

**FARKLI PEROVSKİT GÜNEŞ GÖZELERİNİN  
VERİMLİLİĞİNİN SİMÜLASYONU VE  
KARŞILAŞTIRMASI**

**SIMULATING AND COMPARING THE EFFICIENCY OF  
DIFFERENT PEROVSKITE SOLAR CELLS**

**YAĞIZ DERELİ**

**PROF. DR. ŞULE ERGÜN**

**Tez Danışmanı**

Hacettepe Üniversitesi

Lisansüstü Eğitim-Öğretim ve Sınav Yönetmeliğinin

Temiz Tükenmez Enerjiler Anabilim Dalı için Öngördüğü

YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak hazırlanmıştır.



## ÖZET

# FARKLI PEROVSKİT GÜNEŞ GÖZELERİNİN VERİMLİLİĞİNİN SİMÜLASYONU VE KARŞILAŞTIRMASI

**Yağız DERELİ**

**Yüksek lisans, Temiz Tükenmez Enerjiler Ana Bilim Dalı**

**Tez Danışmanı: Prof. Dr. Şule ERGÜN**

**Ağustos 2023, 58 sayfa**

Perovskit güneş gözeleri, yüksek verimlilik, ucuz maliyet ve ayarlanabilir yapılar olması nedeni ile güneş gözelerinin gelişimi için yapılan araştırmalarda ilgi odağı haline gelmiştir. Perovskit güneş gözelerinin verimliliği, 2009'da bildirilen ve ilk ölçüm olan %3,8'den, 2022'de bildirilen ve son ölçümü olan %25,7'lik verime hızlı bir şekilde ulaşması nedeni ile verimlilik bazında en hızlı gelişen güneş enerjisi teknolojisi olmuştur. Geleneksel güneş paneli olarak bilinen silisyum tabanlı güneş gözelerini kullanan sistemler, günümüzde ticarileşmiş tek güneş panelli teknolojisidir. Perovskit güneş gözeleri henüz ticarileşmemiş olsa da gelecekte geleneksel güneş panellerinin yerini alma potansiyeli oldukça yüksektir. Bu potansiyele en hızlı şekilde ulaşabilmesi için çeşitliliği oldukça fazla olan perovskit malzemelerin, laboratuvar araştırmalarının yanı sıra simülasyon çalışmaları ile desteklenmesi gerekmektedir.

Bu arařtırmada, MAPbI<sub>3</sub>, MAPbBr<sub>3</sub> ve Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> olmak üzere üç farklı perovskit malzemenin OghmaNano (GPVDM) yazılımı yardımı ile literatürden belirlenen bir mimarideki davranıřları simüle edilmiřtir. İlk önce, yazılım varsayılanı olan 27 °C sıcaklıkta ve 100 – 700 nm arasındaki farklı kalınlıklarda incelenmiřtir. Daha sonra her bir perovskit için elde edilen optimum kalınlık deęerleri baz alınarak, -10 ile 70 °C arasındaki farklı sıcaklıklarda incelenilerek elde edilen verimlilik deęerleri literatüre kazandırılmıřtır.

**Anahtar Kelimeler:** Fotovoltaik Sistemler, Perovskit, OghmaNano, GPVDM, Simülasyon, Göze Verimlilięi

## **ABSTRACT**

# **SIMULATING AND COMPARING THE EFFICIENCY OF DIFFERENT PEROVSKITE SOLAR CELLS**

**Yağız DERELİ**

**Master of Science, Department of Renewable Energy**

**Supervisor: Prof. Dr. Şule ERGÜN**

**August 2023, 58 pages**

Perovskite solar cells have become the focus of interest in research for the development of solar cells due to their high efficiency, low cost, and adjustable structures. The perovskite solar cells have been the fastest-growing solar technology in terms of efficiency, which has been rapidly increased from 3.8% (reported in year 2009 for the first time) to 25.8% reported in 2023 as the recent measured value.

Systems using silicon-based solar cells, known as traditional solar panels, are the only commercialized solar panel technology today. Although perovskite solar cells have not yet been commercialized, they have a high potential to replace conventional solar panels in the future. In order to reach this potential as quickly as possible, perovskite materials, which have a wide variety, need to be researched by simulation studies as well as laboratory researches.

In this study, the behavior of three different perovskite materials, MAPbI<sub>3</sub>, MAPbBr<sub>3</sub>, and Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> in an architecture determined from the literature was simulated with the help of OghmaNano (GPVDM) software. It was first studied at a temperature of 27 °C which is the software default, and at different thicknesses between 100 and 700 nm. Then, based on the optimum thickness values obtained for each perovskite material, the efficiency values obtained by examining different temperatures between -10 and 70 °C.

**Keywords:** Photovoltaic Systems, Perovskite, OghmaNano, GPVDM, Simulation, Cell Efficiency

## TEŐEKKÜR

Tez alıřma s¼recim boyunca, g¼z¼mde b¼y¼yen her Őeyi kolaylıkla aŐabileceđime beni inandıran, karŐılaŐtıđım kiŐisel sorunları ¼z¼ene kadar sabır ve anlayıŐ ile bekleyip azimle sonuca ulaŐmama olanak sađlayan, dođruya giden yolda rehberliđini hi esirgemeyen, g¼ler y¼zli¼ tez danıŐmanım Sayın Prof. Dr. Őule ERG¼N'e,

Hem tez alıŐmama baŐlarken hem de araŐtırma s¼recim boyunca ¼nerileri ve y¼nlendirmeleri ile beni aydınlatan, tez danıŐmanım Sayın Prof. Dr. Őule ERG¼N ile tanışmamıza vesile olan Sayın Prof. Dr. Akın BACIOđLU'na,

Bu uzun ve yorucu yolculukta motivasyonumu kaybetmeden ilerlememe yardım eden dostlarım Yađız Berk AKTAŐ ve Beg¼m TEKİN'e,

Eđitim ve ¼đretim hayatım boyunca maddi, manevi her zaman ve her koŐulda yanımda olan ve de olmaya devam edeceklerinden emin olduđum annem, babam ve abime,

Sonsuz TeŐekk¼rlerimi Sunarım...

Yađız DERELİ

Ađustos 2023, Ankara

# İÇİNDEKİLER

ÖZET .....	i
ABSTRACT .....	iii
TEŞEKKÜR.....	v
İÇİNDEKİLER .....	vi
ŞEKİLLER DİZİNİ .....	viii
ÇİZELGELER DİZİNİ.....	ix
SİMGELER VE KISALTMALAR .....	x
1. GİRİŞ.....	1
1.1. Mevcut Sorun .....	2
1.2. Tezin Amacı ve Hedefi .....	3
1.3. Tezin Yapısı.....	3
1.4. Literatür Taraması.....	4
2. PEROVSKİT GÜNEŞ GÖZELERİ .....	7
2.1. Perovskit Minerali ve Tarihçesi.....	7
2.2. Güneş Gözelerinde Perovskit Malzemelerin Önemi .....	9
2.3. Perovskit İnce Film Üretim Yöntemleri.....	12
2.4. Perovskit Gözelerin Mimarisi.....	13
2.4.1. Mezogözenekli Mimari .....	13
2.4.2. Düzlemsel mimari .....	14
2.4.3. ETM bulundurmayan mimari .....	14
2.4.4. HTM bulundurmayan mimari .....	14
3. PEROVSKİT GÜNEŞ GÖZELERİNİN MODELLENMESİ VE SİMÜLASYONU	15
3.1. OghmaNano Yazılımı .....	15
3.2. Modellemenin Parametreleri .....	17
3.3. Perovskit Gözelerin Simülasyonu.....	19
4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA.....	21



4.1. MAPbI <sub>3</sub> .....	21
4.2. MAPbBr <sub>3</sub> .....	24
4.3. Cs <sub>2</sub> AgBiBr <sub>6</sub> .....	27
4.4. Kıyaslama.....	29
4.4.1. Verimlilik - Kalınlık.....	29
4.4.2. Verimlilik - Sıcaklık.....	31
4.4.3. Doluluk Oranı – Kalınlık.....	33
4.4.4. Doluluk Oranı – Sıcaklık.....	34
4.5. Duyarlılık Analizi .....	35
4.6. Yorum .....	36
6. KAYNAKLAR .....	38
EKLER .....	44
EK 1 – Dalga Boyuna Bağlı Kırılma İndisi ve Soğurma Grafikleri .....	44
EK 2 – Her Malzemenin Her Kalınlığına Ait Akım-Voltaj ve Akım Yoğunluğu – Voltaj Grafikleri.....	49

## ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 1. ABX <sub>3</sub> Kristal Yapısı [19].....	8
Şekil 2. Metilamonyum Halojenür Kristal Yapısı [19] .....	8
Şekil 3. Silisyum Güneş Gözelerinde Verimliliğin Tarihsel Gelişimi (Göze verimliliği (%) -Yıl) [20].....	10
Şekil 4. Perovskit Güneş Gözelerinde Verimliliğin Tarihsel Gelişimi (Göze verimliliği (%) -Yıl) [20].....	11
Şekil 5. Mezogözenekli Perovskit Güneş Gözesi Mimarileri [27] .....	13
Şekil 6. Düzlemsel Perovskit Güneş Gözesi Mimarileri [27].....	14
Şekil 7. Modellemeye Ait Mimari Görüntüsü [37].....	17
Şekil 8. MAPbI <sub>3</sub> Göze Katman Yapısı [37].....	17
Şekil 9. MAPbBr <sub>3</sub> Göze Katman Yapısı [37] .....	18
Şekil 10. Cs <sub>2</sub> AgBiBr <sub>6</sub> Göze Katman Yapısı [37].....	18
Şekil 11. Kalınlığa Bağlı Fotovoltaik Göze Verimlilikleri.....	31
Şekil 12. Sıcaklığa Bağlı Fotovoltaik Göze Verimlilikleri.....	32
Şekil 13. Kalınlığa Bağlı Doluluk Oranı (FF) Değerleri.....	34
Şekil 14. Sıcaklığa Bağlı Doluluk Oranı (FF) Değerleri.....	35
Şekil 15. AM1.5 Değeri İçin Güneş Işınımı - Dalga Boyu Grafiği [42].....	45
Şekil 16. MAPbI <sub>3</sub> Soğurma Katsayısı - Dalga Boyu Grafiği [45] .....	45
Şekil 17. MAPbI <sub>3</sub> Kırılma İndisi - Dalga Boyu Grafiği [45] .....	46
Şekil 18. MAPbBr <sub>3</sub> Soğurma Katsayısı - Dalga Boyu Grafiği [46] .....	46
Şekil 19. MAPbBr <sub>3</sub> Kırılma İndisi - Dalga Boyu Grafiği [46].....	47
Şekil 20. Cs <sub>2</sub> AgBiBr <sub>6</sub> Soğurma Katsayısı - Dalga Boyu Grafiği [47].....	47
Şekil 21. Cs <sub>2</sub> AgBiBr <sub>6</sub> Kırılma İndisi - Dalga Boyu Grafiği [47] .....	48

## ÇİZELGELER DİZİNİ

<b>Çizelge 1.</b> Modellemede Kullanılan Elektriksel Parametreler [37,38,39,40].....	18
<b>Çizelge 2.</b> MAPbI <sub>3</sub> İçin Kalınlığa Bağlı Elektriksel Parametreler .....	21
<b>Çizelge 3.</b> MAPbI <sub>3</sub> İçin Sıcaklığa Bağlı Elektriksel Parametreler .....	23
<b>Çizelge 4.</b> MAPbBr <sub>3</sub> İçin Kalınlığa Bağlı Elektriksel Parametreler .....	24
<b>Çizelge 5.</b> MAPbBr <sub>3</sub> İçin Sıcaklığa Bağlı Elektriksel Parametreler .....	25
<b>Çizelge 6.</b> Cs <sub>2</sub> AgBiBr <sub>6</sub> İçin Kalınlığa Bağlı Elektriksel Parametreler .....	27
<b>Çizelge 7.</b> Cs <sub>2</sub> AgBiBr <sub>6</sub> İçin Sıcaklığa Bağlı Elektriksel Parametreler .....	28
<b>Çizelge 8.</b> Boşluk mobilitesi – Verimlilik Değerleri .....	36
<b>Çizelge 9.</b> MAPbI <sub>3</sub> İçin Her kalınlığa Ait Akım-Voltaj ve Akım Yoğunluğu-Voltaj Grafikleri [37] .....	50
<b>Çizelge 10.</b> MAPbBr <sub>3</sub> İçin Her kalınlığa Ait Akım-Voltaj ve Akım Yoğunluğu-Voltaj Grafikleri [37] .....	52
<b>Çizelge 11.</b> Cs <sub>2</sub> AgBrBi <sub>6</sub> İçin Her kalınlığa Ait Akım-Voltaj ve Akım Yoğunluğu-Voltaj Grafikleri [37] .....	55

## SİMGELER VE KISALTMALAR

### Simgeler

K	Kelvin derece
$V_{OC}$	Açık devre voltajı
$J_{SC}$	Kısa devre akım yoğunluğu
$V_{MPP}$	Maksimum güç noktası voltajı
$J_{MPP}$	Maksimum güç noktası akımı yoğunluğu
$\chi$	Elektron ilgisi
$E_g$	Bant aralığı
$\epsilon_0$	Serbest alanın geçirgenliği
$\epsilon_r$	Görelî geçirgenlik
q	Temel elektron yükü
n	Serbest elektron yoğunluğu
p	Serbest boşluk yoğunluğu
$J_n$	Elektron akı yoğunluğu
$J_p$	Boşluk akı yoğunluğu
$\mu_e$	Elektron mobilitesi
$\mu_h$	Boşluk mobilitesi
$E_e$	Elektron mobilite sınırı
$E_v$	Boşluk mobilite sınırı
$D_n$	Elektron difüzyon sabiti
$D_p$	Boşluk difüzyon sabiti
$R_n$	Elektron için net rekombinasyon oranı
$R_p$	Boşluk için net rekombinasyon oranı

G	Serbest taşıyıcı üretim oranı
$\phi$	Voltaj Profili

### **Kısaltmalar**

PCE	Güç dönüşüm verimliliği (Power conversion efficiency)
MA	Metilamonyum
NREL	Ulusal Yenilenebilir Enerji Laboratuvarı (National Renewable Energy Laboratory)
UV	Ultraviyole
n-i-p	Negatif – içsel – pozitif
p-i-n	Pozitif – içsel – negatif
ETM	Elektron transfer malzemesi
HTM	Hole transfer malzemesi
GPVDM	Genel amaçlı fotovoltaik cihaz modeli (General-purpose Photovoltaic Device Model)
OghmaNano	Organik ve Hibrit Malzeme Nano Simülasyon aracı (Organic and Hybrid Material Nano Simulation tool)
AM	Hava kütlesi (Air Mass)
FF	Doluluk oranı (Fill factor)
OLED	Organik ışık yayan diyot (Organic light-emitting diode)
OFET	Organik alan etkili transistör (Organic field-effect transistor)



# 1. GİRİŞ

Enerji, varoluşumuzdan bu yana bizimledir ve insanlık ateşin keşfi ile enerjinin kontrol edilebileceğinin farkına varmıştır. Ateşin keşfinden bu yana enerji yönetimi konusunda kendini geliştiren insanlık, enerjiyi temel ihtiyaçlarından birisi haline getirmiştir. Özellikle sanayi devriminden bu yana insanlık, enerjiden fayda sağlama konusunda büyük gelişmelere imza atmıştır [1].

İnsanlık hem sanayi devriminin öncesinde hem de sonrasında bu yana enerji talebini karşılamak için ağırlıklı olarak fosil yakıtları kullanmıştır. Fosil yakıtlar, geçmişte yaşamış canlı organizmaların kalıntılarından oluşan doğal kaynaklardır. Petrol, kömür ve doğal gaz fosil yakıtların başta gelen örnekleridir. Bu kaynaklar, enerji elde etmek için yakılırlar. Ancak bu yakılma işleminin, sera gazlarının ( $CO_2$ ,  $SO_2$ ,  $NO_x$ ) salınmasında ve dolayısıyla küresel ısınma, iklim değişikliği gibi sorunların ortaya çıkmasındaki payı çok büyüktür [2].

İnsanlığın enerji talebinin hem nüfus hem de teknoloji ile birlikte devamlı artıyor olması, fosil yakıtların sonsuz kaynaklar olmaması ve olsa dahi gezegenimiz için oluşturduğu tehdidin farkına varılması sebebiyle insanlık, alternatif enerji kaynaklarını araştırmaya yönelmiştir. Bu araştırmalar sonucunda da yenilenebilir enerji kaynaklarının günümüz enerji problemlerini çözebilme potansiyelinin farkına varılmıştır [3].

Yenilenebilir enerji kaynaklarının öneminin farkına varılmasıyla birlikte, hükümetler, şirketler ve diğer farklı kurum ve kuruluşlar, çeşitli temiz ve yenilenebilir enerji kaynaklarına yönelmeye başlamıştır. Rüzgâr, hidroelektrik, jeotermal, biyokütle ve güneş enerjisi günümüzde bilinen ve yaygın olarak kullanılan yenilenebilir enerji kaynaklarıdır. Bu kaynakların tamamı sürdürülebilir ve temiz enerji kaynaklarıdır. Ancak, sahip olduğumuz güneş ışığının miktarı ve sürekliliği dikkate alındığında, güneş enerjisi, diğer yenilenebilir kaynaklara göre çok daha önemli görünmektedir. Güneş enerjisinin bu bariz potansiyeli, elektrik üretimi, çevresel, ekonomik ve politik zorluklar gibi sorunları çözebilecek niteliktedir [4].

Güneş enerjisinden faydalanmak üzere tasarlanan cihaza “güneş gözesi (fotovoltaik göze)” adı verilmiştir. Güneş gözesi, güneş ışığının enerjisini fotovoltaik (PV) etkiyi kullanarak elektrik gücüne dönüştüren bir cihazdır. Bu etki basitçe betimlenecek olursa;

belirli bir bant aralığı enerjisine sahip, ışığı soğurabilen yarıiletken malzemelerden oluşan güneş gözeleri, güneşten gelen ışın enerjisinin bir kısmını bu yarıiletken malzemeler yardımı ile soğurur. Soğurulan bu enerji, yarıiletken malzemeleri teşvik ederek elektron alışverişinde bulunmalarını sağlar. Bu elektron alışverişi sayesinde de gözede bir elektrik akımı oluşur. Bir güneş gözesinin temel ölçüsü, gelen güneş ışığının enerjisinin güneş gözesinde üretilen enerjiye oranı ile belirtilen, güç dönüşüm verimliliğidir (PCE) [5].

En basit sayılabilecek gözeler olan tek eklemli güneş gözelerinde ideal koşullardaki maksimum teorik güç dönüşüm verimliliği, Shockley–Queisser limiti olarak bilinen %33,7 olarak kabul görmüştür. Bu limit bize güneş gözelerinin günümüzde hangi noktada olduğu ve daha ne kadar geliştirilebileceği hakkında fikir vermektedir. Ancak güneş enerjisi halen bu potansiyelinin çok altında kullanılmaktadır [1,6].

Günümüzde, korozyon direnci, toksik olmaması, uzun vadeli dayanıklılığı ve ışığa duyarlılığı nedeniyle fotovoltaik teknolojilerinde en yaygın kullanıma sahip yarıiletken malzeme silisyumdur. Ayrıca oksijenden sonra dünyada en çok bulunan elementtir. Buna rağmen silisyum bazlı güneş gözelerinin verimlilik maliyeti (\$/Watt) yüksektir. Bu nedenle, araştırmacılar kendilerini yeni malzeme türlerini keşfetmeye ve üretmeye adanmıştır [7]

Araştırmalar sonucunda silisyum malzemenin yerini alma potansiyeli en yüksek malzemelerden birinin perovskit malzemeler olduğu tespit edilmiştir. A ve B'nin birer katyon ve X'in her ikisine de bağlanan bir anyon olduğu  $ABX_3$  kristal yapısına sahip malzemelerin tümünü kapsayan perovskit, silisyum gibi doğada bol miktarda bulunabilirliği ve kristal yapısını oluşturan elementlerin çeşitliliği sayesinde farklı talepleri karşılama potansiyeli ile araştırmacıların fotovoltaik çalışmalardaki gözdesi haline gelmiştir. [8,9]

## **1.1. Mevcut Sorun**

Fotovoltaik araştırmaların yeni gözdesi perovskit malzemeler, çeşitliliği sayesinde çok yönlü kullanım alanına sahip olsalar da bu çeşitlilik aynı zamanda kargaşayı da beraberinde getirmektedir. Fotovoltaik sistemlerden örnek verilecek olursa; çalışılmak istenilen perovskit malzemenin seçiminin yapılabilmesi için o malzemenin çeşitli koşullardaki davranışı, karakteristik yapısı, çevresel faktörlerden etkilenme şekli, çevre kirliliğine etkisi, maliyeti, dönüşüm verimliliği ve bunun gibi birçok alanda



arařtırmalarının yapılması gerekmektedir. Güneř gözelerinin temel ölçüsü olan güç dönüşüm verimliliğinin incelenmesi bu konuda birincil önceliktir.

