2	Au/Spiro-OMeTAD/ CuSCN/FASnI ₃ /TiO ₂ /FTO	1.13	28.23	83.64	26.60

3.6.3.4. Yansıma

SCAPS-1D'de Yansıma parametresi, emici tabakaya iletilen ışığın yüzdesini gösterir. Yansıma artışı ile emilen ışık miktarının azalacağı açıktır. Bu nedenle, daha düşük

performanslara yol açar. S3 için Şekil 3.13 (j) ve S1, S2, S4 ve S5 PSC yapıları için Şekil 3.12 SB37-SB40 diyagramları bunu doğrulamaktadır. Bununla birlikte, diğer taraftan, daha düşük elektron deliği üretimi de daha düşük rekombinasyona yol açabilir. Bu nedenle, söz konusu diyagramlarda gösterildiği gibi, rekombinasyon grafikleri için bir azalma meydana gelir. Bu nedenle, optimum yansımayı seçmek, daha yüksek performansları veya daha düşük rekombinasyonu göz önünde bulunduran çalışmanın nesnesine bağlıdır.

3.6.4. Yapılandırma optimizasyonu

PSC yapısındaki katmanların konfigürasyonu ve sayısı hücrenin performansını önemli ölçüde etkileyebilir. Bir PSC'nin her aktif katmanı tekli, tandem veya kompozit formlarda yapılandırılabilir. Aktif katmanların her biri için sadece tek bir malzeme kullanılmıştır. Bununla birlikte, bazı durumlarda, her katman için birden fazla malzeme kullanılabilir. Bu bazen daha iyi bir performansa yol açabilir. Özel bir aktif katman (genellikle iki malzeme) için birden fazla malzeme kullanılması durumunda, söz konusu katman kompozit veya tandem formatlarında yapılandırılmalıdır. Aşağıda, söz konusu yapılandırmalar daha fazla tartışılacaktır.

3.6.4.1. Tandem PSC'ler

Tandem konfigürasyonu, aktif bir katman için birden fazla malzeme kullanıldığında PSC'lerin ortak düzenlemelerinden biridir. Bir katman için iki farklı malzeme olması durumunda, malzemelerin yerleştirme sırasına bağlı olarak iki farklı tandem konfigürasyonu oluşturulabilir. Bu çalışmada, Tablo 3.9'da belirtilen optimum yapı malzemelerine göre, tandem konfigürasyonunun simülasyonu, aktif katmanların her biri için iki kez gerçekleştirilmiştir. Yerleşim sırasına bağlı olarak, etkin katmanların tandem konfigürasyonunun her biri için benzersiz kısaltmalar adlandırdık. Perovskit tabakası için TP1 ve TP2, ETM tabakası için TE1 ve TE2 ve HTM tabakası için TH1 ve TH2'yi içerir. Karşılık gelen yapı oluşumları simülasyon sonuçları (fotovoltaik parametreler) ile birlikte Tablo 3.13'te verilmiştir.

Tablo 3.13. Tandem emicilerin farklı kalınlıklarında kullanılması üzerine fotovoltaik parametreler

FASnI ₃ kalınlığı (nm)	FA _{0.85} Cs _{0.15} PbI ₃ kalınlık (nm)	J _{sc} (mA/cm ²)	V _{oc} (V)	FF (%)	PCE (%)	Rekombinasyon hızı tepe noktası (1/cm ³)
100	100	19.36	1.09	67.24	14.13	5.90×10 ¹⁸
100	200	22.29	1.07	63.20	15.10	4.41×10 ¹⁸
100	300	24.01	1.06	60.76	15.51	3.28×10 ¹⁸
100	400	25.06	1.06	58.94	15.61	2.56×10 ¹⁸
100	500	25.74	1.05	57.41	15.57	2.11×10 ¹⁸
200	100	23.74	1.09	67.11	17.44	1.84×10 ¹⁹
200	200	25.26	1.08	62.92	17.20	1.34×10 ¹⁹
200	300	26.19	1.07	60.36	16.97	1.01×10 ¹⁹
200	400	26.79	1.07	58.48	16.73	8.00×10 ¹⁸
200	500	27.18	1.07	56.93	16.48	6.71×10 ¹⁸
300	100	26.24	1.10	67.20	19.33	3.12×10 ¹⁹
300	200	27.07	1.08	62.93	18.47	2.29×10 ¹⁹
300	300	27.60	1.08	60.31	17.92	1.76×10 ¹⁹
300	400	27.95	1.07	58.37	17.49	1.43×10 ¹⁹
300	500	28.18	1.07	56.78	17.11	1.22×10 ¹⁹
400	100	27.72	1.10	67.32	20.44	4.21×10 ¹⁹
400	200	28.20	1.08	63.02	19.27	3.15×10 ¹⁹
400	300	28.53	1.08	60.34	18.54	2.46×10 ¹⁹
400	400	28.74	1.07	58.38	18.00	2.04×10 ¹⁹
400	500	28.89	1.07	56.75	17.55	1.76×10 ¹⁹
500	100	28.62	1.09	67.43	21.11	5.08×10 ¹⁹
500	200	28.93	1.08	63.12	19.79	3.87×10 ¹⁹
500	300	29.15	1.08	60.41	18.96	3.08×10 ¹⁹

Tandem yapıların simülasyon sonuçlarına göre, tandem formatında iki emici kullanılmasının hücrenin performansı üzerinde olumsuz bir etkisi olduğu görülmektedir. Örneğin, TP1 ve TP2 yapılarının verimlilik sonuçları, benzer tek S1 ve S3 PSC yapılarından oldukça düşüktür. ETM durumunda, TE1 ve TE2 yapılarının tek S2 ve S3 yapılarının karışım formatları olduğu Tablo 3.7'den görülebilir. Verimlilik sonuçları, TE1 yapısının söz konusu yapılar arasında en fazla verimliliğe sahip olduğunu ortaya koymaktadır. Ayrıca TE2'nin verimlilik değeri S2 ve S3 yapılarının verimlilikleri arasındadır. Bu nedenle, TE1 tandem yapısını seçmek uygun bir seçim olacak gibi görünüyor. ETM tandem seçimine benzer şekilde, HTM tandemlerinin sonuçları, karşılık gelen tek yapılarına (S3 ve S5) göre hem TH1 hem de TH2 tandem yapıları için daha iyi verimlilikleri temsil eder. Bununla birlikte, küçük bir farkla ilgili olarak, TH2 yapısını optimum yapı olarak seçebiliriz.

Bildirilen sonuçların tandem katmanları için sadece özel bir kalınlıkta verildiğine dikkat edilmelidir. Daha fazla karşılaştırma için, çalışılan tandem katmanları için daha fazla kalınlık aralığını dikkate almak daha iyidir. Bunun için, aktif katmanların farklı kalınlıkları için SCAPS-1D'nin toplu simülasyonu kullanılarak daha eksiksiz bir çalışma gerçekleştirildi. Sonuçlar perovskit, ETM ve HTM katmanları için Tablo 3.14-16'te toplanmıştır. Kalınlık aralığı her tandem perovskit için 100-500 nm, her tandem ETM için 20-100 nm ve her tandem HTM için 50-250 nm olarak kabul edildi.

