
GAZİ ÜNİVERSİTESİ
Gazi
1926

SCAPS-1D SİMÜLASYONUNU KULLANARAK KURŞUNSUZ ÇİFT HALOJENÜRLÜ PEROVSKİT GÜNEŞ PİLLERİNİN VERİMLİLİĞİNİN OPTİMİZE EDİLMESİ

Nepse Seda BOZKURT

YÜKSEK LİSANS TEZİ
ENERJİ SİSTEMLERİ MÜHENDİSLİĞİ ANA BİLİM DALI

GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

OCAK 2025

ETİK BEYAN

Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Tez Yazım Kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmasında;

- Tez içinde sunduğum verileri, bilgileri ve dokümanları akademik ve etik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
- Tüm bilgi, belge, değerlendirme ve sonuçları bilimsel etik ve ahlak kurallarına uygun olarak sunduğumu,
- Tez çalışmasında yararlandığım eserlerin tümüne uygun atıfta bulunarak kaynak gösterdiğimi,
- Kullanılan verilerde herhangi bir değişiklik yapmadığımı,
- Bu tezde sunduğum çalışmanın özgün olduğunu,

bildirir, aksi bir durumda aleyhime doğabilecek tüm hak kayıplarını kabullendiğimi beyan ederim.

Nepse Seda BOZKURT

07/01/2025

SCAPS-1D SİMÜLASYONUNU KULLANARAK KURŞUNSUZ ÇİFT HALOJENÜRLÜ PEROVSKİT GÜNEŞ PİLLERİNİN VERİMLİLİĞİNİN OPTİMİZE EDİLMESİ

(Yüksek Lisans Tezi)

Nepse Seda BOZKURT

GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Ocak 2025

ÖZET

Cs-bazlı perovskit yapılar, perovskit güneş hücrelerinin (PSC'ler) hızlı yükselişine rağmen, fotovoltaik performans açısından organik perovskit güneş hücrelerinden sürekli olarak daha iyi performans göstermektedir. Cs_2PtI_6 malzemelerinin olağanüstü stabilitesi ve yüksek absorpsiyon katsayısı, onları diğer malzemeler arasında perovskit güneş hücreleri için öne çıkarmaktadır. Burada, SCAPS-1D simülatörü kullanılarak FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au yapısına sahip, kurşunsuz Cs_2PtI_6 bazlı perovskit ince film güneş hücreleri detaylı bir şekilde incelenmiştir. Ayrıca, katman kalınlığı, hacim ve arayüzey kusur yoğunluğu, sıcaklık, seri ve şönt dirençler, J-V (akım-gerilim yoğunluğu) ve QE (kuantum verimliliği) özellikleri dahil olmak üzere çeşitli parametrelerin güneş pili performansı üzerine etkilerinin kapsamlı bir analizi yapılmıştır. Başlangıç yapısında, kısa devre akımı (J_{sc}), açık devre gerilimi (V_{oc}), doluluk faktörü (*FF*) ve güç dönüşüm verimliliği (*PCE*) sırasıyla 0.3083V, 10.34 mA/cm², %48.48 ve %1.55 olarak elde edilmiştir. İncelenen güneş hücresindeki Cs_2PtI_6 tabakasının kalınlığı 0.2-1.1 μm aralığında değiştirilmiştir. Artan direnç etkilerinden dolayı FF değeri artan kalınlıkla sürekli olarak azalırken, Cs_2PtI_6 tabakasının 0.4 μm kalınlığında PCE değeri en yüksek değer olan %4.5'e ulaşmıştır. En uygun verimlilik değeri, C_{60} tabakasının kalınlığı 10 nm ve GO tabakasının kalınlığı 120 nm olduğunda elde edilmiştir. Aktif tabakadaki kusur seviyesi 10^{11}-10^{18} cm^{-3} aralığında değiştirilmiştir. Önerilen güneş hücresinde, kusurların sadece çok yüksek değerlerde (>10^{17} cm^{-3}) etkili olduğu ve öncesinde etkilerinin zayıf olduğu bulunmuştur. Çalışılan cihaz için, GO/Cs_2PtI_6 arayüzeyindeki kusur yoğunluğu 10^{15} cm^{-2}'e ulaştığında PCE'nin %3.20'ye düştüğü gözlemlenmiştir. Optimizasyonlardan sonra, V_{oc}, J_{sc}, *FF* ve *PCE* sırasıyla 0.3359V, 23.86 mA/cm^2, %60.63 ve %4.86 olarak elde edilmiştir. Bulgular, kurşunsuz çift perovskit güneş hücrelerinin daha ileri tasarım optimizasyonları için yol gösterici olabilir.

Bilim Kodu : 92802
Anahtar Kelimeler : Çift perovskit bazlı güneş hücreleri, Cs_2PtI_6, kusurlar, SCAPS 1D
Sayfa Adedi : 51
Danışman : Prof. Dr. Serhat KARYEYEN
İkinci Danışman : Prof. Dr. Abdullah YILDIZ

OPTIMIZING THE EFFICIENCY OF LEAD-FREE DOUBLE HALIDE PEROVSKITE SOLAR CELLS USING SCAPS-1D SIMULATION

(Ms. C. Thesis)

Nepse Seda BOZKURT

GAZI UNIVERSITY

GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES

January 2025

ABSTRACT

Inorganic perovskite, obtained by Cs-based perovskite, continuously outperforms organic perovskite solar cells (PSCs) in terms of photovoltaic performance, despite the rapid rise of PSCs. The exceptional stability and high absorption coefficient of Cs_2PtI_6 materials in PSCs make them stand out among the others. Employing SCAPS-1D simulator, herein, we investigated lead-free Cs_2PtI_6 perovskite thin film based solar cells consisting of FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au in detail. Additionally, a comprehensive analysis of the impact of various parameters is carried out, including layer thickness, the density of bulk and interface defects, temperature, series and shunt resistances, J-V (current-voltage density), and QE (quantum efficiency) characteristics. Open circuit-voltage (V_{oc}), short-circuit current (J_{sc}), fill factor (*FF*) and power conversion efficiency (*PCE*) and were obtained from the initial configuration as 0.3083V, 10.34 mA/cm^2, 48.48% and 1.55%, respectively. The thickness of the Cs_2PtI_6 layer for the investigated solar cell was varied in the range of 0.2-1.1 μm. While the FF value decreased continuously with thickness due to the increasing resistance effects, the PCE value reached its highest value with a value of 4.5% at the 0.4 μm thickness of the Cs_2PtI_6 layer. The most optimum efficiency value was obtained when the thickness of the C_{60} layer was 10 nm and the thickness of the GO layer was 120 nm. The defect level in the active layer was changed between 10^{11}-10^{18} cm^{-3}. In the proposed solar cell, it was found that the defects were effective only at very high values (>10^{17} cm^{-3}) and their effect was weak before. For the studied device, it was observed that the PCE decreased to 3.20% when the defect density at the GO/Cs_2PtI_6 interface was lifted to 10^{15} cm^{-2}. After optimizations, V_{oc}, J_{sc}, *FF* and *PCE* were obtained from the final configuration as 0.3359V, 23.86 mA/cm^2, 60.63% and 4.86%, respectively. The findings may pave the way for further design optimization of lead-free double perovskite solar cells.

Science Code : 92802
Key Words : Double perovskite based solar cells, Cs_2PtI_6, defects, SCAPS 1D
Page Number : 51
Supervisor : Prof. Dr. Serhat KARYEYEN
Co-Supervisor : Prof. Dr. Abdullah YILDIZ

TEŞEKKÜR

Öncelikle, bilgi ve deneyimleriyle bu çalışmanın yönünü belirlememde rehberlik eden değerli danışmanlarım Prof. Dr. Serhat KARYEYEN ve Prof. Dr. Abdullah YILDIZ'a en içten teşekkürlerimi sunarım. Çalışmaya yaptıkları katkılar, sabırlı yaklaşımları ve verdikleri destek için minnettarım.

Bu süreçte sevgileri ve destekleriyle yanımda olan, her zaman gururla bana baktığını bildiğim aileme de şükranlarımı iletmek isterim. Onların varlığı bu tezi tamamlamamda en büyük güç kaynağım olmuştur.

Ayrıca, bu çalışmayı depremde kaybettiğimiz değerli vatandaşlarımıza, bu büyük acıyı yaşayan, sevdiklerini ve memleketini kaybetmiş her insana ithaf etmek istiyorum. Onların anısını yaşatmak adına bu çalışmayı, bilime ve insanlığa katkı sunmak için küçük bir adım olarak görüyorum.

Tüm katkılarıyla bu sürece destek olan herkese teşekkür eder, depremde kaybettiğimiz canları rahmetle anarım.

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET iv

ABSTRACT v

TEŞEKKÜR vi

İÇİNDEKİLER vii

ÇİZELGELERİN LİSTESİ ix

ŞEKİLLERİN LİSTESİ x

1. GİRİŞ 1

2. GÜNEŞ PİLLERİ 5

2.1. Birinci Nesil Güneş Pilleri 5

2.2. İkinci Nesil Güneş Pilleri 5

2.3. Üçüncü Nesil Güneş Pilleri 6

2.4. Dördüncü Nesil Güneş Pilleri 7

3. PEROVSKİTLER 9

3.1. Çift Perovskitler 10

4. GÜNEŞ HÜCRELERİNİN ELEKTRİKSEL KARAKTERİSTİKLERİ 13

5. GÜNEŞ HÜCRESİ SİMÜLASYONUNDAKİ KAVRAMLAR 15

5.1. Enerji Bandı (E_g) 15

5.2. N Tipi Yarıiletken 16

5.3. P Tipi Yarıiletken 17

5.4. P-N Eklemi 18

5.5 Elektron İlgisi 19

5.6. İş Fonksiyonu 19

6. BULGULAR VE TARTIŞMA 21

6.1. Shockley-Queisser Sınırı ve Işımalı Rekombinasyon Katsayısı 21

Sayfa

6.2. Cs_2PtI_6 Tabanlı Perovskit Güneş Hücresinin Dizaynı ve SCAPS-1D Programı ile Analiz Edilmesi 24

6.3. FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au Güneş Hücresinin Enerji Band Diagramı 28

6.4. FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au Güneş Hücresinin Fotovoltaik Performansı 29

6.5. Cs_2PtI_6 Tabakasının Kalınlığının FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au Güneş Hücresinin Fotovoltaik Performansına Etkisi 31

6.6. ETL ve HTL Tabakalarının Kalınlığının FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au Güneş Hücresinin Fotovoltaik Performansına Etkisi 32

6.7. Cs_2PtI_6 Tabakasındaki Kusurların FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au Güneş Hücresinin Fotovoltaik Performansına Etkisi 33

6.8. Arayüzey Kusurlarının FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au Güneş Hücresinin Fotovoltaik Performansına Etkisi 35

6.9. Sıcaklığın, FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au Güneş Hücresinin Fotovoltaik Performansına Etkisi 37

6.10. Seri ve Paralel Dirençlerin FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au Güneş Hücresinin Fotovoltaik Performansına Etkisi 38

6.11. Optimum FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au Güneş Hücresinin Fotovoltaik Performansı 40

7. SONUÇ VE ÖNERİLER 43

KAYNAKLAR 45

ÖZGEÇMİŞ 51

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge **Sayfa**

Çizelge 6.1. SCAPS-1D programında kullanılan başlangıç giriş parametreleri 26

Çizelge 6.2. SCAPS-1D programında kullanılan ara yüzey kusur parametreleri 27

Çizelge 6.3. FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin ilk ve son (optimize) durumda fotovoltaik parametreleri 42

Çizelge 6.4. Cs bazlı perovskit güneş hücrelerinin kullanıldığı çalışmalar 43

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil **Sayfa**

Şekil 2.1. 1976'dan günümüze fotovoltaik teknolojilerin gelişimi 8

Şekil 3.1. Perovskit kübik kristal yapısının şematik gösterimi 9

Şekil 3.2. 3 boyutlu perovskit kristal yapısı 10

Şekil 5.1. Farklı yapıdaki malzemelerin enerji bant aralıkları 15

Şekil 5.2. N tipi katkılama sonucu oluşan enerji diyagramı a) İyonlaşmadan önce b) İyonlaşmadan sonra 17

Şekil 5.3. a) Alıcı atomun enerji durumu b)İyonlaşan bir alıcı atomun enerji durumu.. 18

Şekil 6.1. Shockley-Queisser Sınırı 21

Şekil 6.2. Güneş hücresi veriminin ışımalı rekombinasyon katsayısına bağımlı değişimi 22

Şekil 6.3. FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresi yapısının şematik msili 24

Şekil 6.4. FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresi yapısının enerji band yapıları 25

Şekil 6.5. 5 Cs_2PtI_6 tabakasının absorbsiyon katsayısı (α)-dalga boyu (λ) grafiği 27

Şekil 6.6. FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresi yapısının enerji band diyagramı 28

Şekil 6.7. FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin akım yoğunluğu-voltaj(J-V) grafiği 30

Şekil 6.8. FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin quantum verimliliği (QE)dalga boyu grafiği 31

Şekil 6.9. Cs_2PtI_6 tabakasının kalınlığının, FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin V_{oc} ve J_{sc} değerlerine etkisi 32

Şekil 6.10. Cs_2PtI_6 tabakasının kalınlığının, FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin *PCE* ve *FF* değerlerine etkisi 33

Şekil 6.11. ETL ve HTL tabakalarının kalınlığının FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au güneş hücresinin fotovoltaik parametreleri üzerine etkisi 33

Şekil 6.12. Cs_2PtI_6 tabakasındaki kusurların, FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin V_{oc} ve J_{sc} değerlerine etkisi 34

Şekil 6.13. Cs_2PtI_6 tabakasındaki kusurların, FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin *PCE* ve *FF* değerlerine etkisi 35

Şekil **Sayfa**

Şekil 6.14. Arayüzey kusurlarının, FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin *PCE*, *FF*, V_{oc} ve J_{sc} değerlerine etkisi 36

Şekil 6.15. Sıcaklığın, FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin V_{oc} ve J_{sc} değerlerine etkisi..... 37

Şekil 6.16. Sıcaklığın, FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin *PCE* ve *FF* değerlerine etkisi 38

Şekil 6.17. Paralel (R_{sh}) ve seri (R_s) dirençlerin FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin performansına etkisi..... 40

Şekil 6.18. FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin ilk ve optimize durumda akım-voltaj (J-V) grafiği..... 41

Şekil 6.19. FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin ilk ve optimize durumda quantum verimliliği (QE)-dalga boyu grafiği..... 42

SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılmış simgeler ve kısaltmalar, açıklamaları ile birlikte aşağıda sunulmuştur.

Simgeler	**Açıklamalar**
Au	Altın
Br	Brom
C	Karbon
Cl	Klor
cm	Santimetre
C_r	Işımalı rekombinasyon katsayısı
Cs	Sezyum
GO	Grafen oksit
I	İyot
J_{sc}	Kısa devre akımı
mA	Miliamper
nm	Nanometre
Pb	Kurşun
Pt	Platin
Sn	Kalay
V	Volt
V_{oc}	Açık devre gerilimi
α	Absorbsiyon katsayısı
η	Verim
λ	Dalga boyu
µm	Mikrometre

Kısaltmalar	**Açıklamalar**
CdS	Kadmiyum Sülfür
CdTe	Kadmiyum Tellür

Kısaltmalar	**Açıklamalar**
CIGS	Bakır İndiyum Galyum Selenit
DSSC	Boyaya Duyarlı Güneş Hücreleri
ETL	Elektron Taşıma Katmanı
FA^+	Formamidinyum
FF	Doldurma Faktörü
FTO	Flor Katkılı Kalay Oksit
HTL	Boşluk Taşıma Katmanı
MA^+	Metilamonyum
PCE	Güç Dönüşüm Verimliliği
PSC	Perovskit Güneş Hücresi
QD	Kuantum Noktaları

1. GİRİŞ

Günümüzde, stabil, toksik olmayan ve yüksek verimli perovskitlerin bulunması büyük bir sorun olmaya devam etmektedir. Son yıllarda, A_2BX_6 (A= Cs; B= Te, Sn, Pt, Ti; X= I) çift perovskitler birçok araştırmacının ilgisini çekmektedir. Kurşun içermeyen çift perovskitler, iyi stabiliteye ve uygun bant aralıklarına sahip olmaları nedeniyle gelecekteki güneş pili uygulamaları için umut verici adaylardır (Amjad et al., 2023).

Cs_2PtI_6, A_2BX_6 sınıfında dikkat çeken bir örnek olarak öne çıkmaktadır. Bu malzeme, yüksek taşıyıcı hareketliliği, 4×10^5 cm^{-1} gibi yüksek soğurma katsayısı, 1,37 eV'lik dar bant aralığı ve dinamik olarak kararlı yapısıyla perovskit güneş pilleri (PSCs) için ideal bir seçenek sunmaktadır (Schwartz et al., 2020b).

Perovskit güneş pillerinde kullanılan ana bileşenlerden biri, elektron taşıma katmanları (ETL) ve delik taşıma katmanlarıdır(HTL). PSC'lerin verimliliği, ışık emilimi ile üretilen elektronlar ve deliklerin, emici katmandan alınarak ilgili elektrotlara taşınmasını kolaylaştıran bu katmanlara büyük ölçüde bağlıdır. Bu katmanlar, güneş pili cihazlarının verimli çalışabilmesi için kritik öneme sahiptir (Ghosh et al., 2023). Bu nedenle, hem ETL hem de HTL'nin optoelektronik özellikleri, yüksek verimli perovskit güneş pillerinde optimal performans elde etmek için çok önemlidir.

Tezin amacı

Bu tez, FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au tabanlı perovskit güneş hücrelerinin performansını incelemeyi ve çeşitli değişkenlerin bu performans üzerindeki etkilerini araştırmayı hedeflemektedir. SCAPS-1D (Solar Cell Capacitance Simulator) programı kullanılarak, perovskit güneş hücrelerinin performansı üzerinde farklı katman kalınlıkları, sıcaklık etkisi, direnç değişiklikleri ve arayüz kusurlarının hücre performansı üzerindeki etkileri analiz edilecektir.

Literatür taraması

Literatürde, C_{60}, TiO_2, ZnO gibi materyallerin ETL olarak kullanımı yaygındır ve bu materyallerin kalınlıkları ile hücre verimliliği arasındaki ilişki araştırılmıştır.

Ayrıca, grafen oksit (GO) gibi malzemeler, HTL olarak kullanılarak daha yüksek verimlilikler elde edilmiştir. Çalışmalarda, ETL ve HTL katmanlarının kalınlıklarının fotovoltaik parametreler üzerindeki etkileri, hücre tasarımını iyileştiren önemli faktörlerden biri olarak öne çıkmaktadır.

Yang ve diğerleri yaptıkları deneysel çalışmada yüksek kaliteli Cs_2PtI_6 filmi ile yeni bir dar bant aralığına sahip kurşunsuz çift perovskit güneş hücresi önermektedir. Optimizasyon sonrası cihaz 0,73 V açık devre gerilimi, 1,2 mA/cm^2 kısa devre akımı ve 0,82 doldurma faktörü ile %0,72 güç dönüşüm verimliliği göstermektedir. Önerilen yapı; yüksek nem, yüksek sıcaklık ve ultraviyole ışınları gibi zorlu koşullara maruz kaldığında mükemmel bir stabilite sergilemiştir. Stabilite testleri, perovskitlerin kapsülleme yapılmadan 60 gün boyunca orijinal verimliliğinin %80'ini koruyabildiğini ortaya koymuştur (Yang et al., 2020).