Gelecekte yapılacak fotovoltaik çalışmalarda çok çeřitli biçimlerde bulunabilen perovskit malzemelerin seçiminin daha doğru yapılabilmesi için perovskit malzemelerin kendi içinde kıyaslamalarının yapılması ve davranışlarının daha iyi anlaşılması büyük önem arz etmektedir.

## **1.2. Tezin Amacı ve Hedefi**

Perovskit malzemelerin çeřitliliğini avantaj haline getirebilmek, bu konuda olabildiğince çok araştırma yapılmasından geçmektedir. Günümüzde perovskit malzemelerin fotovoltaik gözelerde kullanımını destekleyici nitelikte arařtırmalara sıkça rastlanırken bu arařtırmaların birçoğunun laboratuvar ortamında geliştirilen sistemler üzerinde yapılmış olduđu görülmektedir. Laboratuvar verileri, gerçeğe yakın, güvenilirliğı yüksek veriler elde etmemizde en iyi yöntem olarak görülse de arařtırılan konu birçok varyasyonu bulunan perovskit malzemeler olunca, uzun araştırma süreci kaçınılmaz olacaktır. Perovskit malzemelerin fotovoltaik uygulamalardaki yerinin en kısa zamanda belirlenmesi için laboratuvar arařtırmalarının simülasyon çalışmaları ile desteklenmesi gerekmektedir. Böylece laboratuvar arařtırmalarının yönelimi daha isabetli bir hale gelip perovskit malzemeleri araştırma sürecini hızlandıracaktır.

Bu doğrultuda, perovskit malzemelerin fotovoltaik çalışmalardaki yerini almasına katkı sağlamak amacı ile, OghmaNano (GPVDM) yazılımı yardımı ile  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  (Metilamonyum kurşun iyodür),  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$  (metilamonyum kurşun bromür),  $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$  (Çift perovskit) olmak üzere üç çeřit perovskit malzemenin belirli bir mimarideki verimlilikleri incelenip, kıyaslaması yapılarak literatüre kazandırılması hedeflenmiştir.

## **1.3. Tezin Yapısı**

Çalışmanın ilk bölümünde konu ile ilgili genel bilgi, mevcut sorun, çalışmanın amacı ve hedefleri hakkında bilgiler verilmiştir.

İkinci bölümde, perovskit mineralinin tarihçesi, perovskit malzemelerin yapısı, önemi, fotovoltaik teknolojilerdeki yeri, fabrikasyon yöntemleri ve perovskit güneş gözesi mimarileri hakkında genel bilgi verilmiştir.

Üçüncü bölümde, perovskit güneş gözeleri için kullanılabilen simülasyon uygulamaları hakkında bilgiler sunulmuş ve araştırmada kullanılan OghmaNano yazılımından, modellemede kullanılan denklemlerden, parametrelerden ve simülasyon yöntemlerinden bahsedilmiştir.

Dördüncü bölümde, simülasyon sonucunda elde edilen kalınlık ve sıcaklığa bağlı veriler her perovskit için ayrı ayrı incelenmiştir. Daha sonra kıyaslamaları yapılarak değerlendirilmiştir. Araştırmanın literatüre katkıları yorumlanarak ileri çalışmalar için önerilerde bulunulmuştur.

#### **1.4. Literatür Taraması**

Araştırmanın başında, farklı ince film üretim teknikleri ile üretilen perovskit malzemelerin bir perovskit güneş gözesinde kullanılması sonucu elektriksel dönüşüm verimliliklerinde oluşabilecek farklılıkların incelenmesi ve kıyaslanması hedeflenmiştir. Çalışmada, aynı mimarideki perovskit güneş gözelerinin sadece perovskit katmanlarındaki farklılıkların verimliliğe etkisinin incelenmesi planlanmıştır. Literatürde, her biri farklı ince film üretim tekniğini kullanan, perovskit gözeleri ele alan araştırmaları tespit edilmiş, ancak araştırmalardaki göze mimarisindeki farklılıklar ve OghmaNano (GPVDM) yazılımı için model oluşturabilecek parametrelerin eksikliği nedeniyle araştırılması hedeflenen konunun literatürden elde edilecek verilerle sonuçlandırılmayacağı belirlenmiştir. Ayrıca hedeflenen çalışmanın yapılabilmesi için laboratuvar desteğine ihtiyaç olduğu belirlenmiştir. Bu sebeple bu çalışmada, literatür taraması genişletilerek yine kıyaslama amacı güden benzer bir araştırma konusuna yönelinmiştir.

Literatür taraması sonucu aşağıdaki gibi özetlenebilir:

- R. Yasodharan araştırmasında, tanımladığı perovskit (MAPI) bir güneş gözesinde perovskit katman kalınlığının gözedeki elektriksel dönüşüm verimliliğini nasıl etkilediğini, OghmaNano (GPVDM) yazılımını ve kütüphanesini kullanarak, incelemiştir. Yazılımda kullandığı parametreleri tablo halinde sunmuştur [10].

- Muhammad Sadiq araştırmasında, maksimum elektriksel iletim amacıyla dört katmandan oluşan bir elektron transfer katmanı kullanmıştır. Daha sonra OghmaNano (GPVDM) yazılımı yardımı ile hem perovskit katmanının hem de elektron transfer katmanını oluşturan dört malzemeden her birinin kalınlığındaki değişimlerin, sistemin elektriksel dönüşüm verimliliğine etkilerini incelemiştir. Aynı zamanda optimum kabul ettiği kalınlıkları kullanarak farklı sıcaklıklardaki verimlilik değişimini gözlemlemiştir. Ayrıca, yazılımda kullandığı perovskite katmana ait elektriksel parametreleri tablo halinde sunmuştur [11].
- Abdel-Baset H. Mekky araştırmasında, bir perovskit güneş gözesinde kullanılmak üzere seçtiği beş farklı elektron transfer malzemesinin, gözenin elektriksel dönüşüm verimliliğinde oluşturduğu değişimleri OghmaNano (GPVDM) yazılımı ile incelemiştir. Ayrıca akım, voltaj, doluluk oranı ve dönüşüm verimliliği gibi değerlerin farklı ışık yoğunluklarındaki değişimini de incelemiştir. Ancak yazılımda kullandığı parametreleri paylaşmamıştır [12].
- Michael Pham araştırmasında, toksisite sorununu ele alarak, gelenekselleşmiş, yapısında kurşun elementi barındıran  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  yerine bizmut temelli  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{BiI}_3$  kullanarak, OghmaNano (GPVDM) yazılımı ile elektriksel dönüşüm verimliliğindeki değişimi malzeme kalınlığına bağlı olarak incelemiştir ve bu iki perovskit malzemeyi kıyaslamıştır. Ayrıca yazılımda kullandığı elektriksel parametreleri tablo halinde sunmuştur [13].
- A. Monsur araştırmasında, seçtiği bir mimaride oluşturduğu perovskit güneş gözesinin her bir katmanının kalınlığının elektriksel dönüşüm verimliliğine etkisini OghmaNano (GPVDM) yazılımı ile incelemiş, tespit ettiği optimum kalınlıkları kullanarak oluşturduğu güneş gözesinin verimliliğinin %31.2'ye kadar ulaştığını gözlemlemiştir [14].
- Amrit Kumar Mishra araştırmasında, günümüzde en iyi enerji üretimi sağlayan teknolojilerden biri olan güneş panelleri için perovskit malzemenin kullanılmaya başlanmasının ne kadar heyecan verici bir gelişme olduğunu vurgulamış, seçtiği perovskit göze mimarisinin farklı perovskit katman kalınlıklarındaki elektriksel dönüşüm verimliliğini OghmaNano (GPVDM) yazılımı yardımı ile incelemiştir. Simülasyon için kullandığı katman kalınlıkları ve elektriksel parametreleri tablolar ile sunmuştur [15].

- Komal Kumari arařtırmasında, toksisite sorununun önüne geçmek amacı ile kurşun elementi barındırmayan toplamda dört farklı malzeme olmak üzere, bizmut ferrit ( $\text{BiFeO}_3$ ) ve bunun titanyum, nikel ve kadmiyum ile katkılanmış versiyonlarını kullanmayı tercih etmiştir. Her bir perovskit malzemenin üretimini spin, daldırma ve sprey kaplama tekniklerini kullanarak ayrı ayrı yapmıştır. Daha sonra bu malzemeler ile OghmaNano (GPVDM) yazılımında oluşturduğu perovskit güneş göze simülasyonlarında performans analizini yapmıştır [16].

Literatürden elde edilen bu bilgiler ışığında OghmaNano (GPVDM) yazılımı kullanılarak çeşitli perovskit göze simülasyonları hazırlamanın mümkün olduğu anlaşılmıştır. Bu nedenle, literatürde sıkça bahsi geçen  $\text{MAPbI}_3$ ,  $\text{MAPbBr}_3$  ve  $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$  olmak üzere üç farklı perovskit malzemenin, belirlenecek bir mimaride, önce farklı kalınlıklarda, daha sonra her bir perovskit için elde edilen optimum kalınlık değerleri baz alınarak farklı sıcaklıklarda incelenmesi ve kendi aralarındaki kıyaslamalarının yapılması karar alınmıştır.

## 2. PEROVSKİT GÜNEŞ GÖZELERİ

### 2.1. Perovskit Minerali ve Tarihçesi

Perovskit, 1839 yılında, Ural Dağları'nda, Alman mineralojist Gustav Rose tarafından keşfedilmiştir. Ancak bu alandaki araştırmaları ileriye taşıyan Rus mineralojist Lev Perovski'nin adını almıştır. Esasında kalsiyum, titanyum ve oksijen elementlerinden oluşan bir bileşiktir ve doğada bol bulunur. Bu bileşik  $ABX_3$  kristal yapısına sahiptir ve bu kristal yapısına sahip bütün bileşikler “perovskit” olarak anılmaktadır [17].

A ve B'nin birer katyon ve X'in her ikisine de bağlanan bir anyon olduğu ideal  $ABX_3$  yapısı Şekil 1'de betimlenen bir kristal yapıdır. Bu yapıya sahip perovskit malzemelere örnekler [18];

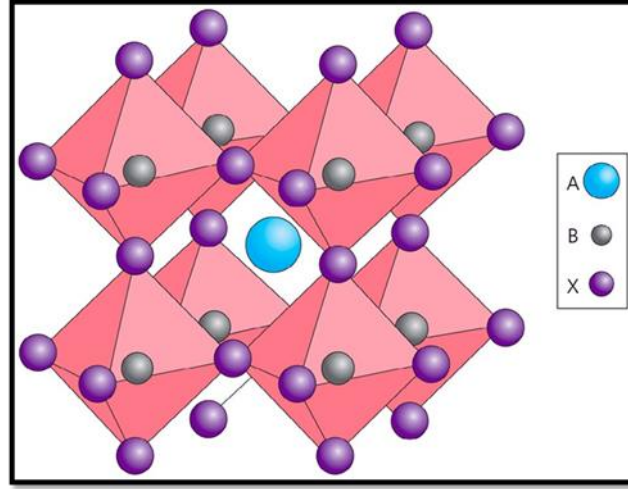
- Stronsiyum titanat (**SrTiO<sub>3</sub>**),
- Kalsiyum titanat (**CaTiO<sub>3</sub>**),
- Kurşun titanat (**PbTiO<sub>3</sub>**),
- Bizmut ferrit (**BiFeO<sub>3</sub>**),
- Silikat perovskit (**(Mg,Fe,Ca)SiO<sub>3</sub>**),
- Lantan manganit (**LaMnO<sub>3</sub>**),

Şeklinde sıralanabilir ve bu sadece küçük bir kesimdir. Çünkü perovskit malzemeler, insan müdahalesi ile de şekillendirilebilen malzemelerdir. Bu nedenle de çeşitliliği fazladır.

Bu örneklerin  $ABX_3$  yapısında temsil ettikleri elementler;

- **A:** Sr, Ca, Pb, Bi, Mg, Fe, Ca, La,
- **B:** Ti, Fe, Si, Mn,
- **X<sub>3</sub>:** O<sub>3</sub>

Şeklinde dir.

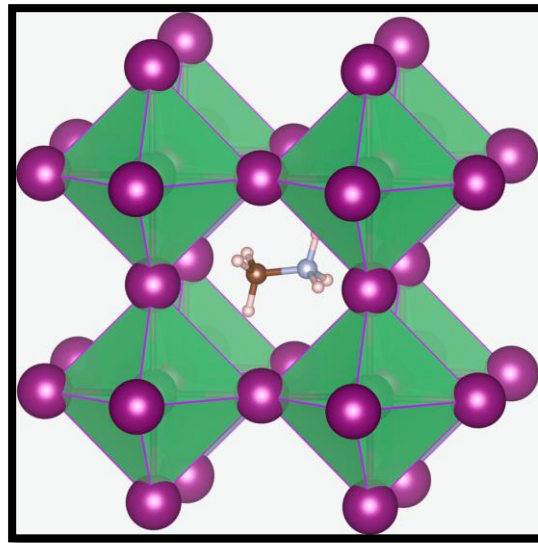


Şekil 1.  $ABX_3$  Kristal Yapısı [19]

1978 yılında A elementini organik bir iyon olan metilamonyum ( $CH_3NH_3$  veya MA) ile değiştiren Dieter Weber, hibrit organik-inorganik perovskit malzemeleri keşfetmiştir. Günümüzde fotovoltaik uygulamalarda en çok görülen perovskit çeşidi olan metilamonyum halojenürlere örnekler [19];

- Metilamonyum Kurşun İyodür ( $MAPbI_3$ ),
- Metilamonyum Kurşun Bromür ( $MAPbBr_3$ ),

Şeklindedir. Bu perovskit malzemelerin kristal yapısı ise Şekil 2’de betimlenmiştir.



Şekil 2. Metilamonyum Halojenür Kristal Yapısı [19]

## 2.2. Güneş Gözelerinde Perovskit Malzemelerin Önemi

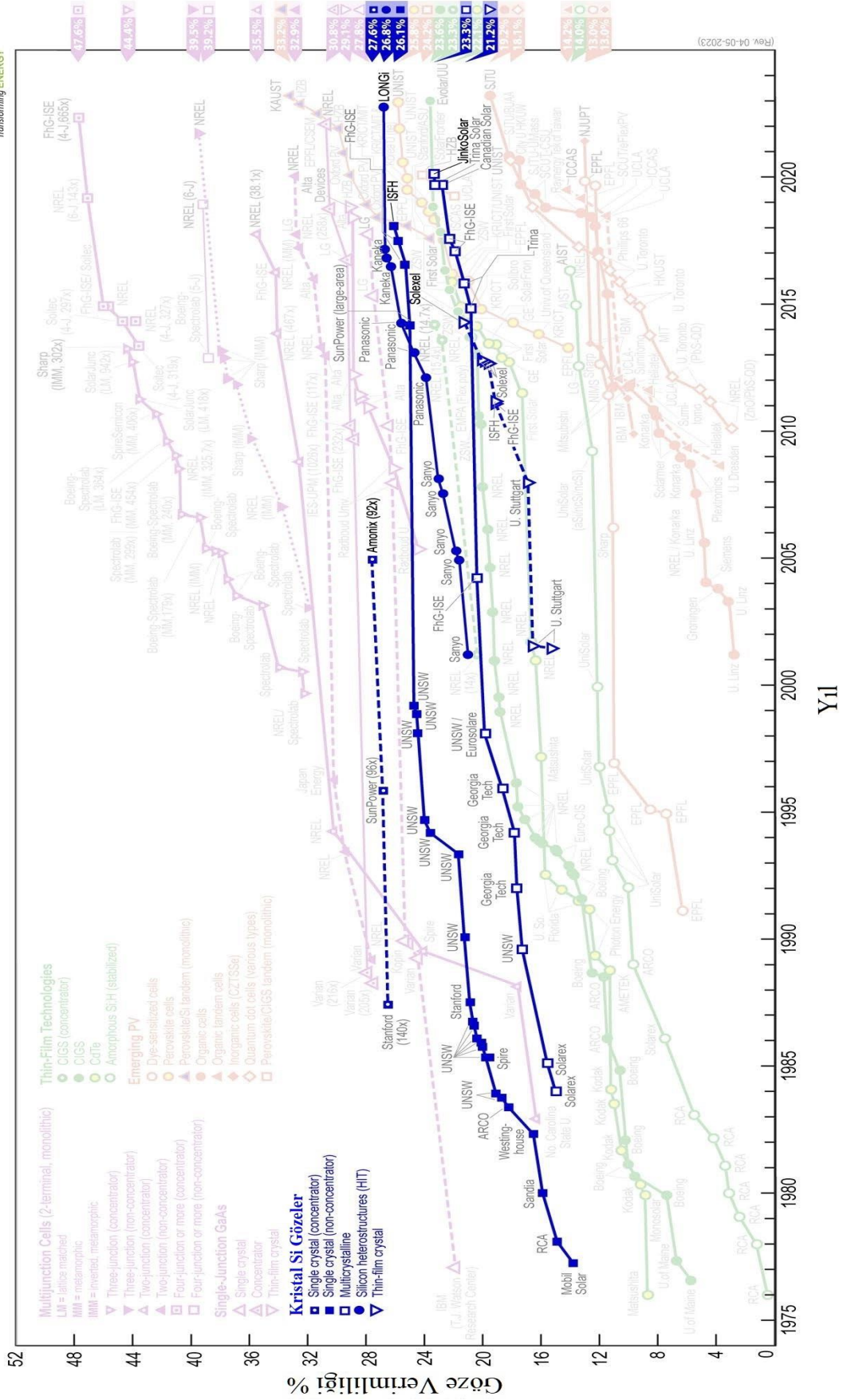
1950'lerde hayatımıza gerçek anlamda girmeye başlayan silisyum tabanlı tek eklemlili güneş gözelerinin, yıllar süren arařtırmalar sonucu ulařılan, günümüzdeki maksimum verimlilięi, Ulusal Yenilenebilir Enerji Laboratuvarı (NREL)'in verilerine göre %26,1'dir (řekil 3) [20].

Perovskit gözelerin tarihsel gelişimine bakılırsa; 2009'da Tsutomu Miyasaka ve arařtırma ortakları tarafından geliştirilen ilk perovskit bazlı güneş gözesinin maksimum verimlilięi %3,8 olarak hesaplanmıřtır [21]. 2009'dan günümüze bu deęer NREL'in verilerine göre günümüzde %25,8'e ulařmıřtır (řekil 4) [20]. Yani, silisyum gözelerin 70 yıl gibi bir sürede aldığı yolu 14 yılda alarak silisyum gözeler ile neredeyse aynı verimlilięe ulařılmıřtır. Silisyum gözelerle kıyasla bu kadar kısa süre içerisinde bu kadar büyük bir gelişim göstermiř olması ve de verimlilik anlamında silisyum gözelerle yarışabilecek düzeye gelmesi, perovskit malzemelerin güneş gözelerinde kullanımının önemini vurgulamıřtır.

Perovskit malzemeler doğada bol bulunması ve fabrikasyonu kolay olması nedeniyle silisyuma kıyasla düşük maliyetli malzemelerdir. Buna rağmen fotovoltaiik verimlilięi de silisyum ile benzer düzeydedir. Bu özellięi sayesinde fotovoltaiik cihazlarda silisyumun yerini alma potansiyeli yüksektir. Bunun yanı sıra perovskit malzemeler, çeřitlilięi ve farklı element kombinasyonları sayesinde süperiletkenlik, dev manyetorezistans, katalitik özellikler, opto-elektronik özellikler gibi fotovoltaiik performansı doğrudan etkileyen özellikleri modifiye etmeye imkân tanır.

Perovskit malzemelerin fotovoltaiik alandaki potansiyelinin yanı sıra ticarileřmesinin önüne geçen bazı problemleri bulunmaktadır. Bunlardan bazıları;

- En yaygın kullanıma sahip  $\text{MAPbI}_3$  gibi yapısında kurřun (Pb) elementi barındıran bileşiklerinin toksisiteye neden olması [22],
- Ortamdaki nem ve oksijen fazlalığıının güneş gözesinde oksidasyona sebep olup yapısında bozulmaya neden olması [23],
- Ultraviyole (UV) ışığın, buna maruz kalan bazı perovskit gözelerde bozunmalara neden olması [24],



Şekil 3. Silisyum Güneş Gözelerinde Verimliliğin Tarihsel Gelişimi (Göze verimliliği (%)-Yıl) [20]





- Silisyum gözelerine kıyasla ömrünün kısa olması [24],
- Sıcaklığın, perovskit kristal yapısına doğrudan etki etmesi nedeni ile verimliliğinde değişikliklere sebep olması [25],

Şeklinde sıralanabilir. Tüm bunlar günümüzde perovskit malzemelerin fotovoltaik uygulamalarda kullanılabilmesi adına ayrı ayrı araştırma odağı haline gelmiştir.