Tablo 3.14, farklı perovskit tandem malzeme kalınlıkları için fotovoltaik parametrelerin ve rekombinasyon faktörleri değerlerinin listesini temsil etmektedir. Basit bir görünüm, en yüksek verimliliği ve en düşük rekombinasyonu sağlayabilir. Sonuçlar aynı anda en yüksek verimliliğe ve en düşük rekombinasyona sahip herhangi bir veriyi temsil etmemektedir. Örneğin, FASnI 3 için 500 nm ve $FA_{0.85}Cs_{0.15}PbI_3$ için 100 nm kalınlıkları en yüksek verimliliği bildirir. Bununla birlikte, aynı zamanda en yüksek rekombinasyonu temsil eder. Başka bir veride, FASnI 3 için 100 nm ve $FA_{0.85}Cs_{0.15}PbI_3$ için 500 nm kalınlıkları en düşük rekombinasyonu verir, ancak nispeten uygun bir performansa sahip değildir. Bu nedenle, proje nesnesine bağlı olarak, optimum sonuç çıkarılabilir. Tandem ETM'ler için uygun kalınlıkların seçilmesi, Tablo 3.15'ten görülebileceği gibi perovskit kasa kadar zor değildir. Veriler, her iki tandem ETM için 20 nm kalınlıklar için en yüksek performansı ve neredeyse en düşük verimliliği temsil eder. Bu nedenle, seçim için uygun bir seçim olabilir.

Tablo 3.14. Tandem ETM'lerin farklı kalınlıklarında fotovoltaiik parametreler

PCBM kalınlığı (nm)	TiO ₂ kalınlığı (nm)	J _{sc} (mA/cm ²)	V _{oc} (V)	FF (%)	PCE (%)	Rekombinasyon hızı tepe noktası (1/cm ³)
20	20	28.29	1.13	84.66	26.97	5.64×10 ¹⁹
20	40	28.25	1.13	84.38	26.84	5.51×10 ¹⁹
20	60	28.22	1.13	84.21	26.76	5.32×10 ¹⁹
20	80	28.20	1.13	84.13	26.71	5.12×10 ¹⁹
20	100	28.18	1.13	84.09	26.67	5.07×10 ¹⁹
40	20	28.32	1.13	83.69	26.67	5.1×10 ¹⁹
40	40	28.29	1.12	83.26	26.50	4.87×10 ¹⁹
40	60	28.26	1.12	83.07	26.40	4.77×10 ¹⁹
40	80	28.22	1.12	83.02	26.35	4.76×10 ¹⁹
40	100	28.19	1.12	83.01	26.32	4.76×10 ¹⁹
60	20	28.37	1.12	81.90	26.12	4.58×10 ¹⁹
60	40	28.30	1.12	81.53	25.93	9.54×10 ¹⁹
60	60	28.25	1.12	81.36	25.82	1.27×10 ²⁰
60	80	28.21	1.12	81.32	25.77	1.34×10 ²⁰
60	100	28.18	1.12	81.31	25.74	1.36×10 ²⁰
80	20	28.25	1.12	80.02	25.38	2.82×10 ²⁰
80	40	28.14	1.12	79.72	25.18	4.12×10 ²⁰
80	60	28.08	1.12	79.57	25.08	4.54×10 ²⁰
80	80	28.04	1.12	79.54	25.03	4.63×10 ²⁰
80	100	28.00	1.12	79.54	25.00	4.64×10 ²⁰
100	20	27.89	1.12	78.37	24.52	7.32×10 ²⁰
100	40	27.75	1.12	78.15	24.32	8.65×10 ²⁰
100	60	27.68	1.12	78.04	24.22	9.05×10 ²⁰

Tablo 3.15. Tandem HTM'lerin farklı kalınlıklarının kullanılması üzerine fotovoltaiik parametreler

CuSCN kalınlığı (nm)	Spiro-OMeTAD kalınlığı (nm)	J _{sc} (mA/cm ²)	V _{oc} (V)	FF (%)	PCE (%)	Rekombinasyon hızı tepe noktası (1/cm ³)
50	50	28.23	1.13	83.53	26.57	6.12×10 ¹⁹
50	100	28.23	1.13	83.53	26.57	6.12×10 ¹⁹
50	150	28.23	1.13	83.53	26.57	6.12×10 ¹⁹
50	200	28.23	1.13	83.53	26.57	6.12×10 ¹⁹
50	250	28.23	1.13	83.53	26.57	6.12×10 ¹⁹
100	50	28.23	1.13	83.18	26.45	6.13×10 ¹⁹
100	100	28.23	1.13	83.18	26.45	6.13×10 ¹⁹
100	150	28.23	1.13	83.18	26.45	6.13×10 ¹⁹
100	200	28.23	1.13	83.18	26.45	6.13×10 ¹⁹
100	250	28.23	1.13	83.18	26.45	6.13×10 ¹⁹
150	50	28.23	1.13	82.83	26.34	6.14×10 ¹⁹
150	100	28.23	1.13	82.83	26.34	6.14×10 ¹⁹
150	150	28.23	1.13	82.83	26.34	6.14×10 ¹⁹
150	200	28.23	1.13	82.83	26.34	6.14×10 ¹⁹
150	250	28.23	1.13	82.83	26.34	6.14×10 ¹⁹
200	50	28.23	1.13	82.49	26.23	6.15×10 ¹⁹
200	100	28.23	1.13	82.49	26.23	6.15×10 ¹⁹
200	150	28.23	1.13	82.49	26.23	6.15×10 ¹⁹
200	200	28.23	1.13	82.49	26.23	6.15×10 ¹⁹
200	250	28.23	1.13	82.49	26.23	6.15×10 ¹⁹
250	50	28.23	1.13	82.14	26.12	6.16×10 ¹⁹
250	100	28.23	1.13	82.14	26.12	6.16×10 ¹⁹

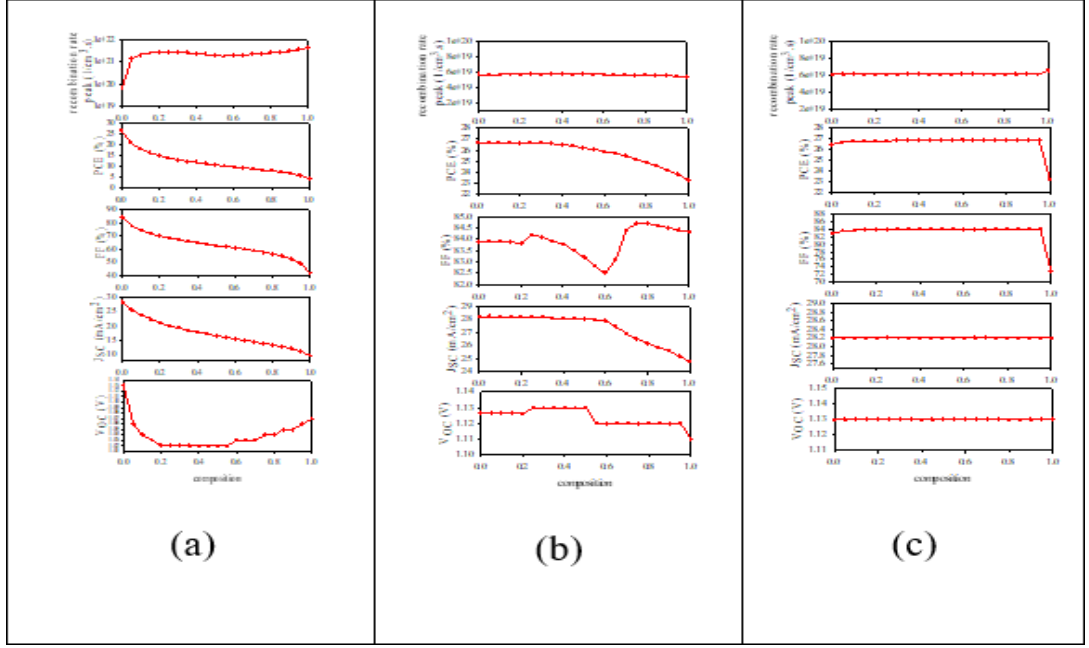
Tablo 3. 16. S3 yapısı için farklı PSC konfigürasyonlarının fotovoltaiik parametreleri

