

T.C.
YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**YENİ SİYANO GRUPLARI İÇEREN YARIİLETKEN KÜÇÜK
MOLEKÜL VE POLİMERLERİN ORGANİK GÜNEŞ PİLLERİNDE
KULLANILMASI**

Sinem NİLİSAZ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Fizik Anabilim Dalı

Fizik Programı

Danışman

Prof. Dr. Serap GÜNEŞ

Ocak, 2021

T.C.
YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**YENİ SİYANO GRUPLARI İÇEREN YARIİLETKEN KÜÇÜK MOLEKÜL
VE POLİMERLERİN ORGANİK GÜNEŞ PİLLERİNDE KULLANILMASI**

Sinem NİLİSAZ tarafından hazırlanan tez çalışması 29.01.2021 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Yıldız Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı, Fizik Programı **YÜKSEK LİSANS TEZİ** olarak kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Serap GÜNEŞ
Yıldız Teknik Üniversitesi
Danışman

Jüri Üyeleri

Prof. Dr. Serap GÜNEŞ, Danışman
Yıldız Teknik Üniversitesi

Doç. Dr. Fatih ONGÜL, Üye
Ardahan Üniversitesi

Dr. Öğr. Üyesi Macide CANTÜRK RODOP, Üye
Yıldız Teknik Üniversitesi

Danışmanım Prof. Dr. Serap GÜNEŞ sorumluluğunda tarafımca hazırlanan “Yeni Siyano Grupları İçeren Yarıiletken Küçük Molekül Ve Polimerlerin Organik Güneş Pillerinde Kullanılması” başlıklı çalışmada veri toplama ve veri kullanımında gerekli yasal izinleri aldığımı, diğer kaynaklardan aldığım bilgileri ana metin ve referanslarda eksiksiz gösterdiğimi, araştırma verilerine ve sonuçlarına ilişkin çarpıtma ve/veya sahtecilik yapmadığımı, çalışmam süresince bilimsel araştırma ve etik ilkelerine uygun davrandığımı beyan ederim. Beyanımın aksinin ispatı halinde her türlü yasal sonucu kabul ederim.

Sinem NİLİSAZ

İmza

Bu alıřma, Tbitak tarafından desteklenen 117F079 numaralı proje ile desteklenmiřtir.

Aileme

Hayatımdaki en güzel ve en değerli iki varlık olan canım kızım Tuğçe'ye ve canım oğlum Ömer' e benim çalışmalarımda ve hayatımda bana destek olarak, anlayışlarını ve sevgilerini benden esirgemedikleri, sevgileriyle beni hep güçlü kıldıkları için teşekkür ederim. Yanımda olduğunuz için çok şanslıyım. Hayat adına birlikte daha çok şeyi beraber başaracağımıza inanıyor ve sizi çok seviyorum.

Benden sevgilerini, yardımlarını ve anlayışlarını esirgemeyen her daim benim yanımda olan, beni her anlamda destekleyen canım anneme, babama ve kardeşime teşekkür ediyorum ve sizleri seviyorum.

TEŞEKKÜR

Tez çalışmamda ve yaşamımda çok özel ve önemli bir yeri olan, güzel bir kalbe, engin bir bilgi ve tecrübeye sahip, bana her zaman desteğini gerek tez çalışmalarımda gerekse hayatımda yanımda olarak gösteren, başarılı olmak için disiplinli çalışmanın önemini ve yaptığımız işi severek yaparsak bizi başarıya götüreceğini bizlere öğreten bunun için de çok çalışmamız gerektiğini bizlere her daim vurgulayan, yaptığı çalışmalarla uluslararası platformda kendisini bir bilim kadını olarak kanıtlamış, hayatımda olmasından ve kendisi ile çalışmaktan onur duyduğum ve tüm kalbimle sevdiğim danışman hocam, sayın Prof. Dr. Serap GÜNEŞ'e,

Bu tez çalışmamda kullanılan organik molekül ve polimerlerin sentezini yapan, bilgisini ve desteğini esirgemeyen YTÜ Kimya Bölümü'nden Dr. Çiğdem YÖRÜR GÖRECI'ye,

Bilgisini ve desteğini benden esirgemeyen ailemden birisi gibi olduğunu bana hissettiren, pes etmeyen karakteriyle ve yaptığı çalışmalarla kendisini kanıtlamış ve tez çalışmamda DFT kullanılarak yapılan teorik çalışmalar için benden desteğini esirgemeyen sevdiğim canım kardeşim Siirt Üniversitesi Fizik Bölümünden Dr. Mehmet KAZICI' ya,

Teorik ölçümler için bizlerden desteğini ve yardımlarını esirgemeyen Giresun Üniversitesi Öğretim Üyesi Doç.Dr. Halil GÖKÇE'ye,

Döngüsel voltametri ve fotolüminesans ölçümleri için Pamukkale Üniversitesi Öğretim Üyesi Dr. Çiğdem ŞAHİN'e,

Atomik Kuvvet Mikroskobu (AFM), Floresans Mikroskobu ve XRD ölçümleri için Öğr. Gör. Melih Beşir ARVAS'a,

Laboratuvarıda çalışmaya ilk başladığım dönemlerde bilgisi ve tecrübeleriyle bana destek olan, kızkardeşim saydığım, Dr. Sinem BOZAR'a,

Güler yüzlülüğü, bilgisi ve yardımları ile bana destek olan, YTÜ Fizik Bölümünden Arş. Gör. Dr. Fatma Pınar CHOİ'ye,

Fizikte olduđu kadar pilotlukta da bir o kadar başarılı olan ve yüzümüzü herdaim güldüren, tez çalışmalarım sırasında psikolojik desteğini esirgemeyen Dr. Adem KARSLI'ya,

Tez çalışmaarım sırasında benden desteğini esirgemeyen, canım arkadaşım Ezgi AZ'a,

Çok teşekkür ederim.

Sinem NİLİSAZ

İÇİNDEKİLER

ŞEKİL LİSTESİ.....	xiii
TABLO LİSTESİ.....	xivv
ÖZET.....	xv
ABSTRACT.....	xviii
1 GİRİŞ	1
1.1 Literatür Özeti	1
1.2 Tezin Amacı	6
1.3 Hipotez	6
2 TEMEL BİLGİLER.....	7
2.1 Güneş Pilleri	7
2.1.1 Birinci Nesil Güneş Pilleri.....	8
2.1.2 İkinci Nesil Güneş Pilleri.....	9
2.1.3 Üçüncü Nesil Güneş Pilleri.....	11
2.2 Güneş Pillerinin Çalışma Prensipleri	12
2.3 Organik Güneş Pilleri.....	15
2.3.1 Birinci Nesil Güneş Pilleri.....	16
3 DENEYSEL ÇALIŞMALAR	20
3.1 3,3'-(2,5-desiloksi-1,4-fenilen)-bis(2-(4-bromofenil) akrilonitril) (SM-Br) Akseptör Molekülü ile Yapılan Çalışmalar	20
3.1.1 SM-Br Molekülünün Sentezi.....	20
3.1.2 Aygıt Yapımı.....	23
3.1.3 SM-Br Molekülünün HOMO-LUMO Seviyelerinin Teorik ve Deneysel Olarak İncelenmesi.....	25
3.1.4 SM-Br Molekülünün Morfolojik ve Yapısal Analizi.....	28
3.1.5 SM-Br Molekülü İçeren Organik Güneş Pillerinin Akım Yoğunluğu- Voltaj Karakteristikleri.....	29
3.2 3,3'-(2,5-Dibutiloksi-1,4-fenilen)-bis(2-(4-klorofenil) akrilonitril	

Bileşiminin Sentezi ($C_{32}H_{30}Cl_2N_2O_2$) (SM-Cl) Molekülünün Organik Güneş Pillerinde Kullanılması.....	33
3.2.1 SM-Cl Molekülünün Sentezi.....	33
3.2.2 Aygıt Yapımı.....	34
3.2.3 SM-Cl Molekülünün HOMO-LUMO Enerji Seviyelerinin Teorik ve Deneysel Olarak Belirlenmesi.....	35
3.2.4 SM-Cl Molekülünün Morfolojik ve Yapısal Analizi.....	36
3.2.5 SM-Cl Molekölü İçeren Organik Güneş Pillerinin Akım Yoğunluğu-Voltaj Karakteristikleri.....	38
3.3 P7 Polimerinin Üçlü Bileşenli Organik Güneş Pillerinde Kullanılması....	40
3.3.1 P7 Polimerinin Sentezi ve Karakterizasyonu.....	40
3.3.2 P7 Polimeri ile Hazırlanan Organik Güneş Pillerinin Akım-Voltaj Karakterizasyonu.....	42
4 SONUÇLAR VE ÖNERİLER.....	44
KAYNAKÇA.....	46
Tezden Üretilmiş Yayınlar	53

SİMGE LİSTESİ

Al	Alüminyum
Ar	Aromatik Grup
Cu	Bakır
CuInSe ₂	Bakır İndiyum Diselenit
CIGS	Bakır İndiyum Galyum Diselenit
Br	Brom
λ	Dalga Boyu
I _d	Diyot Akımı
CdCl ₃	Dötero Kloroform
eV	Elektronvolt
CH ₂	Metilen
CH ₂ Br	Metilen Bromür
F _e	Fermi Enerjisi
I _{ph}	Fotoakım
Ga	Galyum
Ag	Gümüş
C ₇ H ₁₆	Heptan
Hz	Hertz
H	Hidrojen
HCl	Hidroklorik Asit
In	İndiyum
Cd	Kadmiyum
CdS	Kadmiyum sülfür
CdTe	Kadmiyum Tellür
C	Karbon
Cl	Klor
I _m	Maksimum Akım
CH ₃	Metil
MHz	Mega Hertz
HNO ₃	Nitrik Asit

Se	Selenyum
°C	Santigrat
CN	Siyano Grubu
NaHCO ₃	Sodyum Bikarbonat
NaBr	Sodyum Bromür
NaOH	Sodyum Hidroksit
H ₂ O	Su
S	Sülfür
TiO ₂	Titanyum Dioksit
KOH	Potasyum Hidroksit

KISALTMA LİSTESİ

AFM	Atomik Kuvvet Mikroskobu
A-Si	Amorf Silisyum
ATR	Işınımın Yansımalarla Kuvvetlenmesi
DMSO	Dimetil Sülfoksit
ETL	Elektron Taşıyıcı Tabaka
F-TIR	Fourier Dönüşümlü Kızılötesi Spektrometresi
LC-MS	Sıvı Kromatografisi -Kütle Spektrometresi
MC-Si	Mikro Kristal Silisyum
NIR	Near İnfrared Reflectans
PCE	Güç Dönüşüm Verimi
PL	Fotoluminesans
PV	Fotovoltaik
SM	Küçük Molekül
TLC	İnce Tabaka Kromatografisi
XRD	X Işını Kırınımı