### **2.3. Perovskit İnce Film Üretim Yöntemleri**

Perovskit, güneş gözelerinde ince film olarak kullanılmakta ve bu ince film, çeşitli teknikler ile üretilmektedir. Başlıca perovskit ince film üretim teknikleri iki ana başlıkta incelenir [26];

- a) Çözelti işleme tabanlı teknikler
- b) Buhar tabanlı teknikler

#### **a) Çözelti işleme tabanlı teknikler;**

- Spin kaplama
- Damla döküm

#### **Maliyeti düşük ve hızlı, rulodan ruloyna tekniğine uyumlu;**

- Sprey Kaplama
- Bıçak Kaplama
- Slot Kalıp Kaplama
- Fırça Boyama
- Elektrodepozisyon
- Mürekkep püskürtmeli yazıcı

#### **b) Buhar tabanlı teknikler;**

- Kimyasal Buhar Biriktirme (CVD)
- Fiziksel Buhar Biriktirme (PVD)
- Buhar Destekli Çözüm Süreci

Perovskit filmlerin karakteristiği, işlevselliğini doğrudan etkileyen bir faktördür ve üretim tekniklerinin bu faktör üzerindeki etkisi büyüktür. Yani istenilen yüzey özelliklerine, doğru üretim tekniğini seçerek ulaşmak mümkündür.

## 2.4. Perovskit Gözelerin Mimarisi

Perovskit güneş gözesi mimarileri çok çeşitli şekillerde oluşturulabilmektedir. Ancak temelde dört farklı mimari vardır [27,28]. Bunlar;

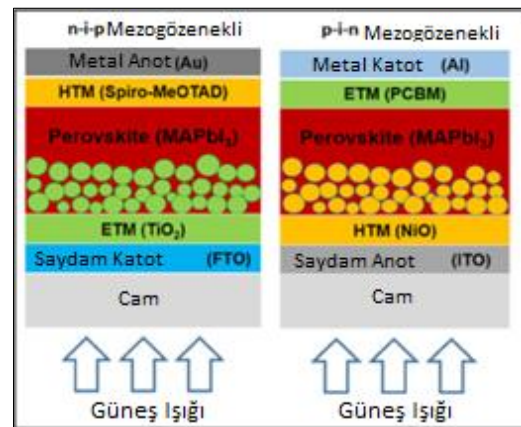
- Mezogözenekli mimari (n-i-p veya p-i-n diziliminde olabilmekte),
- Düzlemsel yapı (n-i-p veya p-i-n diziliminde olabilmekte),
- Elektron taşıyıcı katman bulundurmeyen mimari,
- Hole taşıyıcı katman bulundurmeyen mimaridir,

Şeklindedir.

### 2.4.1. Mezogözenekli Mimari

Mezogözenekli yapılar ilk perovskit güneş gözesinde kullanılan mimaridir. Diğer mimarilerin oluşturulmasına da öncü olmuştur [28]. Mimari Şekil 5’de betimlenmiştir. Elektron transfer malzemesi (ETM) ve boşluk transfer malzemesinin (HTM) konumuna göre şekillenen, normal olarak kabul gören Negatif-içsel-pozitif (n-i-p) veya tersine çevrilmiş pozitif-içsel-negatif (p-i-n) olacak şekilde iki farklı katman dizilimine uyarlanabilirler. Bu katmanlar, n-i-p dizilim için sırasıyla; cam, transparan katot, ETM, perovskit, HTM ve metal anot, p-i-n dizilim için ise sırasıyla; cam, transparan anot, HTM, perovskit, ETM ve metal katot şeklindedir [29].

Diğer mimarilerden farklı olarak, mezogözenekli yapının oluşturulabilmesi için daha yüksek sıcaklıklarda işlenmesi gerekmektedir. Ayrıca çeşitli araştırmalar

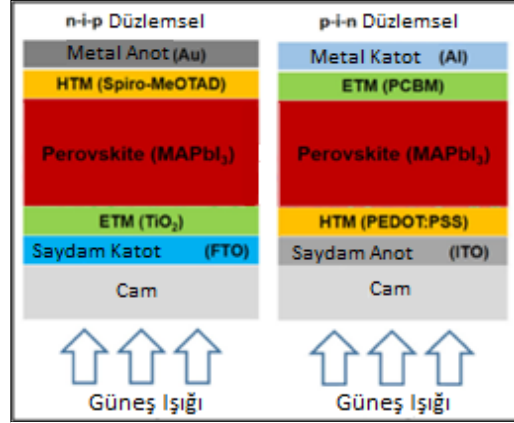


Şekil 5. Mezogözenekli Perovskit Güneş Gözesi Mimarileri [27]

sonucunda mezogözenekli katman kalınlığının 300nm altında olmasının verimliliği olumlu etkilediği de gözlemlenmiş [27].

#### 2.4.2. Düzlemsel mimari

Düzlemsel yapılar, temelde mezogözenekli yapılarla aynıdır ancak bünyelerinde mezogözenek bulundurmazlar. Bu nedenle daha düşük sıcaklıklarda işlenebilirler ve üretimleri daha kolay olur. Mimari, Şekil 6'da betimlenmiştir. Katman dizilimleri mezogözenekli yapı ile birebir aynıdır [29].



Şekil 6. Düzlemsel Perovskit Güneş Gözesi Mimarileri [27]

#### 2.4.3. ETM bulundurmayan mimari

Bu mimarinin diğer mimarilerden farkı, yapısında ETM bulundurmamasıdır. Yapılan araştırmalarda, elektron taşıyıcı katmanın olmadığı perovskit gözelerin, taşıyıcı katman olana kıyasla verimliliklerinde büyük değişimler olmadığı gözlemlenmiştir. ETM olan göze için %15,1 verimlilik, ETM olmayan göze içinse %14,14 verimlilik elde edilmiştir [27]. Bu nedenle, ETM'nin gerekli bir şey olup olmadığı tartışma konusu haline gelmiştir. Ancak bununla birlikte, yeterli verimliliğin elde edilebilmesi için yüzey özelliklerinin kontrolünün mezogözenekli ve düzlemsel yapıya oranla daha iyi yapılması ve çeşitli film modifikasyonlarına ihtiyaç duyulması akıllarda soru işareti bırakmıştır [28].

#### 2.4.4. HTM bulundurmayan mimari

Bu mimarinin diğer mimarilerden farkı ise yapısında HTM bulundurmamasıdır. Perovskit hem ışığı yakalama hem de hole taşıma özelliği barındıran bir malzemedir. Bu nedenle, genelde pahalı malzemelerden üretilen HTM katmanının işlevini yerine getirebileceği düşünülmüş ve tasarlanmıştır. Hole taşıma ve ışığı yakalama gibi önemli özelliklerin hepsi perovskit katmanda gerçekleştirildiği için bu mimariyi kullanan cihazlardaki performansın büyük ölçüde perovskit katmanının kalınlığına ve modifikasyonuna bağlı olduğu gözlemlenmiştir [27].

### 3. PEROVSKİT GÜNEŞ GÖZELERİNİN MODELLENMESİ VE SİMÜLASYONU

Bilgisayar tabanlı simülasyon programları, gerçek güneş gözesi imalatı aşamasından önce güneş gözesi performansının teorik değerlendirmesinin yapılmasında giderek popülerleşmektedir. Bu programların geliştirilmesindeki temel amaç, akademisyenlerin, cihaz performansını öğrencilere göstermelerine yardımcı olmak olsa da gün geçtikçe endüstriyel üretim için de çok önemli bir araç haline gelmiştir.

Günümüzde, özellikle güneş gözelerini modellemek ve simüle etmek için tasarlanmış çok sayıda ücretsiz ve ticari olarak temin edilebilen simülasyon yazılımları bulunmaktadır. Bilindik sayılabilecek, PC-1D, AMPS-1D, SCAPS-1D, vb. gibi farklı tek boyutlu modelleme araçları ve COMSOL multiphysics, Sentaurus, Silvaco ATLAS, ASPIN3, DESSIS, vb. gibi çok boyutlu modelleme araçları buna örnektir. Genel olarak, simülasyon yazılımlarının çoğunun çalışma prensibi benzerdir ancak hız, sunduğu içerik, arayüz, kullanıcı erişilebilirliği ve geçerlilik açısından birbirlerinden farklıdırlar [30].

#### 3.1. OghmaNano Yazılımı

Eski adı “General-purpose Photovoltaic Device Model (GPVDM)” olan ve 18 Ekim 2022 tarihinde isim değişikliğine giden “Organic and Hybrid Material Nano Simulation tool (OghmaNano)” yazılımı, 2011 yılında Imperial College London'da Roderick C. I. MacKenzie tarafından geliştirilen organik ince film uyumlu bir güneş gözesi simülasyon yazılımıdır. Bu yazılım, organik güneş gözeleri, perovskit güneş gözeleri, OLED'ler, OFET'ler, optik filtreler vb. cihaz gruplarının performansını simüle edebilmektedir. Hem elektriksel hem de optik modellemeye imkân tanıyan ve isabetli sonuçlar veren bir güneş gözesi simülasyon aracıdır. Optoelektronik özelliklerin etkisini araştırmayı kolaylaştıran bir yazılımdır [31,32,33]. Yazılımın yarıiletken, organik ve perovskit gözelerin modellenmesinde kullanımı deneysel verilerle doğrulandığı için bu çalışmada kullanılması uygun bulunmuştur [34,35].

OghmaNano (GPVDM) yazılımı, simülasyonları oluşturmada; Poisson denklemini (1), akım süreklilik denklemlerini (2, 3) ve sürüklenme-difüzyon denklemlerini (4, 5) kullanarak çözmektedir [15, 36].

Cihazın, voltaj profilini ( $\phi$ ) elde etmek için, şeffaf ön anot ( $x = 0$ ) ve arka katot ( $x = d$ ) arasında, serbest alanın geçirgenliğinin “ $\epsilon_0$ ”, göreceli geçirgenliğin “ $\epsilon_r$ ” ve bir elektronun temel yükünün “ $q$ ” ile tanımlandığı Poisson denklemi çözülür. Serbest elektron ve boşluk miktarları sırasıyla “ $n$ ” ve “ $p$ ” ile gösterilir.

$$\frac{d}{dx} \epsilon_0 \epsilon_r \frac{\partial \phi}{\partial x} = q(n - p) \quad (1)$$

Cihazda oluşan akım akısını elde etmek için, elektron ve boşluklar için akım süreklilik denklemleri çözülür; burada elektron akım yoğunluğu “ $J_n$ ”, boşluk akım yoğunluğu “ $J_p$ ”, rekombinasyon oranları “ $R_{n,p}$ ” ve serbest taşıyıcı üretim oranı “ $G$ ” dir.

$$\frac{\partial J_n}{\partial x} = q \left( R_n - G + \frac{\partial n}{\partial x} \right) \quad (2)$$

$$\frac{\partial J_p}{\partial x} = -q \left( R_p - G + \frac{\partial p}{\partial x} \right) \quad (3)$$

Sürüklenme-difüzyon denklemi (momentum koruma denklemi), elektronlar için,

$$J_n = q \mu_e n \frac{\partial E_c}{\partial x} + q D_n \frac{\partial n}{\partial x} \quad (4)$$

Ve boşluklar için,

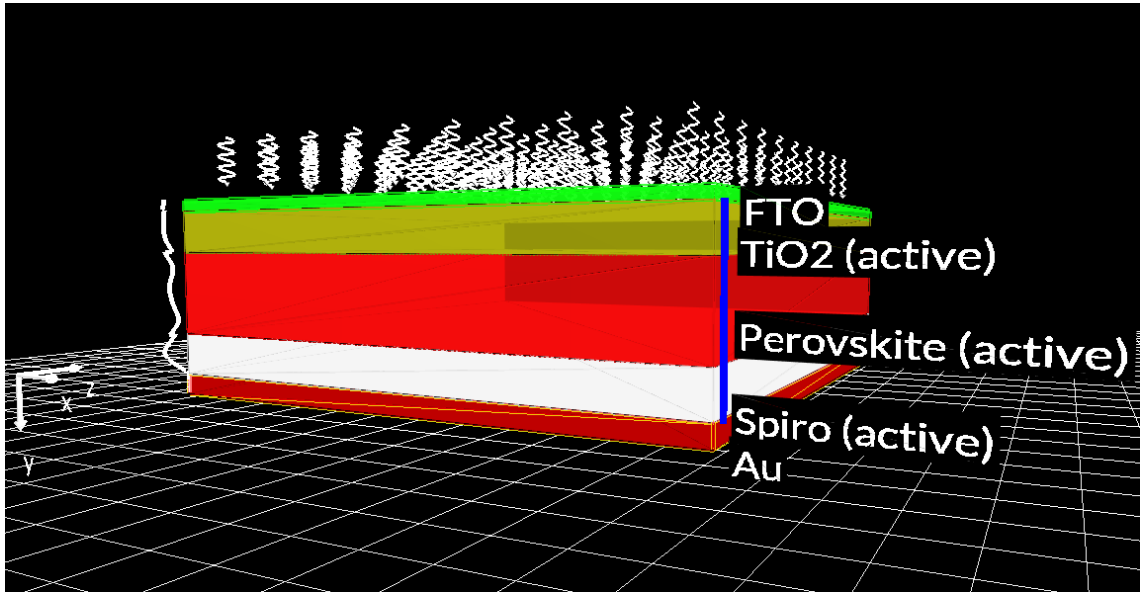
$$J_p = q \mu_h p \frac{\partial E_v}{\partial x} - q D_p \frac{\partial p}{\partial x} \quad (5)$$

Biçiminde kullanılmaktadır.

Elektron ve boşlukların, yakalanma, kaçma ve yeniden bağlanma (trapping, de-trapping, recombination) durumları için Shockley-Read-Hall rekombinasyon modeli kullanılmış, modelin detaylarına literatürde yer verilmiştir [36].

### 3.2. Modellemenin Parametreleri

Yüksek göze verimliği sağlaması sayesinde birçok araştırmada kullanılan MAPbI<sub>3</sub>, 2009 yılında yapılan ilk perovskit güneş gözesi araştırmasında kullanılmış olan, yüksek bant enerjisine sahip MAPbBr<sub>3</sub> ve çift perovskit ailesine mensup, yüksek kristalinitesi sayesinde rekombinasyon süresi uzun, hava ve neme karşı dayanımı yüksek, kurşunsuz Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> perovskit malzemeleri “OghmaNano” yazılımı kullanılarak modellenmiştir [31,32,33].



Şekil 7. Modellemeye Ait Mimari Görüntüsü [37]

Layer name	Thicknes (m)	Optical material	Layer type
FTO	5e-08	... oxides/fto	other ▼
TiO2	2e-07	... oxides/tiox	active layer ▼
Perovskite	4e-07	... perovskites/MAPbI3	active layer ▼
Spiro	2e-07	... small_molecules/spiromeotad	active layer ▼
Au	1e-07	... metal/au	contact ▼

Şekil 8. MAPbI<sub>3</sub> Göze Katman Yapısı [37]

Layer name	Thicknes (m)	Optical material	Layer type
FTO	5e-08	... oxides/fto	other ▼
TiO2	2e-07	... oxides/tiox	active layer ▼
Perovskite	4e-07	... perovskites/MAPbBr3	active layer ▼
Spiro	2e-07	... small_molecules/spiromeotad	active layer ▼
Au	1e-07	... metal/au	contact ▼

Şekil 9. MAPbBr<sub>3</sub> Göze Katman Yapısı [37]

Layer name	Thicknes (m)	Optical material	Layer type
FTO	5e-08	... oxides/fto	other ▼
TiO2	2e-07	... oxides/tiox	active layer ▼
Perovskite	4e-07	... perovskites/Cs2AgBiBr6	active layer ▼
Spiro	2e-07	... small_molecules/spiromeotad	active layer ▼
Au	1e-07	... metal/au	contact ▼

Şekil 10. Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> Göze Katman Yapısı [37]

Çizelge 1. Modellemede Kullanılan Elektriksel Parametreler [37,38,39,40]

	MAPbI <sub>3</sub>	MAPbBr <sub>3</sub>	Cs <sub>2</sub> AgBiBr <sub>6</sub>	TiO <sub>2</sub>	SpiroMeotad
<b>Elektron Mobilitesi</b> (Electron Mobility) (m <sup>2</sup> .V <sup>-1</sup> .s <sup>-1</sup> )	1e-4	1,7e-4	1,18e-4	2e-3	2e-3
<b>Boşluk Mobilitesi</b> (Hole Mobility) (m <sup>2</sup> .V <sup>-1</sup> .s <sup>-1</sup> )	1e-4	1,7e-4	5e-5	2e-3	2e-3
<b>Serbest Elektron Durumlarının Efektif Yoğunluğu</b> (Effective Density Of Free Electron States) (m <sup>-3</sup> )	5e26	3,5e25	1e22	1e26	1e26



<b>Serbest Boşluk Durumlarının Efektif Yoğunluğu</b> (Effective Density Of Free Hole States) ( $m^{-3}$ )	5e26	4e25	1e22	1e26	1e26
<b>Rekombinasyon Oranı Sabiti</b> (Recombination Rate Constant) ( $m^3.s^{-1}$ )	1e-15	1e-15	1e-15	0	0
<b>Elektron İlgisi (<math>\chi</math>)</b> (Electron Affinity) (eV)	3,8	3,3	4,19	3,8	3,8
<b>Bant Aralığı (<math>E_g</math>)</b> (Bandgap) (eV)	1,6	2,3	2,05	1,6	1,6
<b>Bağıl Geçirgenlik (<math>\epsilon_r</math>)</b> (Relative Permittivity)	3,0	17,0	5,8	20,0	20,0

Perovskit malzemelerin elektriksel parametreleri literatürden elden edilirken, TiO<sub>2</sub> ve Spiro-MeOTAD için OghmaNano yazılım kütüphanesi kullanılmıştır [37]. Elektriksel parametreler konusundaki detaylandırmaları özgün bir şekilde yansıtan kaynaklar arasındaki farklılıkları minimize etmek adına parametreler basite indirgenmiştir [38,39,40].

Optik özelliklerin belirlenmesi için literatürden kırma indisi ve soğurma değerleri bulunmuştur [EK-1] [45,46,47]. Bu değerler yazılım kütüphanesine, her perovskit için ayrı ve yeni malzeme olarak kaydedilmiştir. Daha sonrasında katman ayarlamaları yapılırken kayıtlı malzemeler Şekil 8, 9 ve 10'da görüldüğü üzere optik malzeme sekmesinden seçilip modellemeye tanımlanmıştır.

### 3.3. Perovskit Gözelerin Simülasyonu

Modellemeler; tüm perovskit malzemeler için Şekil 7'deki düzlemsel mimaride, MAPbI<sub>3</sub> için Şekil 8, MAPbBr<sub>3</sub> için Şekil 9, Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> için Şekil 10'daki katman yapısında ve Çizelge 1'deki elektriksel parametreler kullanılarak yapıldı.

Simülasyon, perovskit katman kalınlığındaki ve sıcaklıktaki deęişimin çıktılarına etkisini inceleyecek iki ana hedef doęrultusunda yapıldı.

Kalınlığın etkisini incelemek için, AM 1,5 ve 27 °C sıcaklıkta, perovskit dışındaki katmanların modellemelerinde hiçbir deęişiklik yapılmadan, sadece perovskit malzemelerin kalınlığı 100'den 700 nm'ye kadar, 100 nm aralıklarla deęiştirilerek hesaplandı.

Sıcaklığın etkisini incelemek için, kalınlık hesaplamalarında elde edilen veriler doęrultusunda her perovskit malzeme için optimum kalınlık deęeri kullanılmak kaydıyla -10'dan 70 °C sıcaklığa kadar, 10 °C aralıklarla deęiştirilerek hesaplandı. Elde edilen veriler dördüncü bölümde tartışıldı.

## 4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Araştırmada incelenen üç farklı perovskit malzemenin kıyaslamalarının en doğru biçimde yapılabilmesi için, gözeyi oluşturan perovskit dışındaki katmanların her biri birebir aynı tercih edilmiştir. Sadece perovskit malzemede değişikliğe gidilmiştir. Sonuçların tartışılmasında perovskit malzeme ve karakteristiğindeki farklılıkların, gözeyi oluşturan diğer katmanlar ile olası etkileşimleri göz ardı edilmiştir. Bu doğrultuda her bir perovskit malzeme için katman kalınlığı ve sıcaklık değişimlerinin etkileri simülasyon yazılımı ile incelenmiştir.

### 4.1. MAPbI<sub>3</sub>

MAPbI<sub>3</sub> perovskit malzemesi için optik ve elektriksel parametreler girildikten sonra simülasyon, 100'den 700 nm kalınlığa kadar, 100 nm aralıklar ile, yazılım varsayılanı olan 27 °C sıcaklıkta çalıştırılmıştır. Literatür taramasında en sık rastlanan değerlere yakın olması için bu kalınlık skalasında inceleme yapılmıştır. Her bir kalınlık için elde edilen elektriksel parametreler, açık devre voltajı ( $V_{oc}$ ), kısa devre akım yoğunluğu ( $J_{sc}$ ), maksimum güç noktası voltajı ( $V_{MPP}$ ), maksimum güç noktası akım yoğunluğu ( $J_{MPP}$ ), doluluk oranı (FF), maksimum güç ve güç dönüşüm verimliliği şeklinde Çizelge 2'de sunulmuştur.