Yapı modu	Durum	V _{oc} (V)	J _{sc} (mA/cm ²)	FF (%)	PCE (%)
Tek	Birincil çalıştırma	1.13	27.75	83.16	26.02
Tek	Mülk optimizasyonundan sonraki sonuçlar	1.13	28.23	83.86	26.67
Tandem	En iyi perovskit tandem (TP1)	1.08	26.66	61.49	17.69
Tandem	En iyi ETM tandem (TE1)	1.13	28.26	84.58	26.93
Tandem	En iyi HTM tandem (TH2)	1.13	28.23	83.64	26.60
Kompozit	En iyi ETM kompoziti (0.75 TiO ₂ , 0.25 PCBM)	1.13	28.23	84.14	26.70
Kompozit	En iyi HTM kompoziti (0,8 Spiro-OMeTAD, 0,2 CuSCN)	1.13	28.23	84.14	26.76
Tandem kompozit	En iyi PSC yapısı (tek perovskit, tandem ETM- TE1, kompozit HTM-0.8 Spiro-OMeTAD, 0.2 CuSCN)	1.13	28.29	84.94	27.07

Tek konfigürasyonlar için HTM kalınlık varyasyon etkisi araştırmasına benzer şekilde, bunun tandem düzenlemeleri için de geçerli olduğu Tablo 3.16'ten görülebilir. Bununla birlikte, küçük bir farkla ilgili olarak, dikkate alınan HTM'lerin her ikisi için de 50 nm kalınlıklarını seçebiliriz.

3.6.4.2. Kompozit PSC'ler

SCAPS-1D kompozit katmanların yapı simülasyonu yeteneğine sahiptir. Tandem kasalarına benzer şekilde, simülatörler her katman için kompozit konfigürasyonları göz önünde bulundurabilir. Örneğin, perovskit tabakası durumunda, tandem düzenleme yerine iki perovskit malzemenin (örneğin, Tablo 3.9 malzemeleri) karışımı veya bileşimi kullanılabilir. Kompozit konfigürasyonlar durumunda, karışımdaki malzemelerin bileşimi önemli bir faktördür. Bu nedenle, önceki araştırmalara benzer şekilde, aktif katmanların bileşiminin PSC'lerin performans ve rekombinasyon parametreleri üzerindeki etkisini göz önünde bulundurduk. Sonuçlar aktif katmanlar için Şekil 3.14 (a-c)'de gösterilmiştir.



Şekil 3.14. Kompozit PSC grafikleri

Şekil 3.14 (a) 'dan görülebileceği gibi, FA 0.85 Cs 0.15 PbI₃ bileşiminin artırılması, FA_{0.85}Cs_{0.15}PbI₃ / FASnI₃ tabanlı PSC'lerin performansı üzerinde olumsuz bir etkiye sahiptir. Bu nedenle, tek bir FASnI₃ bazlı perovskit kullanmanın daha iyi performans sağlayabileceği ve kompozit konfigürasyonun kabul edilebilir sonuçlar bildirmediği görülmektedir.

Perovskit kompozit sonuçlarına benzer şekilde, Şekil 3.14 (b)'de belirtilen PCBM / TiO₂ karışımındaki PCBM bileşim etkisinin diyagramları genel olarak azalan bir davranışa sahiptir. Bu nedenle, PCBM bileşimi için düşük değerlerin seçilmesi istenir. Bununla birlikte, küçük farklılıkları göz önünde bulundurarak, PCBM için %25 ve TiO₂ için %75 kompozisyon seçtik.

Şekil 3.14 (c) diyagramlarına göre, Spiro-OMeTAD kompozisyon varyasyonunun Spiro-OMeTAD / CuSCN tabanlı PSC'nin performans parametreleri üzerinde anlamlı bir etkisi olmadığı görülmektedir. Bununla birlikte, Spiro-OMeTAD (tek Spiro-OMeTAD) için %100'lük bileşimde, sonuçlar diğerlerinden önemli ölçüde daha düşüktür. Genel olarak, çok küçük farklılıklarla, Spiro-OMeTAD için %80 kompozisyon seçtik.

3.6.5. Nihai I-V sonuçları

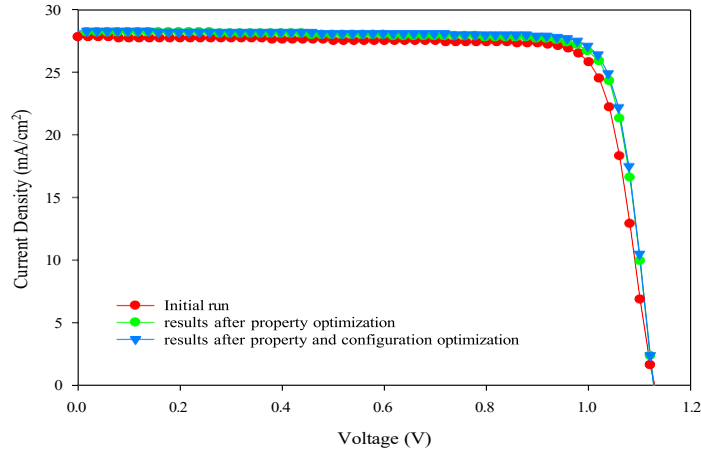
Daha iyi içgörülere sahip olmak için, elde edilen sonuçları özetlemek daha iyidir. Bunun için birincil çalıştırmadan karışık kompozit-tandem yapılara kadar farklı

konfigürasyonların fotovoltaiik parametreleri Tablo 3.17'de toplanmıştır. S3 PSC yapısı için önceki arařtırmaların bir özetini olarak, perovskit için tek FASnI₃ konfigürasyonlarının, ETM için tandem düzenlemesinin ve HTM için kompozit yapının her durum için optimum verimlilięi ortaya koyduęu görölmektedir. Bu nedenle, hepsini son adım olarak tek bir simölasyonda ele almaya karar verdik.

Tablo 3.17. S3 yapısı için farklı PSC konfigürasyonlarının fotovoltaiik parametreleri

Yapı modu	Durum	V _{OC} (V)	J _{sc} (mA/cm ²)	FF (%)	PCE (%)
Tek	Birincil çalıřtırma	1.13	27.75	83.16	26.02
Tek	Mülk optimizasyonundan sonraki sonuçlar	1.13	28.23	83.86	26.67
Tandem	En iyi perovskit tandem (TP1)	1.08	26.66	61.49	17.69
Tandem	En iyi ETM tandem (TE1)	1.13	28.26	84.58	26.93
Tandem	En iyi HTM tandem (TH2)	1.13	28.23	83.64	26.60
Kompozit	En iyi ETM kompoziti (0.75 TiO ₂ , 0.25 PCBM)	1.13	28.23	84.14	26.70
Kompozit	En iyi HTM kompoziti (0,8 Spiro-OMeTAD, 0,2 CuSCN)	1.13	28.23	84.14	26.76
Tandem / kompozit	En iyi PSC yapısı (tek perovskit, tandem ETM- TE1, kompozit HTM-0.8 Spiro-OMeTAD, 0.2 CuSCN)	1.13	28.29	84.94	27.07

Tablo 3.17 sonuçlarına göre, katman özellięi, çalıřma noktaları ve yapılandırma optimizasyonları dahil olmak üzere tüm optimizasyon adımlarının, temel olarak kabul edilen PSC'lerin (S1-S5) genel performansı üzerinde olumlu bir etkiye sahip olduęu görölmektedir. Toplam verimlilik yaklaşık %1 arttı. Ancak bu çalıřmada optimizasyon süreçlerinde performans faktörlerine ek olarak rekombinasyon faktörünün de göz önünde bulundurulduęu ve bunun da daha düşük verimlilik artışlarına yol açtıęı unutulmamalıdır. Daha iyi bir içgörüyeye sahip olmak için, farklı süreçlerin toplam I-V eğrileri ařaęıda Şekil 3.15'te verilmiştir.