ŞEKİL LİSTESİ

Şekil 2.1	Işık Altındaki Güneş Pilinin İdeal Denge Devresi	13
Şekil 2.2	Bir Güneş Pilinin Akım-Gerilim (I-V) Özellikleri	13
Şekil 2.3	Organik Güneş Pillerinde Yük Transferi.....	17
Şekil 3.1	SM-Br ve SM-Cl Moleküllerinin Sentez Basamakları.....	21
Şekil 3.2	SM-Br Molekülünün Sentezi.....	22
Şekil 3.3	İnce Filmlerin Kaplanması İçin Kullanılan Dönel Kaplama Sistemi.....	23
Şekil 3.4	Metal Buharlaştırmak İçin Kullanılan Sistem.....	24
Şekil 3.5	Akım-Gerilim Karakterizasyonunun Yapıldığı Azot Ortamı İçeren Eldivenli Kutu Sistemi.....	24
Şekil 3.6	(a) optimize edilmiş yapı ve enerjiyi göstermektedir.....	25
	(b) SM-Br Molekülünün HOMO-LUMO Seviyelerini Göstermektedir.....	25
Şekil 3.7	SM-Br Molekülün Döngüsel Voltamogramı	26
Şekil 3.8	Aktif tabakada kullanılan malzemelerin enerji seviyelerinin Karşılaştırılması.....	27
Şekil 3.9	Farklı aktif tabaka filmlerinin PL grafiği.....	27
Şekil 3.10	SM-Br Molekülün AFM görüntüsü	28
Şekil 3.11	SM-Br Molekülün XRD görüntüsü.....	29
Şekil 3.12	(a) Tavlanmamış referans cihazının J-V eğrisi.....	31
	(b) Tavlanmış aktif tabakalı referans cihazının J-V eğrisi.....	31
	(c) Tavlanmamış Aktif Tabakada SM-Br Molekülü Olan Referans Cihazlarının J-V Eğrileri.....	31
Şekil 3.13	SM-Cl Molekülünün Sentezi.....	34
Şekil 3.14	SM-Cl Molekülünün DFT/B3LYP Metodu kullanarak 6-31 G(d) Temel Setinde Hesaplanmış.....	35
	(a) Optimize edilmiş yapıları ve enerjileri.....	35
	(b) Moleküler orbital sınırları ve Homo-Lumo enerji seviyeleri.....	35
Şekil 3.15	SM-Cl Molekülünün Döngüsel Voltametri Sonucu.....	36

Şekil 3.16 SM-Cl Molekülünün AFM Görüntüsü.....	37
Şekil 3.17 SM-Cl Molekülünün XRD Görüntüsü.....	37
Şekil 3.18 SM-Cl Molekülünün Floresan Mikroskobu Görüntüsü.....	38
Şekil 3.19 P3HT: PCBM İçerisine Eklenen SM-Cl Molekülünün Akım-Gerilim (J-V) Eğrisi.....	38
Şekil 3.20 SM-Cl Molekölü İçeren ve İçermeyen Organik Güneş Pillerinin Normalize Kuantum Verimi, SM-Cl İnce Filminin Soğurma Grafiği.....	39
Şekil 3.21 Monomer 2'nin Sentezi.....	40
Şekil 3.22 P7 Polimerinin Sentezi.....	41
Şekil 3.23 (a) Referans P7 Polimeri İçermeyen, Tavlanmamış.....	43
(b) P7 Polimeri İçeren Güneş Pillerinin Akım-Gerilim Karakteristikleri.....	43

TABLO LİSTESİ

Tablo 3.1	İncelenen aygıtların fotovoltaiik parametreleri.....	31
------------------	--	----

Yeni Siyano Grupları İçeren Yarıiletken Küçük Molekül Ve Polimerlerin Organik Güneş Pillerinde Kullanılması

Sinem NİLİSAZ

Fizik Anabilim Dalı

Yüksek Lisans Tezi

Danışman: Prof. Dr. Serap GÜNEŞ

Son zamanlarda organik güneş pillerinde fulleren olmayan akseptörlerin kullanımı oldukça popüler hale gelmiştir. İççe geçmiş bir ağ yaklaşımı ile oluşturulan donör ve akseptör karışımı, organik güneş pilinin aktif katmanını oluşturur. Bu donör ve akseptör karışımına bir bileşen daha eklendiğinde üçlü (ternary) karışım elde edilir. Literatürde, aktif tabakada üçlü karışımlar kullanıldığında yüksek verimlilik ve stabiliteye sahip organik güneş pillerinin elde edilebileceği gösterilmiştir.

Bu yüksek lisans tezinde, aktif katmana siyano grupları içeren iki farklı molekül ve bir polimer üçüncü bileşen olarak eklenerek tersine çevrilmiş yapıda organik güneş pilleri hazırlanmış ve karakterize edilmiştir. Aktif tabakaya küçük molekül ve polimer ilave edildiğinde, küçük molekül ve polimer içermeyen referans güneş pillerine göre organik güneş pillerinin verimliliğinin arttığı görülmüş ve verimlilik artışının bilimsel nedenleri incelenmiştir.

Anahtar Kelimeler: Küçük moleküllü güneş pilleri, polimer güneş pilleri ve üçlü karışım güneş pilleri.

**YILDIZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

Use of Cyano Containing Semiconducting Small Molecules and Polymers in Organic Solar Cells

Sinem NİLİSAZ

Department of Physics

Master of Science

Advisor: Prof. Dr. Serap GÜNEŞ

Recently, the use of non-fullerene acceptors in organic solar cells is highly popular. Donor acceptor blends with interpenetrating networks approach forms the active layer of an organic solar cell. When one more component is added to this donor and acceptor mixture, a ternary blend is obtained. In the literature, it has been shown that organic solar cells with high efficiency and stability can be obtained when ternary blends are employed in the active layer.

In this master's thesis, two different molecules containing cyano groups and a polymer were added into the active layer, and organic solar cells were fabricated and characterized. It has been observed that the efficiency of organic solar cells increases when the small molecules and polymer are added to the active layer compared to reference solar cells that do not contain small molecules and polymer, and the scientific reasons for the increase in efficiency have been examined.

Keywords: Small molecule solar cells, polymer solar cells, ternary blends solar cells

YILDIZ TECHNICAL UNIVERSITY
GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES

1.1 Literatür Özeti

Dünyada enerji tüketimi, sanayileşme ve nüfus artışına bağlı olarak artmaktadır. Günümüzde enerji ihtiyacının büyük çoğunluğu, geleneksel yollarla fosil yakıtlar kullanılarak sağlanmaktadır. Ancak, kullanılan bu geleneksel yöntemler hem çevre kirliliğine sebep olmakta, hemde yüksek maliyetlidirler. Pek çok dezavantaja sahip fosil yakıtlar kullanılan geleneksel yöntemler yerine, yenilenebilir enerji kaynaklarına yönelmek enerji üretiminde en önemli hedeflerden biri haline gelmiştir. Yenilenebilir kaynaklar arasında güneş enerjisi, ucuz ve temiz olması bakımından oldukça avantajlıdır. Güneş enerjisi, güneş pilleri kullanılarak doğrudan elektriğe dönüştürülebilir. İlk defa 1839 yılında Fransız fizikçi Edmond Becquerel yaptığı deneyle ilk adımı atmıştır [1]. Güneş pilleri, tarihsel gelişimleri boyunca üretimlerinde kullanılan yarıiletken malzemelerin türüne göre üç gruba ayrılmaktadır [2]: Birinci, ikinci ve üçüncü nesil güneş pilleri. Üçüncü nesil güneş pilleri, organik, hibrit, boya duyarlı gibi yeni nesil teknolojileri kapsamaktadır [3,4].

Organik güneş pillerinin gelişiminde kilometre taşı olmuş ve diğer çalışmalara ışık tutmuş temel çalışmalar ve bunların literatüre katkıları aşağıdaki özetlenmiştir:

C.W. Tang, 1986 yılında donör (çinko fitolasiyanin) ve akseptör (perilendiimid) malzemeyi çift katmanlı yapıda iki metal elektrot arasına sıkıştırarak, güç dönüşüm verimini % 0.47 civarında bulmuştur [5]. Tang'ın yaptığı çalışmada, donör ve akseptör malzeme, genel organik çözücülerde çözünmediklerinden vakum işlemine tabi olarak, süblimasyon tekniği

kullanılarak hazırlanmıştır. Bu yapı, literatürde çift katmanlı yapı olarak bilinmektedir ve verim % 0.5 civarında kalmıştır. Bunun nedeni, ışık

soğurulmasıyla oluşan elektron delik çiftlerinden sadece donör/akseptör ara yüzeyine yakın yerlerde olanların serbest yük taşıyıcılarına dönüştürülebilmesi, diğerlerinin organik malzemelerin eksiton difüzyon uzunluklarının kısa olması sebebiyle ara yüzeyde ayrılmadan rekombinasyon sebebiyle kaybıyla sonuçlanmaktadır.

1992 yılında N.S Sarıçiftçi ve arkadaşları, polimer ve fulleren malzemeleri arasında ultrahızlı yük transferi olduğunu keşfetmişlerdir [6]. Bu keşiften sonra, genel organik çözücülerde çözünebilen malzemeler kullanılarak, organik güneş pillerinin ıslak işlem metotları (dönel kaplama, bıçak ağzı kaplama, püskürtme vb) ile üretilebilme fikri doğmuştur. Bu yöntemler, kolay ve ucuz yöntemler olduğundan organik güneş pillerinin üretimini de kolay ve ucuz hale getirmektedir. Donör ve akseptör malzemenin aynı çözücü içerisinde karıştırılmasıyla hazırlanan çözeltiden (aktif tabaka) oluşturulan filmlerin iki metal elektrot arasına sıkıştırılmasıyla organik güneş pilleri hazırlandı ve böylece, donör ve akseptör ara yüzeylerinin sadece donör ve akseptörün birbirine temas ettiği geometrik ara yüzeyde değil de filmin tüm hacmi boyunca yayılabilmesinden dolayı, hacim heteroeklemi konsepti (bulk heterojunction) olarak adlandırıldı. Dolayısıyla bu konseptte, iki katlı yapıdan farklı olarak donör ve akseptörün birbirine temas ettiği geometrik ara yüzeyden ziyade, ara yüzeyin tüm filmin hacmine yayılması hedeflendi.