Schwartz ve diğerleri yaptıkları çalışmada mükemmel emilim katsayısı, uzun azınlık taşıyıcı yaşam süresi ve 1,4 eV enerji bant aralığına sahip kurşunsuz inorganik halojenür perovskit olan Cs_2PtI_6 üretimi yapmıştır. SnO_2/CdS/Cs_2PtI_6/C/Cu yapısındaki n–i–p güneş hücreleri, %13,88 cihaz verimliliği göstermiştir. Atmosferik şartlarda işlenen bu düzlemsel cihazlar, taramalarda histerezis olmadan düşük V_{oc} kaybı (<0,3 V) sergilemiştir. Platin (Pt), yüksek atom numarası, oksidasyon direnci ve stabilitesi sebebiyle kurşunun (Pb)un yerine geçebilecek umut verici bir yapı sunmuştur (Schwartz et al., 2020b).

Abdelaziz ve arkadaşları SCAPS simülasyon programını kullanarak, Cs_2PtI_6 inorganik kurşunsuz güneş hücreleriyle ilgili cihaz modellemesi yapmıştır. Organik delik taşıma malzemeleri(HTL) ve elektron taşıma malzemelerinin(ETL) inorganik olanlarla değiştirilmesinin etkisini, güneş hücresi cihazlarının yüksek verimlilik ve stabilitelerini koruyarak araştırmıştır. Elde edilen sonuçlardan, WS_2'nin ETL ve Cu_2O'nun HTL olarak diğerlerine nazaran daha uygun malzemeler olduğu bulunmuştur. Metal arka kontak iş fonksiyonu, emici katman kalınlığı, doping yoğunluğu ve kusur yoğunluğunun güneş hücresinin güç dönüşüm verimliliği (*PCE*) üzerindeki etkisi incelenmiştir. Önerilen yapı (FTO/WS_2/Cs_2PtI_6/Cu_2O/Karbon) ile, AM1,5 güneş ışınımı altında %16,3 *PCE* elde etmiştir (AbdElAziz et al., 2022).

Samanta ve arkadaşları kurşunun çevreye zararlı etkilerini ortadan kaldırmak için, Cs_2TiBr_6 güneş hücresini simüle etmiştir. Taşıma katmanları olarak farklı malzemeler denenmiştir. Çalışmada elektron taşıma malzemesi olarak titanyum dioksit, boşluk taşıma malzemesi olarak ise bakır ftalosiyanin ve nikel oksit kullanılmıştır. En yüksek verimi yakalamak için, her bir katmanın uygun kalınlıkta olduğu bir güneş hücresi tasarlanmıştır. Simüle edilen güneş hücresinin güç dönüşüm verimliliği %5,5 olup, deneysel olarak bildirilen %3,3 *PCE* değeriyle karşılaştırılmıştır. Son olarak, standart perovskit güneş hücrelerinde yaygın olarak kullanılan kalınlıkta emici malzeme ile simüle edilen Cs_2TiBr_6 hücresinden %8,5 verimlilik ve %73,6 doldurma faktörü elde edilmiştir (Samanta et al., 2020).

Amjad ve arkadaşları yaptıkları çalışmada, yeni bir n-i-p cihaz mimarisini ($FTO/SnO_2/Cs_2PtI_6/MoO_3/C$), SCAPS-1D simülasyon programını kullanarak incelemiştir. Cihaz performansını optimize etmek için perovskit ve seçici yük taşıma katman kalınlığı, emici ve arayüz kusur yoğunluğu, çalışma sıcaklığı, arka kontak, seri ve şönt direnci gibi parametreler sırasıyla değiştirilerek teorik çalışmalar yapılmıştır. Optimizasyon sonucu, 300 K'de %23,52 güç dönüşüm verimliliği (*PCE*) elde edilmiştir (Amjad et al., 2023).

Razy ve arkadaşları araştırmalarında, SCAPS 1D simülasyon programını kullanarak kurşunsuz, tamamen inorganik yük taşıma elemanları kullanan, çevre dostu ve kararlı bir Cs_2PtI_6 bazlı güneş pili yapısı önermiştir. ETL ve HTL kalınlığı, soğurucu katman kalınlığı ve kusurları, arayüz kusur yoğunluğu, seri direnci ve şönt direnci değiştirerek %32,77 verimliliğe sahip perovskit elde etmişlerdir (Razy et al., 2024).

Saidarsan ve arkadaşları çalışmalarında; bazı bilimsel makalelerde, en iyi deneysel sonuçlardan önemli ölçüde sapma gösteren, hatta temel Shockley-Queisser limitini aşan güneş pili cihaz performanslarının üzerinde durmuştur. İncelenen 250'den fazla bildirilen perovskit güneş pili yapısı sonuçlarının, düşük rekombinasyon katsayısı, düşük kusur yoğunlukları ve yüksek doplama konsantrasyonları gibi gerçekçi olmayan giriş parametrelerinden kaynaklandığını açıkça ortaya koymuştur. Ayrıca, simülasyon yöntemlerindeki tutarsızlıklar ve SCAPS-1D simülasyon aracının optik sınırlamalarını da araştırmışlardır. Bu sorunları çözüme kavuşturacak simülasyon protokolü de dahil olmak üzere birkaç öneri sunmuşlardır (Saidarsan et al., 2025).

2. GÜNEŞ PİLLERİ

Güneş ışığı, ekonomik büyümeyi güçlendirmek için kullanılan temiz ve sürdürülebilir enerji kaynaklardandır. Güneş ışığından en verimli şekilde yararlanmanın yollarından biri, onu güneş hücreleri kullanarak elektriğe dönüştürmektir (Nayak et al., 2019). Günümüzde piyasada çok çeşitli PV hücre teknolojileri bulunmaktadır ve farklı malzeme türleri kullanılmaktadır (Shah et al., 2023).

Güneş pilleri nesillere veya malzemelere göre kategorize edilebilir. Çoğu araştırmacı, teknolojik ilerlemeyi göstermek için güneş pillerini nesillere göre sıralamaktadır (Oni et al., 2024).

2.1. Birinci Nesil Güneş Pilleri

Maliyetlerinin fazla olmasına rağmen yüksek verimliliklerinden dolayı en eski ve en çok kullanılan güneş hücreleridir. Monokristal ve Polikristal güneş pilleri bu grup altında yer almaktadır. Monokristal güneş pilleri tek bir silikon kristalinden oluşur. Günümüzde ticari değeri artan hücrelerin çoğunluğu bu türdendir. Düşük güneş ışığı seviyelerinde daha iyi performans gösterirler. Yüksek verimlilikleri dolayısıyla üreticiler 25 yıla kadar en üstün garanti sunduğunu bildirmektedir. Monokristal hücrelerin aksine polikristal hücrelerin daha basit üretim süreci olması dolayısıyla maliyetleri düşüktür. Yüksek sıcaklıklar monokristal hücrelerin verimini fazla etkilemezken, polikristal hücrelerin verimini önemli derecede olumsuz etkileyebilir. Verimlilikleri silikon saflığının az olması nedeniyle %13-16 arası değişmektedir (Kant & Singh, 2022).

2.2. İkinci Nesil Güneş Pilleri

İnce film güneş pilleri bu grupta yer almaktadır. Esnek bileşenlere sahip ve geniş çapta uygulanabilen ince film güneş pillerinin üretimi nispeten kolaydır, bu da kristal güneş pillerinden daha ucuz olabileceği anlamına gelmektedir. Fazladan yer kapladıkları için evde kullanım açısından verimsizdirler. Amorf silikon (a-Si) ve mikrokristalin silikon (μc-Si)'dan yapılan ince film güneş pilleri, Kadmiyum Tellür (CdTe) ve Kadmiyum Sülfür (CdS)'den

yapılan ince film güneş pilleri, Bakır İndiyum Galyum Selenit (CIGS)'ten yapılan ince film güneş pilleri ikinci nesil güneş pillerine örnek olarak verilmektedir (Kant & Singh, 2022).

2.3. Üçüncü Nesil Güneş Pilleri

Daha az bilinen, ticari gelişen teknolojiler olarak adlandırılır. Organik güneş pilleri, perovskitler, boyaya duyarlı güneş pilleri(DSSC), kuantum nokta hücreleri ve çoklu bağlantılara sahip hücreler bu grupta yer almaktadır.

Organik fotovoltaik hücreler(OSC), silikon güneş pillerine göre iyi stabiliteye ve sağlam bir film yapısına sahip donörlere ve alıcılara ihtiyaç duymaktadır. Organik polimer molekülleri içeren OSC'ler, geniş alan uygulamaları ve esnek enerji üretimi potansiyeli sunan geleneksel inorganik fotovoltaik teknolojilerin yenilikçi bir alternatifi olarak görülmektedir. Bu organik moleküller, güneş pillerinde yük taşınmasını ve ışık emilimini arttırmayı amaçlamaktadır. OSC'ler, uygun maliyetli, çevre dostu ve hafif olmaları nedeniyle geleneksel güneş pillerindeki inorganik muadillerine alternatif olabilecekleri gerçeğinden yola çıkarak önem kazanmıştır. Düşük sıcaklıkta üretim, renk ayarı, esneklik ve çeşitli alt tabakalar üzerinde biriktirme, OSC'lerin sunduğu ek özelliklerdendir (L. X. Chen, 2019).

DSSC'ler, esas olarak bir yük transfer boyası ile kaplanmış bir TiO_2 tabakasından oluşan ve ışığa duyarlılığı ile güneş enerjisinin emilimini uyaran ince film güneş pilleridir(Roy et al., 2019). DSSC'lerde en sık kullanılan substratlar TiO_2, N719 boyası, İyodür İyonu (I^-), Triiyodür İyonu (I_3^-) ve Platin (Pt)'dir(Kunzmann et al., 2018). UV kesme filtresi olmayan DSSC'ler daha yüksek güç dönüştürme verimliliğine sahiptir ancak dış mekan şartlarında daha düşük stabilite göstermektedir. Bunun aksine, UV kesme filtreli DSSC'ler dış mekan koşullarında daha yüksek stabiliteye sahiptir ve güç dönüştürme verimlilikleri düşüktür (Kato et al., 2011).

Kuantum noktaları (QD'ler), biyo-görüntüleme, ışık yayan diyot yeniliği, lazerler ve güneş pilleri gibi bilimin çeşitli alanlarında büyüleyici malzemeler olduğu kanıtlanmış nano ölçekli yarı iletken kristallerdir. Genel olarak bu malzemeler periyodik tablodaki II-VI veya III-V elementleri kullanılarak oluşturulur ve gerçek boyutları eksitonun Bohr yarıçapının altında olan parçacıklar olarak tanımlanır (Cotta, 2020). Moleküler boyalarla karşılaştırıldığında kuantum noktaları, ayarlanabilir foto tepkileri ve daha yüksek molar yok olma katsayıları

açısından daha iyidir ve güç dönüşüm verimliliğinde %5'ten %13'e kayda değer bir artış sağlamaktadır (Chebrolu & Kim, 2019).

En sık kullanılan kuantum nokta hücrelerine veya nanokristallere kadmiyum selenit (CdSe), kurşun selenit (PbSe), kadmiyum sülfür (CdS), kurşun sülfür (PbS), kadmiyum tellürür (CdTe) örnek olarak verilmektedir (Rehman et al., 2023; Zhang et al., 2017).

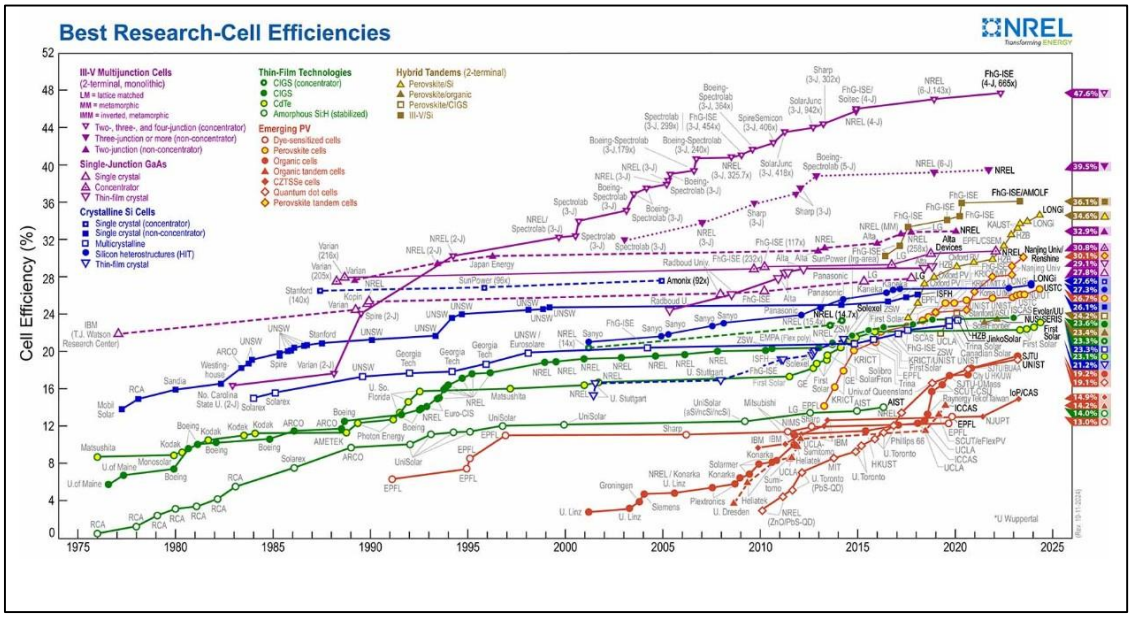
Perovskitler, silikon güneş hücreleriyle kıyaslandığında, kısa süre içerisinde ulaştıkları kayda değer verimleri sayesinde popülaritesini korumaktadır (Yin et al., 2015). Perovskitler ışığı absorbe etme konusunda olağanüstü bir yetenek sergilemektedir. Bunun nedeni, üzerlerine ışık düştüğünde elektrik yükünü taşımaları ve dolayısıyla elektron hareketliliğinde artışa neden olmalarıdır (Asiva Noor Rachmayani, 2015). Perovskitler genellikle beş katmandan oluşur: HTL ile ETL arasında perovskit katmanı bulunur, üst metal arka elektrot katmanı (Au, Ag, Al vb.) ile alt fotoanot katmanı (normalde ITO, FTO veya cam) yerleştirilir. Kısaca perovskit aktif katmanı güneş pilinin merkezine yerleştirilmiştir (Zhou et al., 2022). Bu katmanların şeffaflığı, kalınlığı ve morfolojisi, Perovskit güneş hücresinin güç dönüşüm verimliliğini optimize edecek şekilde değiştirilebilir. Işık, perovskit tabakasıyla etkileşime girdiğinde, ışıkla üretilen elektronların emisyonunu tetikleyerek eksiton(elektron boşluk çifti) oluşumuna yol açmaktadır. Perovskit materyallerin küçük eksiton bağlanma enerjisinden dolayı, eksitonlar serbest yük taşıyıcıları olan elektron ve deliklere ayrılır. Bu yük taşıyıcıları daha sonra delik ve elektron taşıma katmanlarına hareket eder ve hücrenin anot ve katotuna doğru akar. PSC'ler için, mezogözenekli, düzlemsel p-i-n, düzlemsel n-i-p ve perovskit tandem yapıları gibi farklı mimariler mevcuttur (Correa-Baena et al., 2017).

2.4. Dördüncü Nesil Güneş Pilleri

Polimer ince film ve metal nanopartiküllerin yanı sıra çeşitli metalik oksitler, karbon nanotüp, grafen ve bunların türevlerini kullanan dördüncü nesil güneş pilleri, düşük uçuculuğa ek olarak uygun fiyat ve esneklik özellikleri bulunmaktadır. Özellikle grafen (G), geleceğin nanomateryali olarak tanınmasından dolayı özel bir önem kazanmaktadır (Kant & Singh, 2022).

Ulusal Yenilenebilir Enerji Laboratuvarı (NREL), 1976 yılından günümüze kadar çeşitli fotovoltaik teknolojileri araştırmak amacıyla güç dönüşüm verimliliklerinin kapsamlı bir grafiğini tutmaktadır.

Şekil 2.1.'de yarı iletken ailesinin hepsi bulunmaktadır (NREL. (n.d.). Best Research-Cell Efficiency Chart. National Renewable Energy Laboratory. Retrieved December 2, 2024, from Https://Www.Nrel.Gov/Pv/Cell-Efficiency.Html, n.d.).



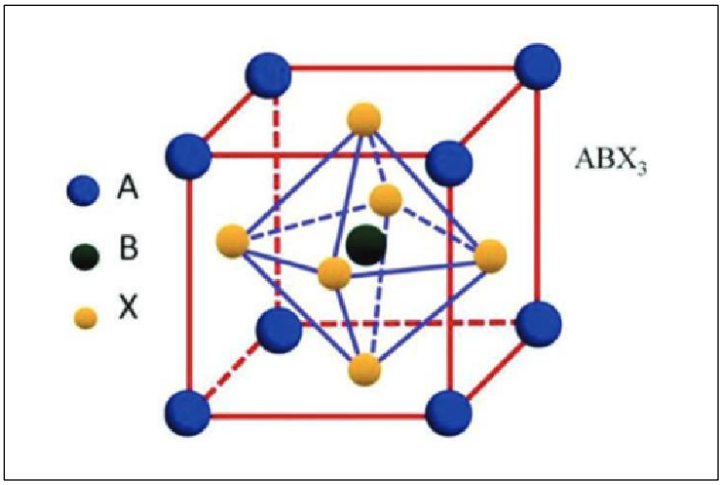
Şekil 2.1. 1976'dan günümüze fotovoltaik teknolojilerin gelişimi (NREL., December 2, 2024)

3. PEROVSKİTLER

Önemli gelişmeler kaydeden üçüncü nesil güneş pili teknolojileri sınıfında yer alan Perovskit güneş pilleri, yenilenebilir enerji kaynakları alanında öne çıkan bir örnek teşkil etmektedir. Adını perovskit mineralinden alan ve benzer kristal yapı sergileyen bu güneş pilleri, fotovoltaik alanında devrim yaratma potansiyeli sebebiyle büyük ilgi görmektedir. Perovskit malzemelerin benzersiz özelliklerinden yararlanan bu güneş pilleri, öncüllerine kıyasla daha yüksek verimlilik ve performans sergilemektedir (Bhalla et al., 2000).

Perovskitlerin kimyasal yapısı basit bir ABX_3 yapısıdır; burada A, Cs^+, metilamonyum (MA^+, $CH_3NH_3^+$), formamidinyum (FA^+,$CH_3CH_2NH_3^+$) gibi organik katyon grubuna aittir. B, Sn^{2+},Pb^{2+} gibi inorganik katyon grubuna aittir ve X, I, Cl, Br vb. gibi halojenür iyonlarını temsil etmektedir (Jeon et al., 2014).