Şekil 3.15. S3 PSC yapısının optimizasyonunun farklı aşamalarına ait I-V grafikleri

Bir güneş pilinin I-V eğrisi altındaki alan, performansını temsil eder. Verilen I-V grafiklerinden, optimizasyon süreçlerinin daha fazla ilerlemesiyle bu alanın arttığı açıktır. Bu, mevcut çalışmanın toplam olumlu sürecini doğrulamaktadır.

3.6.6. Veri doğruluk tespiti

Özet olarak, bu çalışmada SCAPS-1D simülasyon paketi kullanılarak perovskit güneş pilleri simülasyonu etrafında bazı teorik araştırmalar sunulmuştur. Perovskit güneş pillerinin oluşturulabilecek çok çeşitli yapıları ile ilgili olarak, bu çalışma önerilen yapılar arasında uygun PSC'lerin seçilmesi temeline dayanıyordu. Bu 8 farklı MA bazlı ve FA bazlı emici düşünüldü. Ayrıca, ETM'ler olarak TiO_2 , ZnO ve PCBM ve HTM'ler olarak CuSCN, PEDOT: PSS ve Spiro-OMeTAD dahil olmak üzere bazı organik ve inorganik malzemelerin 72 benzersiz PSC yapısı oluşturduğu düşünülmüştür. Söz konusu PSC'ler arasından 5 yapı daha fazla araştırılmak üzere iyi veri (%20'nin üzerinde verimlilik) olarak seçilmiştir. Bunun için, bahsedilen iyi veri yapılarının optimizasyonu, uygun katman özelliği, çalışma noktası ve konfigürasyon seçimi temelinde gerçekleştirildi. Genel olarak, mülk optimizasyonu durumunda, perovskit tabakaları ve taşıma katmanları için sırasıyla nispeten daha yüksek ve daha düşük kalınlık önerilmiştir. Ayrıca, aktif tabakaların katkılama yoğunlukları için daha düşük değerler önerilmiştir. Çalışma noktalarının optimizasyonu için, genellikle PSC'ler için düşük sıcaklıkların ve seri dirençlerin ve yüksek şönt dirençlerinin arzu edileceği kanıtlanmıştır. PSC'lerin konfigürasyon seçim aşamasında, sonuçlar sırasıyla emici, ETM ve HTM katmanları için tek, tandem ve kompozit konfigürasyonun önerildiğini temsil etti.

KAYNAKLAR

- [1] G. A. C. O. G. Değişim, Geçiş Dönemindeki Dünya 3: Sürdürülebilir Enerji Sistemlerine Doğru. Routledge, 2014.
- [2] Q. Wang, Y. Xie, F. Soltani-Kordshuli ve M. Eslamian, "Progress in emerging solution-processed thin film solar cells–Part I: Polymer solar cells," Yenilenebilir ve Sürdürülebilir Enerji İncelemeleri, cilt 56, s. 347-361, 2016.
- [3] J. Jaksik, H. J. Moore, T. Trad, O. I. Okoli ve M. J. Uddin, "Gelişmiş üç boyutlu (3D) güneş pilleri için nanoyapılı fonksiyonel malzemeler," Güneş Enerjisi Malzemeleri ve Güneş Pilleri, cilt 167, s. 121-132, 2017.
- [4] S. Ashok, Fonash, Stephen Joseph ve Fonash, Raymond T., "Güneş pili. Encyclopedia Britannica," 3 Haziran 2020. [Çevrimiçi]. Mevcut: <https://www.britannica.com/technology/solar-cell>.
- [5] Ahmed, A., Pourgazi, A., Khalili Broujeni, R., Zalpour, A., Shivai, Sh., Farahani, Sh., Azizi, H., Mahmoud Zadeh, Gh. Matematik ve fizikte üniversite öncesi fizik. s. 279, 1392.
- [6] "p Tipi ve n Tipi Yarı İletken Arasındaki Fark." DEVRE KÜRESİ. <https://circuitglobe.com/difference-between-p-type-and-n-type-semiconductor.html> (erişim tarihi: Aralık 2021).
- [7] Elham Karimi, "Farklı taşıma katmanlarına sahip nanoyapılı perovskit güneş pillerinin tasarımı, elektriksel ve optik karakterizasyonu," Ph.D., Fizik Fakültesi, Kashan Üniversitesi, 2017.
- [8] M. A. Green, "Üçüncü nesil fotovoltaikler: Düşük maliyette ultra-yüksek dönüşüm verimliliği," Fotovoltaikte İlerleme: Araştırma ve Uygulamalar, cilt 9, sayı 2, s. 123-135, 2001.
- [9] K. I. Jayawardena, L. J. Rozanski, C. A. Mills, M. J. Beliaty, N. A. Nismy, and S. R. P. Silva, "'Inorganics-in-Organics': recent developments and view for 4G polymer solar cells," Nanoscale, cilt 5, sayı 18, s. 8411-8427, 2013.
- [10] H.-R. Wenk ve A. Bulakh, Mineraller: oluşumları ve kökenleri. Cambridge Üniversitesi Yayınları, 2016.
- [11] P. Szuromi ve B. Grocholski, "Doğal ve mühendislik perovskitleri," ed: Amerikan Bilim İlerleme Derneği, 2017.
- [12] I. Hussain, H. P. Tran, J. Jaksik, J. Moore, N. Islam ve M. J. Uddin, "İşlevsel malzemeler, cihaz mimarisi ve perovskit güneş pilinin esnekliği," Emergent Materials, cilt 1, sayı 3, s. 133-154, 2018.
- [13] N.-G. Park, "Perovskite solar cells: an emerging photovoltaic technology," Materials today, cilt 18, sayı 2, s. 65-72, 2015.