**Çizelge 2.** MAPbI<sub>3</sub> İçin Kalınlığa Bağlı Elektriksel Parametreler

Kalınlık (m)	$V_{oc}$ (V)	$J_{sc}$ (A.m <sup>-2</sup> )	$V_{MPP}$ (V)	$J_{MPP}$ (A.m <sup>-2</sup> )	Doluluk Oranı	Maks. Güç (W.m <sup>-2</sup> )	Verimlilik %
1,00E-07	1,00	121,05	0,89	110,67	0,81	98,17	9,82
2,00E-07	1,00	132,76	0,89	118,96	0,79	105,41	10,54
3,00E-07	1,00	136,80	0,89	119,74	0,78	106,09	10,61
4,00E-07	1,00	155,85	0,88	132,76	0,75	117,42	11,74
5,00E-07	1,00	191,34	0,88	157,60	0,72	138,93	13,89
6,00E-07	1,00	159,55	0,88	132,13	0,73	116,87	11,69
7,00E-07	0,99	135,53	0,87	115,40	0,74	99,99	10,00

Çizelge 2 incelendiğinde; verimlilik, 100'den 500 nm kalınlığa kadar artarken 500 nm'den sonra tekrar azalma eğilimi göstermiştir. Dolayısıyla, yapılan hesaplamalar içerisinde en yüksek göze verimliliğinin elde edildiği kalınlık, %16,22 dönüşüm verimliliği ile, 500nm olmuştur.

Perovskit malzeme kalınlığının elektriksel parametrelerle ilişkisi teorik bilgiler dikkate alındığında; kalınlık arttıkça, yapıdaki yük taşıyıcılarının sayısında ve “spektral soğurma” adıyla da bilinen, malzemenin farklı dalga boylarına sahip ışık demetlerinden faydalanma miktarında artış, dolayısı ile verimlilikte de artma beklenir. 100-500 nm kalınlıklar arasındaki verimlilik artışı bu bilgiyi destekler niteliktedir. Aynı zamanda, kalınlığın artması, elektron-hole çiftlerinin rekombinasyon miktarı ile seri direncinin artmasına ve buna bağlı olarak verimliliğin azalmasına neden olur. Verimliliğin, 500-700 nm kalınlıkları arasında azalmasının da bu durumdan kaynaklandığı düşünülmektedir.

Malzeme değişmediği için  $V_{oc}$  değerlerinde değişim olması beklenmez. Kısa devre akım yoğunluğunun yüksek olduğu noktada verimliliğin de yüksek olması beklenir. Çizelge 2'deki veriler bunları destekler niteliktedir.

Daha kalın cihazlarda, elektrotlar arasındaki mesafenin artması, elektrik alanın azalmasına neden olur. Bu nedenle, kalınlığın artması, yük taşıyıcılarının maksimum güç noktasındaki rekombinasyonunu daha da etkin kılar ve bu da doluluk oranının azalması ile sonuçlanır. En yüksek gücün görüldüğü 500 nm kalınlık aynı zamanda en düşük doluluk oranına sahiptir. Ayrıca 400 ve 600 nm kalınlıktaki güç değerleri birbirine çok yakın değerler olmasına karşın 600 nm kalınlıktaki doluluk oranı daha düşüktür. Tüm bunlar teoriyi destekler niteliktedir.

MAPbI<sub>3</sub> perovskit malzemesi için kalınlık hesaplamalarından sonra en yüksek güç dönüşüm verimliliğinin elde edildiği 500 nm kalınlık değeri optimum varsayılarak, bu kalınlık değerinde -10'dan 70 °C sıcaklığa kadar 10 °C aralıklar ile simülasyon çalıştırılmıştır. Her bir sıcaklık değeri için elde edilen elektriksel parametreler, açık devre voltajı ( $V_{oc}$ ), kısa devre akım yoğunluğu ( $J_{sc}$ ), maksimum güç noktası voltajı ( $V_{MPP}$ ), maksimum güç noktası akım yoğunluğu ( $J_{MPP}$ ), doluluk oranı (FF), maksimum güç ve güç dönüşüm verimliliği şeklinde Çizelge 3'te sunulmuştur.

**Çizelge 3.** MAPbI<sub>3</sub> İçin Sıcaklığa Bağlı Elektriksel Parametreler

Sıcaklık (°C)	V <sub>oc</sub> (V)	J <sub>sc</sub> (A.m <sup>-2</sup> )	V <sub>MPP</sub> (V)	J <sub>MPP</sub> (A.m <sup>-2</sup> )	Doluluk Oranı	Maks. Güç (W.m <sup>-2</sup> )	Verimlilik %
-10	1,08	191,36	0,96	156,63	0,73	150,63	15,06
0	1,06	191,37	0,94	157,39	0,73	148,19	14,82
10	1,04	191,37	0,92	157,34	0,73	145,01	14,50
20	1,02	191,36	0,90	156,70	0,73	141,29	14,13
30	1,00	191,34	0,86	159,95	0,72	137,76	13,78
40	0,98	191,31	0,84	159,54	0,72	134,23	13,42
50	0,96	191,26	0,82	159,13	0,71	130,70	13,07
60	0,94	191,20	0,80	158,66	0,71	127,16	12,72
70	0,92	191,12	0,78	158,18	0,71	123,62	12,36

Yarıiletkenler grubunda yer alan perovskit malzemeler, yapısı gereği, artan sıcaklıktan olumsuz etkilenmektedir. Sıcaklığın artması ile, rekombinasyonun artması, yasak enerji aralığının azalması, elektronların iletim bandına geçişlerinin ve elektron hole çiftlerinin difüzyonunun kolaylaşması, difüzyon akımının artmasının etkisiyle akım yoğunluğunun az miktarda artması, açık devre voltajı ve verimliliğin azalması teorik olarak beklenen davranışlardır.

Bunlar göz önünde bulundurularak Çizelge 3 incelendiğinde, verimlilik %15,06'dan %12,3'e, açık devre voltajı 1,08'den 0,92 V'a, kısa devre akım yoğunluğu 191,36'dan 191,12 A.m<sup>-2</sup>'ye azalmıştır. J<sub>sc</sub>'nin artış göstermemesi dışındaki tüm değişimler teoriyi destekler niteliktedir.

Kısa devre akım yoğunluğunun artması beklenirken azalması teorik bilgi ile örtüşmemektedir. Seri dirençteki olası bir artışın bu duruma neden olduğu düşünülmektedir. Doluluk oranının 0,73'den 0,71'e gerilemesi de bu durumu destekler niteliktedir.

## 4.2. MAPbBr<sub>3</sub>

MAPbBr<sub>3</sub> perovskit malzemesi için optik ve elektriksel parametreler girildikten sonra simülasyon, 100'den 700 nm kalınlığa kadar, 100 nm aralıklar ile, yazılım varsayılanı olan 27 °C sıcaklıkta çalıştırılmıştır. Literatür taramasında en sık rastlanan değerlere yakın olması için bu kalınlık skalasında inceleme yapılmıştır. Her bir kalınlık için elde edilen elektriksel parametreler, açık devre voltajı ( $V_{OC}$ ), kısa devre akım yoğunluğu ( $J_{SC}$ ), maksimum güç noktası voltajı ( $V_{MPP}$ ), maksimum güç noktası akım yoğunluğu ( $J_{MPP}$ ), doluluk oranı (FF), maksimum güç ve güç dönüşüm verimliliği şeklinde Çizelge 4'te sunulmuştur.

**Çizelge 4.** MAPbBr<sub>3</sub> İçin Kalınlığa Bağlı Elektriksel Parametreler

Kalınlık (m)	$V_{OC}$ (V)	$J_{SC}$ (A.m <sup>-2</sup> )	$V_{MPP}$ (V)	$J_{MPP}$ (A.m <sup>-2</sup> )	Doluluk Oranı	Maks. Güç (W.m <sup>-2</sup> )	Verimlilik %
1,00E-07	0,99	63,45	0,68	29,85	0,32	20,19	2,02
2,00E-07	1,00	72,28	0,66	36,28	0,33	23,79	2,38
3,00E-07	1,01	79,04	0,66	41,54	0,34	27,21	2,72
4,00E-07	1,02	84,74	0,63	48,64	0,36	30,85	3,09
5,00E-07	1,02	93,60	0,63	56,49	0,37	35,78	3,58
6,00E-07	1,02	88,87	0,63	54,03	0,38	34,24	3,42
7,00E-07	1,02	85,83	0,63	52,08	0,38	33,01	3,30

Çizelge 4 incelendiğinde; verimlilik, 100'den 500 nm kalınlığa kadar artarken 500 nm'den sonra tekrar azalma eğilimi göstermiştir. Dolayısıyla, yapılan hesaplamalar içerisinde en yüksek göze verimliliğinin elde edildiği kalınlık, %3,58 dönüşüm verimliliği ile, 500nm olmuştur.

Perovskit malzeme kalınlığının elektriksel parametrelerle ilişkisi teorik bilgiler dikkate alınarak düşünülürse; kalınlık arttıkça, yapıdaki yük taşıyıcılarının sayısında ve “spektral soğurma” adıyla da bilinen, malzemenin farklı dalga boylarına sahip ışık demetlerinden faydalanma miktarında artış, dolayısı ile verimlilikte de artma beklenir. 100-500 nm kalınlıklar arasındaki verimlilik artışı bu bilgiyi destekler niteliktedir. Aynı zamanda,

kalınlığın artması, elektron-hole çiftlerinin rekombinasyon miktarı ile seri direncinin artmasına ve buna bağılı olarak verimliliğin azalmasına neden olur. Verimliliğin, 500-700 nm kalınlıkları arasında azalmasının da bu durumdan kaynaklandığı düşünülmektedir.

Kısa devre akım yoğunluğunun yüksek olduğu noktada verimliliğin de yüksek olması beklenir. Çizelge 4'deki veriler bunu destekler niteliktedir.

Malzeme değişmediği için  $V_{oc}$  değerlerinde değişim olması beklenmez veya çok az beklenir. Ancak  $V_{oc}$ 'de beklenmeyen bir artış görülmüştür. Bunun, EK-2'de betimlenen, bu malzemeye ait akım-voltaj ve akım yoğunluğu-voltaj grafiklerinde görülen, "S şekilli akım-voltaj grafiği" nedeniyle değişmiş olabileceği düşünülmektedir.

Daha kalın cihazlarda, elektrotlar arasındaki mesafenin artması elektrik alanının azalmasına neden olur. Bu nedenle, kalınlığın artması, yük taşıyıcılarının, maksimum güç noktasındaki rekombinasyonunu daha da etkin kılar ve bu da doluluk oranının azalması ile sonuçlanır. Ancak Çizelge 4 incelendiğinde doluluk oranında artma gözlenmiştir. Bunun  $V_{oc}$  değerindeki beklenmeyen değişimden kaynaklandığı düşünülmektedir.

**Çizelge 5.** MAPbBr<sub>3</sub> İçin Sıcaklığa Bağlı Elektriksel Parametreler

Sıcaklık (°C)	$V_{oc}$ (V)	$J_{sc}$ (A.m <sup>-2</sup> )	$V_{MPP}$ (V)	$J_{MPP}$ (A.m <sup>-2</sup> )	Doluluk Oranı	Maks. Güç (W.m <sup>-2</sup> )	Verimlilik %
-10	1,11	94,34	0,67	58,79	0,38	39,57	3,96
0	1,08	94,22	0,67	57,26	0,38	38,55	3,86
10	1,06	94,05	0,65	57,46	0,38	37,54	3,75
20	1,04	93,82	0,63	57,64	0,37	36,50	3,65
30	1,02	93,49	0,61	57,80	0,37	35,45	3,55
40	0,99	93,07	0,61	56,21	0,37	34,48	3,45
50	0,97	92,52	0,59	56,46	0,37	33,50	3,35
60	0,95	91,83	0,57	56,68	0,37	32,50	3,25
70	0,93	90,98	0,57	54,97	0,37	31,53	3,15

MAPbBr<sub>3</sub> perovskit malzemesi için kalınlık hesaplamalarından sonra en yüksek güç dönüşüm verimliliğinin elde edildiği 500 nm kalınlık değeri optimum varsayılarak, bu kalınlık değerinde -10'dan 70 °C sıcaklığa kadar 10 °C aralıklar ile simülasyon çalıştırılmıştır. Her bir sıcaklık değeri için elde edilen elektriksel parametreler, açık devre voltajı (V<sub>OC</sub>), kısa devre akım yoğunluğu (J<sub>SC</sub>), maksimum güç noktası voltajı (V<sub>MPP</sub>), maksimum güç noktası akım yoğunluğu (J<sub>MPP</sub>), doluluk oranı (FF), maksimum güç ve güç dönüşüm verimliliği şeklinde Çizelge 5'te sunulmuştur.

Yarıiletkenler grubunda yer alan perovskit malzemeler, yapısı gereği, artan sıcaklıktan olumsuz etkilenmektedir. Sıcaklığın artması ile, rekombinasyonun artması, yasak enerji aralığının azalması, elektronların iletim bandına geçişlerinin ve elektron hole çiftlerinin difüzyonunun kolaylaşması, difüzyon akımının artmasının etkisiyle akım yoğunluğunun az miktarda artması, açık devre voltajı ve verimliliğin azalması teorik olarak beklenen davranışlardır.

Bunlar göz önünde bulundurularak Çizelge 5 incelendiğinde, verimlilik %3,96'dan %3,15'e, açık devre voltajı 1,11'den 0,93 V'a, kısa devre akım yoğunluğu 94,34'den 90,98 A.m<sup>-2</sup>'ye azalmıştır. J<sub>sc</sub>'nin azalması dışındaki tüm değişimler teoriyi destekler niteliktedir.

Kısa devre akım yoğunluğunun artması beklenirken azalması teorik bilgi ile örtüşmemektedir. EK-2'de betimlenen, bu malzemeye ait akım-voltaj ve akım yoğunluğu-voltaj grafiklerinde görülen, S şekilli akım-voltaj grafiğinde, kısa devre akımında oluşacak bir kayma ve buna bağlı akım yoğunluğunda oluşacak bir azalma görülebileceği düşünülmektedir. Gözeyi oluşturan katmanların hetero eklemlerden oluşmasının, S şekilli akım-voltaj grafiği elde edilmesine neden olduğu düşünülmektedir. Perovskit olarak MAPbBr<sub>3</sub> kullanılan ve farklı ETM katmanlarının etkisinin incelendiği bir araştırmada, farklı malzemelerin farklı akım-voltaj grafikleri oluşturduğu ve bazılarının S şekilli olduğu görülmüştür [39].

Yine aynı çalışmada MAPbBr<sub>3</sub>'ün kullanıldığı gözelerde doluluk oranlarının, bu çalışmada elde edilen 0,32-0,38 skalasından, çok daha yüksek olduğu gözlemlenmiştir [39]. Bunun, S şekilli akım-voltaj grafiğinde oluşabilecek herhangi bir kaymadan kaynaklı olabileceği düşünülmektedir.



### 4.3. Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub>

Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> perovskit malzemesi için optik ve elektriksel parametreler girildikten sonra simülasyon, 100'den 700 nm kalınlığa kadar, 100 nm aralıklar ile, yazılım varsayılanı olan 27 °C sıcaklıkta çalıştırılmıştır. Literatür taramasında en sık rastlanan değerlere yakın olması için bu kalınlık skalasında inceleme yapılmıştır. Her bir kalınlık için elde edilen elektriksel parametreler, açık devre voltajı (V<sub>OC</sub>), kısa devre akım yoğunluğu (J<sub>SC</sub>), maksimum güç noktası voltajı (V<sub>MPP</sub>), maksimum güç noktası akım yoğunluğu (J<sub>MPP</sub>), doluluk oranı (FF), maksimum güç ve güç dönüşüm verimliliği şeklinde Çizelge 6'da sunulmuştur.

**Çizelge 6.** Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> İçin Kalınlığa Bağlı Elektriksel Parametreler

Kalınlık (m)	V <sub>OC</sub> (V)	J <sub>SC</sub> (A.m <sup>-2</sup> )	V <sub>MPP</sub> (V)	J <sub>MPP</sub> (A.m <sup>-2</sup> )	Doluluk Oranı	Maks. Güç (W.m <sup>-2</sup> )	Verimlilik %
1,00E-07	0,98	27,61	0,88	25,35	0,82	22,23	2,22
2,00E-07	0,99	29,96	0,90	27,01	0,82	24,22	2,42
3,00E-07	0,99	31,37	0,90	28,26	0,82	25,34	2,53
4,00E-07	0,99	31,75	0,90	28,44	0,81	25,50	2,55
5,00E-07	0,99	32,56	0,90	28,91	0,80	25,92	2,59
6,00E-07	0,99	33,38	0,90	29,89	0,81	26,79	2,68
7,00E-07	1,00	33,80	0,90	30,45	0,81	27,30	2,73

Çizelge 6 incelendiğinde; verimlilik, 100'den 700 nm kalınlığa kadar devamlı artarak, 700 nm'de, %2,73 dönüşüm verimliliği ile, hesaplanan parametreler içerisindeki en yüksek verimliliğe ulaşmıştır.

Perovskit malzeme kalınlığının elektriksel parametrelerle ilişkisi teorik bilgiler dikkate alınarak düşünülürse; kalınlık arttıkça, yapıdaki yük taşıyıcılarının sayısında ve “spektral soğurma” adıyla da bilinen, malzemenin farklı dalga boylarına sahip ışık demetlerinden faydalanma miktarında artış, dolayısı ile verimlilikte de artma beklenir. 100-700 nm kalınlıklar arasındaki verimlilik artışı bu bilgiyi destekler niteliktedir. Aynı zamanda,

kalınlıđın artması, elektron-hole çiftlerinin rekombinasyon miktarı ile seri direncinin artmasına ve buna bađlı olarak verimliliđin azalmasına neden olur. Ancak belirlenen parametrelerde bu durumu gözlemek mümkün olmamıştır. Bu durumun, kıyaslama dođruluđunu artırmak adına her malzeme için sabit aralıklarda simülasyonlar yapılmasından kaynaklandıđı düşünölmektedir.

Malzeme deđişmediđi için  $V_{oc}$  deđerlerinde deđişim olması beklenmez veya çok az beklenir. Kısa devre akım yoğunluđunun yüksek olduđu noktada verimliliđin de yüksek olması beklenir. Çizelge 6'daki veriler bunları destekler niteliktedir.

Daha kalın cihazlarda, elektrotlar arasındaki mesafenin artması elektrik alanın azalmasına neden olur. Bu nedenle, kalınlıđın artması, yük taşıyıcılarının, maksimum güç noktasındaki rekombinasyonunu daha da etkin kılar ve bu da doluluk oranının azalması ile sonuçlanır. En yüksek gücün göröldüđu 700 nm kalınlıđın aynı zamanda en düşük doluluk oranına sahip olması beklenmektedir. Ancak doluluk oranında beklenen azalma 100-500 nm aralıđında teoriye uygun iken 500-700 nm aralıđında teoriye ters düşmektedir.  $V_{oc}$  deđerinin, 500-700 nm aralıđındaki minimallikten uzaklaşan deđişimlerinden kaynaklandıđı düşünölmektedir.

**Çizelge 7.**  $Cs_2AgBiBr_6$  İçin Sıcaklıđa Bađlı Elektriksel Parametreler

Sıcaklık (°C)	$V_{oc}$ (V)	$J_{sc}$ (A.m <sup>-2</sup> )	$V_{MPP}$ (V)	$J_{MPP}$ (A.m <sup>-2</sup> )	Doluluk Oranı	Maks. Güç (W.m <sup>-2</sup> )	Verimlilik %
-10	1,07	33,73	0,98	30,12	0,81	29,46	2,95
0	1,05	33,75	0,96	30,22	0,81	28,90	2,89
10	1,03	33,77	0,94	30,25	0,81	28,32	2,83
20	1,01	33,79	0,92	30,26	0,81	27,73	2,77
30	0,99	33,81	0,90	30,25	0,81	27,12	2,71
40	0,97	33,82	0,88	30,23	0,81	26,49	2,65
50	0,95	33,84	0,86	30,19	0,81	25,85	2,59
60	0,93	33,85	0,82	30,88	0,80	25,21	2,52
70	0,91	33,87	0,80	30,89	0,80	24,60	2,46

$\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$  perovskit malzemesi için kalınlık hesaplamalarından sonra en yüksek güç dönüşüm verimliliğinin elde edildiği 700 nm kalınlık değeri optimum varsayılarak, bu kalınlık değerinde -10'dan 70 °C sıcaklığa kadar 10 °C aralıklar ile simülasyon çalıştırılmıştır. Her bir sıcaklık değeri için elde edilen elektriksel parametreler, açık devre voltajı ( $V_{OC}$ ), kısa devre akım yoğunluğu ( $J_{SC}$ ), maksimum güç noktası voltajı ( $V_{MPP}$ ), maksimum güç noktası akım yoğunluğu ( $J_{MPP}$ ), doluluk oranı (FF), maksimum güç ve güç dönüşüm verimliliği şeklinde Çizelge 7'de sunulmuştur.

Yarıiletkenler grubunda yer alan perovskit malzemeler, yapısı gereği, artan sıcaklıktan olumsuz etkilenmektedir. Sıcaklığın artması ile, rekombinasyonun artması, yasak enerji aralığının azalması, elektronların iletim bandına geçişlerinin ve elektron hole çiftlerinin difüzyonunun kolaylaşması, difüzyon akımının artmasının etkisiyle akım yoğunluğunun az miktarda artması, açık devre voltajı ve verimliliğin azalması teorik olarak beklenen davranışlardır.