İdeal olarak perovskit kristal yapısı, Şekil 3.1.'de gösterildiği gibi(Yi et al., 2019), X anyonları tarafından koordine edilen, dodekahedral (12 kat) A katyonuna sahip, kübik bir yapı olarak tanımlanır. A iyonlarının kapladığı hacim sırasıyla B ve X iyonlarının elektronegatifliğine ve boyutuna bağlıdır (Yi et al., 2019).

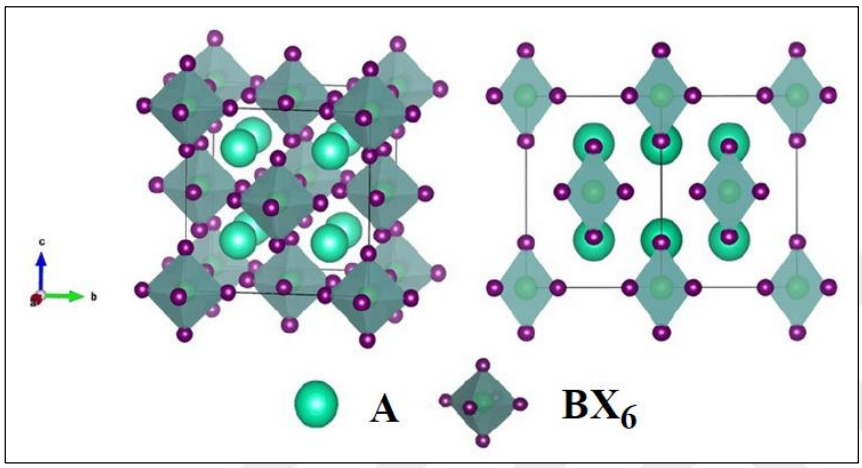


Şekil 3.1. Perovskit kübik kristal yapısının şematik gösterimi (Yi et al., 2019)

Kararlı, toksik olmayan ve yüksek verimli perovskitlerin bulunması konusunda bugüne kadar çalışmalar yapılmıştır. Son yıllarda, çift perovskitler çok sayıda araştırmacının dikkatini çekmiştir.

3.1. Çift Perovskitler

A_2BX_6 ([A]Cs; [B]Te, Sn, Pt, Ti; [X]I) kimyasal yapısına sahip çift perovskitler, iyi stabiliteleri ve ayarlanabilir band aralıkları sebebiyle gelecek uygulamalar için en uygun aday olarak gösterilmektedir (Amjad et al., 2023). 3 boyutlu çift perovskit kristal yapısı Şekil 3.2.'de gösterilmektedir (Faizan et al., 2021).



Şekil 3.2. 3 boyutlu perovskit kristal yapısı (Faizan et al., 2021)

Genel olarak kurşun bazlı perovskitler daha iyi verimlilik sağlamaktadır(Alanazi et al., 2020). Ancak kurşun bazlı hücrelerin neme ve ışığa maruz kaldığında performans düşüşü gibi çeşitli sorunları olmaktadır. Bunlardan en önemli toksisiteleridir (He et al., 2020). Bu gibi olumsuzluklar kurşun bazlı perovskit hücrelerin ticarileşmesinin önünde büyük bir engel oluşturmaktadır.

Perovskitte bulunan kurşun 'un(Pb), toksik etkilerini ortadan kaldırmak için toksik olmayan elementlerle yeri değiştirilebilir. Kalay (Sn), germanyum (Ge) ve bizmut (Bi) kurşunun umut verici alternatifleri olarak kabul görmektedir. Ancak Sn bazlı PSC'ler kararsızdır ve az miktarda bir reaksiyonla kolayca Sn^{2+} - Sn^{4+} olarak oksitlenmektedir. Benzer şekilde, germanyum bazlı PSC'ler Ge^{2+} - Ge^{4+} şeklinde oksitlenerek yapıda kararsızlığa sebep olmaktadır (Getachew Alemu & Alemu, 2022). Kurşunsuz perovskitler, perovskit güneş pillerinde ışık soğurucu olarak kullanımlarına uygun hale getirilebilecek önemli özellikleri nedeniyle günümüzde araştırmacıların dikkatini çekmektedir.

Cs_2PtI_6, yüksek mobilitesi sebebiyle A_2BX_6 sınıfındaki ilgi çekici yapılardan biridir. Yüksek absorplama katsayısı (4×10^5 cm^{-1}), dar bant aralığı (1,37 eV) ve dinamik olarak kararlı bir yapıya sahiptir. Kübik yapısı stabilitesini arttırmaktadır. Yüksek sıcaklıklar, UV ışığı ve yüksek nem gibi zorlu koşullar arasında stabil durumlar sergilemektedir (Yang et al., 2020).

Bu çalışmada, kurşunsuz çift halojenürlü perovskitlerden biri olan Cs_2PtI_6 yapısının verimliliğini arttırmaya yönelik teorik yaklaşımlar izlenecektir.

4. GÜNEŞ HÜCRELERİNİN ELEKTRİKSEL KARAKTERİSTİKLERİ

Bir güneş hücresinin I-V eğrisi, hücrenin malzeme özellikleri, tasarımı, yoğunluğu, sıcaklığı ve gelen ışığın spektrumu gibi çeşitli faktörler tarafından belirlenir. Bu eğri, açık devre voltajı (V_{oc}), kısa devre akım yoğunluğu (J_{sc}), güç dönüşüm verimliliği (*PCE*) ve doldurma faktörü (*FF*) hakkında bilgi sahibi olmamızı sağlar.

(J_{sc}), güneş hücresindeki ışık emilimi ile ilişkilidir ve daha düşük bant aralıklarında daha yüksektir; çünkü perovskit malzemeler, güneş spektrumunun daha büyük bir kısmını absorbe edebilir. (V_{oc}), güneş hücresinin enerji seviyeleri ile ilişkilidir ve daha büyük bant aralıklarında daha yüksektir; çünkü perovskit malzemeler daha yüksek bir termal gerilim üretebilir. (*FF*), güneş hücresindeki rekombinasyon ve direnç kayıplarıyla ilişkilidir. Birçok araştırmacıya göre, yüksek doldurma faktörü, güneş hücresinin güneş ışığını elektriğe dönüştürmede daha verimli olduğunu göstermektedir (Mortadi et al., 2024).

Güneş hücresinin veya modülünün dolum faktörü, güneş ışığını elektriğe verimli bir şekilde dönüştürme yeteneğinin bir ölçüsüdür. Doldurma faktörü, güneş hücresinin maksimum güç çıkışının, açık devre gerilimi ile kısa devre akımının çarpımına oranı olarak hesaplanır. Matematiksel olarak şu şekilde ifade edilir:

$$FF=\frac{P_{max}}{V_{OC} \times J_{SC}} \tag{4.1}$$

P_{max}, maksimum güç çıkışını, V_{oc}, açık devre gerilimini ve J_{sc}, kısa devre akımını ifade etmektedir. V_{oc} ve dolum faktörü (*FF*) arasındaki ilişki, bir güneş hücresinin veya modülünün performansını anlamada önemlidir. Genellikle, V_{oc}'deki bir artış, dolum faktöründe (*FF*) bir artışa neden olur. Bunun nedeni, daha yüksek bir açık devre geriliminin tipik olarak daha iyi yarı iletken malzeme kalitesini ve azalmış rekombinasyon kayıplarını göstermesidir; bu da daha iyi genel performansa ve daha yüksek dolum faktörüne (*FF*) yol açabilir (Mortadi et al., 2024).

V_{oc}, diğer tüm koşullar sabit tutulduğunda, daha yüksek verimlilik sağlayabilir. Verimlilik (η), dolum faktörü (*FF*) ve açık devre gerilimi (V_{oc}) arasındaki ilişki şu denklemle ifade edilebilir:

$$\eta(\%) = \frac{FF \times J_{sc} \times V_{oc}}{P_{in}} \quad (4.2)$$

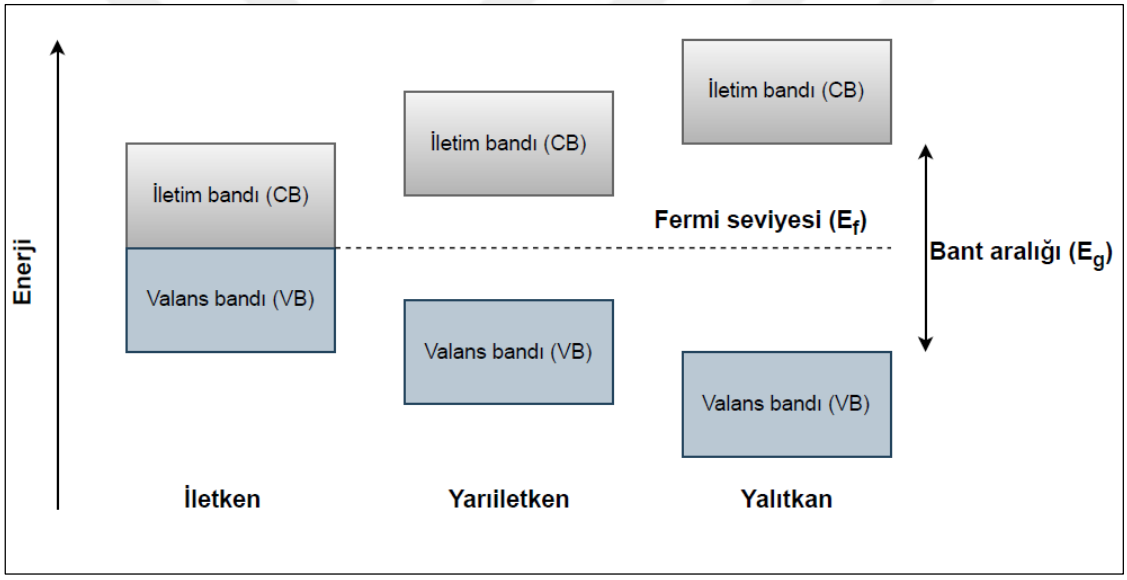
$\eta(\%)$, güneş hücresinin verimliliğini ve P_{in}, gelen güneş ışığı gücünü ifade etmektedir(Mortadi et al., 2024). Verimlilik, hücrenin performansını karakterize eden temel bir parametredir. Pratikte, bir güneş hücresinin verimliliği, ışık soğurma, taşıyıcı oluşturma, taşıma ve toplama süreçlerindeki kayıplarla ilişkilidir. Bu denklemden, V_{oc} ve *FF*'nin güneş hücresinin verimliliğine önemli katkıda bulunan kritik faktörler olduğu açıktır. V_{oc} veya *FF*'nin herhangi birinin iyileştirilmesi, güneş hücresinin genel verimliliğini artırabilir (Mortadi et al., 2024).

Bu çalışmada, SCAPS-1D (''Solar Cell Capacitance Simulator'') isimli simülasyon programı kullanılmıştır. Bu program, güneş hücrelerinin farklı koşullardaki davranışını modellemek için kullanılmaktadır. Özellikle, güneş hücresi yapılarının tasarımı ve optimizasyonu için oldukça faydalıdır. Bu program, güneş hücrelerinin kapasitesini, akım-gerilim (I-V) özelliklerini ve verimliliğini hesaplaması dahil olmak üzere çeşitli simülasyon olanakları sunmaktadır. SCAPS-1D ile çeşitli elektriksel simülasyonlar gerçekleştirilebilir ve görselleştirilebilir. DC simülasyonları için, akım-gerilim (I-V) özellikleri kullanılarak doğrudan açık devre voltajı (V_{oc}), kısa devre akım yoğunluğu (J_{sc}), güç dönüşüm verimliliği (*PCE*) ve doldurma faktörü (*FF*) parametreleri elde edilebilir (Mortadi et al., 2024).

5. GÜNEŞ HÜCRESİ SİMÜLASYONUNDAKİ KAVRAMLAR

5.1. Enerji Bandı (E_g)

Bant aralığı, bir malzemenin valans bandı maksimumu ile iletkenlik bandı minimumu arasındaki enerji farkıdır(bkz. Şekil 5.1.). Optoelektronik özellikler üzerindeki doğrudan etkisi nedeniyle, perovskit malzemelerde bant aralığı ayarlaması oldukça önemlidir. Bant aralığı, bir maddenin hangi ışık dalga boylarını soğurup elektrik sinyaline dönüştürebileceğini belirler. Bant aralığını düşükten yükseğe değiştirme yeteneği, perovskitleri bu özelliği dolayısıyla ilgi çekici yapmaktadır.



Şekil 5.1. Farklı yapıdaki malzemelerin enerji bant aralıkları

Fotonlar, yarı iletken bir malzeme ile etkileşime girdiğinde üç olası sonuç ortaya çıkabilir:

(a) Malzeme ile çevresi arasındaki kırılma indisi farkına bağlı olarak yüzeyden yansıtılabilir,
(b) Malzemenin sönüm katsayısına bağlı olarak malzeme içinde soğurulabilir,
(c) Malzeme boyunca iletilebilir.

Fotovoltaik cihazlarda, yansıma ve iletim genellikle kayıp olarak kabul edilir çünkü fotonlar soğurulmaz ve güç üretimine katkıda bulunmamaktadır. Ancak, bir foton soğurulduğunda, bir elektronu valans bandından iletkenlik bandına yükseltebilir (Miah et al., 2024).

Soğurulacak fotonların enerji seviyeleri, aşağıda verilen denklem kullanılarak tahmin edilebilir:

$$E_{in} = \frac{1240}{\lambda(\text{nm})}(\text{eV}) \quad (5.1)$$

Burada E_{in}, gelen fotonun enerjisini ve λ ise ilgili fotonun dalga boyunu temsil etmektedir. 1240 nm, 1 eV enerjiye sahip bir fotonun dalga boyudur. Eğer $E_{in} \geq E_g$ ise, gelen foton soğurulacaktır; burada E_g, malzemenin bant aralığını ifade eder. Genel olarak, yarı iletken malzemelerin bant aralığının kenarında en yüksek soğurma veya yayılım meydana gelir. Bu bant aralığı, bir fotovoltaik hücrenin güneş spektrumunun hangi kısmını soğurabileceğini belirlemede kritik bir rol oynamaktadır (Miah et al., 2024).

Bir yarı iletken, bant aralığından daha düşük enerjiye sahip fotonları soğurmaz; çünkü bu enerji, valans bandındaki bir elektronu iletkenlik bandına yükseltecek kadar büyük değildir. Öte yandan, bant aralığından daha yüksek enerjiye sahip fotonlar genellikle iletkenlik bandı kenarına geçiş yaparken ısı üreterek performansa katkıda bulunmaz.

Malzeme üzerine düşen fotonun enerjisine göre sergilediği durumlar şu şekilde açıklanabilir;

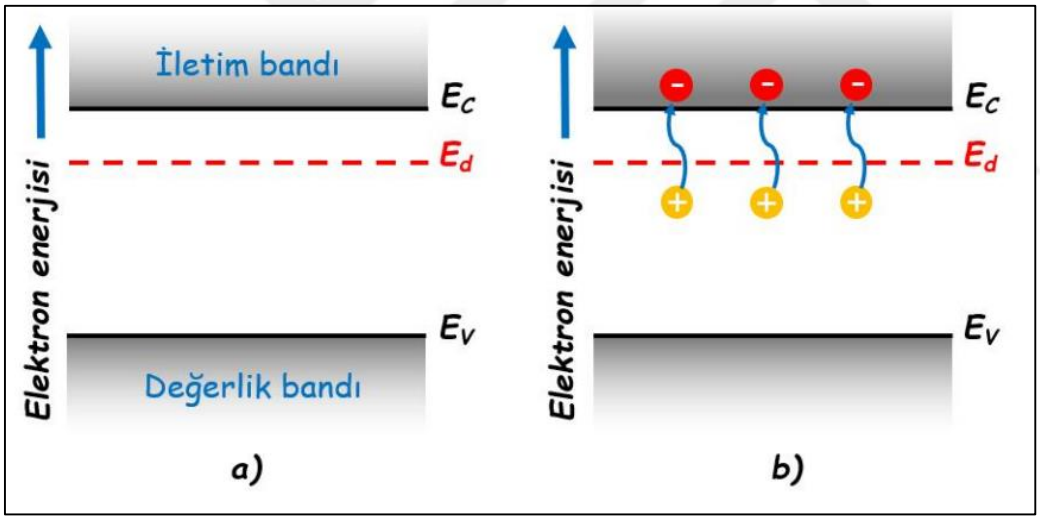
- Eğer gelen foton enerjisi E_{in}, bant aralığı enerjisi E_g'den küçükse, yarı iletkenle minimum etkileşim gerçekleşir ve foton, malzeme boyunca şeffaf bir şekilde geçer.
- Eğer $E_{in} = E_g$ ise, gelen fotonlar bir elektron-delik çifti üretmek için tam yeterli enerjiye sahiptir ve bu nedenle valans bandındaki elektron, iletkenlik bandına ulaşabilir.
- Eğer gelen foton enerjisi E_{in}, bant aralığı enerjisi E_g'den büyükse, güçlü foton soğurulması gerçekleşir ve elektron, iletkenlik bandında fazla enerjiyle kalır (Miah et al., 2024).

5.2. N Tipi Yarıiletken

Periyodik tablonun IV. Grup elementlerine beş değerlik elektronuna sahip V. Grup elementleri eklendiğinde, elektronlardan dördü IV. Grup elementinin atomlarıyla kovalent bağa katkıda bulunacak ve beşinci elektron IV. Grup elementinin atomlarına daha gevşek bir şekilde bağlı kalacaktır. Beşinci değerlik (valans) elektronu donör elektron olarak adlandırılır (Neamen, 2011).

Verici elektronu olmayan katkı atomu pozitif yüklüdür. Çok düşük sıcaklıklarda donör elektron katkı atomuna bağlıdır. Bununla birlikte, verici elektronu iletim bandına yükseltmek için gereken enerji, kovalent bağda yer alan elektronlarınkinden önemli ölçüde daha azdır. Verici elektrona termal enerji gibi küçük bir enerji miktarı eklenirse, iletkenlik bandına yükseltilebilir ve geride pozitif yüklü bir V. Grup atom iyonu kalır. İletim bandındaki elektron artık kristalde hareket ederek bir akım oluşturabilirken, pozitif yüklü iyon kristalde sabittir. Bu tür katkı atomu, iletim bandına bir elektron bağışlar ve bu da donör katkı atomu olarak adlandırılır. Verici katkı atomları, değerlik bandında boşluklar(holes) oluşturmadan iletim bandına elektronlar ekler. Ortaya çıkan malzeme, n-tipi bir yarı iletken olarak adlandırılmaktadır.

N-tipi katkılama sonucunda oluşan enerji bandı diyagramı Şekil 5.2.'de gösterilmektedir. Enerji seviyesi, E_d, donör elektronun enerji durumudur (Neamen, 2011).