- [14] M. Hu, L. Liu, A. Mei, Y. Yang, T. Liu ve H. Han, "Geniş bir ışık bicerdöverli NH₂CH₃ ile verimli delik iletkensiz, tamamen yazdırılabilir mezoskopik perovskit güneş pilleri [double bond, length as m-dash] NH₂PbI₃," Journal of Materials Chemistry A, vol. 2, no. 40, pp. 17115-17121, 2014.
- [15] J.-P. Correa-Baena ve ark., "Yüksek verimli perovskit güneş pillerinin hızlı evrimi," Enerji ve Çevre Bilimi, cilt 10, sayı 3, s. 710-727, 2017.
- [16] P. C. Harikesh ve ark., "Çözelti işlenmiş fotovoltailer için inorganik kurşunsuz perovskitlerin şablonlanması için alternatif bir katyon olarak Rb," Malzemelerin Kimyası, cilt 28, sayı 20, s. 7496-7504, 2016.
- [17] B. Conings ve ark., "Yüksek verimli düzlemsel heterojunction perovskit güneş pilleri için düşük sıcaklıkta TiO₂ elektron toplama katmanı üretilmesi kolay," APL Materials, cilt 2, sayı 8, s. 081505, 2014.
- [18] E. Edri, S. Kirmayer, M. Kulbak, G. Hodes ve D. Cahen, "Metil amonyum kurşun bromür perovskit bazlı yüksek açık devre voltajlı güneş pillerini geliştirmek için klorür dahil etme ve delik taşıma malzemesi dopingi," Fiziksel kimya mektupları dergisi, cilt 5, sayı 3, s. 429-433, 2014.
- [19] M. Asghar, J. Zhang, H. Wang ve P. Lund, "Perovskit güneş pillerinin cihaz kararlılığı – Bir inceleme," Yenilenebilir ve Sürdürülebilir Enerji İncelemeleri, cilt 77, s. 131-146, 2017.
- [20] J. Chen ve N.-G. Park, "Kararlı ve yüksek verimli perovskit güneş pilleri için inorganik delik taşıma malzemeleri," Fiziksel Kimya C Dergisi, cilt 122, sayı 25, s. 14039-14063, 2018.
- [21] A. Kojima, K. Teshima, Y. Shirai ve T. Miyasaka, "Fotovoltailer için görünür ışık hassaslaştırıcıları olarak organometal halojenür perovskitler," Amerikan Kimya Derneği Dergisi, cilt 131, sayı 17, s. 6050-6051, 2009.
- [22] H.-S. Kim ve ark., "Kurşun iyodür perovskite duyarlılaştırılmış tüm katı hal submikron ince film mezoskopik güneş pili ile %9'u aşan verimlilik," Bilimsel raporlar, cilt 2, sayı 1, s. 1-7, 2012.
- [23] H. Zhou ve ark., "Yüksek verimli perovskit güneş pillerinin arayüz mühendisliği," Science, cilt 345, sayı 6196, s. 542-546, 2014.
- [26] Z. Song, S. C. Watthage, A. B. Phillips ve M. J. Heben, "Yüksek performanslı perovskit güneş pillerine doğru yollar: fotovoltailer uygulamalar için organometal halojenür perovskitlerdeki son gelişmelerin gözden geçirilmesi," Enerji için Fotonik Dergisi, cilt 6, sayı 2, s. 022001, 2016.
- [27] P. Xu, W. Li, J. Xie ve C. Zhu, "Aldehit hidrazonların C-H dönüşümlerinin araştırılması: radikal stratejiler ve ötesi," Kimyasal araştırma hesapları, cilt 51, sayı 2, ss. 484-495, 2018.
- [28] J. Y. Jeng ve ark., "CH₃NH₃PbI₃ perovskit/fulleren düzlemsel-heterojunction hibrid güneş pilleri," Advanced Materials, cilt 25, sayı 27, s. 3727-3732, 2013.
- [29] L. Hu ve ark., "NaCl katkılı PEDOT: PSS'nin ikili etkisiyle yüksek doldurma faktörü ve ihmal edilebilir histerezis ile ters çevrilmiş düzlemsel perovskit güneş pilleri," ACS uygulamalı malzemeler ve arayüzler, cilt 9, sayı 50, s. 43902-43909, 2017.

- [30] N. Marinova, S. Valero ve J. L. Delgado, "Organik ve perovskit güneş pilleri: Çalışma prensipleri, malzemeler ve arayüzler," *Kolloid ve arayüz bilimi dergisi*, cilt 488, s. 373-389, 2017.
- [31] Q. Zhu ve ark., "Yüksek hareketlilik delik taşıma katmanına sahip kompakt katmansız perovskit güneş pilleri," *ACS uygulamalı malzemeler ve arayüzler*, cilt 8, sayı 4, s. 2652-2657, 2016.
- [32] J. W. Lee, D. J. Seol, A. N. Cho ve N. G. Park, "HC (NH₂)₂PbI₃'ün siyah polimorfuna dayanan yüksek verimli perovskit güneş pilleri," *Advanced Materials*, cilt 26, sayı 29, s. 4991-4998, 2014.
- [33] S. Aharon, S. Gamliel, B. El Cohen ve L. Etgar, "Yüksek verimli delik iletkeni içermeyen CH₃NH₃PbI₃ perovskit güneş pillerinin tükenme bölgesi etkisi," *Fiziksel Kimya Kimyasal Fizik*, cilt 16, sayı 22, s. 10512-10518, 2014.
- [34] A. Mei ve ark., "Yüksek stabiliteye sahip bir delik iletkeniz, tamamen yazdırılabilir mezoskopik perovskit güneş pili," *science*, cilt 345, sayı 6194, s. 295-298, 2014.
- [35] J. W. Lee, D. H. Kim, H. S. Kim, S. W. Seo, S. M. Cho ve N. G. Park, "Foto-ve nem-stabil perovskit güneş pili için formamidinyum ve sezyum hibridizasyonu," *Advanced Energy Materials*, cilt 5, sayı 20, s. 1501310, 2015.
- [36] W. Ke ve ark., "Verimli perovskit güneş pilleri için alternatif bir elektron taşıma tabakası olarak düşük sıcaklıkta çözelti işlenmiş kalay oksit," *Amerikan Kimya Derneği Dergisi*, cilt 137, sayı 21, s. 6730-6733, 2015.
- [37] T. Qin ve ark., "Yuva kalıp kaplı perovskit güneş pillerinde amorf delik taşıyan tabaka," *Nano Enerji*, cilt 31, s. 210-217, 2017.
- [38] M. Qin ve ark., "Düşük sıcaklıkta işlenmiş indiyum oksit elektron seçici katmanlarına dayanan perovskit güneş pilleri," *ACS uygulamalı malzemeler ve arayüzler*, cilt 8, sayı 13, s. 8460-8466, 2016.
- [39] K. Wang ve ark., "Perovskit güneş pilleri için elektron seçici tabaka olarak düşük sıcaklık ve çözelti ile işlenmiş amorf WO₃," *Fiziksel kimya mektupları dergisi*, cilt 6, sayı 5, s. 755-759, 2015.
- [40] W.-Q. Wu, D. Chen, R. A. Caruso ve Y.-B. Cheng, "N tipi malzemelere dayalı hibrit perovskit güneş pillerinde son gelişmeler," *Journal of Materials Chemistry A*, cilt 5, sayı 21, s. 10092-10109, 2017.
- [41] W. Tress, N. Marinova, O. Inganäs, M. K. Nazeeruddin, S. M. Zakeeruddin ve M. Graetzel, "Perovskit güneş pillerinde delik taşıma katmanının rolü-Rekombinasyonun azaltılması ve emilimin artırılması," 2014 IEEE 40. Fotovoltaik Uzman Konferansı (PVSC), 2014: IEEE, s. 1563-1566.
- [42] Z. H. Bakr, Q. Wali, A. Fakharuddin, L. Schmidt-Mende, T. M. Brown ve R. Jose, "Kararlı ve verimli perovskit güneş pilleri için delik taşıma malzemeleri mühendisliğindeki gelişmeler," *Nano Energy*, cilt 34, s. 271-305, 2017.
- [43] "İş Fonksiyonu: Denklem ve Eşik Frekansı ile İlişki." *Elektrik4U*. <https://www.electrical4u.com/work-function/> (erişim tarihi: Kasım 2021).
- [44] J. Hölzl ve F. K. Schulte, "Metallerin çalışma fonksiyonu", *Katı yüzey fiziği: Springer*, 1979, s. 1-150.