Bunlar göz önünde bulundurularak Çizelge 7 incelendiğinde, verimlilik %2,95'den %2,46'ya, açık devre voltajı 1,07'den 0,91 V'a azalmış, kısa devre akım yoğunluğu 33,73'den 33,87  $\text{A.m}^{-2}$ 'ye artmıştır. Tüm değişimler teoriyi destekler niteliktedir.

#### **4.4. Kıyaslama**

$\text{MAPbI}_3$ ,  $\text{MAPbBr}_3$  ve  $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$  için farklı kalınlıklardaki ve sıcaklıklardaki, verimlilik ve FF değerleri kıyaslanıp yorumlanmıştır.

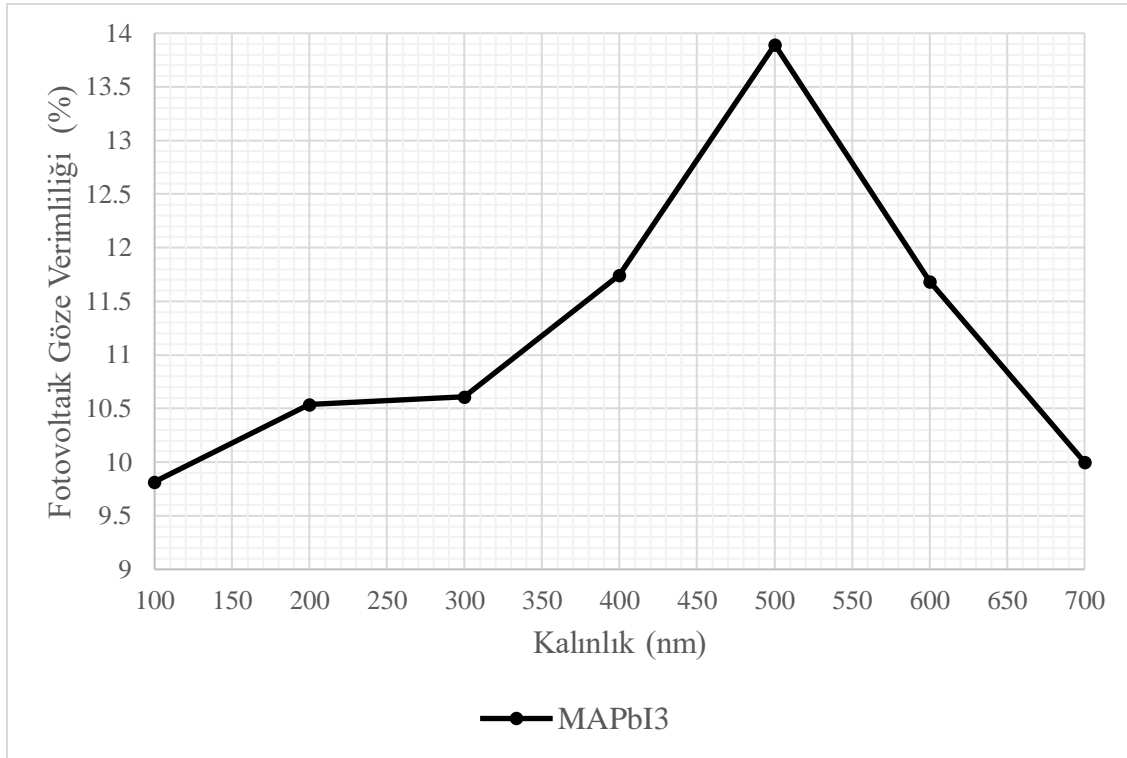
##### **4.4.1. Verimlilik - Kalınlık**

$\text{MAPbI}_3$ ,  $\text{MAPbBr}_3$  ve  $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$  için farklı kalınlıklardaki fotovoltaik göze verimlilik değerleri Şekil 11'de betimlenmiştir.

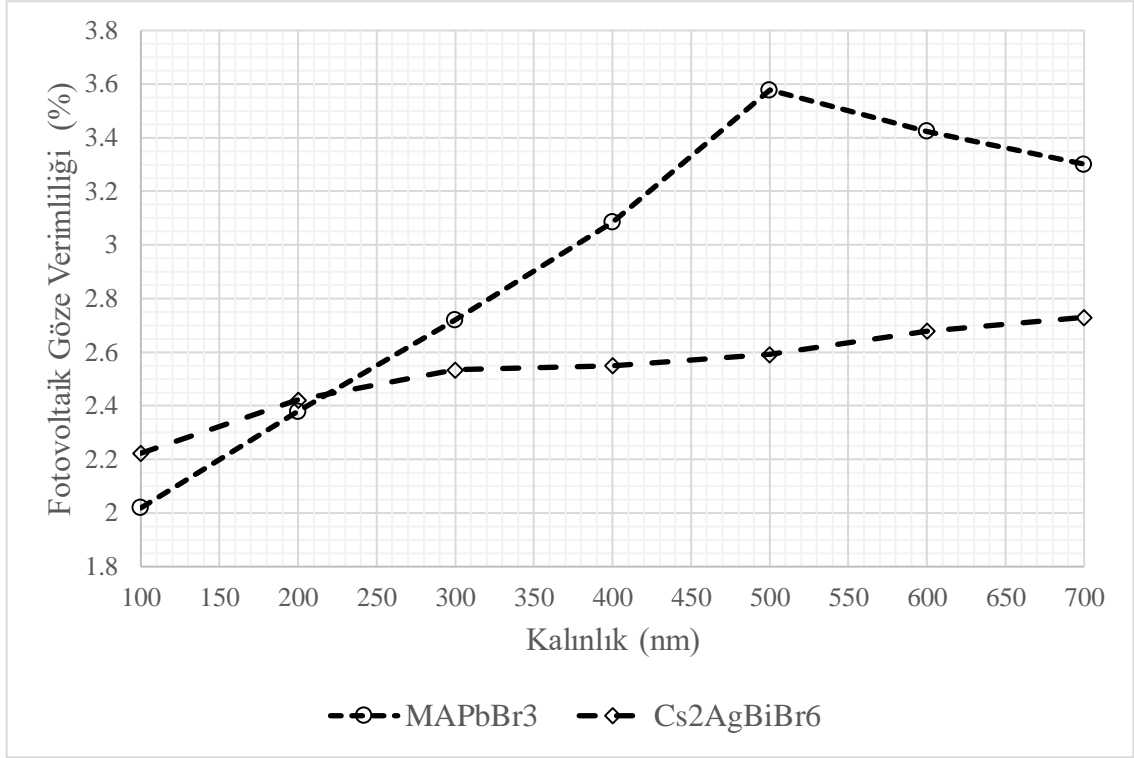
Şekil 11 incelendiğinde, açık ara ile  $\text{MAPbI}_3$  malzemesi en yüksek verimliliğe sahipken,  $\text{MAPbBr}_3$  ve  $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$  malzemelerinin birbirine yakın sonuçlar verdiği görülmektedir. Bunun temel sebebinin malzemelerin bant genişliğindeki, soğurma katsayısındaki ve kırılma indisi değerindeki farklılıklar olduğu bilinmektedir.  $\text{MAPbBr}_3$  ve  $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$  malzemelerinin bant genişliği birbirine daha yakın olmakla beraber  $\text{MAPbI}_3$  malzemesinden fazladır. Soğurma katsayısı ve kırılma indisi değerlerinin etkisi Ek-1'de

tartışılmıştır. Tüm bunların bir sonucu olarak enerji dönüşüm verimliliği en yüksek olması beklenen malzeme MAPbI<sub>3</sub> malzemesidir ve öyle de olmuştur.

MAPbI<sub>3</sub> ve MAPbBr<sub>3</sub> benzer kristal yapılara ve davranışlara sahip perovskit malzemelerdir. Her iki malzeme için de en yüksek verimlilik değerlerinin 500 nm’de görülmesi bunu kanıtlar niteliktedir. Toksik olmayan Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> çift perovskit malzemesi ise diğer iki malzemedен farklı olarak, hesaplanan değerler içerisinde, en yüksek verimliliği 700 nm’de vermiştir.



a) MAPbI<sub>3</sub> İçin



b) MAPbBr<sub>3</sub> ve Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> İçin

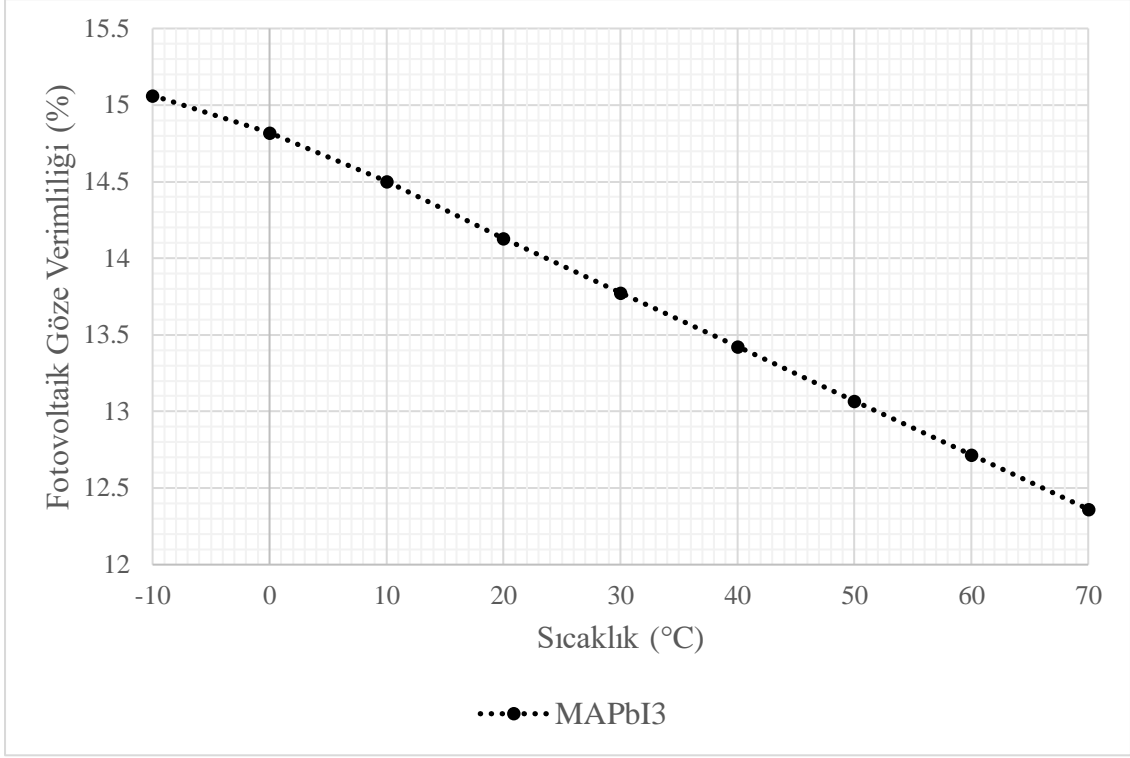
Şekil 11. Kalınlığa Bağlı Fotovoltaik Göze Verimlilikleri

#### 4.4.2. Verimlilik - Sıcaklık

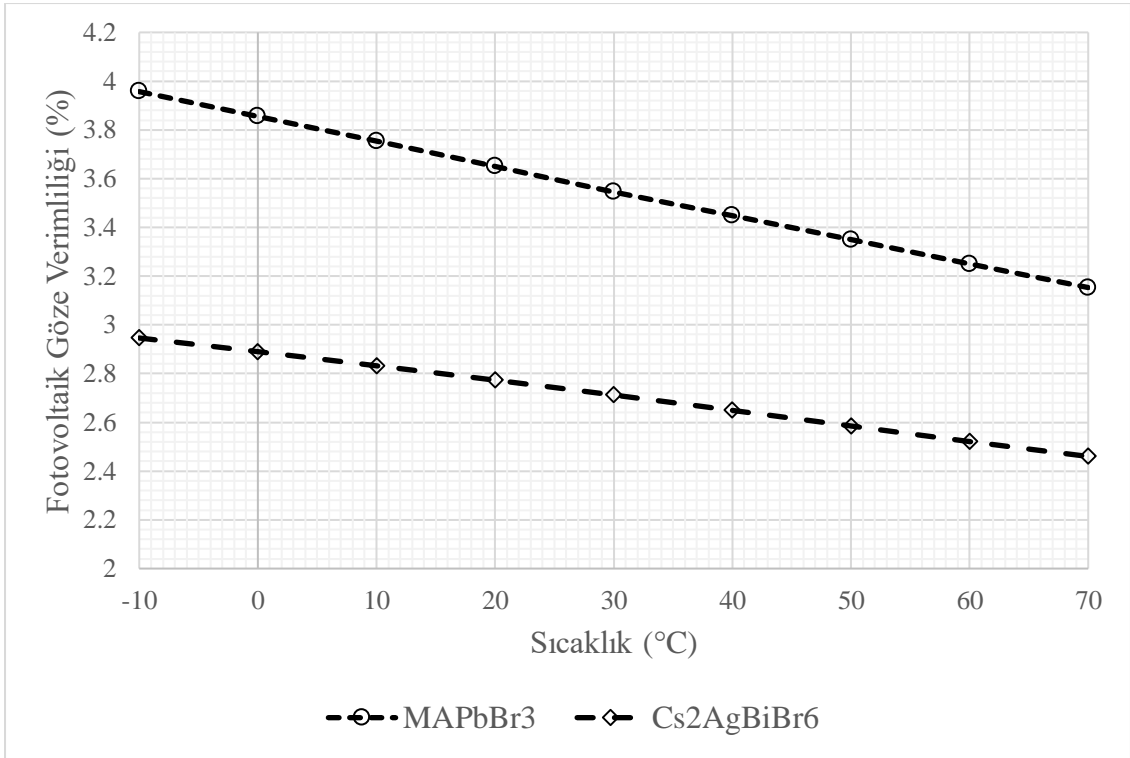
MAPbI<sub>3</sub>, MAPbBr<sub>3</sub> ve Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> için farklı sıcaklıklardaki göze verimlilik değerleri Şekil 12’de betimlenmiştir.

Yarıiletkenler grubunda yer alan perovskit malzemeler, yapısı gereği, artan sıcaklıktan olumsuz etkilenmektedir. Sıcaklığın artması ile, yasak enerji aralığında azalma, elektronların iletim bandına geçişlerinin ve elektron hole çiftlerinin difüzyonunun kolaylaşması, difüzyon akımının artmasının etkisiyle akım yoğunluğunun az miktarda artması, açık devre voltajı ve verimliliğin azalması teorik olarak beklenen davranışlardır.

Şekil 12 incelendiğinde, bütün malzemeler, artan sıcaklıkla beraber verimlilikleri azalarak, bir yarıiletken beklenen davranışı sergilemişlerdir. Sayısal olarak en büyük kayıp MAPbI<sub>3</sub> malzemesinde gözlenmiş olsa da orantısız olarak incelendiğinde en büyük kayıp MAPbBr<sub>3</sub> malzemesinde görülmüştür.



a) MAPbI<sub>3</sub> İçin



b) MAPbBr<sub>3</sub> ve Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> İçin

Şekil 12. Sıcaklığa Bağlı Fotovoltaik Göze Verimlilikleri

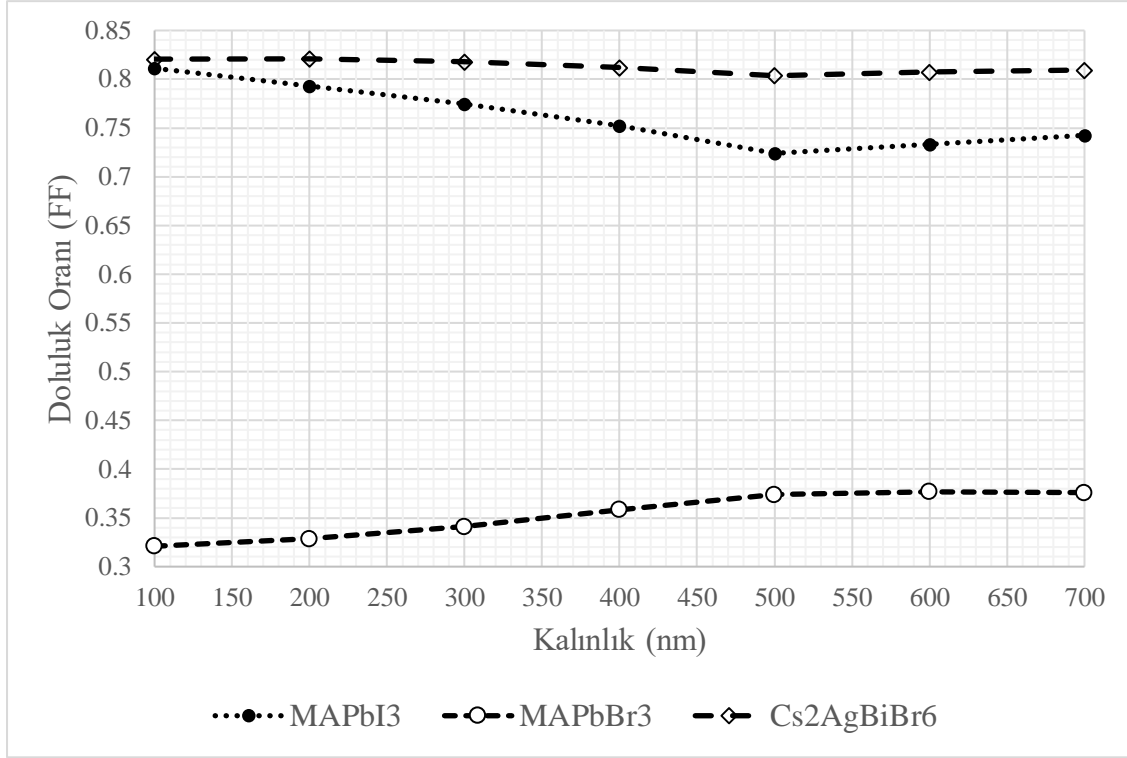
#### 4.4.3. Doluluk Oranı – Kalınlık

MAPbI<sub>3</sub>, MAPbBr<sub>3</sub> ve Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> için farklı kalınlıklardaki doluluk oranları Şekil 13'te betimlenmiştir.

Fotovoltaik malzemelerin doluluk oranının yüksek olması, kullanıldığı gözenin, ideal bir I-V eğrisine daha yakın bir performans sergilediğini ve dolayısıyla daha yüksek bir enerji dönüşüm verimliliğine sahip olduğunu gösterir. Yüksek doluluk oranına sahip fotovoltaik malzemeler, güneş enerjisini daha etkin bir şekilde kullanma potansiyeline sahip olabilir. Bu durum fotovoltaik gözenin kalitesi ve performansı hakkında genellikle olumlu bir gösterge olarak kabul edilir [41].

Şekil 13'teki kalınlığa bağlı FF değerleri incelendiğinde en yüksek doluluk oranına sahip malzemenin Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> olduğu görülmektedir. İncelenen üç malzeme içerisindeki en düşük verimliliğe sahip malzeme olmasına karşın verimliliği belirleyen bundan başka birçok faktör vardır. Bu nedenle doluluk oranının yüksek olmasını doğrudan yüksek verimlilik ile ilişkilendirmek doğru olmayabilir. Daha çok, ideal koşullarda yüksek verimlilik sağlama potansiyeli olduğunun göstergesidir.

MAPbI<sub>3</sub> ve Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> malzemeleri yaklaşık 0,72 ile 0,83 değerleri arasında benzer seviyelerde değişip, benzer davranışlar sergilerken, MAPbI<sub>3</sub>, kalınlık değişiminden Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub>'ye oranla daha çok etkilenmiştir. MAPbBr<sub>3</sub> malzemesi diğer iki malzemenin çok altında kalan yaklaşık 0,32 ile 0,38 değerleri arasında değişip, her iki malzemenin tersi davranış sergilemiştir. Bunun, EK-2'de sunulan I-V ve J-V grafiklerinde, MAPbBr<sub>3</sub> malzemesine ait grafiğin, diğer iki malzemedan farklı, S şekilli I-V ve J-V grafiği olmasından kaynaklandığı düşünülmektedir.