2001 yılında Sean Shaheen ve arkadaşları MDMO-PPV [poli(2-metoksi-5-(3',7'-dimetiloksi) -1,4-fenilenilen)] ve PCBM malzemelerini klorobenzen çözücüsü içerisinde çözerek ITO/PEDOT/MDMO-PPV: PCBM/LiF/Al aygıt yapısında organik güneş pili üretmişlerdir. Toluen çözücüsü yerine hem donör, hem de akseptör malzemenin daha iyi çözünmesini sağlayan klorobenzen kullanarak ve tek başına alüminyum (Al) üst kontak yerine lityum florid (LiF) ve Al'un beraber kullanılmasıyla hazırlanan organik güneş pillerinin verimini % 2.5 olarak bulmuşlardır [7].

2003'de Franz Padinger ve arkadaşları P3HT [poli(3-hekziltiyofen)] ve PCBM ([6,6]-fenil-C₆₁-butirik asit metil ester) malzemelerini aktif tabaka olarak kullanarak hacim heteroeklemlili organik güneş pilleri hazırlamışlardır. Üst

metal kontak olarak ise Al kullanmışlardır. Bu çalışmada, aktif tabakasında P3HT: PCBM kullanılan organik güneş pilleri hazırlandıktan sonra sıcaklık işlemi uygulanmasıyla organik güneş pillerinin veriminin % 3.5 değerine ulaştığı gözlenmiştir. Bu çalışmayla birlikte, üretim sonrası sıcaklık işlemi terimi, literature katılmıştır ve pek çok çalışmada aktif tabakaya metal kontaklar kaplandıktan önce ya da sonra sıcaklık işlemi uygulanmasının organik güneş pillerinin verimini arttırdığı gözlenmiştir.[8].

2006 yılında J. Y Kim ve arkadaşları sol-jel metodunu kullanarak titanyum oksit (TiO_x) tabakası hazırlamışlar ve aktif tabaka üzerine kaplamışlardır. TiO_x optik aralayıcı olarak kullanılmış ve böylece de elektrik alan şiddetinin maksimum değerinin aktif tabaka içerisinde kalması sağlanmış, bunun sağladığı katkıyla da % 5 verim elde edilmiştir [9].

2009'da Sung Heum Park, Kwang Lee, Alan J. Heeger ve diğer çalışma arkadaşları aktif tabakasında düşük bant aralıklı donör poli [N - 9'-heptadesanil-2,7-karbazol-alt-5,5-(4',7'-di-2-thienyl-2',1',3'-benzotiadiazol)] (PCDTBT) ve 6,6-fenil C70-butrik asit metil ester (PC₇₀BM) kullanarak hazırladıkları organik güneş pilleri için %6.1 verim elde etmişlerdir [10]. Düşük bant aralıklı malzemelerin soğurma spektrumları, yakın kızıl ötesi bölgeye kadar uzanmakta ve güneş emisyon spektrumuyla uyumlu olduğundan güneşten gelen fotonların hasatlanması açısından avantajlı hale gelmektedir. Böylece, foton hasatına katkı sağlayacak düşük bant aralıklı malzemelerin sentezinin önemi zaten bilinmekteyken daha önemli hale gelmiştir.

2012 yılında Jiaoyan Zhou ve arkadaşları küçük molekül, DR₃TBDT (metilrhodanin tertiyofen di (metoksi) benzo[1,2-b:4,5-b'] ditiyofen ve PC₇₁ BM'i 1:08 w/w oranında karıştırarak hazırladıkları aktif tabakadan oluşan organik güneş pili için % 6.92 verim elde etmişlerdir. Bu karışımın içerisine silikon bazlı organik bir polimer olan PDMS (polidimetilsiloksan) ilave edildiğinde verimin iyileştiğini gözlemlemişler ve verimi % 7.38 olarak bulmuşlardır [11]. Geçmişte, literatürde elde edilen en iyi sonuçlar, polimerlerin donör olarak kullanıldığı çalışmalarda elde edilmişken, bu

çalışma, küçük moleküllerin de donör malzeme olarak kullanılabileceğini göstermiştir.

2014'de Qian Zhang ve çalışma arkadaşları bir donör molekül olan DRCN7T [bis(metaniliden))bis (3-etil-4-oksoyazolidin-5,2- diyliden)) dimalononitril] ve akseptör PC₇₁ BM (1:0.5w/w) kullanarak ITO/PEDOT:PSS/DRCN7T: PC₇₁ BM/PFN/Al aygıt yapısında organik güneş pili hazırlamışlardır. 90 °C'de 10 dakika tavlama işlemi yapılmış, elektron taşıyıcı tabaka olarak PFN [poli [(9,9- bis (3'-(N, N-dimetilamino) propil)-2,7-fluoren)-alt-2,7-(9,9-dioktilfluoren)]] kullanarak % 9.3 verim elde etmişlerdir [12]. Aktif tabakanın üzerine daha önce kullanılmamış bir elektron taşıyıcı tabakasının kullanılması, özellikle PCBM ve üst metal kontak arasına elektron taşıyıcı tabakanın eklenmesiyle elektronun ekstraksiyonu kolaylaştıracak tabakaların eklenmesinin önemi vurgulanmıştır.

Zuo XiaO, Xue Jia ve Liming Ding 2017 yılında düşük bant aralıklı ve yakın kızıl ötesi bölgede soğurma yapabilen bileşiklerin aktif tabakaya eklenmesiyle üç bileşenli aktif tabaka kullanarak organik güneş pilleri üretmiş ve %12.16 'lık verim elde etmişlerdir. Bu donör ve akseptörden oluşan yapıya üçüncü bir akseptör malzeme olan PC₇₁ BM eklenmesiyl (D:A₁:A₂) üçlü yapıyı oluşturmuşlardır. ITO/ZnO/PEDOT: PSS/D: A₁: A₂/MoO₃/Ag aygıt yapısı ile elde edilen organik güneş pilinin verimini %14.08 olarak bulmuşlardır [13]. Aktif tabakaya yeni bir akseptör malzemenin eklenmesiyle oluşturulan üçlü karışımlardan hazırlanan organik güneş pillerinin dikkat çekici verimlere ulaşılması, literatürün ilgisini üçlü karışımlara çekmiştir. Aktif tabaka, sadece donör ve akseptör (D: A) karışımlarından oluşmaktayken iki farklı ve donör veya iki farklı akseptör ve bir donörden oluşan üçlü karışımlardan oluşan aktif tabakalarla verimin daha da arttırılabileceği literatürde derin araştırmalara konu olmuştur.

2019 yılında Jianxio Wang, Jian Wang ve Fujun Zhang, bir donör PTB7-Th ve bir akseptör IEICO-4F kullanarak hazırladıkları organik güneş pili için % 10.74 verim elde etmişken üçüncü bileşen olarak diğer akseptör IT-4F'ü %25 oranında ekleyerek verimi, % 11.78 olarak bulmuşlardır [14].

2020 yılında Yuanbao Lin ve arkadaşları bir donör polimer olan PM6 (Poli[(2,6-(4,8-bis(5-(2-etilhekzil-3-fluoro)thiophen-2-yl)-benzo[1,2-b:4,5-b']ditiyofen))-alt-(5,5-(1',3'-di-2-tiyenil-5',7'- bis(2-etilhekzil)benzo[1',2'-c:4',5'-c']ditiyofen-4,8-dion)], ile akseptör Y6 [2,2'-((2Z,2'Z)-((12,13-bis(2-etilhekzil)-3,9-diundesil12,13-dihidro[1,2,5]tiyadiazol[3,4e] tiyeno[2,"30":4',5'] tiyeno[2',3':4,5] pirolo[3,2-g]tiyeno[2',3':4,5]tiyeno[3,2-b]indol2,10 didil)bis(methanildiyen))bis(5,6-difluoro-3-oxo-2,3-dihidro-1H-inden-2,1diyliden))dimalononitril]ve PC₇₁BM malzemelerini, (%0.5w) kloronaftalin ile birlikte kloroform içerisinde çözerek verimi, %16 bulmuşlardır. Bu üçlü yapıya ağırlıkça % 0.004 n -tipi takviye edici BV (benzil viyolen) ilave etmişler, verimi%17.1olarakbulmuşlardır.BusistemlerdePM6:Y6:PC₇₁BM:BV(%0.004 w) n-tipi katkılama yöntemi ile aktif tabakası üç bileşenden oluşan organik güneş pillerinin veriminin arttığı gözlemlenmiştir [15].

2020 yılında Liu ve arkadaşları Science Bulletin dergisinde yayınladıkları çalışmayla organik güneş pillerinin verimini % 18.22 olarak rapor etmişlerdir ve sertifikalandırılmış verim değeri olarak ise %17.6 belirtilmiştir. Bu çalışmada, aktif tabakada bir kopolimer, donör D18 ile kaynaşmış halka metodu ile birleştirilmiş ditiyeno [3',2':3,4;2'',3'':5,6] benzo[1,2-c] [1,2,5] tiyadiazol (DTBT) kullanılmıştır. DTTP'ye kıyasla DTBT daha geniş bir moleküler düzleme sahiptir ve bu da D18'in daha yüksek mobiliteye sahip olmasına neden olmaktadır. %18.22 bugüne kadar organik güneş pillerinde elde edilmiş en yüksek verim olarak kaydedilmiştir.

Yukarıda bahsedilen çalışmalar, literatürde organik güneş pilleri alanında kilometre taşı olmuş ve literatüre malzeme ve aygıt konsepti açısından yenilik getirmiş çalışmalardan seçilmiştir.

1.2 Tezin Amacı

Bu tezin amacı, literatürde ilk defa sentezlenmiş, siyano grubu içeren yarıiletken küçük moleküller ve bir polimerin aktif tabaka içerisinde kullanıldığı, organik güneş pillerinin hazırlanması, karakterizasyonu ve bu yeni malzemelerin güç dönüşüm verimine etkilerinin incelenmesidir.

1.3 Hipotez

Organik güneş pillerinde, aktif tabakada ikili donör akseptör karşılımları kullanmak yerine, yeni, siyano grupları içeren küçük molekül ve polimerlerin üçüncü bileşen olarak aktif tabakaya eklenmesi, organik güneş pillerinin verimini iyileştirir.