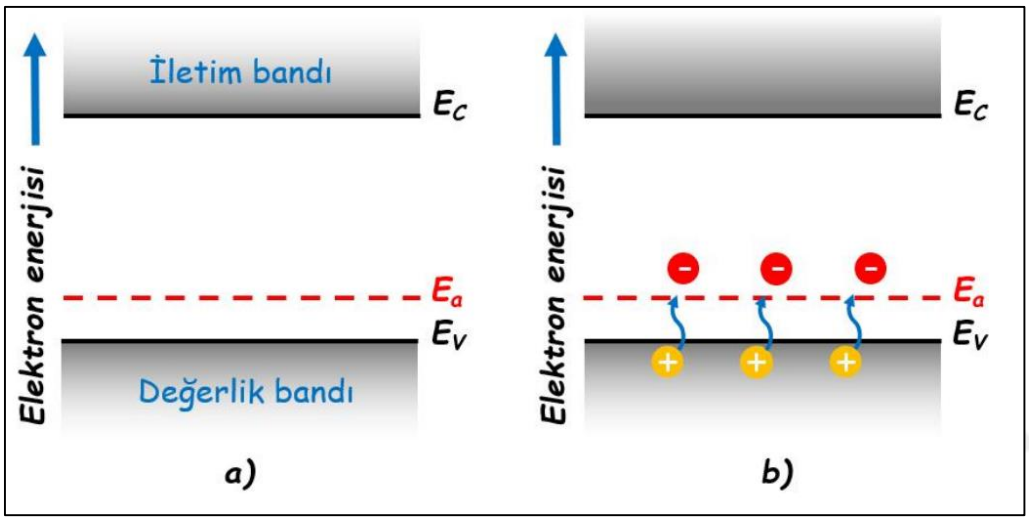


Şekil 5.2. N tipi katkılama sonucu oluşan enerji diyagramı a) İyonlaşmadan önce b) İyonlaşmadan sonra (Neamen, 2011)

5.3. P Tipi Yarıiletken

Periyodik tablonun IV. Grup elementlerine, üç değerlik (valans) elektronuna sahip III. Grup elementleri eklendiğinde, bir kovalent bağ pozisyonu boş kalır. Bir elektronun bu "boş" yeri işgal etmesi durumunda, III. Grup element atomunun net yük durumu negatif olacağı için, işgalci elektronun enerjisinin değerlik elektronlarından daha büyük olması gerekir.

Ayrıca, işgalci elektronun iletim bandında çıkabilmesi için yeterli enerjisi yoktur ve enerjisi iletim bandı enerjisinden çok daha küçüktür. IV. Grup elementlerinin herhangi birinin bir elektronu az miktarda termal enerjiyle III. Grup element atomunun boş pozisyonuna geçebilir. Bu durumda IV. Grup elementinin atomunun değerlik elektronunda yeni bir "boş" pozisyon oluşur. Oluşan yeni boş pozisyon, IV. Grup elementinin başka bir atomunun değerlik elektronu tarafından doldurulabilir. Bu da hollerin kristal içinde hareket edebildiğini göstermektedir "Hol" pozisyonun enerji durumu ve valans bandında bir holün oluşumu Şekil 5.3.'de gösterilmektedir (Chang et al., 2018).



Şekil 5.3. a) Alıcı atomun enerji durumu b)İyonlaşan bir alıcı atomun enerji durumu (Chang et al., 2018)

Alıcı atom, iletim bandında elektron üretmeden değerlik bandında holler oluşturabilir. Bu tip malzeme, p tipi yarı iletken malzeme olarak adlandırılır (Chang et al., 2018).

5.4. P-N Eklemi

P-n eklemi **(**p-n junction), pratikte bir diyot olarak işlev görmektedir. Bu yapı, akımın yalnızca bir yönde geçmesine izin vermektedir. P tipi malzeme çoğunluğu pozitif yüklü taşıyıcılardan oluşan deliklerle doludur. N tipi malzeme ise çoğunluğu negatif yüklü taşıyıcılardan oluşan elektronlarla doludur. Bu iki bölge birleştirildiğinde, aralarındaki temas noktası deplesyon tabakası (depletion layer) olarak adlandırılmaktadır. Deplesyon tabakasının p tipi tarafı elektronlarla doluyken, n tipi tarafı deliklerle doludur. P tipi ve n tipi

bölgelerin aksine Deplesyon tabakası iletken değildir. İletimsizlik, bu tabakada taşıyıcıların eksikliğinden kaynaklanır. ‘Deplesyon’ terimi de buradan gelmektedir.

Deplesyon tabakasının bu iletimsiz yapısı, diyot olarak kullanılan p-n eklemlerinde akımın sadece bir yönde geçmesini sağlamaktadır (Riordan & Hoddeson, 1997).

P-n eklemde:

- Elektronların hareketi n-tipi bölgeden p-tipi bölgeye doğrudur.
- Deliklerin hareketi p-tipi bölgeden n-tipi bölgeye doğrudur.
- Bu hareketler, deplesyon tabakasında elektriksel bir denge oluşturur ve elektrik alan yaratır.
- Elektrik alan, taşıyıcıların karşı yönde hareketini sınırlandırır, bu da tek yönlü akım özelliğini sağlar.

P-n eklemin bu özellikleri, diyotların temel çalışma prensibini oluşturur ve bu yapı güneş hücreleri, transistörler gibi birçok elektronik cihazda kullanılmaktadır (Riordan & Hoddeson, 1997).

5.5. Elektron İlgisi

Elektron ilgisi (χ), vakumda serbest bir elektronun enerji seviyesi ile iletim bandı minimumu arasındaki farkı tanımlamaktadır (Ullah et al., 2024). Elektron yakalama sırasında enerji açığa çıkarsa, elektron ilgisi pozitif bir değere sahiptir. Örneğin, halojenler (*F, Cl, Br*) yüksek pozitif elektron ilgisine sahiptir çünkü elektron kazandıklarında kararlı bir yapı oluştururlar. Elektron yakalama sırasında enerji harcanırsa, elektron ilgisi negatif olmaktadır.

5.6. İş Fonksiyonu

İş fonksiyonu, bir malzemenin yüzeyindeki elektronların, vakum seviyesine çıkabilmesi için gereken en düşük enerjiyi ifade eder. Bu enerji, bir malzemeden fotonlarla uyarılmış

elektronların vakuma çıkabilmesini sağlar ve kuantum verimliliğini (QE) büyük ölçüde belirler. İş fonksiyonu (φ), şu şekilde hesaplanabilir:

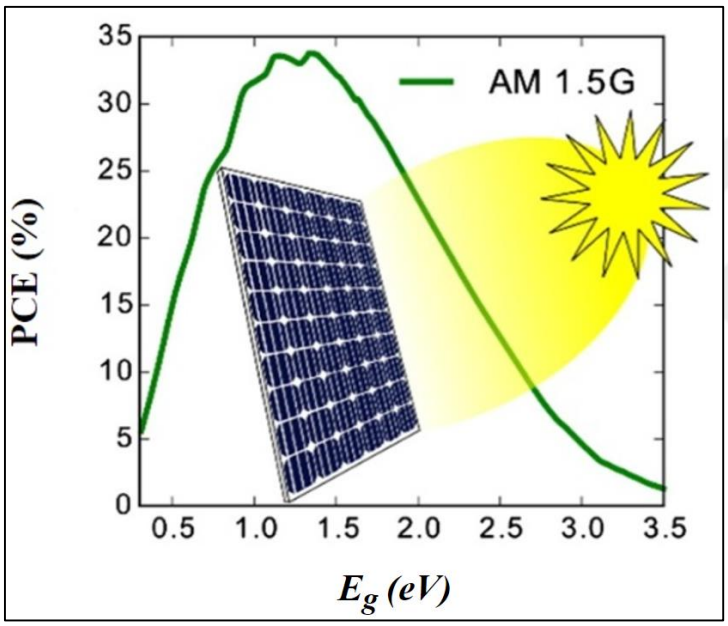
$$\varphi = E_{vac} - E_f \quad (5.2)$$

Burada; E_{vac}, vakum enerji seviyesini ifade eder. E_f, Fermi seviyesini temsil eder. Bu formül, bir malzemenin içindeki Fermi seviyesinden, yüzeyindeki vakum enerji seviyesine kadar olan enerji farkını tanımlar ve bu, malzemenin yüzey elektronik özelliklerine bağlıdır (Xia et al., 2023).

6. BULGULAR VE TARTIŞMA

6.1. Shockley-Queisser Sınırı ve Işımalı Rekombinasyon Katsayısı

1961'de Shockley ve Queisser, tek bir *p-n* bağlantısı kullanarak maksimum teorik güneş hücresi verimliliğini hesaplayan ilk bilim insanlarıydı. Shockley-Queisser sınırı, tek bir *p-n* ekleminden yapılmış bir güneş hücresinin maksimum teorik verimliliğinin hesaplanmasını ifade eder. Teorik sınır yaklaşık %33 olarak hesaplanmıştır (Shockley & Queisser, 1961).



Şekil 6.1. Shockley-Queisser Sınırı (Verschraegen, J., & Burgelman, M., 2007)

Hesaplama, Şekil 6.1.'de görüldüğü gibi 1,34 eV enerji bant aralığına sahip tek bir *p-n* bağlantısı varsayıldığında (AM 1,5 güneş spektrumu altında) maksimum güç dönüşüm verimliliğini yaklaşık %33,7 olarak belirlemektedir. Bu nedenle, gelen güneş radyasyonuna sahip ideal bir güneş hücresi 337 Wm^{-2} üretecektir. Güneş radyasyonu 6000 K'de kara cisim radyasyonu olarak modellendiğinde, maksimum verimlilik bant aralığı enerjisi E_g=1,34 eV olduğunda meydana gelecektir. Bu tez çalışmasında, uygun enerji band aralığından dolayı, Cs_2PtI_6 perovskit tabanlı (E_g=1,37 eV) güneş hücresi göz önünde tutulmuştur.

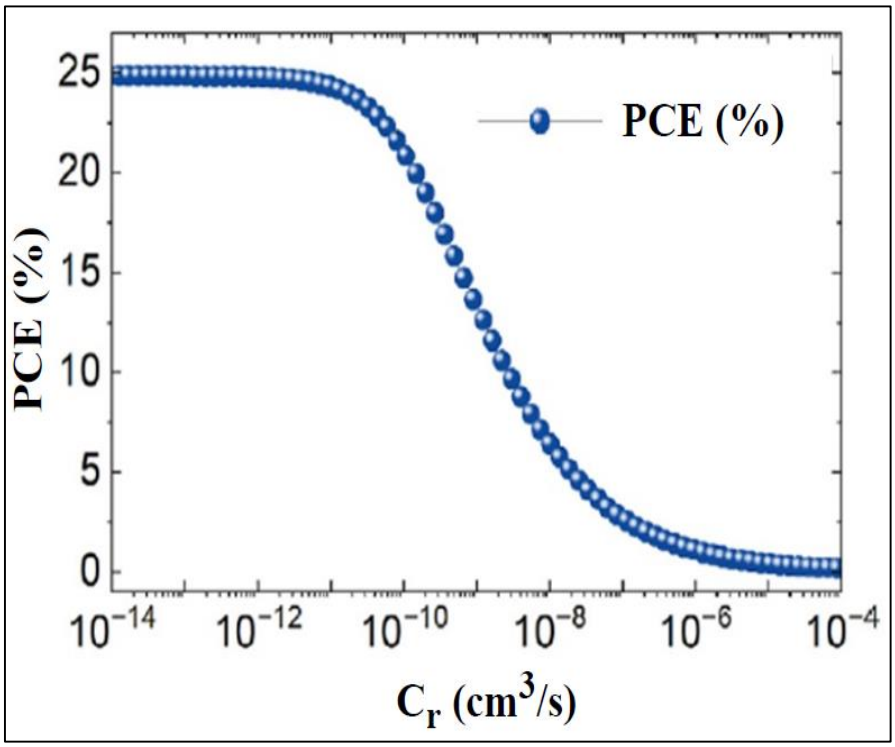
Shockley ve Queisser (Shockley & Queisser, 1961), karanlıkta bile, ortam sıcaklığı mutlak sıfırdan büyük olan herhangi bir hücre için, çevrenin bir kara cisim gibi davrandığını ve dolayısıyla kara cisim (Planck) yasasına göre radyasyon yaydığını ileri sürmüştür.

$$I(\lambda, \mathrm{T}) = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \times \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda k_B \mathrm{T}}\right) - 1} \tag{6.1}$$

Burada I, güç yoğunluğunu, T, kara cismin sıcaklığını, λ, ışığın dalga boyunu, h, Planck sabitini, k_B, Boltzmann sabitini ve c, ışığın hızını temsil etmektedir. Güneş hücresi, aktif tabakasının enerji bant aralığından daha yüksek enerjiye sahip fotonları emer ve daha sonra bant aralığı enerjisine eşit enerjiye sahip fotonları yeniden yaymak için radyasyonel olarak yeniden birleşen elektron-deşik çiftleri üretir. Bu iki süreç birbirini dengelemektedir. Mutlak sıfırın üzerindeki herhangi bir sıcaklık için, eşdeğer bir radyasyon emisyon oranına yol açan sürekli bir kara cisim radyasyonu akışı vardır. Bu akış sayesinde radyasyonel yeniden birleşme oranına temel bir alt sınır getirilmektedir. Işımalı rekombinasyon oranı şu şekilde ifade edilebilir:

$$U_{rad} = \mathrm{C}_r(np - {n_i}^2) \tag{6.2}$$

burada C_r ışımalı rekombinasyon katsayısıdır, n ve p sırasıyla serbest elektron ve serbest deşik yoğunluklarını ve n_i özgün taşıyıcı yoğunluğunu temsil etmektedir.



Şekil 6.2. Güneş hücresi veriminin ışımalı rekombinasyon katsayısına bağımlı değişimi (Saidarsan et al., 2025)

Kusur yoğunluğu, Auger rekombinasyon katsayıları ve SRH rekombinasyon katsayıları gibi nitelikler herhangi bir fizik yasasını ihlal etmeden sıfıra ayarlanabilse de, ışımalı rekombinasyon katsayısı (C_r), Shockley ve Queisser sınır formülasyonundan temel bir alt sınıra sahiptir ve bu nedenle sıfıra ayarlanamaz (Saidarsan et al., 2025). Bu katsayının varsayılan değeri SCAPS-1D'de sıfıra ayarlandığından ve kullanıcı genellikle literatürden bir C_r değeri elde etmekte zorluk çektiğinden, kullanıcı genellikle SCAPS-1D'deki varsayılan ayarları korumaktadır. Bu, kaçınılmaz olarak güneş hücresi performans ölçümlerinin sistematik olarak aşırı yüksek tahmin edilmesine yol açmaktadır ve Shockley ve Queisser sınırının ihlaline neden olabilir. Temel yarı iletken özelliklerini içeren C_r için yaklaşık bir ifade şu şekilde ifade edilebilir:

$$C_r = \frac{2\pi c}{N_v N_c}\left(\frac{k_B \mathrm{T}}{hc}\right)^3 \left(\frac{E_g}{k_B.\mathrm{T}}\right)^2 \left(\frac{1}{d}\right) \tag{6.3}$$

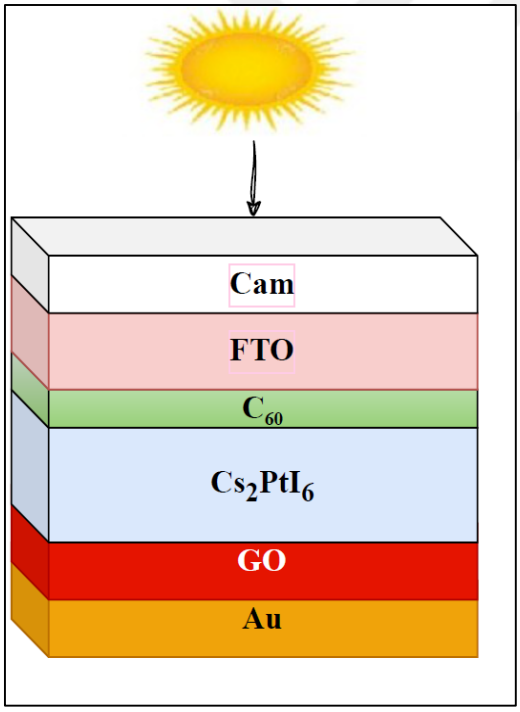
Burada N_c ve N_v sırasıyla iletkenlik bandındaki ve değerlik bandındaki durumların yoğunluğunu temsil eder, T, sıcaklığı temsil eder, h, Planck sabiti iken k_B, Boltzmann sabitidir ve c, ışık hızını temsil eder. E_g, bant aralığını ve d, aktif tabakanın kalınlığını temsil etmektedir.

SCAPS-1D sürüm 3.3.11 de, “Sayısal Ayarlar” düğmesi altındaki “Sayısal Panel” deki simülasyonlar için denklem (6.3.)’de ifade edilen C_r değerini kullanma seçeneği vardır. Ancak, literatürde birçok araştırmacı varsayılan ayar “Shockley Queisser rekombinasyon sınırını asla ayarlama” olarak ayarlanmış ve deneysel değerlerle tutarlı olmayan hatta Shockley ve Queisser sınırının üzerine çıkan sonuçlar rapor etmişlerdir. Gerçekçi olmayan düşük C_r=10^{-14} cm^3/s değerlerinin kullanılması ile verim değerleri %25 civarında bulunurken, daha gerçekçi bir C_r=10^{-6} cm^3/s değerinde aynı cihaz için verimin %2 civarında olduğu rapor edilmiştir(Bkz Şekil 6.2.). Simüle edilen cihaz performansındaki değişim, C_r değerindeki çok küçük bir farktan dolayı bile oldukça belirgin olabileceğinden, simülasyonları gerçekleştirmek için literatürden uygun C_r değerinin kullanılması gerekir. Bizim analizlerimizde, C_r değerleri dikkate alınmış ve böylece deneysel değerlerle daha tutarlı olan sonuçlar elde edilmiştir.

6.2. Cs_2PtI_6 Tabanlı Perovskit Güneş Hücresinin Dizaynı ve SCAPS-1D Programı ile Analiz Edilmesi

Bu çalışmada, Şekil 6.3.'de belirtilen FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au yapısına sahip perovskit güneş hücresinin performans parametrelerini belirlemek için, teorik bir model altında, güneş hücresinin performansını etkileyebilecek faktörler incelenmiş ve performansı optimize edilmiştir. Burada, FTO şeffaf iletken tabaka, C_{60} ve GO taşıyıcı seçici tabakalardır.