- [45] I. Çelik, Z. Song, A. J. Cimaroli, Y. Yan, M. J. Heben ve D. Apul, "Laboratuvardan fab'a yansıtılan perovskit PV hücrelerinin Yaşam Döngüsü Değerlendirmesi (LCA)," Güneş Enerjisi Malzemeleri ve Güneş Pilleri, cilt 156, s. 157-169, 2016.
- [46] E. Kim ve I. Bhattacharya, "Genetik algoritmaya dayalı bir perovskit güneş pili tasarımı için malzeme seçim yöntemi," 2020 47. IEEE Fotovoltaik Uzmanlar Konferansı (PVSC), 2020: IEEE, s. 2631-2634.
- [47] G. Rebitzer ve G. Fleischer, "Otomobillerin Yaşam Döngüsünde çevresel etki faktörlerinin ve ödünleşim seçeneklerinin belirlenmesi-A yazılım tabanlı metodoloji sound restriction of system boundaries," SAE Technical Paper, 0148-7191, 2000 .
- [48] K. Tan, P. Lin, G. Wang, Y. Liu, Z. Xu ve Y. Lin, "SCAPS cihaz simülasyonu ile katı hal perovskit güneş pillerinin kontrol edilebilir tasarımı," Katı Hal Elektronığı, cilt 126, s. 75-80, 2016.
- [49] S. Bansal ve P. Aryal, "SCAPS-1D simülasyonları aracılığıyla perovskit bazlı güneş pillerinde elektron ve delik taşıma katmanları için yeni malzemelerin değerlendirilmesi," 2016 IEEE 43. Fotovoltaik Uzmanlar Konferansı (PVSC), 2016: IEEE, s. 0747-0750.
- [50] U. Mandadapu, S. V. Vedanayakam ve K. Thyagarajan, "SCAPS-1D kullanarak kurşun bazlı perovskit güneş pilinin simülasyonu ve analizi," Hint Bilim ve Teknoloji Dergisi, cilt 10, sayı 11, s. 65-72, 2017.
- [51] N. F. Ramli ve ark., "SCAPS simülasyonu ile monolitik tandem silikon-perovskit güneş pilinin model gelişimi," AIP Conference Proceedings, 2017, cilt 1838, no. 1: AIP Publishing LLC, s. 020006.
- [52] R. Teimouri ve R. Mohammadpour, "CuSbS₂'nin perovskit güneş hücresinde delik taşıma malzemesi olarak potansiyel uygulaması: bir simülasyon çalışması," Süperkafesler ve Mikroyapılar, cilt 118, s. 116-122, 2018.
- [53] Y. Raoui, H. Ez-Zahraouy, N. Tahiri, O. El Bounagui, S. Ahmad ve S. Kazım, "Farklı yük seçici kontaklar kullanan MAPbI₃ bazlı perovskit güneş pillerinin performans analizi: Simülasyon çalışması," Güneş Enerjisi, cilt 193, s. 948-955, 2019.
- [54] M. Chowdhury ve ark., "SCAPS-1D ile perovskit güneş pillerinde emici tabakanın ve n / i arayüzünün derin seviye kusur yoğunluğunun etkisi," Fizikte Sonuçlar, cilt 16, s. 102839, 2020.
- [55] S. Zandi ve M. Razaghi, "Perovskit güneş pilinin sonlu elemanlar simülasyonu: Yapısal ve malzeme modifikasyonuna dayalı verimlilik iyileştirme üzerine bir çalışma," Güneş Enerjisi, cilt 179, s. 298-306, 2019.
- [56] S. M. AbdulMohsin ve D. E. Tareq, "HTM olarak CuO ve Nano kompozit PANI / SWCNTS'nin karşılaştırılabilir çalışması perovskite güneş pillerinin imalatı ve simülasyonu," AIMS Energy, cilt 8, sayı 2, s. 169-178, 2020.
- [57] S. Abdelaziz, A. Zekry, A. Shaker ve M. Abouelatta, "SCAPS cihaz simülasyonu ile formamidinyum kalay bazlı perovskit güneş pilinin performansının araştırılması," Optical Materials, cilt 101, s. 109738, 2020.

- [58] R. Teimouri ve ark., "Yüksek verimli düzlemsel perovskit güneş pili için Li katkılı TiO₂ elektron taşıma katmanlarının sentezlenmesi," Süperkafesler ve Mikroyapılar, cilt 145, s. 106627, 2020.
- [59] N. Singh, A. Agarwal ve M. Agarwal, "SCAPS-1D kullanarak sezyum bazlı inorganik perovskit güneş pillerinin hesaplamalı analizi", AIP Conference Proceedings, 2020, cilt 2265, no. 1: AIP Publishing LLC, s. 030672.
- [60] "ELIS, Gent Üniversitesi'nde geliştirilen ince film güneş pilleri için simülasyon programı SCAPS-1D." <https://scaps.elis.ugent.be/> (erişim tarihi: Kasım 2021).
- [61] R. Bernal-Correa ve A. Morales-Acevedo, "Düzlemsel perovskit güneş pilleri için spektral yansıma optimizasyonu," Optik, cilt 227, s. 165973, 2021.
- [62] S. Karthick, S. Velumani ve J. Bouclé, "Experimental and SCAPS simulated formamidinium perovskit solar cells: a comparison of device performance," Solar Energy, cilt 205, s. 349-357, 2020.
- [63] İ. M. De Los Santos ve ark., "CH₃NH₃PbI₃ perovskit güneş pillerinin optimizasyonu: Teorik ve deneysel bir çalışma," Güneş Enerjisi, cilt 199, s. 198-205, 2020.
- [64] Q. Duan ve ark., "Cihaz simülasyonu ile delik-taşıma-malzeme içermeyen CH₃NH₃PbI₃ / CsSnI₃ all-perovskit heterojunction verimli güneş pillerinin tasarımı," Güneş Enerjisi, cilt 201, s. 555-560, 2020.
- [65] D. M. Chapin, C. S. Fuller ve G. L. Pearson, "Güneş radyasyonunu elektrik enerjisine dönüştürmek için yeni bir silikon p- n bağlantı fotoseli," Journal of Applied Physics, cilt 25, sayı 5, s. 676-677, 1954.
- [66] L. M. Fraas ve L. D. Partain, Güneş pilleri ve uygulamaları. John Wiley ve Oğulları, 2010.
- [67] S. Zandi, P. Saxena ve N. E. Gorji, "COMSOL kullanarak RGO temaslı perovskit güneş pillerinde ısı dağılımının sayısal simülasyonu," Güneş Enerjisi, cilt 197, s. 105-110, 2020.
- [68] A. Hima, N. Lakhdar, B. Benhaoua, A. Saadoun, I. Kemerchou, birnd F. Rogti, "Yüksek dönüşüm verimliliği için optimize edilmiş bir perovskit güneş pili tasarımları," Superlattices and Microstructures, cilt 129, s. 240-246, 2019.
- [69] Y. Hamri ve ark., "CdS'ye tampon dökeme alternatifi kullanarak Cu (In, Ga) Se₂ ince film güneş pillerinin geliştirilmiş verimliliği," Güneş Enerjisi, cilt 178, s. 150-156, 2019.
- [70] Bir. Çanta, R. Radhakrishnan, R. Nekovei ve R. Jeyakumar, "Emici tabakanın, delik taşıma tabakası kalınlıklarının ve doping yoğunluğunun perovskit güneş pillerinin cihaz simülasyonu ile performansına etkisi," Güneş Enerjisi, cilt 196, s. 177-182, 2020.
- [71] Bir. Houimi, S. Y. Gezgin, B. Mercimek ve H. Ş. Kılıç, "SCAPS-1D kullanılarak CZTS/n-Si güneş pillerinin sayısal analizi. Deneysel ve hesaplanmış çıktılar arasında karşılaştırmalı bir çalışma," Optik Malzemeler, cilt. 121, s. 111544 2021.