2.1 Güneş Pilleri

Güneş güçlü bir enerji kaynağıdır. Bir saatte yeryüzüne çarpan güneş enerjisi, tüm yıl boyunca yeryüzünün tüm enerji ihtiyacını karşılamaya yetecek miktardadır. Böylesine büyük bir enerji, güneş pilleri kullanılarak elektrik enerjisine dönüştürülebilir. Güneş pilleri uzay uygulamalarında sıklıkla kullanılmaktadır. Ancak, fotovoltaiik pazarında yaygın kullanımları için uygun maliyetli ve kolay üretim yöntemlerinin geliştirilmesi gerekmektedir.

Enerji, modern toplumların sosyal ve ekonomik gelişiminde büyük bir önem taşımaktadır ve dünya nüfusunun ve ekonomisinin hızla büyümesiyle orantılı olarak, enerji ihtiyacı artmakta ve küresel bir enerji sorununa doğru yaklaşılmaktadır [16-17]. Günümüzde cep telefonlarının, modern bilgisayarların ve internetin olmadığı bir dünya hayal etmek neredeyse imkansızdır. Dolayısıyla, yüksek standartta yaşam koşullarına sahip olma isteği de beraberinde enerji talebi artışını getirmektedir. Nüfus arttıkça da sahip olunan enerjiden daha fazlasına ihtiyaç duyulmaktadır [18]. Günümüzde enerji ihtiyacının büyük bölümü fosil yakıtlardan karşılanmaktadır. Ancak, fosil yakıt kaynakları giderek azalmakta ve tükenme tehdidi ile karşı karşıya kalmaktadır. Tamamen tükenmese bile, kaynakların önemli ölçüde azalması sebebiyle fosil yakıtlara dayalı ürünler için ödenmesi gereken ücretin artması beklenmektedir ve ayrıca fosil yakıt kullanımı, atmosfere karbon salınım miktarını attırması sebebi ile iklim değişikliğine yol açmaktadır [16]. Fosil yakıtlara bağımlılığı azaltmak veya yenilenebilir enerji kaynaklarına yönelmek bu sorunların çözümü için sunulabilecek iki yoldur. Yenilenebilir enerji kaynaklarına yönelmek, fosil yakıtlara bağımlılığı ve dolayısıyla atmosfere karbon salınımını da azaltacağından, aslında iki çözümü tek elde toplamak gibi düşünülebilir. Yenilenebilir enerji kaynaklarına dayalı çözümler, uygun maliyetli olduğunda toplum tarafından da kabul görecektir.

Yenilenebilir enerji kaynakları arasında en güçlü enerji kaynağı olması açısından Güneş Enerjisi büyük bir öneme sahiptir. Dünya yüzeyine ulaşan güneş enerjisi miktarı o kadar büyüktür ki, bir yıl içinde Dünyanın kömür, petrol, doğalgaz gibi yenilenebilir olmayan kaynaklarından elde edilenden bile daha fazladır.

Yukarıda da bahsedildiği gibi Güneş enerji, güneş pilleri kullanılarak elektrik enerjisine dönüştürülebilir. Tarihsel olarak, ilk silisyum güneş pilleri 1954'de Bell laboratuvarlarında üretilmiştir. 1954'de Chapin ve arkadaşları, tek-kristal silisyum güneş pilini keşfetmişlerdir [19]. Tarihsel olarak, güneş pilleri nesiller olarak adlandırılan üç gruba ayrılmıştır. Bunlar, birinci, ikinci ve üçüncü nesil güneş pilleridir [20].

Birinci nesil güneş pilleri, kristal silisyum ve galyum arsenid (GaAs) gibi malzemeler kullanılarak hazırlanmaktadır. Amorf (A-Si), Mc-Si, kadmiyum tellür (CdTe), bakır indiyum selenid (CIS) ve bakır indiyum galyum selenid (CIGS) ince filmler kullanılarak ikinci nesil güneş pilleri üretilmektedir. A-Si ve mikrokristal silisyum ince filmlerin kullanıldığı ikinci nesil güneş pillerinin verimleri sırasıyla % 10 ve % 11 iken CIGS (minimodül) ve CdTe kullanıldığı güneş pillerinin verimleri sırasıyla % 18 ve % 21 olarak kaydedilmiştir [20]. Birinci nesil güneş pillerinin verimi, ikinci nesile kıyasla daha yüksektir. Ancak, ikinci nesil güneş pilleri, bina entegrasyonları için daha büyük olasılıkla uygulanabilir ve esnek alt tabakalarla daha uyumludur.

Nanokristal, organik, hibrit, boya duyarlı ve perovskit güneş pilleri, üçüncü nesil içerisinde yer almaktadır. Üçüncü nesil güneş pilleri yeni teknolojileri içerir. Düşük maliyet, kolay üretim, esnek alt tabakalarla uyumluluk, başlıca avantajlar olarak sayılabilir. Bununla birlikte, birinci ve ikinci nesil güneş pillerine kıyasla verimleri ve kararlılıkları halen düşüktür. Farklı nesil güneş pilleri detaylı olarak aşağıda tartışılmıştır.

2.1.1 Birinci Nesli Güneş Pilleri:

Silisyum doğada, bol bulunması ve katkılama ile fiziksel özelliklerinin ayarlanabilir olması sebebiyle birinci nesil fotovoltaik teknolojisinde sıklıkla

kullanılmaktadır. Galyum arsenid içeren güneş pillerinin verimi de oldukça yüksektir. Ancak, maliyetlerinin yüksek olması sebebiyle maliyetin ön planda olmadığı uzay tipi uygulamalarda kullanılmaktadır. Kristal silisyum güneş pillerinden hazırlanan modüller yirmi yıldan fazla yaşam ömrüne sahip olup, kararlılığı yüksektir [22]. Tarihsel olarak, ilk silisyum güneş pilleri, 1954 yılında Pearson, Fuller ve Chapin tarafından Bell Laboratuvarlarında geliştirilmiştir [19]. Bu tarihten beri, birinci nesil güneş pillerinin verimi hızla yükselmiştir. Bu gelişme ile silisyum güneş pilleri, uzay uygulamalarında uydular için bir güç kaynağı olarak kullanılmıştır [23]. Düşük ve yüksek sıcaklık süreçlerinin geliştirilmesi, silisyum güneş pillerinin verimini daha da arttırmıştır [24]. Termal oksidasyon için 850 ° C'den düşük bir sıcaklık işlemi kullanılan 25 cm² alana sahip hücreler için % 24'lük verim elde edilmiştir [25]. PERL (passivated emitter rear locally diffused) yapı kullanılarak verim, % 25 oranında iyileştirilmiş, yük taşıyıcılarının rekombinasyonunu en aza indirmek için ise yüzey pasivasyonu kullanılmıştır [26].

Birinci nesil güneş pillerinin verimi yüksek olmasına rağmen, ev tipi uygulamalar için maliyetlerinin hala yüksek olması sebebiyle maliyetinin uygulama açısından sorun olmayacağı uzay ve uydu uygulamaları gibi alanlarda sıklıkla kullanılmaktadır.

2.1.2 İkinci Nesli Güneş Pilleri:

Çok kristal silisyum, fotovoltaik pazarı için bir başka önemli malzemedir. İçerisinde çoklu kristal yapıda silisyum malzeme kullanılan güneş pillerine "çok kristal silikon güneş pilleri" denir.

Mc-Si'ye olan ilgi 1970'lerde başladı ve hücre kalınlığında azalma sağlanarak elde edilen % 20'lik verim, bugünün bu alandaki rekor verim değeri olarak sayılabilir [27]. Sınırlılıklara rağmen, çok kristalli Si, dünya çapındaki kurulumlarda yüksek pay ile en eski teknolojilerden biridir [28]. Her ne kadar bu tür güneş pilleri için yüksek verimler rapor edilse de daha da geliştirmek için çalışmalar sürmektedir.

Amorf silisyum tabakalar, ilk olarak 1969'da R. Chittick tarafından geliştirildi [29]. 1976 yılında David Carlson ve Christopher Wronski, % 2.4 verim sağlayarak, ilk amorf silikon güneş pilini ürettiler [30]. Silan gazı kullanılmasıyla güneş pili performansları daha da iyileştirilebilmiştir [30-31]. P-i-n tipi amorf silikon güneş pillerinin verimi, hızlı bir şekilde yükselmiştir [32]. Ancak, Staebler-Wronski etkisi sebebiyle a-Si: H güneş pillerinin verimi, ışık altında ilk yüz saatte önemli ölçüde azalmaktadır [33] Bu probleme kesin çözüm olmamakla birlikte, 150 °C'de birkaç kez tavlama işlemi geliştirilmiştir. Güneş pilleri, tavlamadan sonra uzun süre ışık altında kalmaya devam ederse, Stabler-Wronski etkisi tekrar ortaya çıkmaktadır. A-Si:H ince film güneş pilleri, hala derin araştırmalara konu olsa da verim doyma noktasındadır. A-Si: H ince film güneş pilinin son güç dönüşüm verimliliği yaklaşık % 10'dur [34]. A-Si yerine Mc-Si: H tabakaları kullanılarak verim, % 12 olarak geliştirilmiştir [35].

CdTe, yüksek soğurma katsayılı, düşük maliyetli, yüksek kimyasal kararlılığa ve doğrudan geçişli bant aralığına sahip bir yarıiletken olması nedeniyle ikinci nesil güneş pillerinde sıklıkla kullanılmaktadır [36-37]. CdTe güneş pilleri, genellikle bir pencere katmanı olarak CdS içerir. CdS'nin yaklaşık 2.42eV olan düşük bant aralığı vardır ve kısa dalga boyu bölgesini soğurabilir. CdS / CdTe güneş pili için elde edilen % 6'lık verim [38], CdS tabakası için kimyasal banyo biriktirme yada kimyasal çözelti biriktirme yöntemi seçildiğinde ve CdTe katmanı için kapalı alan süblimasyon yöntemi kullanıldığında %16'ya yükseltilebilmiştir [39].

Cu (In, Ga) Se₂, uzun vadede kararlı ve daha ucuz bir malzeme olması açısından ikinci nesil güneş pillerinde kullanılmıştır [40]. Bir soğurucu malzeme olarak CuInSe₂'nin (CIS) bant aralığı yaklaşık 1.0 eV'dir. CIS'i Ga veya S ile ilişkilendirerek, bant aralığı 1.7 eV olarak ayarlanabilmiştir. Böylece açık devre voltajı, arttırılmıştır [41]. 2.0 ve 3.6 eV bant aralıklarına sahip N tipi yarı iletkenler, CIGS güneş pillerinde tampon tabakalar olarak kullanılmıştır. Bununla birlikte, CdS, en yaygın kullanılan tampon tabakadır. Cd içermeyen yarı iletkenler ayrıca bir tampon katman olarak umut verici sonuçlar

göstermiştir. Cd içermeyen tampon tabakaları kullanılarak % 11'in üzerinde verim elde edilmiştir [42].