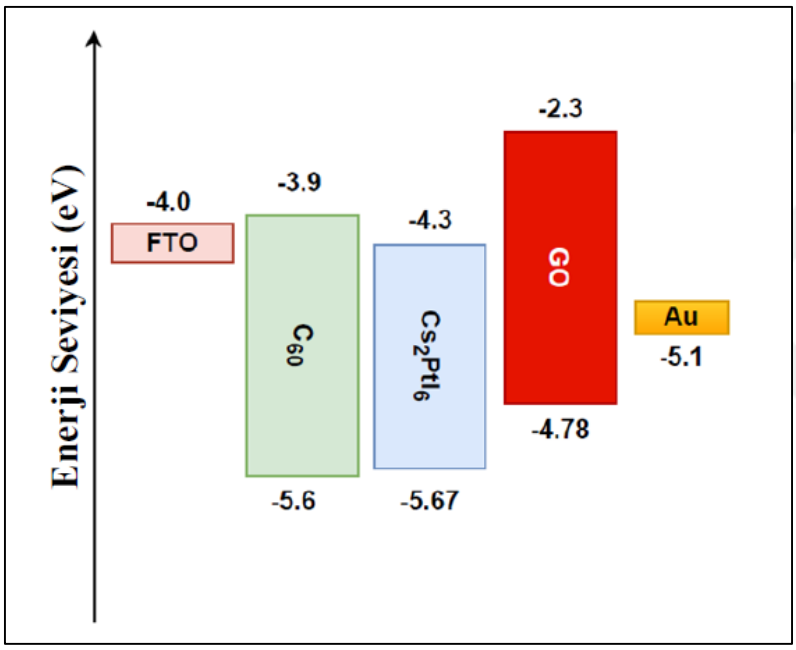
C_{60} ve GO sırası ile elektron transport tabakası (ETL) ve deşik (hole) transport tabakasına (HTL) karşılık gelmektedir. Cs_2PtI_6 perovskit tabakası, güneş hücresinde ışık emilimini sağlayan aktif tabakadır. Au, üst metal kontaktır. ETL, n-tipi; HTL, p-tipi ve Cs_2PtI_6 perovskit tabakası ise özgün (intrinsic) yarıiletken özellikleri sergilediğinden çalışılan güneş hücresi, n-i-p yapısındadır.



Şekil 6.3. FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresi yapısının şematik temsili

Şekil 6.4.'de FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresi yapısının enerji band yapıları verilmiştir. Burada vakum seviyesine göre iletkenlik ve değerlik bandlarının seviyeleri belirtilmiştir. Cs_2PtI_6 nin elektron afinitesi (iletkenlik bandının valans bandına göre konumu) 4,3 eV'tur. Enerji band aralığı 1,37 eV olduğundan, değerlik bandının seviyesi 5,67 eV'tur. Güneş ışığı Cs_2PtI_6 perovskit tabakasına ulaştığında, bu tabakada elektronlar ve deşikler

üretilir. Elektronlar, C_{60} tarafına, deşikler ise GO tarafına doğru hareket ederler. Elektronların FTO'ya, deşiklerin ise Au'ya ulaşmaları gerekir. Böylece devre tamamlanaralak ışık altında sürekli elektron-deşik çiftleri üretilmektedir. Elektronların ve deşiklerin ilgili tabakalara ulaşmaları için gerekli difüzyon uzunlukları tabaka kalınlıklarına eşit veya büyük olmalıdır. Ohmik kontak sağlanması ve iletimi engelleyici herhangi bir enerji bariyeri oluşmaması için, metal kontak(Au)'nun iş fonksiyonu (5,1 eV), HTL'nin (GO), elektron afinite seviyesinden (2,3 eV) büyük olmalıdır. Önerilen yapıda bu şart sağlanmaktadır.



Şekil 6.4. FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresi yapısının enerji band yapıları

Güneş hücrelerindeki fiziksel süreçleri incelemek için sıklıkla kullanılan sayısal simülasyon aracı SCAPS-1D, mevcut çalışmada kullanılmıştır. SCAPS-1D yazılımı Burgelman(Verschraegen & Burgelman, 2007) tarafından oluşturulmuştur ve Poisson denklemini (Denklem (6.4)), deşikler için süreklilik denklemini (Denklem (6.5)) ve elektronlar için süreklilik denklemini (Denklem (6.6)) hesaba katan Shockley–Read–Hall rekombinasyon istatistiklerine dayanmaktadır.

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = -\frac{q}{\varepsilon_0 \varepsilon_r}(p(x) - n(x) + N_D - N_A + p_t(x) - n_t(x)) \tag{6.4}$$

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{dJ_p}{dx} - R_p + G_p \tag{6.5}$$

$$\frac{dn}{dt} = -\frac{dJ_n}{dx} - R_n + G_n \quad (6.6)$$

Burada $\psi(x)$, p, n, q, $\varepsilon_0, \varepsilon_r$, $N_D, N_A, p_t(x), n_t(x)$, J_p, J_n, $G_p(G_n)$ ve $R_p(R_n)$ sırasıyla elektrostatik potansiyel, deşik ve elektron yoğunlukları, elektron yükü, serbest uzay geçirgenliği, bağıl geçirgenlik, donör (verici) ve akseptör (alıcı) yük safsızlık yoğunlukları, tuzaklanmış deşik ve elektron yoğunlukları, deşiklerin ve elektronların akım yoğunlukları, deşik (elektron) oluşum oranı ve deşik (elektron) rekombinasyon oranıdır.

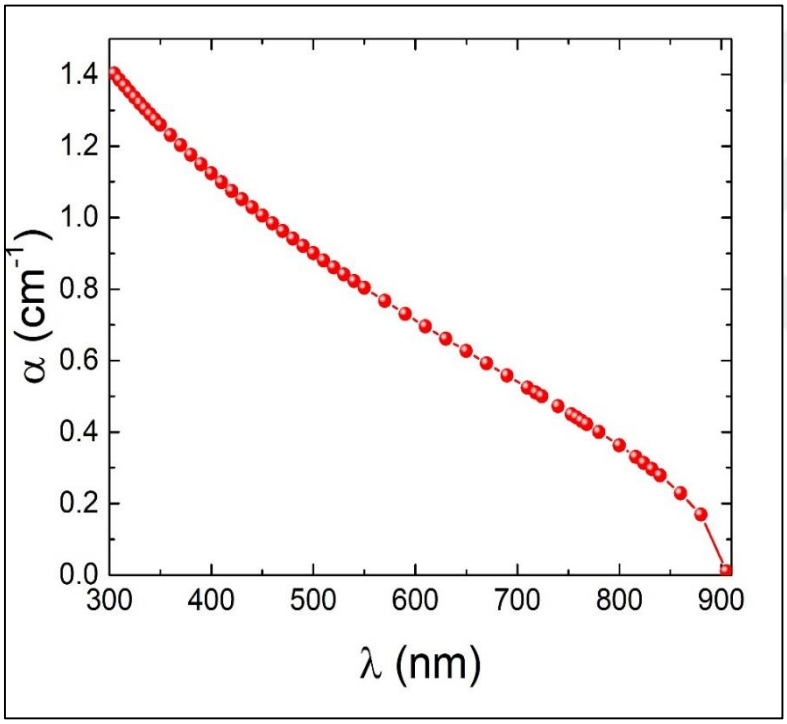
Bu nedenle, SCAPS-1D, sınır koşullarını hesaba katarak bahsi geçen denklemleri kullanarak, açık devre voltajı (V_{oc}), akım yoğunluğu (J_{sc}), doldurma faktörü (*FF*), güç dönüşüm verimliliği (*PCE*) ve kuantum verimliliği (*QE*) gibi güneş cihazlarının performans parametrelerini hesaplayabilmektedir. Çizelge 6.1.'de FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresi yapısında kullanılan her bir tabaka için SCAPS-1D programında kullanılan, oda sıcaklığındaki başlangıç giriş parametreleri verilmiştir. Tabaka kalınlıkları için optimum değerler belirlenmiştir.

Çizelge 6.1. SCAPS-1D programında kullanılan başlangıç giriş parametreleri (Kumar & Singh, 2021; Lakhdar & Hima, 2020; Widianto et al., 2021)

Parametre	FTO	C_{60}	Cs_2PtI_6	GO
Kalınlık (nm)	400	30	1100	100
Enerji bant aralığı, E_g (eV)	3.5	1.7	1.37	2.48
Elektron afinitesi (eV)	4	3.9	4.3	2.3
Bağıl geçirgenlik, ε_r	9	4.2	4.8	10
İletkenlik bandı durumların yoğunluğu,	2.2×10^{18}	8.0 x	3×10^{14}	2.2×10^{18}
Değerlik bandı durumların yoğunluğu, N_v	1.8 x	8.0 x	1×10^{17}	1.8×10^{19}
Elektron mobilitesi, μ_e (cm^2/Vs)	20	8.0 x 10-	62.6	26
Deşik mobilitesi, μ_h (cm^2/Vs)	10	3.5 x 10-	62.6	123
Donör yoğınluğu, N_D (cm^{-3})	1×10^{18}	2.6 x	1×10^{15}	0
Akseptör yoğunluğu, N_A (cm^{-3})	0	0	1×10^{12}	2×10^{18}
Kusur yoğunluğu, N_t (cm^{-3})	1×10^{14}	1×10^{14}	1×10^{14}	1×10^{14}

Çizelge 6.2. SCAPS-1D programında kullanılan ara yüzey kusur parametreleri

Ara yüzey kusur parametresi	HTL/Cs_2PtI_6	ETL/ Cs_2PtI_6
Kusur tipi	Nötr	Nötr
Elektron yakalama kesiti (cm^2)	1 x 10^{-15}	1 x 10^{-15}
Deşik yakalama kesiti (cm^2)	1 x 10^{-15}	1 x 10^{-15}
Enerji dağılımı	Tek	Tek
Referans değerine karşı enerji (eV)	0.6	0.6
Karakteristik enerji (eV)	0.1	0.1
Toplam kusur yoğunluğu (cm^{-2})	1 x 10^{12}	1 x 10^{12}



Şekil 6.5. Cs_2PtI_6 tabakasının absorbsiyon katsayısı (α)-dalga boyu (λ) grafiği

Şekil 6.5.'de FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresi yapısının ilgili giriş parametreleri girildiğinde program tarafından Cs_2PtI_6 tabakası için otomatik olarak üretilen absorbsiyon katsayısı (α)-dalga boyu (λ) grafiğini göstermektedir. Bu grafiğe göre 905 nm civarında absorbsiyon katsayısı sıfıra düşer ve Cs_2PtI_6 tabakası bu dalga boyundan daha büyük dalga boyuna sahip fotonları absorblayamaz. Bu dalga boyuna karşılık gelen enerji, yapının yasak enerji aralığı(1,37eV)'dır. Buna göre, Cs_2PtI_6 tabakası enerjisi 1,37 eV'den küçük olan fotonları absorblayamaz. Tabakanın, özellikle görünür bölgedeki fotonları absorbladığı görülmektedir.

6.3. FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au Güneş Hücresinin Enerji Band Diagramı

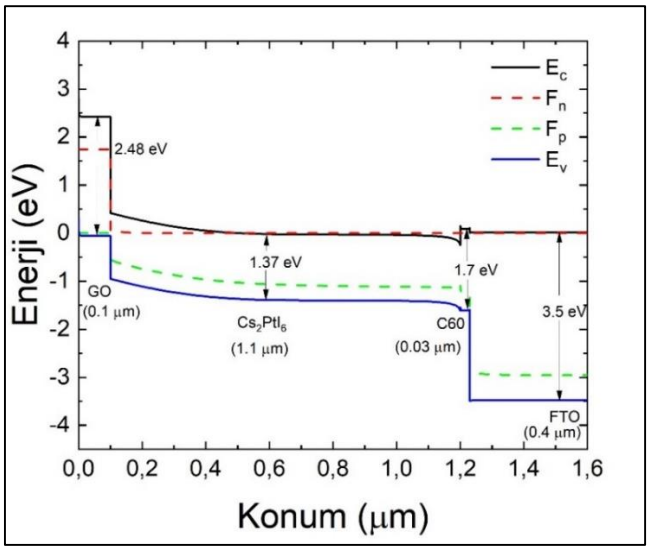
Şekil 6.6.'da FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresi yapısının enerji band diyagramı gösterilmektedir. Aktif tabaka (Cs_2PtI_6) tabaka ile HTL (GO) arasındaki valans bandı bükülmesi (VBO) ve ETL (C_{60}) ile aktif tabaka arasındaki iletim bandı bükülmesi (CBO), arayüz rekombinasyonunu ve taşıyıcı iletimini etkileyen iki önemli özelliktir. CBO, perovskitin iletim bandı minimumu (E_c) ile ETL arasındaki enerji seviyesi farkıdır.

Buna karşılık, VBO, soğurucunun değerlik bandı maksimumu (E_v) ile HTL arasındaki enerji seviyesi farkıdır. Bant aralığı (E_g) ve elektron afinitesi (χ), VBO ve CBO'yu ayarlayarak cihaz performansını optimize etmek için kullanılabilecek iki özelliktir. VBO ve CBO'yu tahmin etmek için aşağıdaki formüller kullanılır (Rühle, 2016; Saidarsan et al., 2025; Shockley & Queisser, 1961; Verschraegen & Burgelman, 2007).

$$VBO = (X_{HTL} - X_{PER} + E_{g,HTL} - E_{g,PER}) \tag{6.7}$$

$$CBO = (X_{PER} - X_{ETL}) \tag{6.8}$$

Elektron Fermi seviyesi (F_n), ETL'nin iletkenlik bandına (E_c) yakın olmalı ve deşik Fermi seviyesi (F_p), HTL'nin değerlik bandına (E_v) bitişik olmalıdır. VBO ve CBO değerleri sırasıyla -0,89 ve 0,4 eV olarak belirlenmiştir.



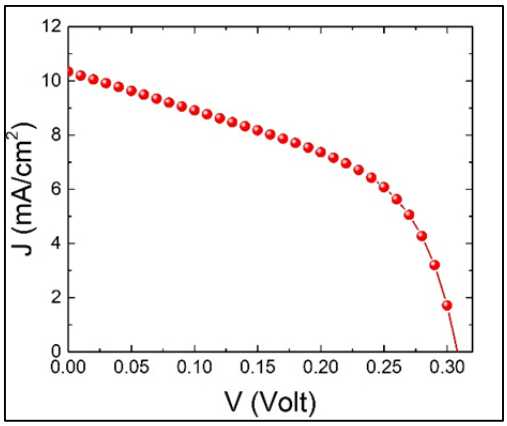
Şekil 6.6. FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresi yapısının enerji band diyagramı

ETL/perovskit arayüzünde, CBO durumunda, perovskitte üretilen elektronlar toplanmak üzere yüzeye akar. ETL'nin iletim bandı perovskitinkinden düşükse, perovskitten, ETL'ye doğru harekete eden elektronlar için herhangi bir enerji bariyeri oluşmamaktadır (Haider et al., 2020; Hauschild et al., 2017; Sekar et al., 2023; Sinsermsuksakul et al., 2013).Bu durumda CBO'nun değeri negatiftir. Öte yandan, ETL'nin iletim bandı, Şekil 6.6'da gösterildiği gibi perovskitinkinden yüksek ise, perovskitten, ETL'ye doğru harekete eden elektronlar için bir enerji bariyeri oluşmaktadır (Haider et al., 2020; Hauschild et al., 2017; Sekar et al., 2023; Sinsermsuksakul et al., 2013).

Önerilen cihazda CBO'nun değeri pozitiftir. Oluşan bariyerin çok yüksek olması cihaz performansını olumsuz etkilerken, 0,4 eV gibi bir bariyer değeri ETL ile perovskit arayüzeyindeki rekombinasyonların azaltılmasında rol oynamaktadır (Haider et al., 2020; Hauschild et al., 2017; Sekar et al., 2023; Sinsermsuksakul et al., 2013). Benzer şekilde, HTL/Perovskit arayüzünde, HTL malzemesinin E_v değeri, perovskitinkinden daha yüksek olduğunda VBO değeri pozitif olmaktadır. Bu durumda özellikle J_{sc} değeri artmaktadır (Haider et al., 2020; Hauschild et al., 2017; Sekar et al., 2023; Sinsermsuksakul et al., 2013).

HTL/Perovskit arayüzünde, HTL malzemesinin E_v değeri, perovskitinkinden daha düşük olduğunda VBO değeri negatif olmaktadır. Bu durumda V_{oc} değerinde düşüş olur (Haider et al., 2020; Hauschild et al., 2017; Sekar et al., 2023; Sinsermsuksakul et al., 2013). Çalışılan cihaz için elde edilen negatif VBO değerinden (-0,89eV) dolayı, cihazın V_{oc} değeri düşüktür.

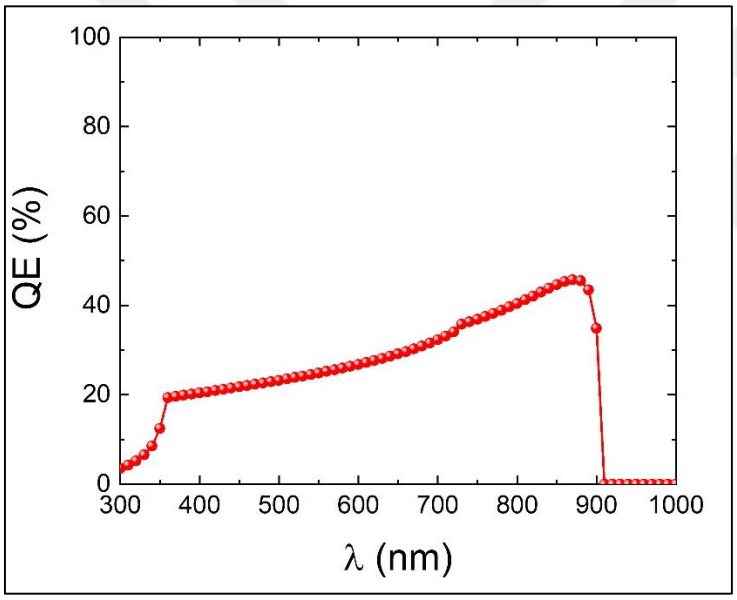
6.4. FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au Güneş Hücresinin Fotovoltaik Performansı



Şekil 6.7. FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin akım yoğunluğu-voltaj (J-V) grafiği

Çizelge 6.1. ve 6.2. de verilen giriş parametreleri kullanılarak, standart test şartlarında (AM1,5G ışığı altında, 300 K'de, 1000 mW/cm^2 güç yoğunluğunda) FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresi için akım yoğunluğu-voltaj (J-V) değerleri belirlenmiştir.

Şekil 6.7.'de incelenen yapı için akım yoğunluğu-voltaj (J-V) grafiği verilmiştir. Hesaplamalarda, denklem (6.3) de verilen C_r ışımalı rekombinasyon katsayısı 1,45x10^{-6} cm^3/s olarak belirlenmiş ve bu değer simülasyonda dikkate alınarak analizler gerçekleştirilmiştir. V_{oc}, J_{sc}, *FF* ve *PCE* sırasıyla 0,3083V, 10,34 mA/cm^2, %48,48 ve %1,55 olarak başlangıç konfigürasyonundan elde edilmiştir.