- [72] J. Wang ve ark., "Simple Solution- Dokulu Perovskit'in Nano Ölçekli Kapsamı için İşlenmiş Yaklaşım Yüksek Verimli Perovskit / Si Tandem Güneş Pilleri Sağlayan Silikon Yüzey," Enerji Teknolojisi, cilt. 9, hayır. 1,s. 2000778, 2021.
- [73] M. Bir. Eşref ve ben. Alam, "SCAPS 1D kullanarak tampon katmanı olarak In2S3 ve geri temas olarak Au ile CIGS, CISSe ve CZTS tabanlı güneş pillerinin sayısal simülasyonu," Engineering Research Express, cilt 2, Hayır. 3, s. 035015 2020.
- [74] D. Dwivedi, "CZTS tabanlı ince film fotovoltaik hücrenin çıktı performansının artırılması için sayısal simülasyon," İleri Bilim, Mühendislik ve Tıp, cilt 12, sayı 1, s. 88-94, 2020.
- [75] H. Shen ve ark., "Monolitik perovskit / Si tandem güneş pilleri: % 30'un üzerinde verimliliğe giden yollar," Advanced Energy Materials, cilt 10, sayı 13, s. 1902840, 2020.
- [76] S. Tripathi, P. Lohia ve D. Dwivedi, "Yenilikçi bir hibrit tampon katmanı ile sürdürülebilir ve çevre dostu toksik olmayan CZTS güneş piline katkı," Solar Energy, cilt 204, s. 748-760, 2020.
- [77] M. Burgelman, K. Decock, A. Niemegeers, J.Verschraegen, ve S. Degrave, "SCAPS manual," ed: Şubat, 2016.
- [78] M. Burgelman, K. Decock, S. Helifi ve A. Abass, " İnce film güneş pillerinin gelişmiş elektrik simülasyonu,"İnce Katı Filmler, cilt 535, s. 296-301, 2013.
- [79] J. Jiang ve ark., "SCAPS tarafından Cu2Sn1- xGexS3 güneş pillerinin optimizasyon bant aralığı gradasyon yapısı simülasyonu,"
- [80] Hussain, I., ve ark., İşlevsel malzemeler, cihaz mimarisi ve perovskit güneş pilinin esnekliği. Acil Malzemeler, 2018. 1(3): s. 133-154.
- [81] Lee, J.W., ve ark., HC (NH2) 2PbI3'ün siyah polimorfuna dayanan yüksek verimli perovskit güneş pilleri. İleri Malzemeler, 2014. 26(29): s. 4991-4998.
- [82] Babayiğit, A., ve ark., Organometal halojenür perovskit güneş pillerinin toksisitesi. Doğa malzemeleri, 2016. 15(3): s. 247-251.
- [83] Babayiğit, A., ve ark., Model organizma Danio rerio'da Pb ve Sn bazlı perovskit güneş pillerinin toksisitesinin değerlendirilmesi. Bilimsel raporlar, 2016. 6(1): s. 18721.
- [84] Serrano - Lujan, L., ve ark., Kalay ve kurşun bazlı perovskit güneş pilleri inceleniyor: çevresel bir bakış açısı. İleri Enerji Malzemeleri, 2015. 5(20): s. 1501119.
- [85] Duha, A.U. ve M.F. Borunda,% 30.85 verimlilikle Pb içermeyen tamamen perovskit tandem güneş pilinin optimizasyonu. Optik Malzemeler, 2022. 123: s. 111891.
- [86] Krishnamoorthy, T., ve ark., Fotovoltaik uygulamalar için kurşunsuz germanyum iyodür perovskit malzemeleri. Malzeme Kimyası Dergisi A, 2015. 3(47): s. 23829-23832.
- [87] Cui, X.-P., ve ark., Cupric bromür hibrid perovskit heterojunction güneş pilleri. Sentetik metaller, 2015. 209: s. 247-250.

- [88] Aharon, S., ve ark., Yüksek verimli delik iletkeni içermeyen CH₃NH₃PbI₃ perovskit güneş pillerinin tükenme bölgesi etkisi. Fiziksel Kimya Kimyasal Fizik, 2014. 16(22): s. 10512-10518.
- [89] Mei, A., ve ark., Yüksek stabiliteye sahip, delik iletkeniz, tamamen yazdırılabilir mezoskopik perovskit güneş pili. Bilim, 2014. 345(6194): s. 295-298.
- [90] Correa-Baena, J.-P., ve ark., Yüksek verimli perovskit güneş pillerinin hızlı evrimi. Enerji ve Çevre Bilimi, 2017. 10(3): s. 710-727.
- [91] Kopacic, I., ve ark., Kompozisyon mühendisliği yoluyla germanyum halojenür perovskit güneş pillerinin gelişmiş performansı. ACS Uygulamalı Enerji Malzemeleri, 2018. 1(2): s. 343-347.
- [92] Suarez, B., ve ark., Kombine halojenürler (Cl, Br, I) perovskit güneş pillerinin rekombinasyon çalışması. Fiziksel kimya mektupları dergisi, 2014. 5(10): s. 1628-1635.
- [93] Seo, S., ve ark., Yüksek verimli (% 16.4) organik-inorganik hibrit perovskit güneş pillerinin ultra ince, katkısız bir NiO deliği taşıma katmanı. Nanoölçek, 2016. 8(22): s. 11403-11412.
- [94] Bi, D., ve ark., CH₃NH₃PbI₃ perovskit duyarlılaştırılmış mezoskopik güneş pillerinde farklı delik taşıma malzemelerinin rekombinasyon üzerine etkisi. Fiziksel kimya mektupları dergisi, 2013. 4(9): s. 1532-1536.
- [95] Conings, B., L. Baeten ve C. De Dobbelaere, D, Haen, J.; Manca, J.; Boyen, H.-G. İnce Film Sandviç Yaklaşımı Kullanarak Yüksek Tekrarlanabilirlik ile %10 Verimliliği Aşan Perovskit Bazlı Hibrit Güneş Pilleri. Av. Mater, 2014. 26: s. 2041-2046.
- [96] Hosseini, SR, ve ark., SCAPS-1D simülasyonu ile düzlemsel CH₃NH₃PbI₃ tabanlı perovskit güneş pilinin performansı üzerindeki ideal olmayan koşulların etkisinin araştırılması. Heliyon, 2022. 8(11): s. e11471.
- [97] Sharma, H., ve ark., PEDOT ile Yüksek Verimli CH₃NH₃PbI₃ Perovskit Güneş Pilinin Sayısal Analizi: SCAPS 1D Simülatörü Kullanarak PSS Delik Taşıma Malzemesi. Elektronik Malzeme Dergisi, 2023: s. 1-13.
- [98] Belarbi, M., O. Zeggai ve S. Louhibi-Fasla, SCAPS-1D simülasyon programı kullanılarak metilamonyum kurşun iyodür perovskit güneş pillerinin sayısal çalışması. Materials Today: Proceedings, 2022. 51: s. 2115-2119.
- [99] Abena, A.N., ve ark., SCAPS-1D aracılığıyla inorganik HTL ile hibrit organik katyon perovskite dayalı güneş pillerinin sayısal olarak araştırılması. Çin Fizik Dergisi, 2022. 76: s. 94-109.
- [100] Burgelman, M., ve ark., SCAPS el kitabı. Şubat, 2016.
- [101] Burgelman, A.N.-M., in Proc. 25nd IEEE Photovoltaic Spec. 1996: Washington DC, IEEE, New York. s. 901-904.
- [102] Burgelman, M., P. Nollet ve S. Degraeve, Polikristalin yarı iletken güneş pillerinin modellenmesi. İnce katı filmler, 2000. 361: s. 527-532.
- [103] Karimi, E. ve S. Ghorashi, Farklı delik taşıyan malzemelerin perovskit güneş pillerinin performansı üzerindeki etkisinin araştırılması. Optik, 2017. 130: s. 650-658.