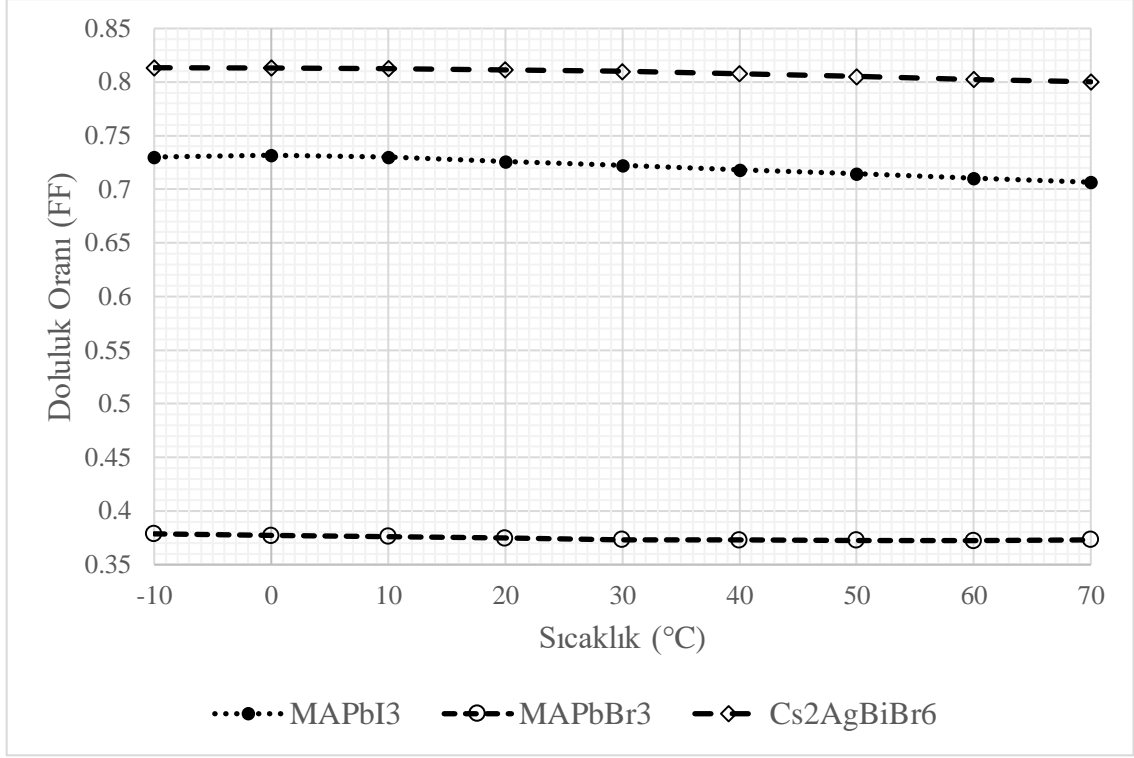
**Şekil 13.** Kalınlığa Bağlı Doluluk Oranı (FF) Değerleri

#### 4.4.4. Doluluk Oranı – Sıcaklık

MAPbI<sub>3</sub>, MAPbBr<sub>3</sub> ve Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> için farklı kalınlıklardaki doluluk oranları Şekil 14’te betimlenmiştir.

Sıcaklığın artması ile beraber açık devre voltajı ve kısa devre akımında oluşacak değişimlerin bir sonucu olarak FF değerinin azalması teoride beklenen bir durumdur. Şekil 14 incelendiğinde, MAPbI<sub>3</sub> ve Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> malzemeleri bu durumu teoriye uygun bir biçimde yansıtmıştır. Ancak MAPbBr<sub>3</sub> malzemesi için FF değeri neredeyse hiç değişmemiştir. Bunun sebebinin, hesaplamalarda gözlemlenen, yavaşça artması gereken J<sub>sc</sub> değerinde görülen azalma olduğu, bunun temelinde de Ek-2’de bahsedilen S şekilli akım gerilim grafiğinde oluşacak bir kaymadan kaynaklı olabileceği düşünülmektedir.





Şekil 14. Sıcaklığa Bağlı Doluluk Oranı (FF) Değerleri

#### 4.5. Duyarlılık Analizi

Yazılımda kullanılan elektriksel parametrelere yönelik duyarlılık analizi,  $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$  malzemesinin 700 nm kalınlığında oluşturulmuş simülasyon ile yapılmıştır. Elektron mobilitesi, boşluk mobilitesi, serbest elektron durumlarının efektif yoğunluğu ve serbest boşluk durumlarının efektif yoğunluğu parametrelerinde oluşacak minimal değişimlerin verimliliği nasıl etkilediğine dair sonuçlar incelenmiştir. Uygulanan duyarlılık analizi yönteminde, bu parametreler içerisinde sadece boşluk mobilitesinin, verimlilikte kayda değer farklılıklar yarattığı gözlemlenmiştir.

İncelemenin yapıldığı aralık, kullanılan elektriksel parametrelerin sadece simülasyon çalışan araştırmacılardan elde edilmesi ve laboratuvar destekli araştırmalarda da simülasyonu çalıştırmaya yetecek parametrelerin paylaşılmamasından kaynaklı kısıtlandığı için, literatürden sağlanamamıştır. Bunun yerine artı ve eksi yönde 0,1 birim aralıklarla 0,3 birim değiştirilerek incelenmiştir. Sonuçlar Çizelge 8’de betimlenmiştir. Literatür verisi “\*” ile işaretlenmiştir.

**Çizelge 8.** Boşluk mobilitesi – Verimlilik Değerleri

<b>Boşluk Mobilitesi (<math>m^2.V^{-1}.s^{-1}</math>)</b>	<b>Verimlilik %</b>
4,7E-05	2,717
4,8E-05	2,723
4,9E-05	2,730
<b>*5,0E-05</b>	<b>*2,736</b>
5,1E-05	2,743
5,2E-05	2,749
5,3E-05	2,754

#### **4.6. Yorum**

Bu araştırma, MAPbI<sub>3</sub>, MAPbBr<sub>3</sub> ve Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> olmak üzere üç farklı perovskit malzemenin OghmaNano yazılımı yardımı ile literatürden belirlenen belli bir mimarideki göze verimliliklerinin, perovskit kalınlığı ve sıcaklık ile değişimini incelemeyi amaçlamıştır.

Yapılan literatür taraması sonucunda, elektriksel parametrelerin elde edildiği araştırmalarda bu çalışmadan farklı mimari kullanıldığı ve bu çalışma ile aynı mimariyi kullanan araştırmalarda ise yazılımı doğru şekilde çalıştırmaya yetecek elektriksel parametrelerin paylaşılmadığı gözlemlenmiştir. Ayrıca OghmaNano yazılımında bir modelleme yapmakta kritik rol oynayan, malzemelerin kırılma indisi ve soğurma katsayısı gibi optik parametrelerin de literatürde bu yazılımı kullanan araştırmalarda betimlenmediği gözlemlenmiştir.

Elektriksel parametrelerin eksikliğinin üstesinden gelmek amacı ile benzer girdileri kullanan AMPS-1D, SCAPS-1D vb. yazılımlar ile yapılan araştırmalar da literatür taramasına dahil edilmiştir. Böylece perovskit malzemelerin elektriksel parametreleri hakkında OghmaNano yazılımını doğru biçimde çalıştırmaya yetecek veri toplanabilmiştir.

Optik parametrelerin eksikliđinin üstesinden gelmek için malzemelerin kırılma indisi ve sođurma katsayısı deđerleri, bu parametrelere özel çevrimiçi kütüphanelerde araştırılmıřtır. Kıyaslama yapmayı hedefleyen bu arařtırmada, çevrimiçi kütüphanelerden elde edilebilen verilerin ait olduđu malzeme çeřitliliđinin az olmasından dolayı üç ile sınırlandırılmıřtır.

Arařtırmanın sonuçları, yukarıda bahsedilen elektriksel ve optik parametrelerin bulunmasındaki zorluklar nedeniyle literatürdeki arařtırmalar ile dođrulanamamasına karřın benzer nitelikte olduđu gözlemlenmiřtir.

Kullanılan MAPbI<sub>3</sub> ve MAPbBr<sub>3</sub> malzemelerinin düzlemsel (planar) yapıda olduklarına literatürde deđinilirken, Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> malzemesi için herhangi bir bilgi verilmemiřtir. Ancak OghmaNano yazılımı malzemenin yapısından çok optik ve elektriksel parametrelerini kullanarak simülasyon oluřturmaya elveriřli bir yazılımdır. Bu nedenle, malzemelerin farklı yapılarından ortaya çıkabilecek optik ve elektriksel parametrelerdeki deđiřimlerin laboratuvar ortamında incelenmesi daha sonra yazılıma entegre edilmesi gerekmektedir.

Arařtırma için seçilen parametreler çerçevesinde, perovskit güneř gözesi çalışmalarında kullanmaya en uygun malzemenin, en yüksek verimliliđe sahip olan MAPbI<sub>3</sub> olduđu kanısına varılmıřtır.

Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> malzemesi için verimlilik hesaplamaları oldukça düşük sonuçlar vermiř olsa da hem toksisite sorunu için çözüm sunması hem de doluluk oranı yüksek olması nedeniyle verimlilik artırma çalışmalarını ile geliřtirilip kullanılabilir potansiyel bir malzeme olduđu kanısına varılmıřtır.

Gelecekteki deneysel çalışmalar, perovskit malzemelerin güneř gözesi olarak en uygun şekilde nasıl kullanılabilirliđini gösterecektir. Bununla beraber, OghmaNano yazılımının, laboratuvar arařtırmaları ile birlikte kullanılması ve kullanılan parametrelerin bu arařtırmaların raporlarında detaylıca betimlenmesi ile gelecek simülasyon çalışmalarında gerçeđe çok daha yakın sonuçlar elde edilmesi beklenmektedir.

## 6. KAYNAKLAR

- [1] Smil, V., *Energy: A Beginner's Guide*, Oneworld Publications, Chapter Four, 85-126, 2006.
- [2] Kadirođlu, O. ve Sökmen, C. N., 1994, NÜKLEER ENERJİ İLE ELEKTRİK ÜRETİMİ, *Bilim ve Teknik Dergisi*, 319.
- [3] Sorrell, S., Speirs, J., Bentley, R., Brandt, A., & Miller, R. (2010). Global oil depletion: A review of the evidence. *Energy Policy*, 38(9), 5290-5295. <https://doi.org/10.1016/j.enpol.2010.04.046>.
- [4] Ellabban, O., Abu-Rub, H., & Blaabjerg, F. (2014). Renewable energy resources: Current status, future prospects and their enabling technology. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 39, 748-764. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2014.07.113>
- [5] Nelson J., *The Physics of Solar Cells*, Imperial College Press, Chapter 1, 1-16, 2003.
- [6] 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.
- [7] Luque, A., & Hegedus, S., *Handbook of Photovoltaic Science and Engineering*, John Wiley & Sons, Chapter 1, 1-43, 2003.
- [8] Snaith, Henry. (2013). Perovskites: The Emergence of a New Era for Low-Cost, High-Efficiency Solar Cells. *The Journal of Physical Chemistry Letters*. 4. 3623–3630. [10.1021/jz4020162](https://doi.org/10.1021/jz4020162).
- [9] Green, Martin & Ho-Baillie, Anita & Snaith, Henry. (2014). The emergence of perovskite solar cells. *Nature Photonics*. 8. [10.1038/NPHOTON.2014.134](https://doi.org/10.1038/NPHOTON.2014.134).
- [10] R. Yasodharan, A. P. Senthilkumar, J. Ajayan and P. Mohankumar, "Effects of layer thickness on Power Conversion Efficiency in Perovskite solar cell: A numerical simulation approach," 2019 5th International Conference on Advanced Computing & Communication Systems (ICACCS), Coimbatore, India, 2019, pp. 1132-1135, doi: [10.1109/ICACCS.2019.8728410](https://doi.org/10.1109/ICACCS.2019.8728410).
- [11] Sadiq, Muhammad & Khan, Muhammad & Arif, Muhammad & Khattak, Amir & Ullah, Kaleem & Afridi, Shaista. (2021). Numerical investigation of a new approach based on perovskite  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  absorber layer for high-efficiency solar cells. *Materials Research Express*. 8. doi: [10.1088/2053-1591/ac2377](https://doi.org/10.1088/2053-1591/ac2377).

- [12] Mekky, Abdel-Baset. (2020). Electrical and Optical Simulation of Hybrid Perovskite-Based Solar Cell at Various Electron Transport Materials and Light Intensity. *Annales de Chimie - Science des Matériaux*. 44. 179-184. 10.18280/acsm.440304.
- [13] Pham, M., Harris, J., Shaffer, J. *et al.* Bismuth perovskite as a viable alternative to Pb perovskite solar cells: device simulations to delineate critical efficiency dynamics. *J Mater Sci: Mater Electron* **30**, 9438–9443 (2019). <https://doi.org/10.1007/s10854-019-01275-3>
- [14] A. Monsur, S. S. Mahtab, S. S. Ahmed, R. Chakma and M. J. Alam, "Design and Optimization of Perovskite Solar Cell with Thin ZnO Insulator Layer as Electron Transport," *2018 International Conference on Advancement in Electrical and Electronic Engineering (ICAEEE)*, Gazipur, Bangladesh, 2018, pp. 1-4, doi: 10.1109/ICAEEE.2018.8643012.
- [15] Amrit Kumar Mishra, R.K. Shukla, Electrical and optical simulation of typical perovskite solar cell by GPVDM software, *Materials Today: Proceedings*, Volume 49, Part 8, 2022, Pages 3181-3186, ISSN 2214-7853, <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.11.376>.
- [16] Komal Kumari, Tapas Chakrabarti, Abir Jana, Disha Bhattachartjee, Bhaskar Gupta, Subir Kumar Sarkar, Comparative Study on Perovskite Solar Cells based on Titanium, Nickel and Cadmium doped BiFeO<sub>3</sub> active material, *Optical Materials*, Volume 84, 2018, Pages 681-688, ISSN 0925-3467, <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2018.07.071>.
- [17] Wikipedia contributors. (2022, December 22). Perovskite. In Wikipedia, The Free Encyclopedia. Retrieved 08:50, January 16, 2023, from <https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Perovskite&oldid=1128819319>
- [18] Wikipedia contributors. (2023, January 14). Perovskite (structure). In *Wikipedia, The Free Encyclopedia*. Retrieved 09:11, January 16, 2023, from [https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Perovskite\\_\(structure\)&oldid=1133515180](https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Perovskite_(structure)&oldid=1133515180)
- [19] Marronnier, Arthur, 2018. *Anharmonicity and Instabilities in Halide Perovskites for Last Generation Solar Cells*.
- [20] Best Research-Cell Efficiency Chart (NREL). <https://www.nrel.gov/pv/assets/pdfs/best-research-cell-efficiencies.pdf> (Erişim tarihi: 16 Ocak 2023)

- [21] Akihiro Kojima, Kenjiro Teshima, Yasuo Shirai, and Tsutomu Miyasaka, 2009. *Organometal Halide Perovskites as Visible-Light Sensitizers for Photovoltaic Cells*, *Journal of the American Chemical Society* 131 (17), 6050-6051. DOI: <https://doi.org/10.1021/ja809598r>
- [22] Rongjian Sa, Wenyang Zha, Zujun Ma, Rusheng Yuan, Diwen Li, 2020. *Stable lead-free perovskite solar cells: A first-principles investigation*. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* 239, 118493. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2020.118493>
- [23] G. Niu, X. Guo, ve L. Wang, 2015. “*Review of recent progress in chemical stability of perovskite solar cells*,” *Journal of Materials Chemistry A*, c. 3, s. 17, ss. 8970-8980.
- [24] T. Leijtens, G. E. Eperon, S. Pathak, A. Abate, M. M. Lee ve H. J. Snaith, 2013. “*Overcoming ultraviolet light instability of sensitized TiO<sub>2</sub> with meso-superstructured organometal tri-halide perovskite solar cells*,” *Nature Communications*, c. 4, s. 1, ss.1-8.
- [25] B. Kim, G. H. Moon, S. C. Park, J. Jang ve Y. S. Kang, “*Effects of crystal size and surface coverage of perovskites on electron recombination in solar cells*,” *Materials Letters*, c. 242, ss. 191- 194, 2019.
- [26] Priyanka Kajal, Satvasheel Powar, Kunal Ghosh, 2018. *Manufacturing Techniques of Perovskite Solar Cells*, *Applications of Solar Energy*, Pages 341-364. [https://doi.org/10.1007/978-981-10-7206-2\\_16](https://doi.org/10.1007/978-981-10-7206-2_16)
- [27] Istiak Hussain, Hoang Phong Tran, Jared Jaksik, Justin Moore, Nazmul Islam, M. Jasim Uddin, 2018. *Functional materials, device architecture, and flexibility of perovskite solar cell*, *Emergent Materials*, Pages 1:133–154. <https://doi.org/10.1007/s42247-018-0013-1>
- [28] Vishesh Manjunath, Ramya Krishna, Suresh Maniarasu, Easwaramoorthi Ramasamy, Sakthivel Shanmugasundaram, Ganapathy Veerappan, 2018. *Perovskite Solar Cell Architectures*, *Perovskite Photovoltaics Basic to Advanced Concepts and Implementation*, Pages 89-121. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-812915-9.00004-6>
- [29] S.A. Olaleru, J.K. Kirui, D. Wamwangi, K.T. Roro, B. Mwakikunga, 2020. *Perovskite solar cells: The new epoch in photovoltaics*. *Solar Energy* 196, Pages 295-309. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2019.12.025>

- [30] A. Kowsar, M. Billah, S. Dey, S. C. Debnath, S. Yeakin and S. F. Uddin Farhad, "Comparative Study on Solar Cell Simulators," *2019 2nd International Conference on Innovation in Engineering and Technology (ICIET)*, Dhaka, Bangladesh, 2019, pp. 1-6, doi: 10.1109/ICIET48527.2019.9290675.
- [31] R. C. MacKenzie, T. Kirchartz, G. F. Dibb, and J. Nelson, "Modeling nongeminate recombination in P3HT:PCBM solar cells," *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 115, pp. 9806-9813, 2011.
- [32] Zhu, L., Zhang, M., Xu, J. *et al.* Single-junction organic solar cells with over 19% efficiency enabled by a refined double-fibril network morphology. *Nat. Mater.* **21**, 656–663 (2022). <https://doi.org/10.1038/s41563-022-01244-y>
- [33] Majeed, N., Saladina, M., Krompiec, M., Greedy, S., Deibel, C., MacKenzie, R. C. I., Using Deep Machine Learning to Understand the Physical Performance Bottlenecks in Novel Thin-Film Solar Cells. *Adv. Funct. Mater.* 2020, 30, 1907259. <https://doi.org/10.1002/adfm.201907259>
- [34] H. Mäckel and R. C. I. MacKenzie, Determination of Charge-Carrier Mobility in Disordered Thin-Film Solar Cells as a Function of Current Density, *Phys. Rev. Appl.* **9**, 34020 (2018).
- [35] X. Shi, V. Nádaždy, A. Perevedentsev, J. M. Frost, X. Wang, E. von Hauff, R. C. I. MacKenzie, and J. Nelson, Relating Chain Conformation to the Density of States and Charge Transport in Conjugated Polymers: The Role of the  $\beta$ -phase in Poly(9,9-dioctylfluorene), *Phys. Rev. X* **9**, 021038 (2019).
- [36] Mackenzie, Roderick & Shuttle, Christopher & Chabinye, Michael & Al-Hashimi, Mohammed. (2012). Extracting Microscopic Device Parameters from Transient Photocurrent Measurements of P3HT:PCBM Solar Cells. *Advanced Energy Materials*. **2**. 662-669. 10.1002/aenm.201100709.
- [37] OghmaNano (GPVDM) Yazılımı, Versiyon: 7.88.064
- [38] Abdulsalam, Hassan & Babaji, Garba & Tela Abba, Habu. (2018). The Effect of Temperature and Active layer thickness on the Performance of  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  Perovskite Solar Cell: A Numerical Simulation approach.

- [39] R.Jeyakumar, Atanu Bag, 2021. *Methylammonium Lead Bromide Based Planar Perovskite Solar Cells Using Various Electron Transport Layers*. Solar Energy 221, Pages 456-467. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2021.04.029>
- [40] Mohandes, A., Moradi, M. & Nadgaran, H. Numerical simulation of inorganic Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> as a lead-free perovskite using device simulation SCAPS-1D. *Opt Quant Electron* **53**, 319 (2021). <https://doi.org/10.1007/s11082-021-02959-z>
- [41] Sharma, Dinesh & Purohit, Ghanshyam. (2014). Analysis of the Effect of Fill Factor on the Efficiency of Solar PV System for Improved Design of MPPT.
- [42] Bird, R. E., and C. Riordan, 1986: Simple Solar Spectral Model for Direct and Diffuse Irradiance on Horizontal and Tilted Planes at the Earth's Surface for Cloudless Atmospheres. *J. Appl. Meteor. Climatol.*, 25, 87–97, [https://doi.org/10.1175/1520-0450\(1986\)025<0087:SSSMFD>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0450(1986)025<0087:SSSMFD>2.0.CO;2).
- [43] M. G. Villalva, J. R. Gazoli and E. R. Filho, "Comprehensive Approach to Modeling and Simulation of Photovoltaic Arrays," in *IEEE Transactions on Power Electronics*, vol. 24, no. 5, pp. 1198-1208, May 2009, doi: 10.1109/TPEL.2009.2013862.
- [44] Green, M. A., Emery, K., Hishikawa, Y., Warta, W., and Dunlop, E. D. (2016) Solar cell efficiency tables (version 47). *Prog. Photovolt: Res. Appl.*, 24: 3– 11. doi: 10.1002/pip.2728.
- [45] Manzoor, Salman & Haeusele, Jakob & Bush, Kevin & Palmstrom, Axel & Carpenter, Joe & Yu, Zhengshan & Bent, Stacey & Mcgehee, Michael & Holman, Zachary. (2018). Optical modeling of wide-bandgap perovskite and perovskite/silicon tandem solar cells using complex refractive indices for arbitrary-bandgap perovskite absorbers. *Optics Express*. 26. 27441. 10.1364/OE.26.027441.
- [46] Sarah Brittan and Erik C. Garnett. Measuring  $n$  and  $k$  at the Microscale in Single Crystals of CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbBr<sub>3</sub> Perovskite. *The Journal of Physical Chemistry C* **2016** 120 (1), 616-620 <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b11075>
- [47] Huygen J. Jöbsis, Valentina M. Caselli, Sven H. C. Askes, Erik C. Garnett, Tom J. Savenije, Freddy T. Rabouw, Eline M. Hutter; Recombination and localization: Unfolding the pathways behind conductivity losses in Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> thin films. *Appl. Phys. Lett.* 27 September 2021; 119 (13): 131908. <https://doi.org/10.1063/5.0061899>



[48] R. Saive, "S-Shaped Current–Voltage Characteristics in Solar Cells: A Review," in *IEEE Journal of Photovoltaics*, vol. 9, no. 6, pp. 1477-1484, Nov. 2019, doi: 10.1109/JPHOTOV.2019.2930409.].