Şekil 6.8. FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin quantum verimliliği (QE)dalga boyu grafiği

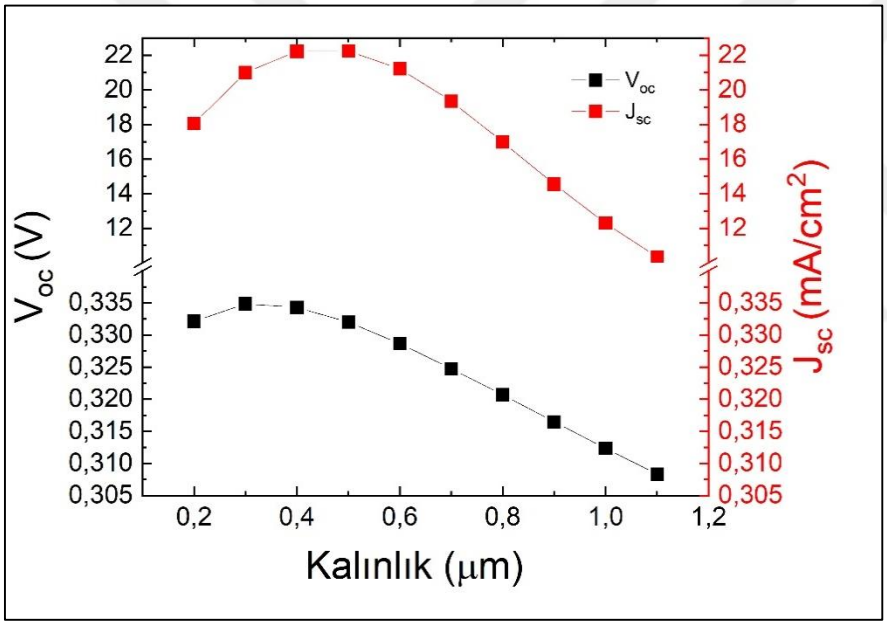
Güneş hücresi tarafından toplanan taşıyıcı sayısının, hücreye ulaşan fotonlarının sayısına oranına güneş hücresinin kuantum verimliliği denir. Cihazın farklı ışık dalga boylarına verdiği tepkiyi tanımlamaktadır. Kısa devre çalışma koşullarında toplanan taşıyıcı sayısının, belirli bir dalga boyu için hücreye ulaşan fotonlarının sayısına oranını temsil etmektedir. FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresi için quantum verimliliği (QE)-dalga boyu grafiği Şekil 6.8.'de verilmiştir.

Burada, FTO tarafından güneş hücresine ulaşan ve enerjileri 1,7 eV'den büyük olan fotonlar ilk olarak daha yüksek bant aralığına sahip C_{60} ETL tabakası tarafından

absorblanmaktadırlar. Kısaca, 300-730 nm'lik daha düşük dalga boyu aralığında fotonlar çoğunlukla bu tabaka tarafından absorblandıkları için, Cs_2PtI_6 tabakası tarafından 730-905 nm aralığı daha çok absorblanmaktadır.

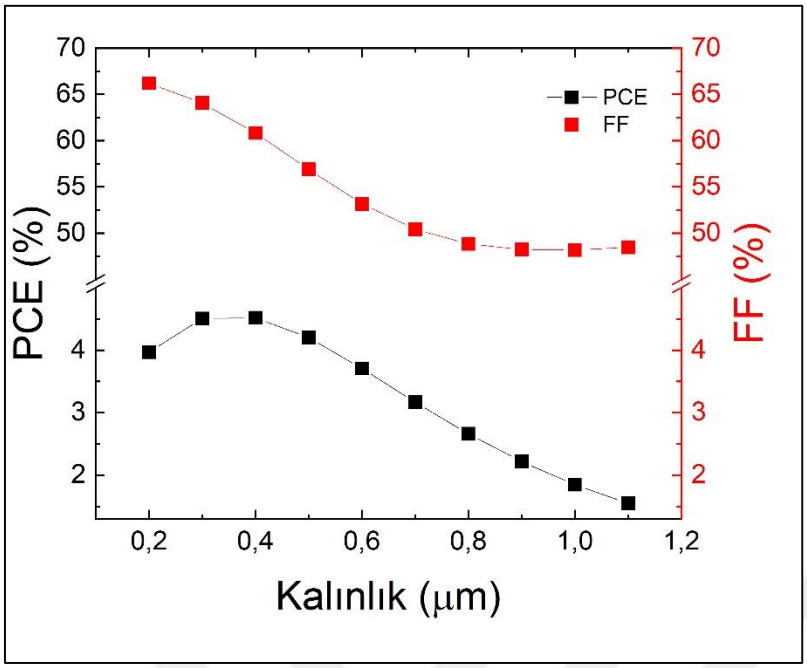
ETL tabakasının kalınlığı düşürülerek bu tabaka tarafından daha az fotonlar yakalanabilir ve Cs_2PtI_6 tabakasının optimum kalınlığı ayarlanarak daha önceki raporlarda da gözlemlendiği gibi her konfigürasyonda elde edilebilecek daha yüksek fotoakımda iyileştirilmiş QE ile sonuçlanabilmektedir (Hossain et al., 2023).

6.5. Cs_2PtI_6 Tabakasının Kalınlığının FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au Güneş Hücresinin Fotovoltaik Performansına Etkisi



Şekil 6.9. Cs_2PtI_6 tabakasının kalınlığının, FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin V_{oc} ve J_{sc} değerlerine etkisi

Yüksek bir enerji dönüşüm verimliliği, yalnızca güneş hücresinin aktif tabakasından gelen ışıkla üretilmiş yük taşıyıcılarının rekombinasyonu azaltılarak, elektrotlar aracılığıyla bu taşıyıcıların toplandığı durumlarda elde edilebilir. Sonuç olarak, yüksek kalınlığa sahip aktif tabaka, ilgili elektrotlar tarafından yük birikiminden ziyade yük rekombinasyonuna neden olmaktadır. Bu, aktif tabaka kalınlığına göre daha az yük taşıyıcı difüzyon uzunluğu ile açıklanmaktadır. Ayrıca, çok ince aktif tabaka sınırlı foton emilimine neden olmaktadır ve akım yoğunluğu azalmaktadır. Dolayısıyla, en yüksek performansı sağlayan optimum aktif tabaka kalınlığını belirlemek çok kritiktir.

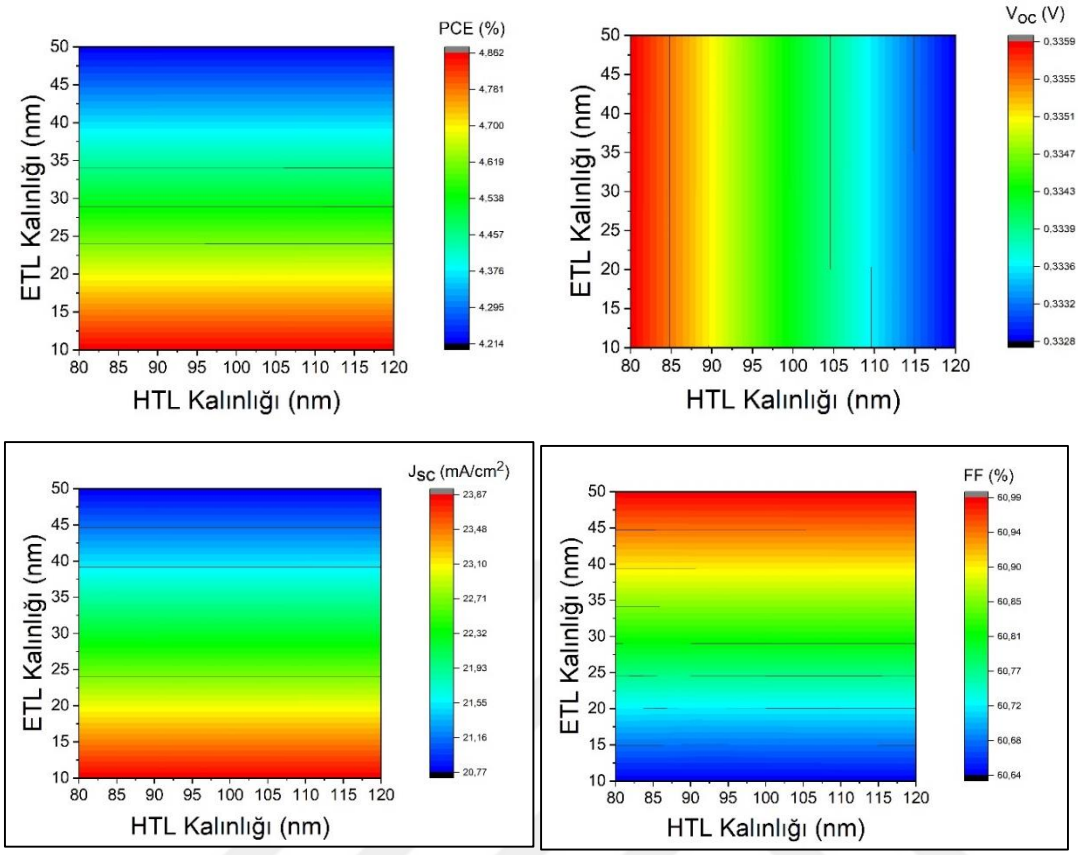


Şekil 6.10. Cs_2PtI_6 tabakasının kalınlığının, FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin *PCE* ve *FF* değerlerine etkisi

Şekil 6.9.'da Cs_2PtI_6 tabakasının kalınlığının, FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin V_{oc} ve J_{sc} değerlerine etkisi gösterilmektedir. Araştırılan güneş hücresi için Cs_2PtI_6 tabakasının kalınlığı 0,2-1,1 μm aralığında değiştirilmiştir. 0,3 ve 0,4 μm kalınlık değerlerinde, en yüksek V_{oc} ve J_{sc} değerleri elde edilmiştir. Şekil 6.10.'da, Cs_2PtI_6 tabakasının kalınlığının, FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin *PCE* ve *FF* değerlerine etkisi gösterilmektedir. Artan direnç etkilerinden dolayı *FF* değeri kalınlıkla sürekli azalırken, *PCE* değeri, Cs_2PtI_6 tabakasının 0,4 μm kalınlık değerinde %4,5 değeri ile en yüksek değerine ulaşmıştır. Bu yüzden bundan sonra gerçekleştirilen simülasyonlarda, Cs_2PtI_6 tabakasının kalınlığı 0,4 μm'ye sabitlenmiştir.

6.6. ETL ve HTL Tabakalarının Kalınlığının FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au Güneş Hücresinin Fotovoltaik Performansına Etkisi

Şekil 6.11.'de, ETL ve HTL tabakalarının kalınlığının FTO/C_{60}/Cs_2PtI6/GO/Au güneş hücresinin fotovoltaik parametreleri üzerine etkisi gösterilmektedir. ETL (C_{60}) tabakasının kalınlığı 10-50 nm aralığında değiştirilmiştir. HTL (GO) tabakasının kalınlığı 80-120 nm aralığında değiştirilmiştir.



Şekil 6.11. ETL ve HTL tabakalarının kalınlığının FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au güneş hücresinin fotovoltaik parametreleri üzerine etkisi

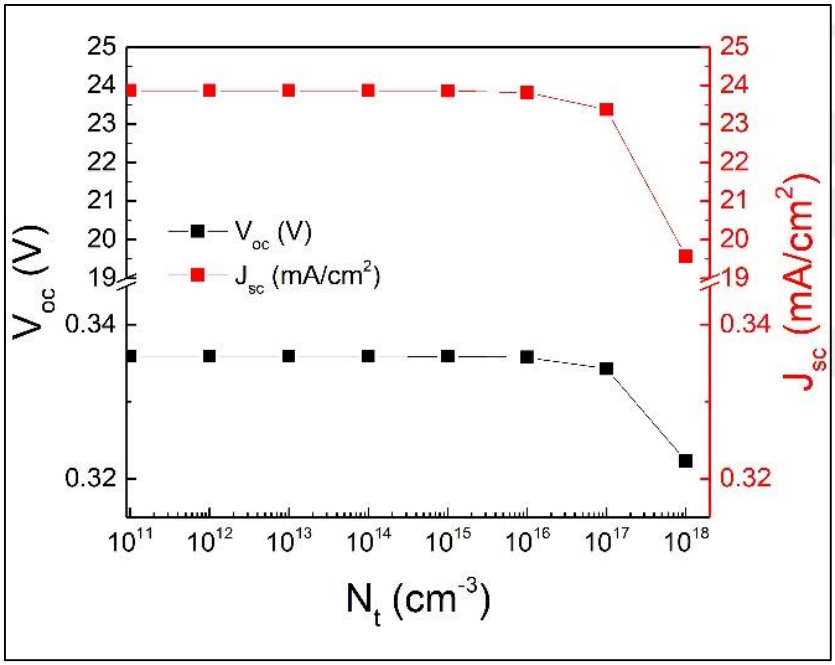
ETL tabakasının kalınlığı, FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au güneş hücresinin fotovoltaik parametrelerini önemli derecede etkilerken, HTL tabakasının kalınlığının bu parametreleri çok etkilemediği belirlenmiştir. En optimum verim değeri, ETL tabakasının kalınlığı 10 nm ve HTL tabakasının kalınlığı 120 nm olduğunda elde edilmiştir. Bu yüzden bundan sonra gerçekleştirilen simülasyonlarda ETL ve HTL tabakalarının kalınlıkları bu optimum değerlere sabitlenmiştir.

6.7. Cs_2PtI_6 Tabakasındaki Kusurların FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au Güneş Hücresinin Fotovoltaik Performansına Etkisi

Bu kısımda, Cs_2PtI_6 aktif tabakasının kusur yoğunluğunun, araştırılan güneş hücresinin performansı üzerine etkisi araştırılmıştır(Şekil 6.12. ve 6.13.). Taşıyıcı rekombinasyonu, özellikle, aktif tabakadaki kusurlar nedeniyle meydana gelmektedir.

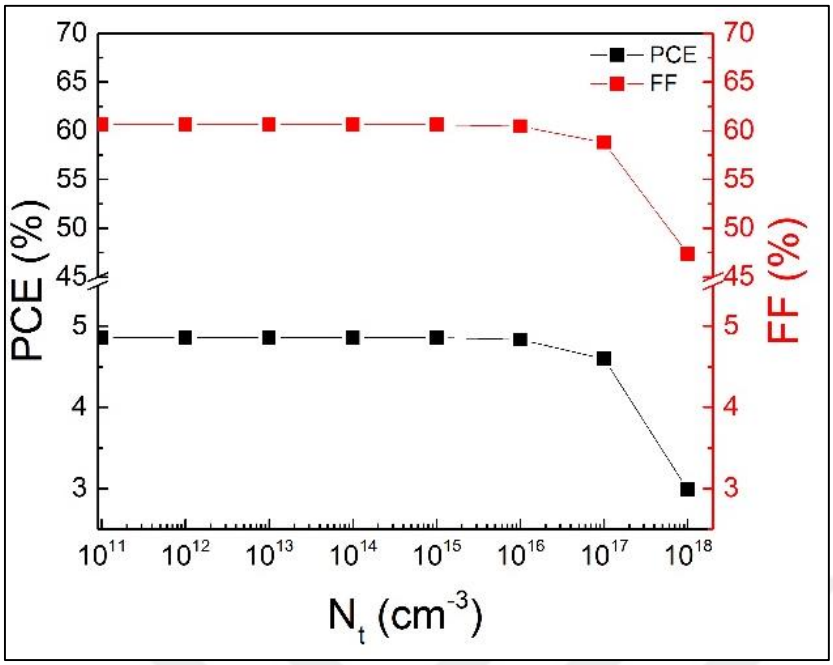
Bu tabakada oluşan ışık ile üretilen elektron-deşik çifti, metal kontaklara ulaşmadan önce bu kusur durumlarıyla karışabilir ve bu da hücrelerin genel performansının düşmesine yol açmaktadır (Khatun et al., 2021).

Aktif tabakadaki kusurların varlığı, güneş hücresindeki rekombinasyon oranı üzerinde önemli bir etki yapar ve sonuç olarak hücredeki karanlık akımının yüksek seviyelere ulaşmasına neden olmaktadır. Aktif tabakadaki kusur seviyesi yükseldikçe, hem difüzyon uzunluğu hem de azınlık taşıyıcısının ömrü kısalmaktadır (Cao et al., 2019; Khatun et al., 2021; O'Donnell & Chen, 1991).



Şekil 6.12. Cs_2PtI_6 tabakasındaki kusurların, FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin V_{oc} ve J_{sc} değerlerine etkisi

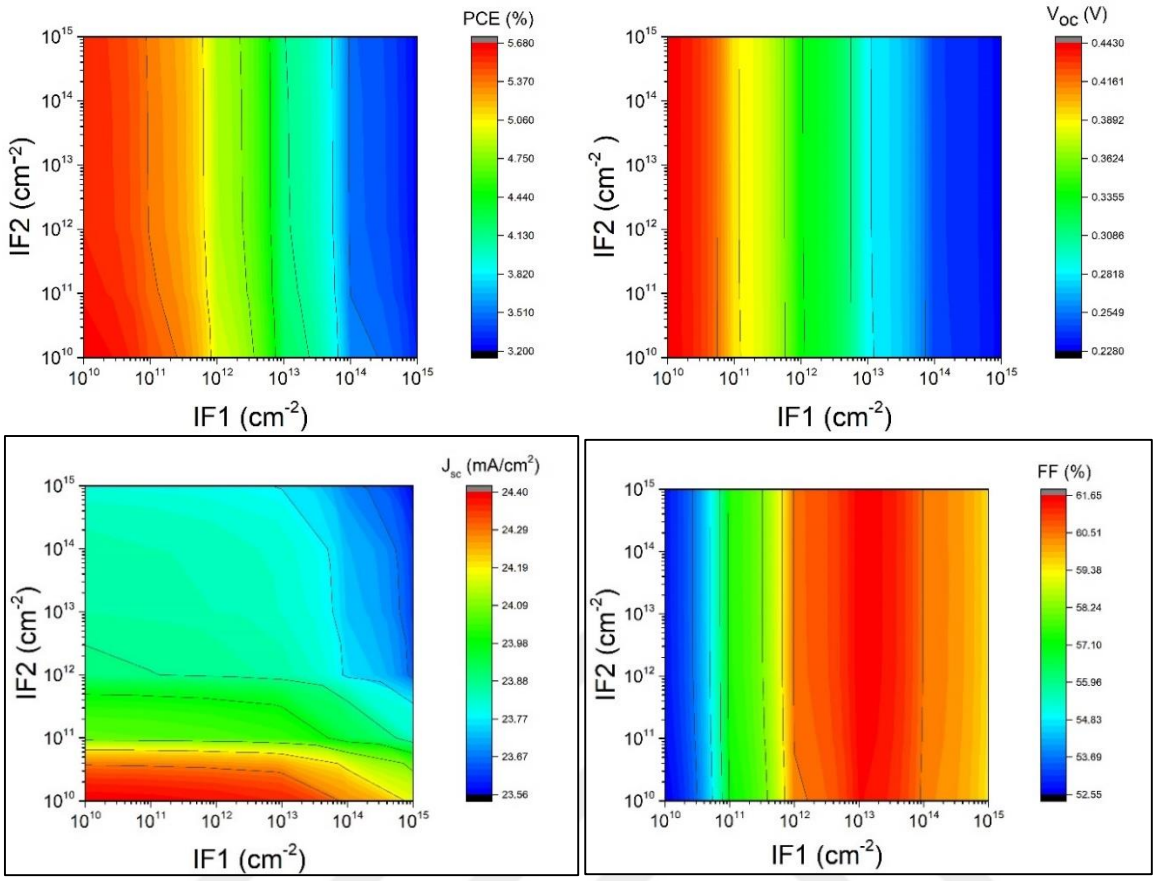
Aktif tabakadaki (Cs_2PtI_6) kusur seviyesi 10^{11}-10^{18} cm^{-3} arasında değiştirilmiştir. Önerilen güneş hücresinde kusurların ancak çok yüksek değerlerde (>10^{17} cm^{-3}) etkili olduğu öncesinde etkisinin zayıf olduğu tespit edilmiştir. Bu değerin üstünde tüm fotovoltaik parametreler dramatik olarak düşmektedir. Yüksek performans ve kararlı bir güneş hücresi elde etmek için, kusurları mümkün olduğunca en aza indirmek çok önemlidir. Mevcut çalışmamızda, kusur yoğunluğu 10^{14} cm^{-3} olarak optimize edilmiştir.