Genel olarak, birçok araştırmacı cihaz yapısına odaklanmak yerine biriktirme tekniklerine odaklanmıştır. Biriktirme yöntemlerinin geliştirilmesi daha iyi sonuçlar vermiştir. 2017'de CIGS güneş pili için belirlenen en son verimlilik değeri % 21'dir [43].

Herhangi bir fotovoltaik teknolojinin fotovoltaik pazarında yerini alabilmesi için verim, yaşam ömrü ve maliyet üç önemli parametreyi teşkil etmektedir. Birinci ve ikinci nesil teknolojiler bu parametreler açısından iyi bir performans gösterebilirler de üretim maliyetleri ev tipi uygulamalar için hala yüksektir. Bu tür güneş pilleri üzerinde yapılan bilimsel ve mühendislik çalışmalarına rağmen, verimler doymuş görünmektedir. Bu nedenle, alternatif malzemeler veya üretim yolları üzerine araştırmalar büyük ilgi görmektedir.

2.1.3 Üçüncü Nesil Güneş Pilleri:

Organik yarı iletkenler, düşük maliyet, hafiflik, esnek altlıklarla uyumluluk, kimyasal ve fiziksel özelliklerinin sentetik yollarla kolay ayarlanabilmesi gibi çeşitli avantajlara sahiptir. Bu nedenle, organik, hibrit, tandem, boya duyarlı, perovskit güneş pillerinde organik yarıiletkenler sıklıkla kullanılmaktadır.

Konjuge bir polimerden (donör) bir fullerene (akseptöre) foto-etkili elektron transferinin keşfi, organik güneş pillerinin geliştirilmesinde bir kilometre taşı olarak kabul edilmiştir [6- 44]. O zamandan beri, yeni malzemeleri sentezlemek, güneş pillerini tasarlamak ve yeni kavramları tanıtmak için yoğun bir çaba harcanmıştır. Organik yarıiletkenler organik güneş pillerinin yanı sıra, ışık yayan diyotlar, alan etkili transistörler ve lazerler vb. gibi diğer elektronik cihazlarda da kullanılmıştır. Bu nedenle, organik elektronik olarak adlandırılan yeni bir alan ortaya çıkmıştır.

Her ne kadar verimleri, kısa sürede diğer nesillerle rekabet edecek seviyelere ulaşsa da organik malzemelerin oksijene ve neme hassasiyetleri hazırlanan

güneş pillerinin uzun dönem kararlılıklarını olumsuz etkilemektedir. Bu tez çalışmasında, iyileştirme çalışmaları için öneriler aşağıda sunulacaktır.

2.2 Güneş Pillerinin Çalışma Prensipleri

Güneş pillerinin çalışma prensibi fotovoltaiik etkiye dayanır. Fotovoltaiik etki, üzerine ışık düşürüldüğünde, iki farklı malzemenin birleşim noktasında bir potansiyel farkın oluşmasına dayanır. Güneş pillerinin çalışmasındaki adımlar aşağıdaki gibidir;

- Fotonların soğurulması
- Yük taşıyıcılarının ayrışması
- Elektrotlarda yük taşıyıcıların toplanması

Geleneksel güneş pilleri, iki tabakalı, p ve n tipi yarıiletkenlerden oluşan bir p-n ekleminden oluşur. Üzerine ışık düşürülmediğinde, akım-voltaj özellikleri aşağıdaki Shockley denklemi ile tanımlanan bir p-n eklem diyotu olarak işlev görür [45].

$$I_d = I_s \left[\exp \left(\frac{qV}{nkT} \right) - 1 \right] \quad (2.1)$$

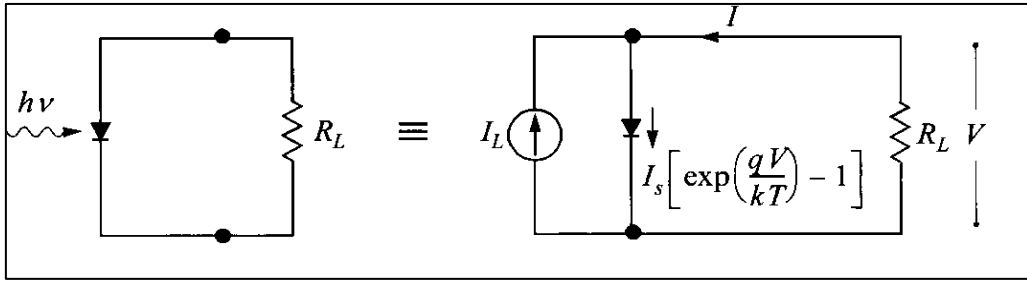
Burada I_s doyma akımı, V diyotun voltajı, n diyotun idealite faktörü, q bir elektronun yükü, k Boltzman sabiti, T Kelvin cinsinden sıcaklıktır. Sistem, güneş ışığına maruz kaldığında yarıiletkenin bant aralığına (E_g) eşit ya da daha büyük enerjilere sahip fotonlar soğurulur [46]. Işık soğurma yoluyla elektron-delik çiftlerinin oluşması, güneş pillerinin çalışması için önemli bir adımdır. Eğer elektron ve delik yaşam ömürleri boyunca birbirlerinden ayrılmamışlarsa, rekombinasyon denilen bir mekanizma ile yeniden birleşeceklerdir. Işıkla oluşturulan elektron-delik çiftlerinin yeniden birleşmesi, güneş pillerinde bir kayıp mekanizması olup, yeniden birleşmeleri halinde hiçbir şekilde akım üretilmeyecektir. Elektron-delik çiftlerini ayırmanın yollarından bir tanesi, bir p-n eklemde mevcut olan elektrik alanını kullanmaktır. Anorganik yarıiletkenlerde elektron-delik çiftlerinin bağlanma enerjileri, organik yarıiletkenlerinkinden düşüktür. Elektron-delik çiftlerinin çoğu, eklem bölgesinde oluşturulur ve yerleşik potansiyel ve elektrik alan

sebebiyle, elektronlar ve delikler farklı bölgelere doğru hareket ederler. Fotovoltaik etki sebebiyle ortaya çıkan elektrik akımına fotoakım denir. Dolayısıyla, üzerine ışık düşürüldüğünde bir güneş pili, p-n eklem diyotu ile, paralel bir akım kaynağı olarak ifade edilebilir [45].

İdeal bir güneş pilinin aydınlatma altında akım-voltaj (I-V) özellikleri aşağıdaki denklemle tanımlanır [46]:

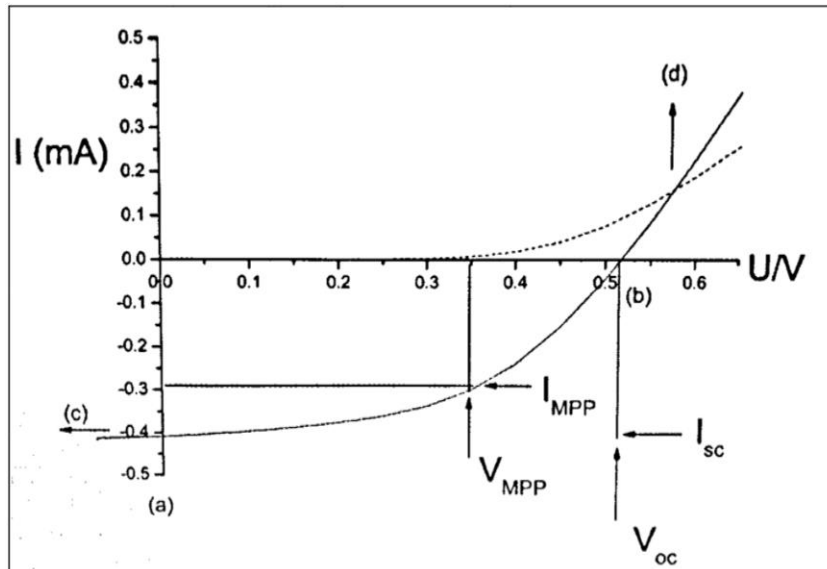
$$I = I_{ph} \left[\exp \left(\frac{qV}{nkT} \right) - 1 \right] \quad (2.2)$$

Bir güneş pilinin eşdeğer şeması şekil 2.1’de gösterilmiştir.



Şekil 2.1. Işık altındaki güneş pilinin ideal denge devresi

Bir güneş pilinin akım-voltaj grafiği şekil 2.2 'de gösterilmektedir.



Şekil 2.2 Bir güneş pilinin akım-gerilim (I-V) özellikleri [47].

Maksimum güçte çalışmayı sağlamak için çıkış gücü:

$$P = I * V \quad (2.3)$$

Maksimum güç koşulu, $dP / dV = 0$ için sağlanabilir.

$$P_m = I_m * V_m = FF * V_{oc} * I_{sc} \quad (2.4)$$

Doluluk faktörü FF, şu şekilde tanımlanır:

$$FF = \frac{I_m * V_m}{V_{oc} * I_{sc}} \quad (2.5)$$

Güç dönüştürme verimliliği η , maksimum güç çıkışı P_m 'nin , gelen güç, P_{in} 'e oranıdır.

$$\eta = \frac{P_m}{P_{in}} = \frac{I_m * V_m}{P_{in}} = \frac{FF * V_{oc} * I_{sc}}{P_{in}} \quad (2.6)$$

2.3 Organik Güneş Pilleri

Organik güneş pilleri, iki metal elektrot arasına sıkıştırılmış biri elektron veren (donor), diğeri elektron alan (akseptör) organik tabakalardan oluşur. Organik yarıiletkenlerdeki donor ve akseptör terminolojisi, anorganik yarıiletkenlerinkinden farklıdır. Organik yarıiletkenlerde elektron veren malzeme donor ve p tipli yarıiletken olarak adlandırılırken, elektron alan malzeme ise akseptör ve n tipli organik yarıiletken olarak adlandırılmaktadır. Özetle, p tipi organik yarıiletkenler donor ve n tipi organik yarıiletkenler ise akseptör olarak belirtilmektedir. Malzemelerin çözünürlüğüne bağlı olarak, organik güneş pilleri malzemeleri çözelti esaslı veya vakum esaslı olmak üzere ikiye ayrılır. Malzemelerin bir çoğu, kloroform, klorobenzen ve toluen gibi genel organik çözücüler içerisinde çözünür. Genellikle, organik çözücüler içinde çözünmeyen küçük organik moleküller süblimasyon yoluyla vakum işlemi kullanılarak kaplanır. Konjuge polimerler ve fullerenler, organik güneş pillerinin aktif tabakalarında sıklıkla kullanılmıştır. Konjuge polimerler, tekli ve çift bağların ard arda tekrar etmesiyle oluşur. Tekli bağlar, sigma bağları, çift bağlar ise sigma ve π bağlarından oluşur. π bağları, polimer omurgası boyunca elektron delokalizasyonuna yol açar, bu da polimer zincirinin omurgası boyunca yük hareketliliği için açık bir yol oluşturur.