## EKLER

### EK 1 – Dalga Boyuna Bağlı Kırılma İndisi ve Soğurma Grafikleri

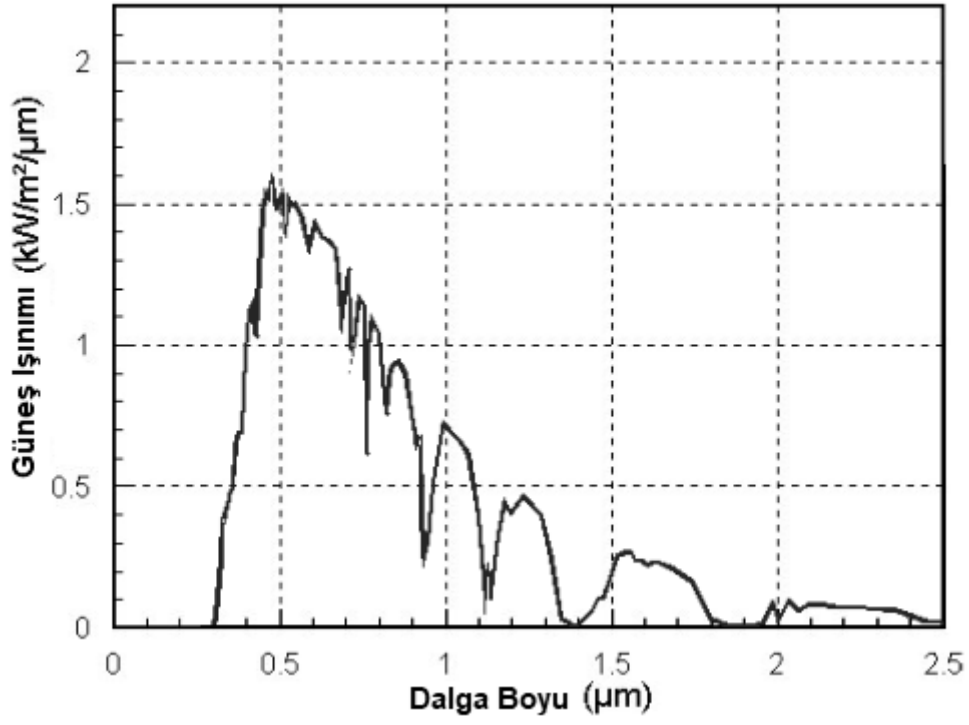
Güneş ışınım eğrisi (aynı zamanda güneş spektrumu olarak da bilinir), güneşin farklı dalga boylarında yaydığı elektromanyetik ışınımın dağılımını ifade eder. Güneş ışınım eğrisi, Şekil 15’te de görüldüğü üzere, ultraviyole (UV), görünür ve kızılötesi (IR) ışık dahil olmak üzere geniş bir dalga boyu aralığını kapsar [42].

Öte yandan, soğurma eğrisi fotovoltaik bir malzemenin veya cihazın farklı dalga boylarında güneş ışınımını soğurma verimliliğini temsil eder. Farklı malzemelerin soğurma özellikleri değişkenlik gösterir ve soğurma eğrileri, gelen güneş enerjisinin kullanılabilir elektrik enerjisine dönüştürülmesinde ne kadar verimli olduklarını gösterir.

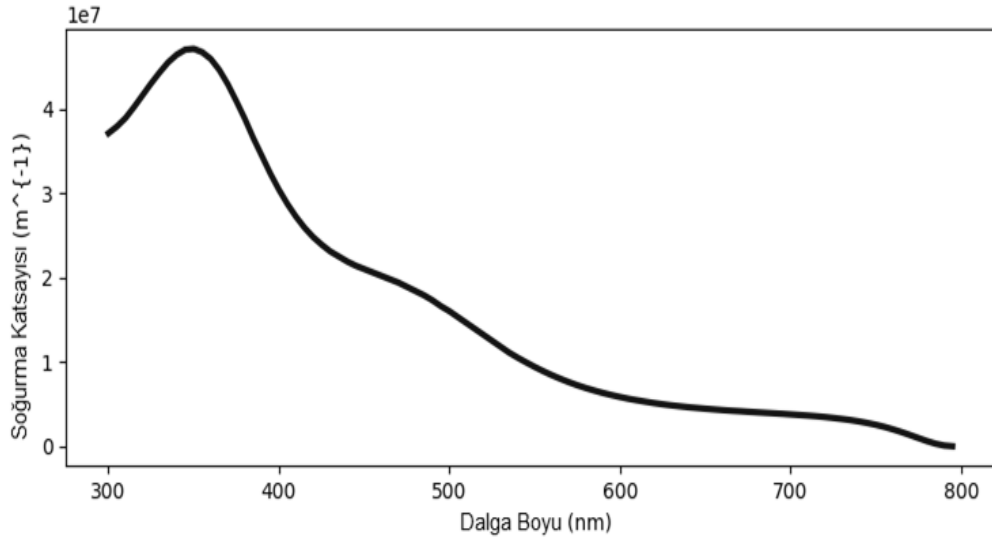
Güneş ışınım eğrisi ve soğurma eğrisi arasındaki ilişki, bir güneş gözesinin verimliliğini önemli ölçüde etkiler. Eğer bir fotovoltaik malzemenin soğurma eğrisi, güneş spektrumuna iyi bir şekilde uymazsa, o malzeme belirli dalga boylarındaki ışığı yeterince iyi soğuramaz ve genel verimliliği düşer. Verimli soğurma, malzemenin daha yüksek miktarda yük taşıyıcıları oluşturmasına olanak tanır ve bu da verimliliği olumlu etkiler [43].

Kırılma indisi, bir ortamdaki ışığın hızının, vakumdaki hızına oranıdır. Bir ortamın kırılma indisi ne kadar yüksekse, ışığın bu ortamdan geçerken hızı o kadar düşer ve ışık yolu daha fazla bükülür. Yüksek kırılma indisi olan yarıiletken malzemeler, ışığın malzeme içinde daha fazla kırılmasına ve bu nedenle daha fazla soğurulmasına olanak tanır. Optimum kırılma indisi değerleri, fotovoltaik gözelerin güneş ışığını en iyi şekilde soğurmasını, böylece güneş elektrik dönüşümünü daha verimli yapmasını sağlar [44].

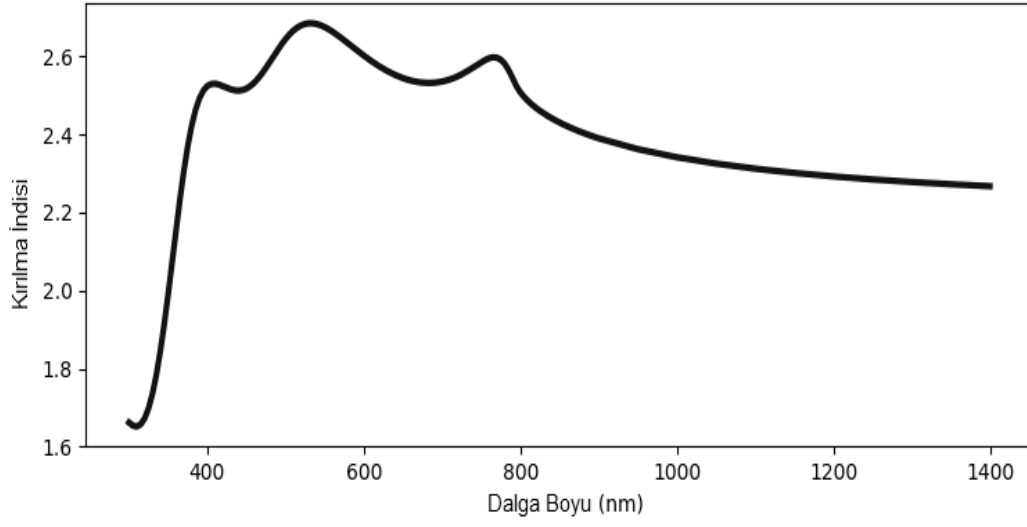
Bu bilgiler ışığında, çalışılan malzemeler içerisinde, en yüksek verimliliğin, güneş ışınım eğrisi ile benzerliği, soğurma katsayısı ve kırılma indisi değerlerinin diğer malzemelerden yüksek oluşu nedeniyle, MAPbI<sub>3</sub> malzemesinin kullanıldığı simülasyonda görülmesi beklenir. Çünkü, soğurma katsayısı için Şekil 16,18,20 ve kırılma indisi için Şekil 17,19,21 kıyaslanırsa, en yüksek değerlere sahip malzemenin MAPbI<sub>3</sub> olduğu anlaşılabilir. Diğer iki malzeme ise hem soğurma katsayısı hem de kırılma indisi değerleri açısından birbirine benzerlik göstermektedir. Bu nedenle birbirine yakın verimlilik değerlerine sahip olması beklenir.



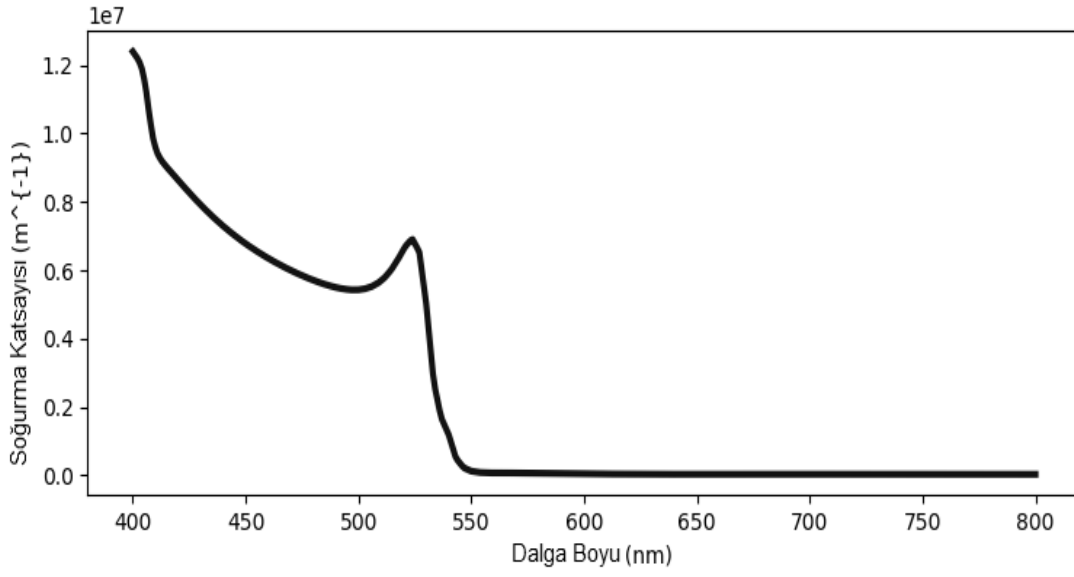
Şekil 15. AM1.5 Değeri İçin Güneş Işınımı - Dalga Boyu Grafiği [42]



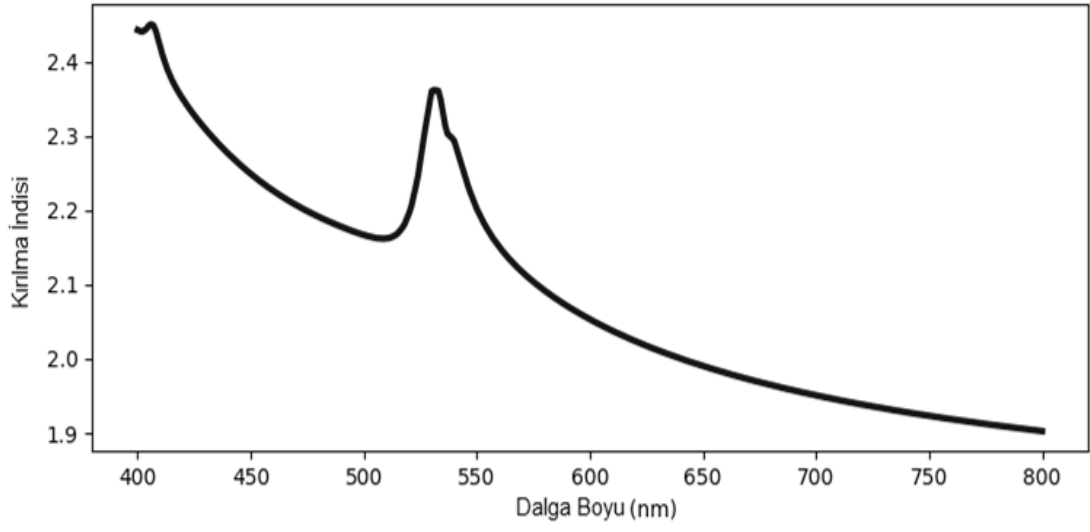
Şekil 16. MAPbI<sub>3</sub> Soğurma Katsayısı - Dalga Boyu Grafiği [45]



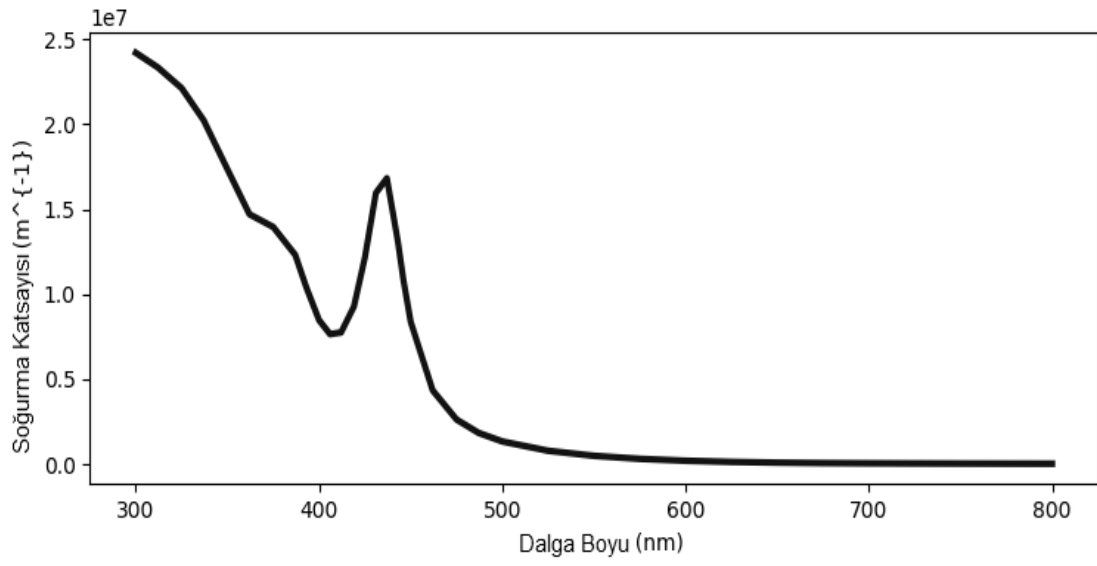
Şekil 17. MAPbI<sub>3</sub> Kırılma İndisi - Dalga Boyu Grafiği [45]



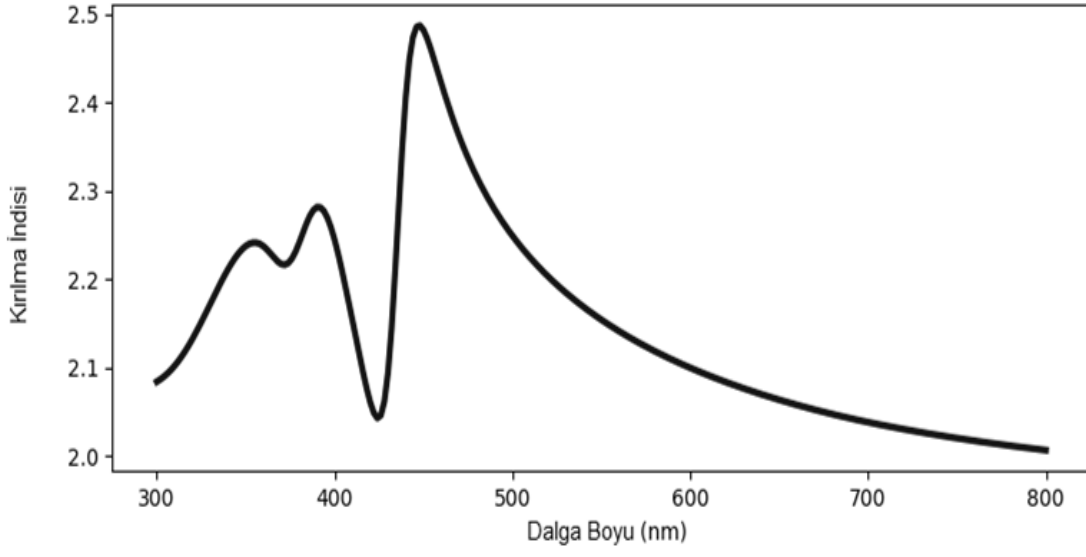
Şekil 18. MAPbBr<sub>3</sub> Soğurma Katsayısı - Dalga Boyu Grafiği [46]



Şekil 19. MAPbBr<sub>3</sub> Kırılma İndisi - Dalga Boyu Grafiği [46]



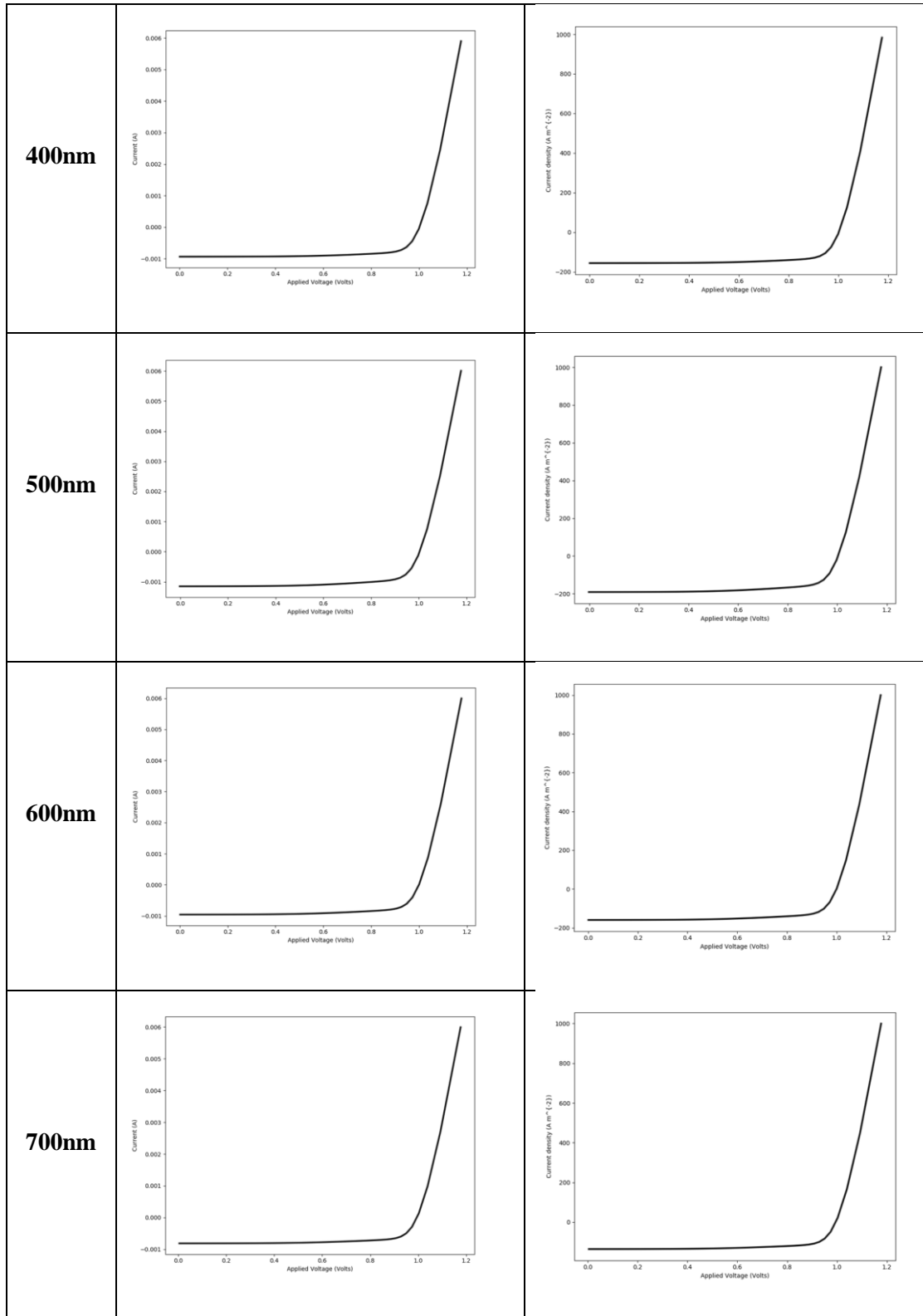
Şekil 20. Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> Soğurma Katsayısı - Dalga Boyu Grafiği [47]