Şekil 6.13. Cs_2PtI_6 tabakasındaki kusurların, FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin *PCE* ve *FF* değerlerine etkisi

6.8. Arayüzey Kusurlarının FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au Güneş Hücresinin Fotovoltaik Performansına Etkisi

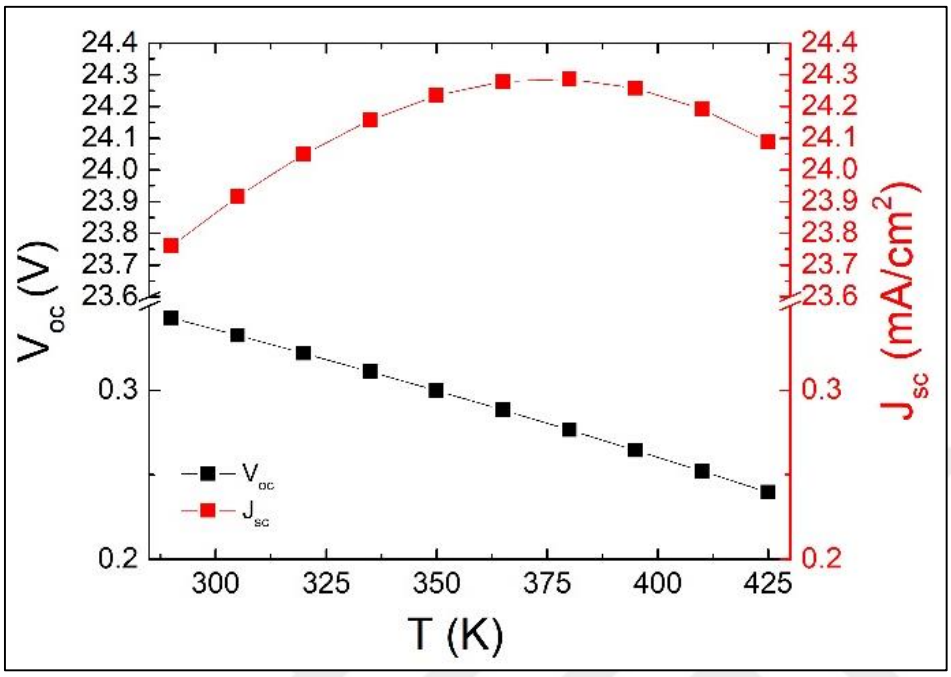
Bu kısımda, HTL (GO) ile aktif tabaka (Cs_2PtI_6) ve ETL (C_{60}) ile aktif tabaka (Cs_2PtI_6) arasındaki ara yüzey kusurlarının araştırılan güneş hücresinin performans parametrelerine etkisi araştırılmıştır. Şekil 6.14.'de IF1 ve IF2 sırası ile GO/Cs_2PtI_6 ve C_{60}/Cs_2PtI_6 arasındaki kusurları ifade etmektedir. Her iki arayüzde, kusur seviyesi 10^{10}'dan 10^{15} cm^{-2}'ye değiştirilmiştir.



Şekil 6.14. Arayüzey kusurlarının, FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin *PCE*, *FF*, V_{oc} ve J_{sc} değerlerine etkisi

Şekil 6.14.' den görüldüğü gibi, C_{60}/Cs_2PtI_6 arayüzündeki kusur yoğunluğunun değişmesi ile, V_{oc}, *FF* ve *PCE* değerleri neredeyse değişmeden kalır. Ancak J_{sc} değeri 10^{11} cm^{-2}'deki kusur durumuna kadar değişmeden kalmakta ve ardından hızlıca azalmaktadır. GO/Cs_2PtI_6 arayüzündeki kusur yoğunluğunun değişmesi ile bu kusurlar, rekombinasyon merkezleri ve tuzakları olarak davranmaktadırlar. Bu yüzden taşıyıcılar, elektrotlara ulaşamadan rekombine olmaktadırlar. Metal kontaklara ulaşan taşıyıcı konsantrasyonundaki bu düşüşten dolayı, güneş hücresinin GO/Cs_2PtI_6 arayüzündeki kusur yoğunluğunun artması cihazın güç dönüşüm verimini azaltmaktadır (Cao et al., 2019; Khatun et al., 2021). Çalışılan cihaz için, GO/Cs_2PtI_6 arayüzündeki kusur yoğunluğu 10^{10}'dan 10^{15} cm^{-2} değiştirildiğinde güç dönüşüm veriminin (*PCE*), %5,68'den %3,20'ye düştüğü gözlemlenmiştir. Mevcut çalışmamızda, ara yüzey kusur yoğunluğu her iki ara yüzey içinde 10^{12} cm^{-2} olarak optimize edilmiştir.

6.9. Sıcaklığın, FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au Güneş Hücresinin Fotovoltaik Performansına Etkisi



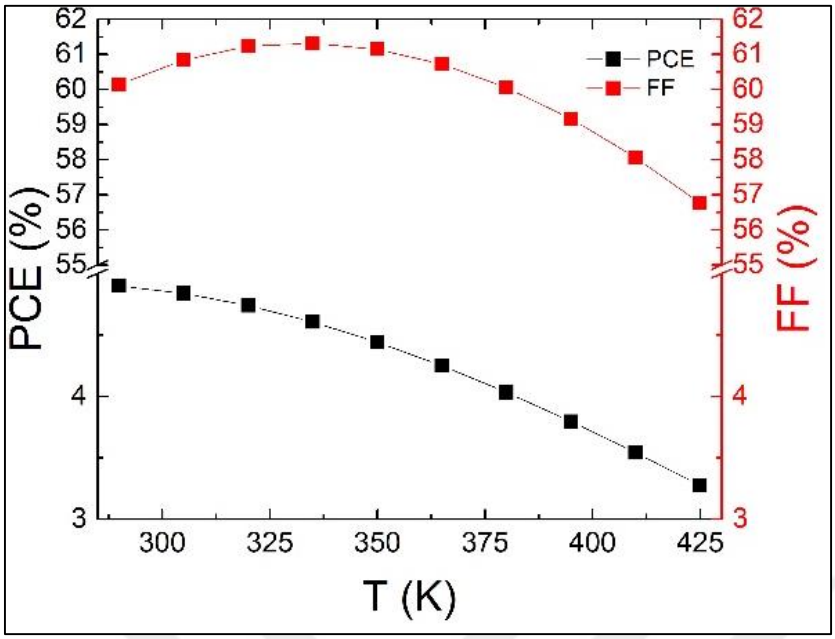
Şekil 6.15. Sıcaklığın, FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin V_{oc} ve J_{sc} değerlerine etkisi

Güneş hücresinin performansı çevre sıcaklığından önemli ölçüde etkilenir. Bu kısma kadar gerçekleştirilen simülasyonlarda, sıcaklık 300 K olarak ayarlanmıştır. Bu çalışma sıcaklık aralığını 275-425 K olarak belirlemiş olup, Şekil 6.15. ve 6.16.'dan görüldüğü gibi, genel olarak V_{oc}, *PCE* ve *FF*'nin artan sıcaklıkla birlikte azaldığı gözlemlenmiştir. Bunun nedeni, malzemenin bant aralığının artan sıcaklıkla birlikte azalması ve J_{sc}'de artışa yol açmasıdır. Bir yarıiletkenin enerji band aralığı ile sıcaklık arasındaki ilişki şöyledir (Ou et al., 2024).

$$E_g(T) = E_0 - aT^2/(T + b) \tag{6.9}$$

burada E_o, a ve b malzeme sabitleridir.

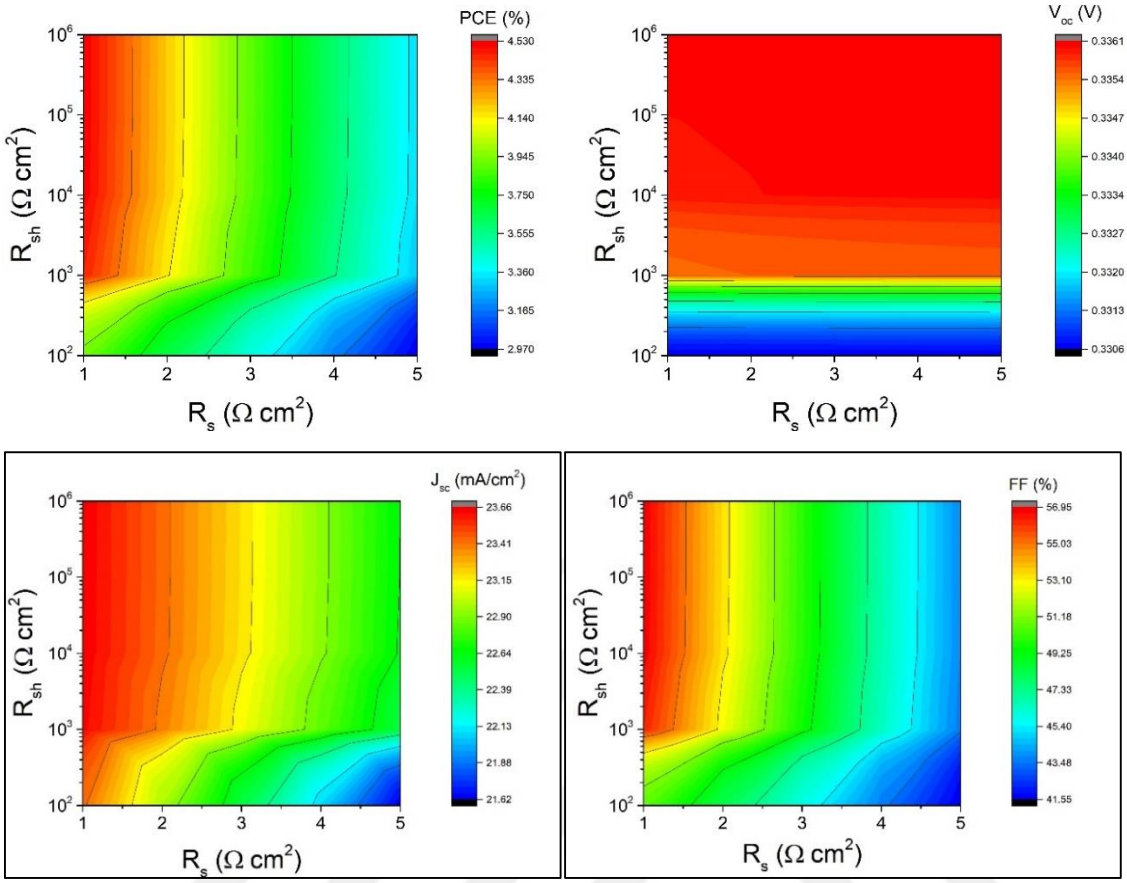
Çalışılan yapıda, J_{sc}'nin sıcaklığa bağımlılığının 275-425 K aralığında zayıf olduğu, 375 K'den sonra bu parametrenin de sıcaklıkla düştüğü gözlemlenmiştir. Sıcaklık 425 K'e ulaştığında, *PCE* değerinde dramatik bir azalma gözlemlenmiştir. Sıcaklık arttıkça, perovskit güneş hücresi içindeki kusurlar artabilmekte ve buna bağlı olarak hücrenin genel performansında bir azalmaya yol açabilmektedir (Ou et al., 2024).



Şekil 6.16. Sıcaklığın, FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin *PCE* ve *FF* değerlerine etkisi

6.10. Seri ve Paralel Dirençlerin FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au Güneş Hücresinin Fotovoltaik Performansına Etkisi

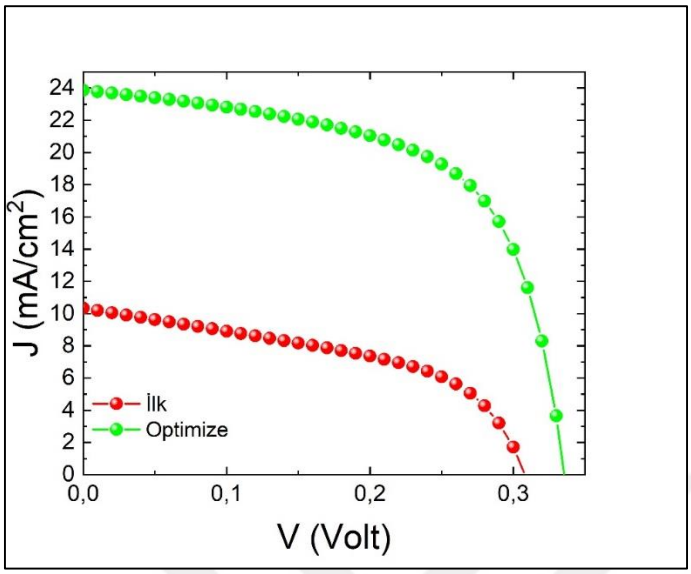
Güneş hücrelerinin performansı, esas olarak güneş hücresi katmanları, alt ve üst metal kontakları arasındaki bağlantılar ve üretim esnasında ortaya çıkan kalite kaybından ötürü elektriksel olarak iki direnç ile tanımlanmaktadır. Bu iki direnç paralel direnç(R_{sh}) ve seri direnç(R_s)' dir ve cihazın performansını önemli ölçüde etkilemektedir. Teorik olarak ideal durumda R_{sh}'ın sonsuz, R_s'nin de sıfır olması gerekmektedir.



Şekil 6.17. Paralel (R_{sh}) ve seri (R_s) dirençlerin FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin performansına etkisi

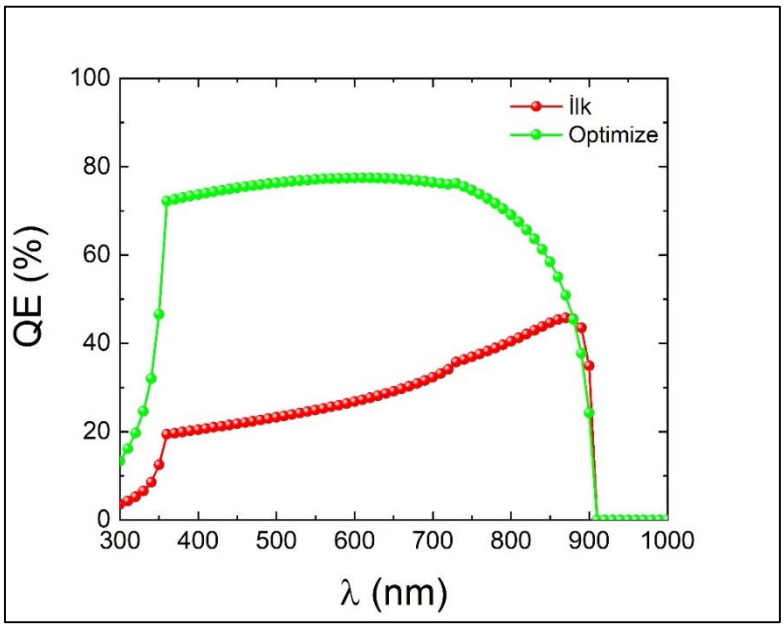
Bu kısımda, çalışılan yapı için R_{sh} değeri 10^2-10^6 Ωcm^2 arasında, R_s değeri ise 1-5 Ωcm^2 arasında değiştirilmiştir. Şekil 6.17.'de görüldüğü gibi, en yüksek *PCE* değeri (%4,53), R_{sh} =10^6 Ωcm^2 ve R_s =1 Ωcm^2 olduğunda elde edilmiştir. R_s değeri V_{oc} üzerinde etkisizken, R_{sh} =10^3 Ωcm^2 değerinden sonra etkisini yitirmektedir. R_{sh} değeri J_{sc} üzerinde etkisizken, R_s değeri etkin olmaktadır. Son olarak, düşük R_{sh} ve yüksek R_s değerlerinde *FF* değeri %56,95'e ulaşırken, tersi durumda önemli bir şekilde düşerek %41,55'e düşmektedir.

6.11. Optimum FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au Güneş Hücresinin Fotovoltaik Performansı



Şekil 6.18. FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin ilk ve optimize durumda akım-voltaj (J-V) grafiği

Şekil 6.18.'de FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin ilk ve optimize durumda akım-voltaj (J-V) grafiği verilmiştir. Son olarak, simülasyon sonuçları, Çizelge 6.1'de sunulan sabit değerlere sahip Cs_2PtI_6 tabanlı güneş hücresi optimize edilmiş parametreler kullanıldığında, *PCE* değerlerinin sırasıyla %1,55'den %4,86'ya çıkmıştır.



Şekil 6.19. FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin ilk ve optimize durumda quantum verimliliği (QE)-dalga boyu grafiği

Çizelge 6.3'den görüldüğü gibi, optimizasyonlardan sonra tüm fotovoltaik parametrelerin değeri artmıştır. V_{oc} değeri 0,3083'den 0,3359V'a, J_{sc} değeri 10,34'den 23,86 mA/cm^2'ye, *FF* değeri ise %48,48'den %60,63'e yükselmiştir. Oransal olarak en yüksek artış J_{sc} değerinde olmuştur. Şekil 6.19.'da FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin ilk ve son durumda quantum verimliliği (QE)-dalga boyu grafiği verilmiştir. Optimize edilen cihazın güşe ışığını absorbladığı bölgenin genişlediği ve QE'nin özellikle görünür bölgede yükseldiği görülmektedir. Bu grafiklerde belirtilen çizgilerin altında kalan bölgeler J_{sc} değerine eşit olduğundan, Şekil 6.18. ve 6.19.'daki sonuçların birbiri ile tutarlı olduğu görülmüştür.

Çizelge 6.3. FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au perovskit güneş hücresinin ilk ve son(optimize) durumda fotovoltaik parametreleri

Cihaz	V_{oc} (V)	J_{sc} (mA/cm^2)	FF (%)	PCE (%)
İlk	0.3083	10.34	48.48	1.55
Optimize	0.3359	23.86	60.63	4.86

Son olarak, Çizelge 6.4'de Cs-bazlı çift perovskit güneş hücrelerinin deneysel olarak elde edilen fotovoltaik performansları verilmiştir. Bu teorik çalışmada elde edilen sonuçların, deneysel sonuçlar(Exp) ile uyum içerisinde olduğu görülmüştür.