Tekrar birimindeki atomların sayısı, türü, zincir simetrisi, polimerlerin elektronik yapısını belirler. Buna bağlı olarak polimerler yarıiletken ve hatta metalik özellik de sergileyebilir [48]. Organik güneş pillerinde, konjuge polimerler genelde donor olarak, fulleren türevleri ise akseptör olarak kullanılmıştır. Konjuge polimerlerin çözünürlüğünde herhangi bir problem yaşanmamasına rağmen, akseptör malzeme olarak kullanılan C_{60} 'nin organik çözücülerde çözünmeme problemi bulunmaktaydı. Çözünür bir fullerene türevi olan PCBM (1-(3-metoksikarbonil) propil-1-fenil [6,6] C_{61})'in sentezi organik güneş pillerinin ıslak işlem kullanılarak üretilebilmesinin önünü açmıştır [49]. Organik güneş pilleri organik aktif tabaka filmlerinin iki metal elektrot arasına sıkıştırılmasıyla üretilir. Altlık olarak şeffaf iletken oksit (TCO) kaplı camlar kullanılır. İndiyum kalay oksit (ITO), organik güneş

pillerinde en çok kullanılan şeffaf iletken oksitlerden biridir. Bununla birlikte, indiyum kaynaklarının tükenmeye yüz tutması, organik güneş pillerinde ITO elektrotların uzun vadede yaygın kullanımını etkileyebilecek gibi görünmektedir. Polistiren sülfonik asit katkı, poli (etilen-dioksitiofen) (PEDOT: PSS), ITO kaplı cam altlıkların üzerine sulu bir çözeltiden kaplanır. PEDOT: PSS, ITO yüzeylerinin yüzey kalitesini iyileştirerek aynı zamanda delik enjeksiyonuna / ekstraksiyonuna izin verir. Donör ve akseptör birleşiminden oluşan aktif tabakalar, aygıt konfigürasyonunda kullanılan organik yarıiletkenlerin çözünürlüğüne bağlı olarak çözelti veya vakum işlemi teknikleri kullanılarak kaplanır. Üst metal elektrot olarak kullanılan malzemelerin enerji seviyelerine uygun olan bir metal tercih edilir.

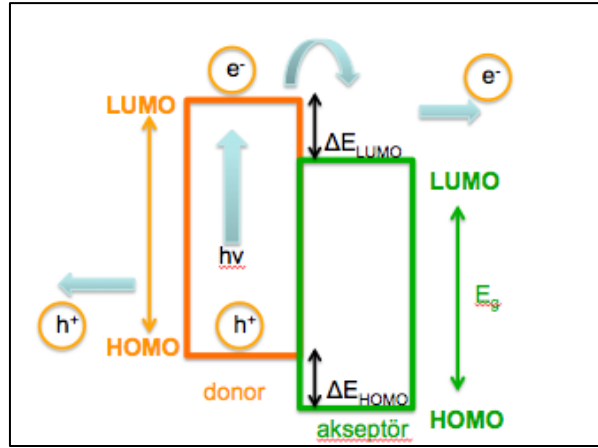
2.3.1 Organik Güneş Pillerinin Çalışma Prensibi

Organik güneş pillerinin çalışma prensipleri aşağıda belirtilen dört adımdan oluşmaktadır.

- (i) Işığın soğurulması ve elektron-delik çiftlerinin oluşması
- (ii) Elektron-delik çiftlerinin ayrışması
- (iii) Yüklerin taşınması
- (iv) Uygun elektrotlara yük aktarımı [50].

Organik yarıiletkenlerin üzerine ışık düşürüldüğünde, doğrudan serbest yük taşıyıcıları oluşmaz; bunun yerine elektron-delik çiftleri oluşur. Bu elektron delik çiftleri, yaşam ömürleri içerisinde serbest yük taşıyıcılarına ayrılmalıdır. Ayrılmadıkları takdirde, rekombinasyon sonucu yeniden birleşeceklerdir. Bu da kayıp anlamına gelmektedir. Elektron delik çiftlerinin ayrılması için elektrik alanları gereklidir. Bu alanlar, donör ve akseptörlerin birbirine temas ettiği ara yüzeylerde zaten mevcuttur. Ara yüzeydeki potansiyelin değişmesi, yerel elektrik alanları için olası bir kaynaktır. Bir organik yarıiletken üzerine ışık düşürülmesiyle oluşan elektron-delik çiftinin ömrü boyunca böyle bir ara yüze ulaşması durumunda, yük transferi gerçekleşebilir [51]. Işık etkisiyle bu transfer gerçekleştiğinden fotoetkiyle oluşmuş yük transferi olarak adlandırılmaktadır. Organik yarıiletkenlerde eksiton difüzyon uzunlukları 10-

20 nm arasındadır. Etkili bir ayrışma için eksiton difüzyon uzunluğu, donör akseptör faz ayırımı uzunluğu ile karşılaştırılabilir olmalıdır [50]. Yukarıda da belirtildiği gibi, elektron-delik çiftlerinin rekombinasyonu, organik güneş pilleri için kayıp mekanizmasıdır. Daha sonraki adımda serbest yük taşıyıcıları, ilgili elektrotlara taşınmalıdır. Literatürde, çift katmanlı ve hacim heteroeklemlili yapı olmak üzere iki farklı aygıt yapısı sıklıkla kullanılmışlardır. Çift katmanlı bir organik aygıt, birbirinin üstüne kaplanmış ve iki metal elektrot arasına kaplanmış, iki farklı p ve n tipi organik yarıiletken katmanından oluşur. Bu tür aygıtlarda, sadece arayüzeyden eksiton difüzyon uzunluğu mesafesi içinde oluşturulan elektron delik çiftleri eklem arayüzeyine ulaşabilir. Eklem dışında yaratılan elektron delik çiftleri, iki tabakalı heteroeklem güneş pilleri için bir kayıp mekanizmasıdır. İki katmanlı heteroeklem sınırlılıklarının üstesinden gelmek için hacim heteroeklemi aygıt yapısı önerilmiştir. Hacim heteroeklemine dayalı güneş pili içinde, aktif tabaka bir donör ile bir akseptör karışımından oluşur. Donör ve akseptörlerin çözünebilir olmaları, çok çeşitli yarıiletkenlerin karıştırılabilme olasılığını kolaylaştırır.



Şekil 2.3 Organik güneş pillerinde yük transferi

Güç dönüşüm verimliliği, açık devre voltajı (V_{oc}), kısa devre akım yoğunluğu (I_{sc}) ve dolgu faktörü (FF) ile doğrudan ilişkilidir. Bu üç parametrenin eş zamanlı olarak yüksek olması, verim açısından da önemlidir. Herhangi bir parametrenin tek başına iyi olması, diğerlerinin düşük olmasına yol açıyorsa verimin de düşmesine neden olacaktır. Organik güneş pillerinde V_{oc} 'nin

kaynağı derin tartışmalara yol açmıştır. Bu çalışmalardan bazıları metal-yalıtkan-metal resmine işaret ederken, bazıları da donör ve akseptörün HOMO - LUMO seviyeleri arasındaki farka bağlı olduğunu belirtmektedir [52-54]. Voc'nin güneş pillerindeki kökeni hala tartışma konusudur. Yapılan ilk çalışmalarda akseptörün LUMO'su ile açık devre gerilimi arasında doğrusal bir ilişki olduğunu göstermiştir [53]. Daha sonra Voc'nin donörün LUMO seviyesi ve akseptörün HOMO seviyesi arasındaki farkla orantılı olduğu gösterilerek bu farka 0.3 gibi bir deneysel parametre de eklenmiştir [54]. Voc'yi etkileyen diğer faktörler ise aktif tabakaların morfolojisi ve elektrotlardaki yük kayıpları olarak belirtilmiştir. [55-56-57-58]. Voc'nin arttırılabilmesi amacıyla plazma aşındırma ve daha yüksek iş fonksiyonuna sahip organik yarıiletkenlerin ya da kendiliğinden organize tek tabakaların (SAM) ITO yüzeyine kaplanmasıyla ITO'nun iş fonksiyonu değiştirilmeye çalışılmıştır [59-60]. Özetle Voc, araştırılan malzemelerin enerji seviyelerine olduğu kadar arayüzeylere de duyarlıdır.

Kısa devre akımı I_{sc} ise yük taşıyıcılarının yoğunluğu, mobilite ve elektrik alanla doğrudan ilişkilidir. Organik yarıiletkenlerin soğurma katsayıları yüksek olsa da, genelde 350 ile 650 nm arasında soğurma aralığına sahiptir. Bu durum, güneş spektrumu ile arasında bir uyumsuzluğa neden olur [50-61]. Bundan dolayı, 600 nm'nin üzerinde ışığı soğuran ve düşük bant aralığına sahip polimerlerin sentezi, literatür özetinde de belirtildiği gibi oldukça büyük bir ilgi görmüştür [62-63]. Soğurma kısıtlılığı, organik güneş pilindeki katmanların kalınlığını arttırarak ortadan kaldırılabilir. Aktif tabaka kalınlığının organik güneş pillerinin I_{sc} 'si üzerinde bir etkiye sahip olduğu bilinmektedir. Ancak, kalınlık artışı ve yük taşıyıcı mobilitesi arasında hassas bir denge bulunmaktadır. Organik yarıiletkenlerin anorganik yarı iletkenlere kıyasla daha düşük mobiliteye sahip olması nedeniyle, kalınlık çok fazla arttırılamamaktadır.

Dolgu faktörü, verimi doğrudan etkileyen bir başka parametredir. Dolgu faktörü, aktif tabakanın morfolojisi, kalınlık, konjuge polimerlerin düzeninden ve elektrotlar ile aktif tabaka arasında oluşabilecek arayüzeylerin seri (R_s) ve

şönt direncinde (R_{sh}) değişikliklere sebep olmasından etkilenmektedir [64-65].