- [104] Karimi, E. ve S.M.B. Ghorashi, P3HT delik taşıyan malzemelerle perovskit güneş pilinin simülasyonu. *Nanofotonik Dergisi*, 2017. 11(3): s. 032510-032510.
- [105] Zandi, S. ve M. Razaghi, Perovskit güneş pilinin sonlu elemanlar simülasyonu: Yapısal ve malzeme modifikasyonuna dayalı verimlilik iyileştirme üzerine bir çalışma. *Güneş Enerjisi*, 2019. 179: s. 298-306.
- [106] Reinders, A., ve ark., *Fotovoltaik güneş enerjisi: temellerden uygulamalara*. 2017: John Wiley ve Oğulları.
- [107] Mandadapu, U., ve ark., SCAPS-1D kullanarak yüksek verimli kalay halide perovskit güneş pillerinin optimizasyonu. *Uluslararası Simülasyon ve Süreç Modelleme Dergisi*, 2018. 13(3): s. 221-227.
- [108] Chowdhury, M., ve ark., Perovskit güneş pillerinde emici tabakanın ve n / i arayüzünün derin seviye kusur yoğunluğunun SCAPS-1D ile etkisi. *Fizikte Sonuçlar*, 2020. 16: s. 102839.
- [109] Abdelaziz, S., ve ark., SCAPS cihaz simülasyonu ile formamidinyum kalay bazlı perovskit güneş pilinin performansının araştırılması. *Optik Malzemeler*, 2020. 101: s. 109738.
- [110] Karthick, S., S. Velumani ve J. Bouclé, Deneysel ve SCAPS simüle formamidinyum perovskit güneş pilleri: Cihaz performansının karşılaştırılması. *Güneş Enerjisi*, 2020. 205: s. 349-357.
- [111] Bag, A., ve ark., Emici tabakanın, delik taşıma tabakası kalınlıklarının ve doping yoğunluğunun perovskit güneş pillerinin cihaz simülasyonu ile performansına etkisi. *Güneş Enerjisi*, 2020. 196: s. 177-182.
- [112] Jeyakumar, R., ve ark., Elektron taşıma tabakası (TiO_2) kalınlığının ve doping yoğunluğunun $CH_3NH_3PbI_3$ bazlı düzlemsel perovskit güneş pillerinin performansına etkisi. *Elektronik Malzeme Dergisi*, 2020. 49: s. 3533-3539.
- [113] Diantoro, M., ve ark., IV eğrilerinden güneş pili parametreleri için Shockley denklemi uyum analizleri. *Uluslararası Fotoenerji Dergisi*, 2018. 2018.
- [114] Breitenstein, O. and Rißland, S. (2013). A two-diode model regarding the distributed series resistance. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 110, 77-86.
- [115] İnternet: Honsberg C. B. and Bowden S. G. (2019). Double diode model, Photovoltaics Education Website. URL: <https://www.pveducation.org/pvcdrom/double-diode-model>. Son Erişim Tarihi: 15.09.2021.
- [116] İnternet: Honsberg C. B. and Bowden S. G. (2019). I-V curve, Solar cell operation, Photovoltaics Education Website. URL: <https://www.pveducation.org/pvcdrom/solar-cell-operation/iv-curve>. Son Erişim Tarihi: 22.09.2021.
- [117] İnternet: Honsberg C. B. and Bowden S. G. (2019). Solar cell short circuit current, Photovoltaics Education Website. URL: <https://www.pveducation.org/pvcdrom/solar-cell-operation/short-circuit-current>. Son Erişim Tarihi: 22.09.2021.

- [118] İnternet: Honsberg C. B. and Bowden S. G. (2019). Solar cell open circuit voltage, Photovoltaics Education Website. URL: <https://www.pveducation.org/pvcdrom/solar-cell-operation/open-circuit-voltage>. Son Erişim Tarihi: 22.09.2021.
- [119] İnternet: Honsberg C. B. and Bowden S. G. (2019). Solar Cell Fill-factor, Photovoltaics Education Website. URL: <https://www.pveducation.org/pvcdrom/solar-cell-operation/fill-factor>. Son Erişim Tarihi: 25.09.2021.
- [120] İnternet: Honsberg C. B. and Bowden S. G. (2019). Effect of parasitic resistances, Photovoltaics Education Website. URL: <https://www.pveducation.org/pvcdrom/solar-cell-operation/effect-of-parasitic-resistances>. Son Erişim Tarihi: 25.09.2021.
- [121] İnternet: Honsberg C. B. and Bowden S. G. (2019). Solar cell series-resistance, Photovoltaics Education Website. URL: <https://www.pveducation.org/pvcdrom/solar-cell-operation/series-resistance>. Son Erişim Tarihi: 25.09.2021.
- [122] İnternet: Honsberg C. B. and Bowden S. G. (2019). Solar cell shunt-resistance, Photovoltaics Education Website. URL: <https://www.pveducation.org/pvcdrom/solar-cell-operation/shunt-resistance>. Son Erişim Tarihi: 27.09.2021.
- [123] İnternet: Honsberg C. B. and Bowden S. G. (2019). Solar cell effect of temperature, Photovoltaics Education Website. URL: <https://www.pveducation.org/pvcdrom/solar-cell-operation/effect-of-temperature>. Son Erişim Tarihi: 27.09.2021.
- [124] İnternet: Honsberg C. B. and Bowden S. G. (2019). Solar cell effect of light intensity, Photovoltaics Education Website. URL: <https://www.pveducation.org/pvcdrom/solar-cell-operation/effect-of-light-intensity>. Son Erişim Tarihi: 30.09.2021.
- [125] İnternet: Honsberg C. B. and Bowden S. G. (2019). Solar cell quantum-efficiency, Photovoltaics Education Website. URL: <https://www.pveducation.org/pvcdrom/solar-cell-operation/quantum-efficiency>. Son Erişim Tarihi: 30.09.2021.
- [126] İnternet: Honsberg C. B. and Bowden S.G (2019). Solar cell spectral response, Photovoltaics Education Website. URL: <https://www.pveducation.org/pvcdrom/solar-cell-operation/spectral-response>. Son Erişim Tarihi: 30.09.2021.
- [127] Mahan, J. E., Ekstedt, T. W., Frank, R. I. and Kaplow, R. (1979). Measurement of minority carrier lifetime in solar cells from photo-induced open-circuit voltage decay. *IEEE Transactions on Electron devices*, 26(5), 733-739.
- [128] Hersch, P. and Zweibel, K. (1982). Basic photovoltaic principles and methods. Solar Energy Research Inst., Golden, CO (USA). 290-1448.
- [129] Collins, S., Vatavu, S., Evani, V., Khan, M., Bakhshi, S., Palekis, V., Rotaru, C. and Ferekides, C. (2015). Radiative recombination mechanisms in CdTe thin films deposited by elemental vapor transport. *Thin Solid Films*, 582, 139-145.

- [130] Richter, A., Werner, F., Cuevas, A., Schmidt, J. and Glunz, S. W. (2012). Improved parameterization of Auger recombination in silicon. *Energy Procedia*, 27, 88-94.
- [131] Min, B., Wagner, H., Dastgheib-Shirazi, A. and Altermatt, P. P. (2014). Limitation of industrial phosphorus-diffused emitters by SRH recombination. *Energy Procedia*, 55, 115-120.

ÖZGEÇMİŞ

Ad-Soyad : Cihan ATAŞ

ÖĞRENİM DURUMU

- **Ön Lisans** : 2001, Yüzüncü Yıl Üniversitesi/ Hakkari MYO, Bilgisayar Programcılığı Bölümü
- **Lisans** : 2015, Sakarya Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü
- **Lisans** : 2019, Sakarya Üniversitesi, Haşim Gürddamar Bilgisayar ve Bilişim Fakültesi, Bilişim Sistemleri Mühendisliği Bölümü
- **Yüksek Lisans** : Devam ediyor, Sakarya Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Ana Bilim Dalı

MESLEKİ DENEYİM:

- 2008 yılından itibaren Sakarya Üniversitesi Bilgi İşlem Dairesi Başkanlığı Donanım Uzmanı olarak çalışıyor.

TEZDEN TÜRETİLEN ESERLER:

- Ataş C., Delibaş, N., ve Nieai, A. (2023, 6-8, Ekim). Investigation Of The Structure and Composition Of Electron Transport Materials in Perovskite Solar Cells Through Scaps-1D Simultions. A. Bilgili (Ed.), Balkan 9th International Conference on Applied Sciences (ISBN: 978-625-6830-40-0, 114.sayfa) içinde. Edirne, Türkiye