Çizelge 6.4. Cs bazlı perovskit güneş hücrelerinin kullanıldığı çalışmalar

Hücre Yapıları	V_{oc} (V)	J_{sc} (mA/cm	*FF* (%)	*PCE* (%)	Referans
ITO/SnO_2/Cs_2PtI_6/Spiro-OMeTAD/Au(Exp)	0.73	1.20	82	0.72	(Yang et al., 2020)
FTO/CdS/Cs_2PtI_6/C/Cu(Exp)	1.20	20.20	41.51	10.06	(Schwartz et al., 2020a)
FTO/CdS/Cs_2PtI_6 with EDA/C/Cu(Exp)	1.07	19.84	65.03	13.88	(Schwartz et al., 2020a)
Au/MoO_3/Cs_2TiBr_6/SnO_2/FTO	1.53	8.66	86.45	11.49	(Ahmed et al., 2021)
FTO/TiO_2/Cs_2TiBr_6/NiO/Au	1.12	10.25	73.59	8.51	(Samanta et al., 2020)
FTO/TiO_2/C_{60}/Cs_2TiBr_6/P_3HT/Au(Exp)	0.99	5.75	54.9	3.12	(M. Chen et al., 2018)

Çizelge 6.4. (devam) Cs bazlı perovskit güneş hücrelerinin kullanıldığı çalışmalar

FTO/TiO_2/Cs_2TiBr_6/P_3HT/Au(Exp)	0.89	3.87	59.5	2.15	(M. Chen et al., 2018)
FTO/CdS/Cs_2PtI_6/MoO_3/Cu	1.11	20.14	61	13.9	(AbdElAziz et al., 2022)
FTO/CdS/Cs_2PtI_6/Cu_2O/Cu	1.1	20.4	62	14.2	(AbdElAziz et al., 2022)
FTO/CdS/Cs_2PtI_6/CuI/Cu	1.12	20.13	60	13.7	(AbdElAziz et al., 2022)
FTO/ICZSO/Cs_2PtI_6/Cu_2O/C	1.13	22.2	59.2	14.8	(AbdElAziz et al., 2022)
FTO/ZnSe/Cs_2PtI_6/Cu_2O/C	1.12	22.3	58	14.7	(AbdElAziz et al., 2022)
FTO/WS_2/Cs_2PtI_6/Cu_2O/C	1.1	28.1	52.4	16.3	(AbdElAziz et al., 2022)
FTO/C_{60}/Cs_2PtI_6/GO/Au	0.3359	23.86	60.63	4.86	Bu çalışma

7. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışmada, SCAPS-1D simülasyon programı kullanılarak kurşunsuz çift halojenürlü perovskit güneş hücresinin verimliliğini arttırmaya yönelik teorik bir araştırma yapılmıştır. Perovskit güneş hücrelerinin performansı üzerindeki soğurucu katman kalınlığı ile ETL(Elektron Taşıma Katmanı) ve HTL(Delik Taşıma Katmanı) kalınlıklarının etkileri incelenmiştir. Sonuçlar, en iyi performansın soğurucu katman kalınlığının 0,4 μm, ETL kalınlığının 10 nm ve HTL kalınlığının 120 nm olduğu durumlarda elde edildiğini göstermektedir. Simülasyondan önceki *PCE* değeri %1,55 iken, katman kalınlıklarının değiştirilmesiyle *PCE* değeri %4,86'ya çıkmıştır. Aktif tabakadaki kusur seviyesi 10^{11}-10^{18} cm^{-3} aralığında değiştirildiğinde, kusurların sadece çok yüksek değerlerde (>10^{17} cm^{-3}) etkili olduğu ve öncesinde etkilerinin zayıf olduğu bulunmuştur. Çalışılan cihaz için, C_{60}/Cs_2PtI_6 arayüzündeki kusurların değiştirilmesi *PCE* üzerinde kayda değer bir farka neden olmazken, GO/Cs_2PtI_6 arayüzeyindeki kusur yoğunluğu 10^{15} cm^{-2}'e ulaştığında *PCE*'nin %3,20'ye düştüğü gözlemlenmiştir. Sıcaklık etkileri, 275-425 K arasında incelenmiş olup V_{oc}, *PCE*, *FF* değerlerinin sıcaklık arttıkça düştüğü gözlemlenmiştir. J_{sc}'nin sıcaklığa bağımlılığının 275-425 K aralığında zayıf olduğu, 375 K'den sonra bu parametrenin de sıcaklıkla düştüğü gözlemlenmiştir. Simüle edilen yapı için R_{sh} değeri 10^2-10^6 Ωcm^2 arasında, R_s değeri ise 1-5 Ωcm^2 arasında değiştirildiğinde, yüksek *PCE* değeri (%4,53), R_{sh} =10^6 Ωcm^2 ve R_s =1 Ωcm^2 olduğunda elde edilmiştir. Optimize edilmiş cihazın güneş ışığını emdiği bölge genişlemiş ve özellikle görünür bölgede QE (Kuantum Verimliliği) artmıştır. QE grafiklerindeki eğrilerin altında kalan alanlar J_{sc} değerine karşılık geldiği için, sonuçlar birbiriyle tutarlıdır. Simülasyon sonunda V_{oc}, J_{sc}, *FF* ve *PCE* sırasıyla 0,3359V, 23,86 mA/cm^2, %60,63 ve %4,86 olarak elde edilmiştir. Çalışılan yapının literatürdeki deneysel çalışmalarla da yakın sonuçlar verdiği gözlemlenmiştir.

KAYNAKLAR

AbdElAziz, H. H., Taha, M., El Rouby, W. M. A., Khedr, M. H., Saad, L. (2022). Evaluating the performance of Cs2PtI6−xBrx for photovoltaic and photocatalytic applications using first-principles study and SCAPS-1D simulation. *Heliyon*, 8(10). 61-67.

Ahmed, S., Jannat, F., Khan, M. A. K., Alim, M. A. (2021). Numerical development of eco-friendly Cs2TiBr6 based perovskite solar cell with all-inorganic charge transport materials via SCAPS-1D. *Optik*, 225, 165765.

Alanazi, T. I., Game, O. S., Smith, J. A., Kilbride, R. C., Greenland, C., Jayaprakash, R., Georgiou, K., Terrill, N. J., Lidzey, D. G. (2020). Potassium iodide reduces the stability of triple-cation perovskite solar cells. *RSC Advances*, 10(66). 110-123.

Amjad, A., Qamar, S., Zhao, C., Fatima, K., Sultan, M., Akhter, Z. (2023). Numerical simulation of lead-free vacancy ordered Cs2PtI6 based perovskite solar cell using SCAPS-1D. *RSC Advances*, 13(33), 23211–23222.

Asiva Noor Rachmayani. (2015). *SABU THOMAS, A. T. (2008). Peroveskite photovoltaics book. Экономика Региона,* 282.

Bhalla, A. S., Guo, R., Roy, R. (2000). The perovskite structure—a review of its role in ceramic science and technology. *Materials Research Innovations*, 4(1), 3–26.

Cao, Y., Zhu, X., Chen, H., Zhang, X., Zhouc, J., Hu, Z., Pang, J. (2019). Towards high efficiency inverted Sb2Se3 thin film solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 200, 109945.

Chang, S. Y., Cheng, P., Li, G., Yang, Y. (2018). Transparent Polymer Photovoltaics for Solar Energy Harvesting and Beyond. *In Joule* 2(6), 1039–1054.

Chebrolu, V. T., Kim, H.-J. (2019). Recent progress in quantum dot sensitized solar cells: an inclusive review of photoanode, sensitizer, electrolyte, and the counter electrode. *Journal of Materials Chemistry C*, 7(17), 4911–4933.

Chen, L. X. (2019). Organic Solar Cells: Recent Progress and Challenges. *ACS Energy Letters*, 4(10), 2537–2539.

Chen, M., Ju, M. G., Carl, A. D., Zong, Y., Grimm, R. L., Gu, J., Zeng, X. C., Zhou, Y., Padture, N. P. (2018). Cesium Titanium(IV) Bromide Thin Films Based Stable Lead-free Perovskite Solar Cells. *Joule*, 2(3), 558–570.

Correa-Baena, J.-P., Abate, A., Saliba, M., Tress, W., Jesper Jacobsson, T., Grätzel, M., Hagfeldt, A. (2017). The rapid evolution of highly efficient perovskite solar cells. *Energy & Environmental Science*, 10(3), 710–727.

Cotta, M. A. (2020). Quantum Dots and Their Applications: What Lies Ahead? *ACS Applied Nano Materials*, 3(6), 4920–4924.

Faizan, M., Bhamu, K. C., Murtaza, G., He, X., Kulhari, N., AL-Anazy, M. M., Khan, S. H. (2021). Electronic and optical properties of vacancy ordered double perovskites A2BX6 (A = Rb, Cs; B = Sn, Pd, Pt; and X = Cl, Br, I): a first principles study. *Scientific Reports*, 11(1), 6965.

Sharma, P., Kumar, A. (Editörler). (2022). *Recent Advances in Multifunctional Perovskite Materials,* Rijeka: IntechOpen.

Ghosh, R., Singh, A., Agarwal, P. (2023). Study on effect of different HTL and ETL materials on the perovskite solar cell performance with TCAD simulator. *Materials Today: Proceedings*.

Haider, S. Z., Anwar, H., Jamil, Y., Shahid, M. (2020). A comparative study of interface engineering with different hole transport materials for high-performance perovskite solar cells. *Journal of Physics and Chemistry of Solids,* 136, 109147.

Hauschild, D., Kreikemeyer-Lorenzo, D., Jackson, P., Friedlmeier, T. M., Hariskos, D., Reinert, F., Powalla, M., Heske, C., Weinhardt, L. (2017). Impact of a RbF Postdeposition Treatment on the Electronic Structure of the CdS/Cu(In,Ga)Se 2 Heterojunction in High-Efficiency Thin-Film Solar Cells. *ACS Energy Letters*, 2(10), 2383–2387.

He, T., Jiang, Y., Xing, X., Yuan, M. (2020). Structured Perovskite Light Absorbers for Efficient and Stable Photovoltaics. *Advanced Materials*, 32(26),90-105.

Hossain, M. K., Toki, G. F. I., Samajdar, D. P., Mushtaq, M., Rubel, M. H. K., Pandey, R., Madan, J., Mohammed, M. K. A., Islam, M. R., Rahman, M. F., Bencherif, H. (2023). Deep Insights into the Coupled Optoelectronic and Photovoltaic Analysis of Lead-Free CsSnI 3 Perovskite-Based Solar Cell Using DFT Calculations and SCAPS-1D Simulations. *ACS Omega*, 8(25), 22466–22485.

İnternet: The Use of UV/VIS/NIR Spectroscopy in the Development Of High Efficiency PV Solar Cells *URL: https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html*/ Son Erişim Tarihi: 02.12.2024.

Jeon, N. J., Noh, J. H., Kim, Y. C., Yang, W. S., Ryu, S., Seok, S. Il. (2014). Solvent engineering for high-performance inorganic-organic hybrid perovskite solar cells. *Nature Materials*, 13(9), 897–903.

Kant, N., Singh, P. (2022). Review of next generation photovoltaic solar cell technology and comparative materialistic development. *Materials Today: Proceedings*, 56, 3460–3470.

Kato, N., Higuchi, K., Tanaka, H., Nakajima, J., Sano, T., Toyoda, T. (2011). Long-term stability and degradation analysis of dye-sensitized solar cell for outdoor use. *R&D Review of Toyota CRDL*, 42(3), 53–62.

Khatun, M. M., Sunny, A., Ahmed, S. R. Al. (2021). Numerical investigation on performance improvement of WS2 thin-film solar cell with copper iodide as hole transport layer. *Solar Energy*, 224, 956–965.

Kumar, A., Singh, S. (2021). Computational simulation of metal doped lead-free double perovskite (Cs2AgBi0.75Sb0.25Br6) solar cell using solar cell capacitance simulator. *Materials Today: Proceedings*, 44, 2215–2222.

Kunzmann, A., Valero, S., Sepúlveda, Á. E., Rico-Santacruz, M., Lalinde, E., Berenguer, J. R., García-Martínez, J., Guldi, D. M., Serrano, E., Costa, R. D. (2018). Hybrid dye-titania nanoparticles for superior low-temperature dye-sensitized solar cells. *Advanced Energy Materials*, 8(12). 79-91.

Lakhdar, N., Hima, A. (2020). Electron transport material effect on performance of perovskite solar cells based on CH3NH3GeI3. *Optical Materials*, 99, 109517.

Miah, M. H., Khandaker, M. U., Rahman, M. B., Nur-E-Alam, M., Islam, M. A. (2024). Band gap tuning of perovskite solar cells for enhancing the efficiency and stability: issues and prospects. *RSC Advances*, 14(23), 15876–15906.

Mortadi, A., El Hafidi, E. M., Nasrellah, H., Monkade, M., El Moznine, R. (2024). Investigation of bandgap grading on performances of perovskite solar cell using SCAPS-1D and impedance spectroscopy. *Solar Energy Advances*, 4, 100056.

Nayak, P. K., Mahesh, S., Snaith, H. J., Cahen, D. (2019). Photovoltaic solar cell technologies: analysing the state of the art. *Nature Reviews Materials*, 4(4), 269–285.

Neamen, D. (2011). *Semiconductors Physics and Devices*. (4. Baskı). Crawfordsville: RR Donnelley, 242.

O'Donnell, K. P., Chen, X. (1991). Temperature dependence of semiconductor band gaps. *Applied Physics Letters*, 58(25), 2924–2926.

Oni, A. M., Mohsin, A. S. M., Rahman, M. M., Hossain Bhuian, M. B. (2024). A comprehensive evaluation of solar cell technologies, associated loss mechanisms, and efficiency enhancement strategies for photovoltaic cells. *Energy Reports*, 11, 3345–3366.

Ou, M., Qiu, L., Ding, C., Fan, W., Meng, X., Wang, J., Ling, Y., Huang, K., Liu, X., Huang, H., Wu, J., Niu, J. (2024). Dion-Jacobson perovskite solar cells: Further optimize the performance by SCAPS-1D simulation techniques. *Materials Today Communications*, 39(2103), 2960-2974.

Razy, M. Al, Niloy, A. B., Ahmed, S., Jannat, F., Anan, M. I., Datta, P. G., Mohsin, M., Abdul Alim, M. (2024). Performance prediction of perovskite solar cell integrated with lead-free cesium platinum Iodide (Cs2PtI6) absorber and CuInS2 quantum Dot as HTL. *Micro and Nanostructures*, 185, 207727.

Rehman, F., Syed, I. H., Khanam, S., Ijaz, S., Mehmood, H., Zubair, M., Massoud, Y., Mehmood, M. Q. (2023). Fourth-generation solar cells: a review. *Energy Advances*, 2(9), 1239–1262.

Riordan, M., Hoddeson, L. (1997). Origins of the pn junction. *IEEE Spectrum*, 34(6), 46–51.

Roy, A., Ghosh, A., Bhandari, S., Selvaraj, P., Sundaram, S., Mallick, T. K. (2019). Color Comfort Evaluation of Dye-Sensitized Solar Cell (DSSC) Based Building-Integrated Photovoltaic (BIPV) Glazing after 2 Years of Ambient Exposure. *Journal of Physical Chemistry C*, 123(39), 23834–23837.

Rühle, S. (2016). Tabulated values of the Shockley-Queisser limit for single junction solar cells. *Solar Energy*, 130, 139–147.

Saidarsan, A., Guruprasad, S., Malik, A., Basumatary, P., Ghosh, D. S. (2025). A critical review of unrealistic results in SCAPS-1D simulations: Causes, practical solutions and roadmap ahead. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 279, 113230.

Samanta, M., Ahmed, S. I., Chattopadhyay, K. K., Bose, C. (2020). Role of various transport layer and electrode materials in enhancing performance of stable environment-friendly Cs2TiBr6 solar cell. *Optik*, 217, 164805.

Schwartz, D., Murshed, R., Larson, H., Usprung, B., Soltanmohamad, S., Pandey, R., Barnard, E. S., Rockett, A., Hartmann, T., Castelli, I. E., Bansal, S. (2020a). Air stable, high-efficiency, pt-based halide perovskite solar cells with long carrier lifetimes. *Physica Status Solidi - Rapid Research Letters*, 14(8), 1–8.

Sekar, K., Marasamy, L., Mayarambakam, S., Hawashin, H., Nour, M., Bouclé, J. (2023). Lead-free, formamidinium germanium-antimony halide (FA 4 GeSbCl 12) double perovskite solar cells: the effects of band offsets. *RSC Advances*, 13(36), 25483–25496.

Shah, N., Shah, A. A., Leung, P. K., Khan, S., Sun, K., Zhu, X., & Liao, Q. (2023). A Review of Third Generation Solar Cells. *Processes*, 11(6). 237-260.

Shockley, W., Queisser, H. J. (1961). Detailed Balance Limit of Efficiency of p-n Junction Solar Cells. *Journal of Applied Physics*, 32(3), 510–519.

Sinsermsuksakul, P., Hartman, K., Bok Kim, S., Heo, J., Sun, L., Hejin Park, H., Chakraborty, R., Buonassisi, T., Gordon, R. G. (2013). Enhancing the efficiency of SnS solar cells via band-offset engineering with a zinc oxysulfide buffer layer. *Applied Physics Letters*, 102(5). 151-173.

Ullah, S., Alshahrani, T., Khan, F., Rasheed J., F. (2024). Investigating the potential of lead-free Cs2AgBiI6 and Cs2AgBiBr6 double perovskites for photovoltaic applications. *Materials Today Communications*, 38, 1–13.

Verschraegen, J., Burgelman, M. (2007). Numerical modeling of intra-band tunneling for heterojunction solar cells in scaps. *Thin Solid Films*, 515(15), 6276–6279.

Widianto, E., Shobih, Rosa, E. S., Triyana, K., Nursam, N. M., Santoso, I. (2021). Performance analysis of carbon-based perovskite solar cells by graphene oxide as hole transport layer: Experimental and numerical simulation. *Optical Materials*, 121, 111584.

Xia, S., Shi, H., Wang, Y., Diao, Y., Kan, C., Shi, D. (2023). Cesium modulated halide perovskites: A theoretical insight on the dynamic evolution, work function and band alignments. *Surfaces and Interfaces*, 38(29), 102791.

Yang, S., Wang, L., Zhao, S., Liu, A., Zhou, Y., Han, Q., Yu, F., Gao, L., Zhang, C., Ma, T. (2020). Novel Lead-Free Material Cs 2 PtI 6 with Narrow Bandgap and Ultra-Stability for Its Photovoltaic Application. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 12(40), 44700–44709.

Yi, Z., Ladi, N. H., Shai, X., Li, H., Shen, Y., Wang, M. (2019). Will organic-inorganic hybrid halide lead perovskites be eliminated from optoelectronic applications? *Nanoscale Advances*, 1(4), 1276–1289.

Yin, W.-J., Yang, J.-H., Kang, J., Yan, Y., Wei, S.-H. (2015). Halide perovskite materials for solar cells: a theoretical review. *Journal of Materials Chemistry A*, 3(17), 8926–8942.

Zhang, X., Santra, P. K., Tian, L., Johansson, M. B., Rensmo, H., Johansson, E. M. J. (2017). highly efficient flexible quantum dot solar cells with improved electron extraction using mgzno nanocrystals. *ACS Nano*, 11(8), 8478–8487.

Zhou, Y., Herz, L. M., Jen, A. K. Y., Saliba, M. (2022). Advances and challenges in understanding the microscopic structure–property–performance relationship in perovskite solar cells. *Nature Energy*, 7(9), 794–807.



Gazili olmak ayrıcalıktır