Yukarıda belirtilen, dikkat edilmesi gereken hususlara ek olarak donör ve akseptör malzemeler, ideal HOMO-LUMO seviyesi ilişkilerine sahip olsalar bile, aralarındaki fiziksel etkileşim, bu malzemelerin morfolojisi genel olarak verim açısından önemli rol oynar. Donör ve akseptör malzemenin aynı çözücü içinde karışabilirliği, çözücü seçimi, donör ve akseptör konsantrasyonu, ince film kaplama teknikleri ve ısıtma, morfolojiyi etkileyen diğer faktörlerdir [66].

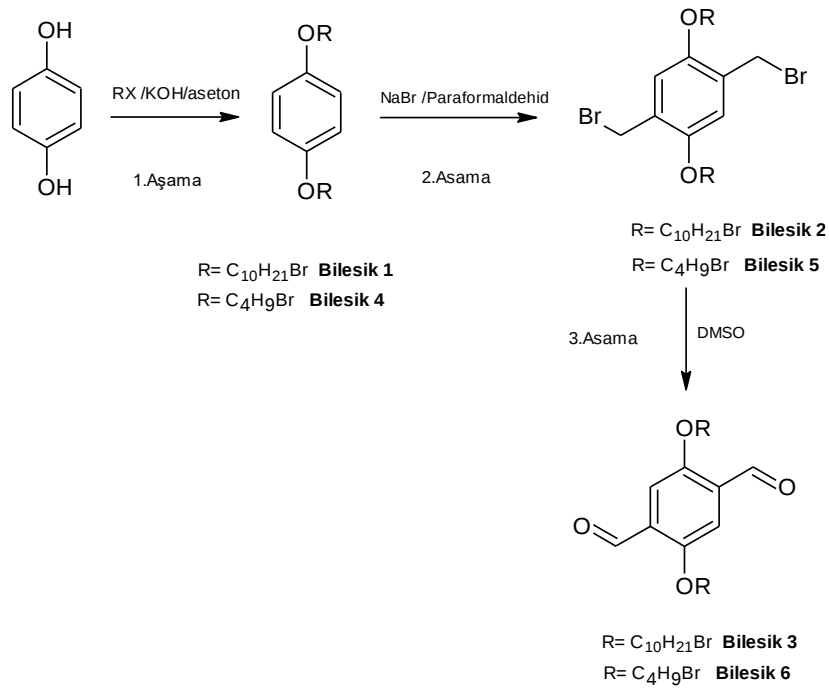
Morfolojinin yanı sıra, yük taşıyıcı transferi ve mobilitesi, organik güneş pili araştırmalarında en önemli konulardır. Yük taşıyıcı taşınmasında kilit nokta, yük taşıyıcı mobilitesidir. Yukarıda belirtildiği gibi, organik yarıiletkenlerin yük taşıyıcı mobiliteleri, anorganik yarı iletkenlerinkinden birkaç kat daha düşüktür. Mobilitenin düşük olması, elektronik durumların tek tek moleküller veya molekül segmentleri üzerindeki lokalizasyonundan kaynaklanır [67].

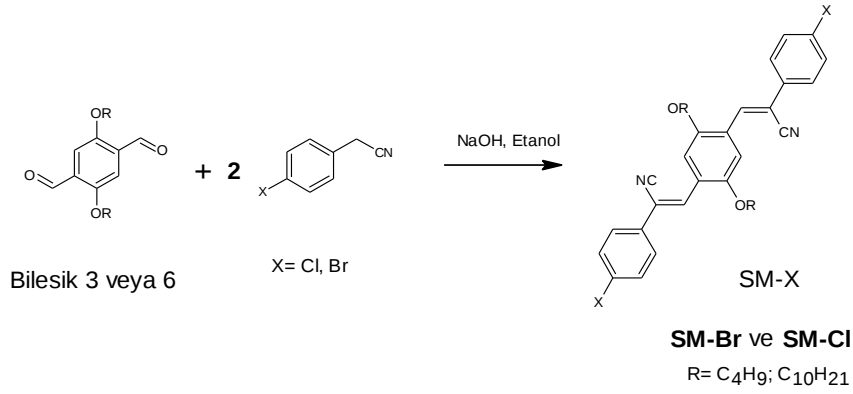
Fotovoltaik performansın daha iyi olması için dengeli elektron ve delik hareketliliği gereklidir. Düşük mobilite, yük rekombinasyonu olasılığını ve direnç kayıplarını artırır aynı zamanda yük ayırma verimini de sınırlandırarak, aygıt performansını etkiler [67].

3.1 3,3'-(2,5-desiloksi-1,4-fenilen)-bis(2-(4-bromofenil) akrilonitril) (SM-Br) Akseptör Molekülü ile Yapılan Çalışmalar

3.1.1 SM-Br Molekülünün Sentezi

SM-Br ve SM-Cl moleküllerinin sentezlenmesi için farklı başlangıç maddeleri kullanarak aynı sentez yolları takip edilmiştir. Şekil 3.1'de sentez yolları şematik olarak gösterilmiştir.





Şekil 3.1 SM-Cl ve SM-Br moleküllerinin sentez basamakları

SM-Br molekülü, Yıldız Teknik Üniversitesi Kimya Bölümünden Dr. Çiğdem Yörür Göreci tarafından aşağıdaki yöntem kullanılarak sentezlenmiştir.

Burada çalışması yapılmış olan 3,3'-(2,5-desiloksi-1,4-fenilen)-bis(2-(4-bromofenil) akrilonitril) (SM-Br), dört aşamada hazırlanmıştır.

1. Basamak: 1,4-Didesiloksibenzen (Bileşik 1, $\text{C}_{26}\text{H}_{46}\text{O}_2$) Sentezi [68]

Bileşik 1, n-desilbromür ve hidrokinonun KOH varlığında reaksiyona sokulmasıyla elde edildi. Bileşiğin yapı karakterizasyonu FTIR ve LC-MS spektroskopileriyle gerçekleştirildi. Verim: % 76, mp 62-64 °C. FTIR (ATR) ν (cm^{-1}): 2955, 2933 ve 2850 (alifatik CH gerilimleri), 1028 (Ar-O gerilimi), 998 (C-O-C gerilimi). LC-MS (m/z): 391.4 [M+1] + ($\text{C}_{26}\text{H}_{46}\text{O}_2$ hesaplanan; 390.6).

2. Basamak: 1,4 -Bis (bromometil)-2,5-didesiloksibenzen Bileşik 2, ($\text{C}_{28}\text{H}_{48}\text{Br}_2\text{O}_2$) Sentezi [69].

Bileşik 2'nin sentezi için, Bileşik 1 (1.5 mmol), paraformaldehit (15 mmol), NaBr (7.5 mmol) ve asetik asit (5 mL) karışım halinde hazırlanarak 70 °C'ye kadar ısıtıldı. Daha sonra konsantre sülfürik asit (0.4 mL) ve asetik asit (0.75 mL) karışımı damla damla eklendi. Bu reaksiyonun 4 saat boyunca kaynatıldı. Reaksiyonun sonucunda karışım oda sıcaklığına kadar soğutularak süzüldü. Daha sonra çözücü buharlaştırılarak kolon kromatografisi (heksan: etilasetat / 40:1) ile saf hale getirildi. Bileşik 2 ($\text{C}_{28}\text{H}_{48}\text{Br}_2\text{O}_2$) saf olarak elde edildi.

Verim: %83, mp 85-86 ° C. FT-IR (ATR) 8, 2956, 2917, 2850, 1509, 1031, 906) cm^{-1} : ^1H NMR (500 MHz, CDCl_3): δ 7,00 (s, 2H, Ar-H) 4,50 (s, 4H, 2x CH_2Br)

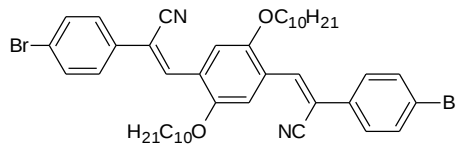
4,00-3,98 (t, 4H, 2xOCH₂), 1,82-1,88 (m, 4H, 2xOCH₂CH₂), 1.76-1.45 (m, 28H, 14 CH₂), 0.90-0.87 (m, 6H, 2xCH₃) ppm. LC-MS (m/z): 475.3 [M-C₇H₁₆]⁺ (C₂₈H₄₈Br₂O₂ hesaplanan; 476.5).

3. Basamak: 2,5-Didesiloksibenzen-1,4-dikarbaldehit (Bileşik 3, C₂₈H₄₆O₄) Sentezi [70]

Bileşik 3'ün sentezi için, Bileşik 2 (0.5 mmol) ve NaHCO₃ (7.5 mmol), 8 mL DMSO içerisinde karıştırılır ve karışım 115 ° C'ye kadar ısıtılır. Karışım giderek sarı floresan bir renk alır. Reaksiyon 30 dakika bu sıcaklıkta devam eder. Bu reaksiyon sonucu elde edilen karışım 100 ml su içerisine dökülür ve kloroform ile ekstrakte edilir. Çözücü buharlaştırılarak geri de kalan sarı madde kurutulur.

Verim: % 72, mp 84-86 ° C. FTIR (ATR) ν (cm⁻¹): 2950, 2914 ve 2849 (alifatik CH gerilimleri), 1678 (C=O gerilimi), 1212 (C-O gerilimi). LC-MS (m/z): 443.4 [M-3]⁺ (C₂₈H₄₆O₄ hesaplanan; 446.7).

4.Basamak:3,3'-(2,5-didesiloksi-1,4-fenilen)-bis (2 -(4-bromofenil) akrilonitril] (SM-Br, C₄₄H₅₄Br₂N₂O₂)



Şekil 3.2 SM-Br molekülünün sentezi

SM-Br molekülünün sentezi için, 0.25 g NaOH, 10 mL etanol ve 5 mmol 4-(Bromofenil)asetonitril bileşiğinden bir çözelti hazırlandı. Çözelti 5-10 dakika oda sıcaklığında ve azot atmosferinde karıştırıldı. Bu sürenin sonunda, aldehit bileşiği olarak Bileşik 3'den, 2.5 mmol karışıma ilave edilerek azot atmosferinde ve oda sıcaklığında 2 saat boyunca reaksiyon devam edildi. Reaksiyonun ilerlemesi TLC kontrolleri tarafından yapıldı ve oluşan çökelti reaksiyon sonunda süzüldü ve ürün normal atmosfer altında kurutuldu. Verim: % 89, mp 92-94 ° C. FTIR (ATR) ν (cm⁻¹): 3069 (aromatik CH gerilimi), 2212 (CN gerilimi), 1488 (C=C gerilimi). ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃): δ 8.04 (s, 2H, 2 -C=CH), 7.90 (s, 2H, 2 ArH), 7.64-7.56 (m, 8H, ArH), 4.14 (t, J= 3.1 Hz, 4H,

2 OCH₂), 1.67-1.53 (m, 4H, OCH₂CH₂), 0.90 (t, J= 3.0 Hz, 6H, 2 CH₃). ¹³C NMR (100 MHz, CDCl₃): δ 151.8 (ArC), 136.4 (ArCq), 132.2 (2xC=CH), 125.7 (2xArCq-Br), 127.5 (ArC), 118.2 (2xCN), 110.9 (2xCCN), 69.5 (OCH₂) ppm. LC-MS (m/z): 802.2 [M]⁺ (C₄₄H₅₄Br₂N₂O₂ hesaplanan; 802.7).