**Şekil 21.** Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> Kırılma İndisi - Dalga Boyu Grafiği [47]

**EK 2 – Her Malzemenin Her Kalınlığına Ait Akım-Voltaj ve Akım Yoğunluğu – Voltaj Grafikleri**

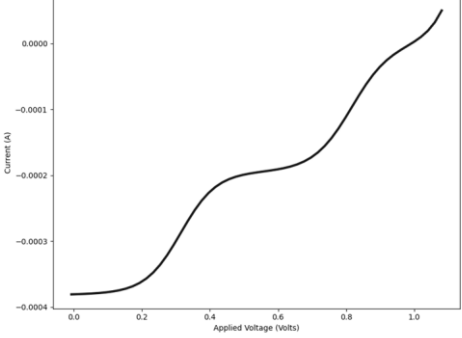
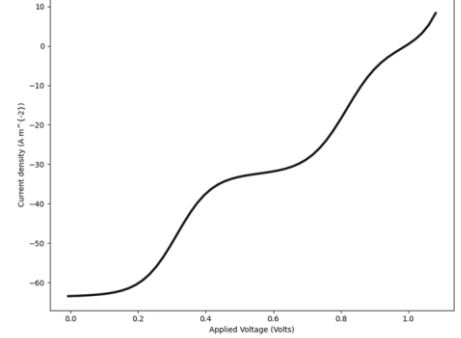
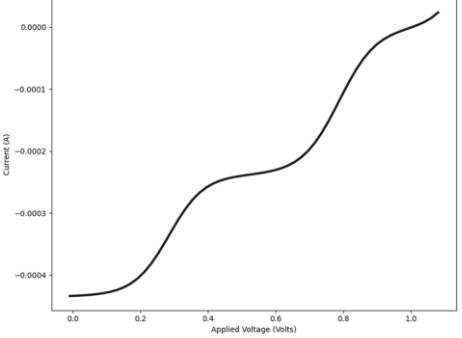
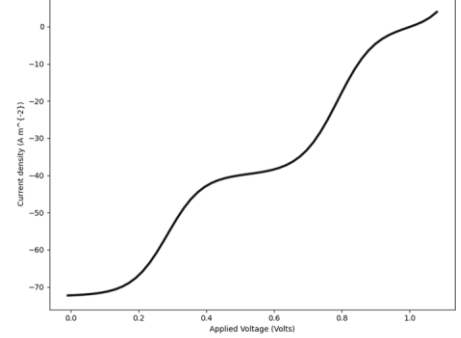
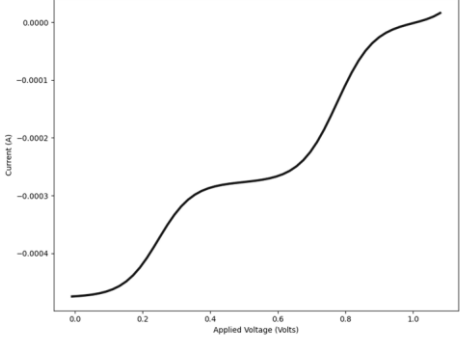
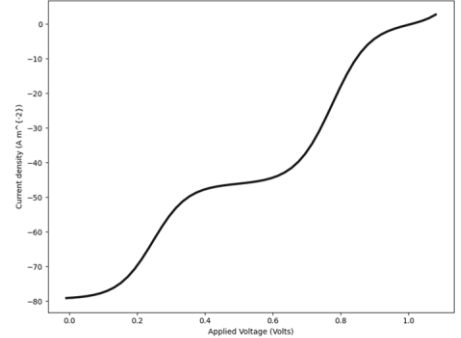
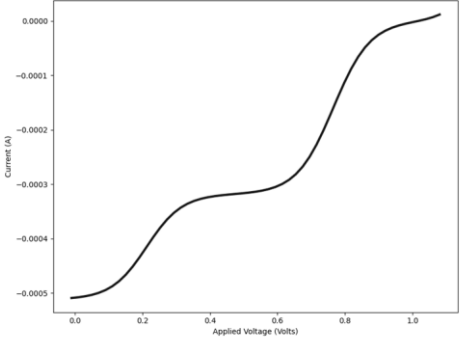
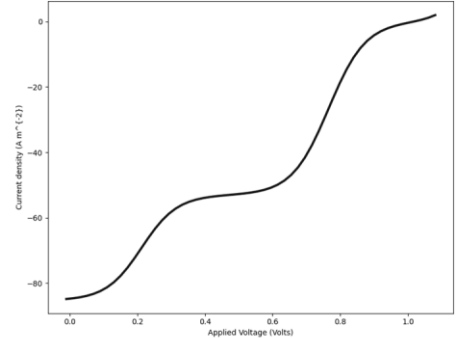
<b>MAPbI<sub>3</sub></b>		
<b>Kalınlık</b>	<b>Y: Akım(A)- X: Voltaj(V) Grafiği</b>	<b>Y: Akım Yoğunluğu(A/m<sup>2</sup>)- X: Voltaj(V) Grafiği</b>
<b>100nm</b>		
<b>200nm</b>		
<b>300nm</b>		

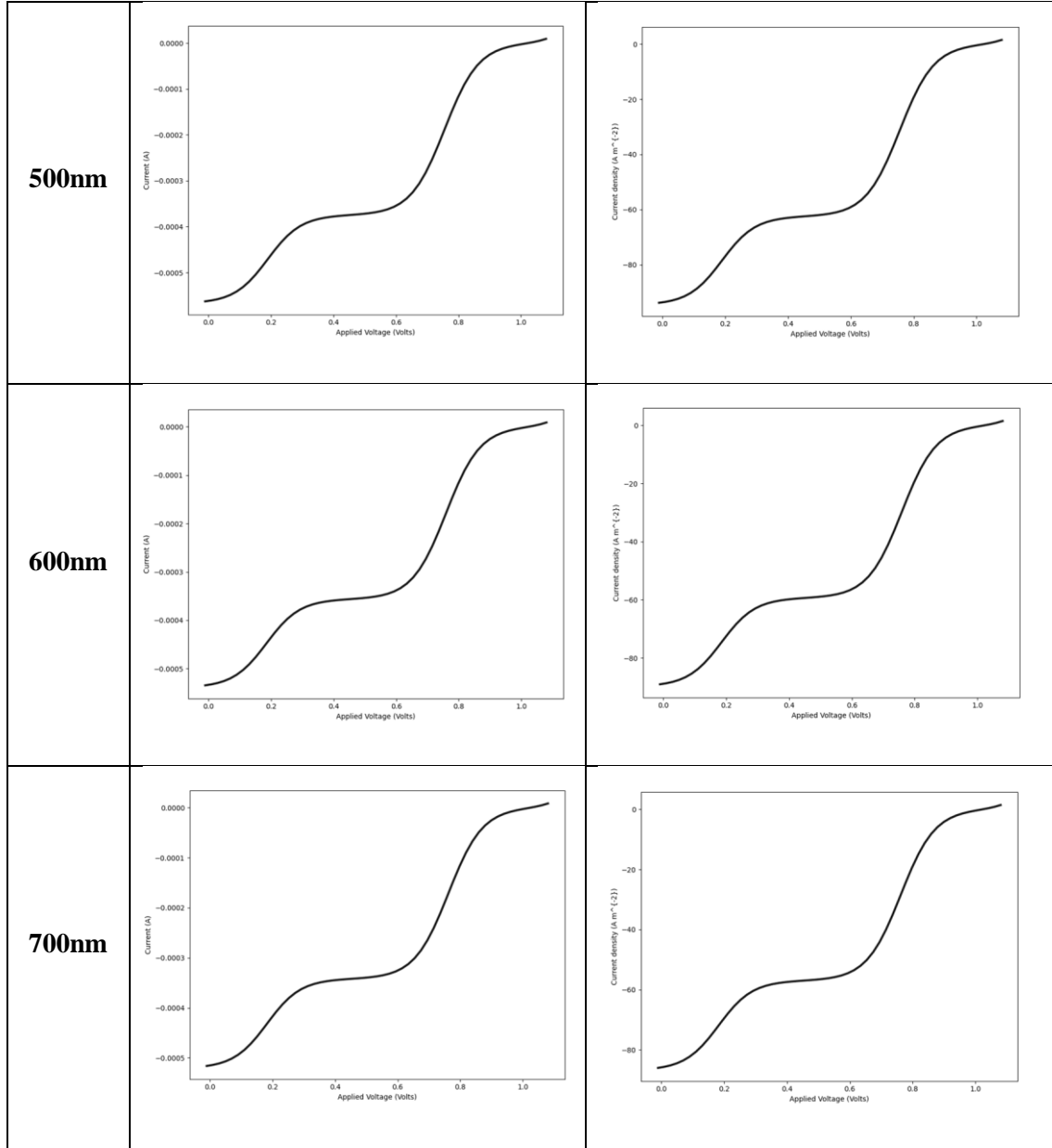


**Çizelge 9.** MAPbI<sub>3</sub> İçin Her kalınlığa Ait Akım-Voltaj ve Akım Yoğunluğu-Voltaj Grafikleri [37]



**MAPbBr<sub>3</sub>**

<b>Kalınlık</b>	<b>Y: Akım(A)- X: Voltaj(V) Grafiği</b>	<b>Y: Akım Yoğunluğu(A/m<sup>2</sup>)- X: Voltaj(V) Grafiği</b>
<b>100nm</b>		
<b>200nm</b>		
<b>300nm</b>		
<b>400nm</b>		



**Çizelge 10.** MAPbBr<sub>3</sub> İçin Her kalınlığa Ait Akım-Voltaj ve Akım Yoğunluğu-Voltaj Grafikleri [37]

Güneş gözelerinde görülen S-şekilli akım-voltaj (I-V) eğrisi, genellikle bir gözenin sağlıklı işlemediğinin göstergesidir. Bazı durumlarda, I-V eğrisi “S” şeklini alabilir ve bu genellikle gözede bir problem olduğunu gösterir.

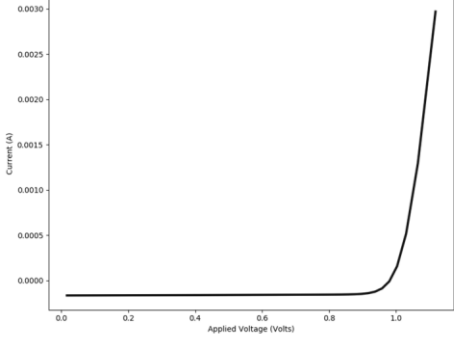
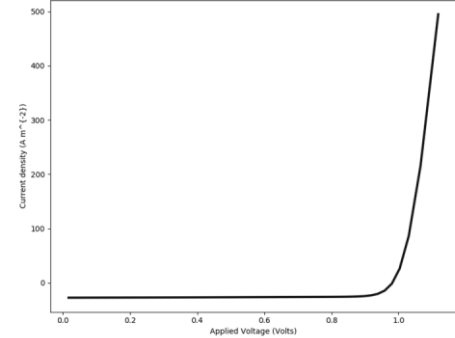
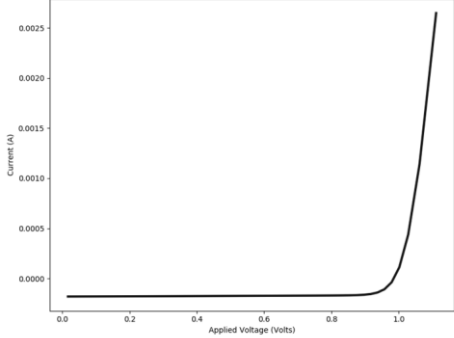
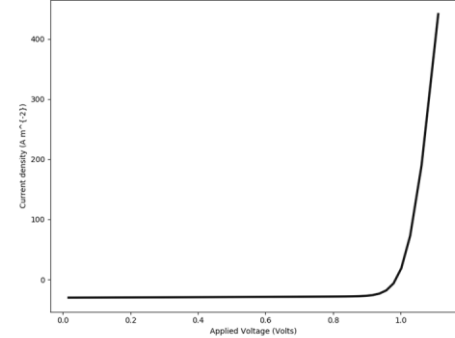
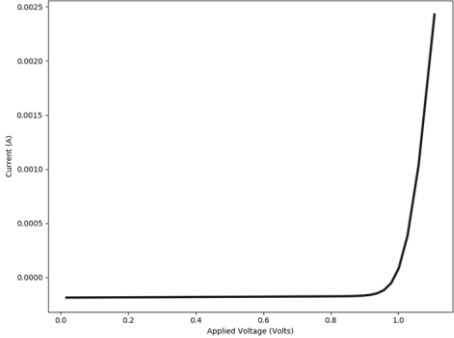
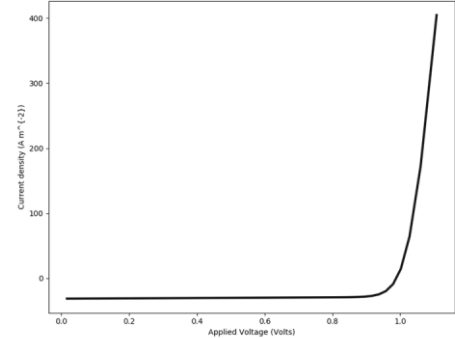
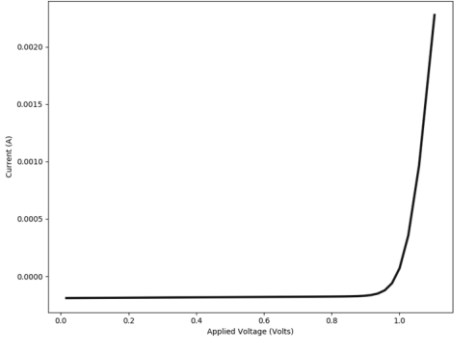
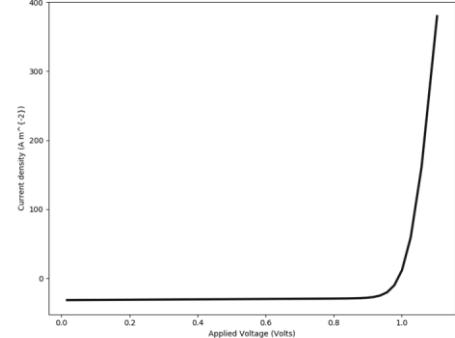
S-şekilli I-V eğrisinin oluşmasının çeşitli nedenleri vardır ve bu genellikle bir ya da birden çok göze parametresindeki değişiklikten kaynaklanır. Bu değişiklikler genellikle gözede kusurlardan, göze tasarımındaki problemlerden, ya da gözenin üretimindeki hatalardan kaynaklanır.

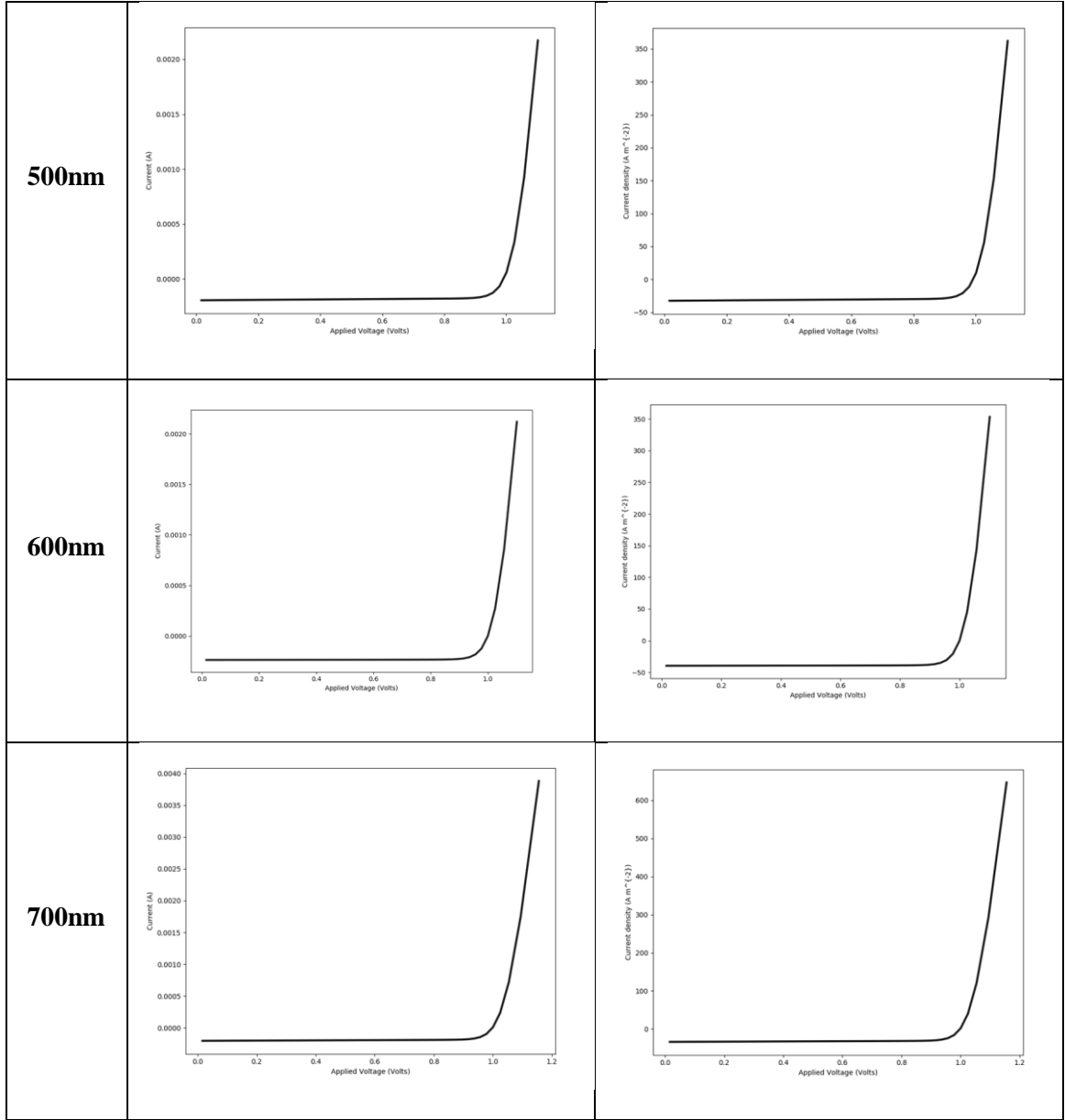
S-şekilli I-V eğrisinin oluşmasındaki yaygın nedenler şunlardır:

- Yüzey Rekombinasyonu: Gözenin aktif yüzeyindeki defektlerden kaynaklanan aşırı yüzey rekombinasyonu, S-şekilli bir I-V eğrisine neden olabilir.
- Şant (Shunt) Direnci: Gözelerdeki düşük şant direnci, S-şekilli bir I-V eğrisine yol açabilir. Düşük şant direnci, genellikle gözedeeki kusurlardan veya gözenin kötü üretiminden kaynaklanır.
- Yetersiz Ohmik İletim: Gözenin elektrotları ve yarıiletken malzemesi arasındaki ohmik iletimin yetersiz olması da S-şekilli bir I-V eğrisine yol açabilir.

S-şekilli bir I-V eğrisi gözlemlendiğinde, bu genellikle gözenin performansını ciddi şekilde azaltır ve bu nedenle göze tasarımı ve üretim sürecinde dikkatlice yönetilmesi gereken bir sorundur. Bu bilgiler ışığında Çizelge 10 incelendiğinde MAPbBr<sub>3</sub> malzemesinin ideal olmayan bir davranış sergilediği söylenebilir. [48].

**Cs<sub>2</sub>AgBrBi<sub>6</sub>**

<b>Kalınlık</b>	<b>Y: Akım(A)- X: Voltaj(V) Grafiği</b>	<b>Y: Akım Yoğunluğu(A/m<sup>2</sup>)- X: Voltaj(V) Grafiği</b>
<b>100nm</b>		
<b>200nm</b>		
<b>300nm</b>		
<b>400nm</b>		



**Çizelge 11.**  $\text{Cs}_2\text{AgBrBi}_6$  İçin Her kalınlığa Ait Akım-Voltaj ve Akım Yoğunluğu-Voltaj Grafikleri [37]