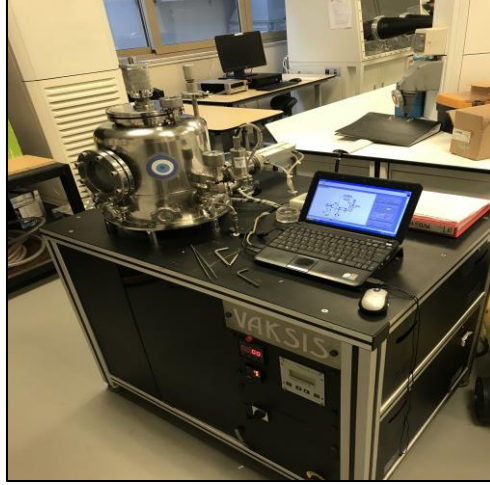
3.1.2 Aygıt Yapımı

Başlangıçta cihaz hazırlığı için, tüm ITO kaplı cam altlıklar, 40 dakika boyunca bir HCl:HN:O (4.6:0.4:5) asit karışımı ile aşındırıldı. Aşındırma işleminden sonra cam altlıklar ultrasonik banyoda aseton ve izopropanol ile her aşamada sırasıyla 20 dakika süreyle temizlendi. P3HT: PCBM çözeltisi, 12 mg P3HT ve 6.5 mg PCBM 1 ml klorobenzenle çözülerek hazırlandı. SM-Br, SM-Cl ve P7 polimer çözeltileri ise kloroformda hazırlanarak P3HT: PCBM çözeltileri 1:1 hacim oranında karıştırıldı. Elektron taşıyıcı tabaka olarak TiO_x çözeltisi sol-jel yöntemiyle hazırlandı. TiO_x tabakası, 8000 rpm'de ITO kaplı altlıklar üzerine Şekil 3.2'de görülen dönel kaplama cihazı (Specialty Coatings) kullanılarak kaplandı.



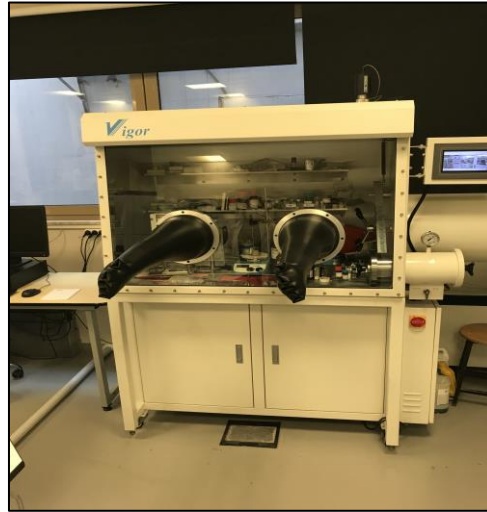
Şekil 3.3 İnce filmlerin kaplanması için kullanılan dönel kaplama sistemi

İnce filmler, 450°C'de 30 dakika süreyle bir fırında tavlandı. Daha sonra, üçlü karışım, kaplı filmler üzerine 1000 rpm'de dönel kaplama yöntemiyle kaplandı. 8000 rpm'de PEDOT: PSS: DMSO: Triton X karışımı dönel kaplama yöntemiyle kaplandı. Son olarak, 100 nm gümüş (Ag) Şekil 3.3'de görülen termal kaplama cihazı (VAKSİS) kullanılarak buharlaştırıldı.



Şekil 3.4 Metal buharlaştırmak için kullanılan sistem

Akım-gerilim karakterizasyonu Şekil 3.4'te gösterilen eldivenli kutu (glovebox) sistemi (VİGOR) içerisinde kalibre edilmiş silisyum güneş pili (ORIEL NEWPORT) vasıtasıyla kalibre edilmiş solar simulator (ABET) kullanılarak gerçekleştirildi.

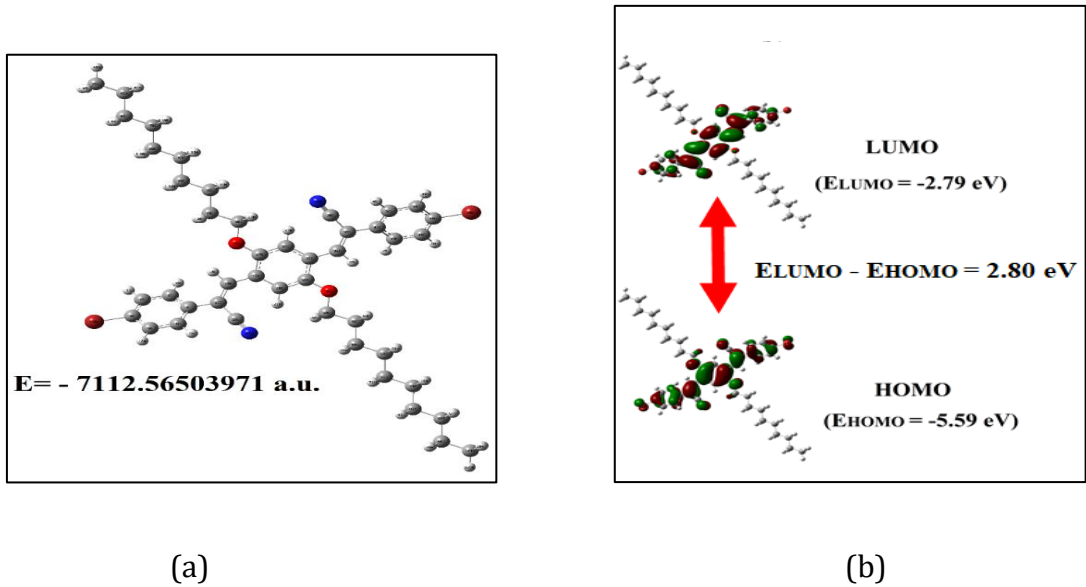


Şekil 3.5 Akım-gerilim karakterizasyonun yapıldığı azot ortamı içeren eldivenli kutu sistemi

Akım-gerilim karakteristikleri KEİTHLEY 2400 cihazı kullanılarak elde edildi. Elde edilen akım-gerilim eğrileri kullanılarak kısa devre akım yoğunluğu (J_{sc}), açık devre voltajı (V_{oc}) ve dolgu faktörü (FF) belirlenerek verimler hesaplandı.

3.1.3 SM- Br Molekülünün HOMO-LUMO Seviyelerinin Teorik ve Deneysel Olarak İncelenmesi

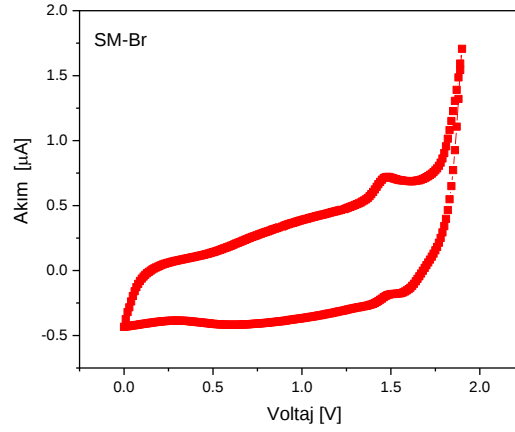
Yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT), moleküler sistemlerin yapısal, spektroskopik, termodinamik, manyetik ve elektronik özelliklerini belirlemek için en yaygın kullanılan metodlardan biridir. B3LYP [71-72] değişim bağlılık fonksiyonu kullanan yoğunluk fonksiyonel teorisi, spektroskopik ve elektronik çalışmalar için gerçekleştirilmiştir. Bu çalışmada DFT / B3LYP methodu kullanılarak Gaussian 09 W yazılımı altında 6-31 G (d) temel setinde teorik çalışmalar yapılmıştır [73]. DFT/B3LYP hesaplamalarından elde edilen tüm görüntülemeler, GaussView5 yazılımı tarafından sağlanmıştır [74]. Tüm teorik hesaplamalar Siirt Üniversitesinden Dr. Mehmet KAZICI ve Giresun Üniversitesinden Doç. Dr. Halil GÖKÇE tarafından yapılmıştır.



Şekil 3.6 (a) Optimize edilmiş yapı ve enerji (b) SM-Br molekülünün HOMO-LUMO seviyeleri

Şekil 3.6'da görüldüğü gibi HOMO seviyesi -5.59 eV'ye karşılık gelirken, LUMO seviyesi -2.79 eV'lik bir bant boşluğuna yol açan 2.80 eV'ye karşılık gelmektedir.

Deneysel olarak SM-Br molekülünün HOMO-LUMO seviyelerini incelemek için, döngüsel voltametri yöntemi kullanıldı.

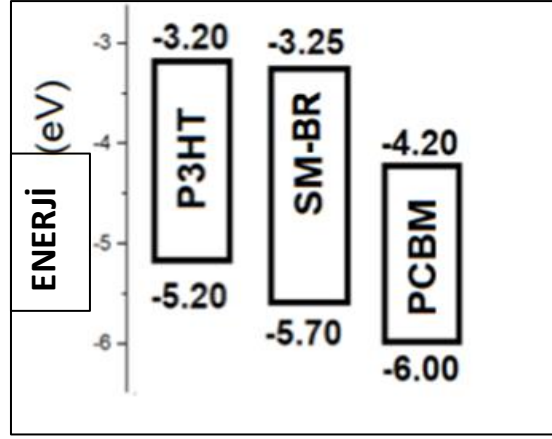


Şekil 3.7 SM-Br molekülünün döngüsel voltamogramı

Aşağıda gösterilen formüllerde HOMO-LUMO seviyeleri bir dahili standart olarak ferrosen kullanılarak hesaplanmıştır (0,46 V'ye karşılık Ag/Ag⁺) [75-76]. Optik bant boşluğu (E_g), soğurma spektrumunun bant kenarında hesaplandı.

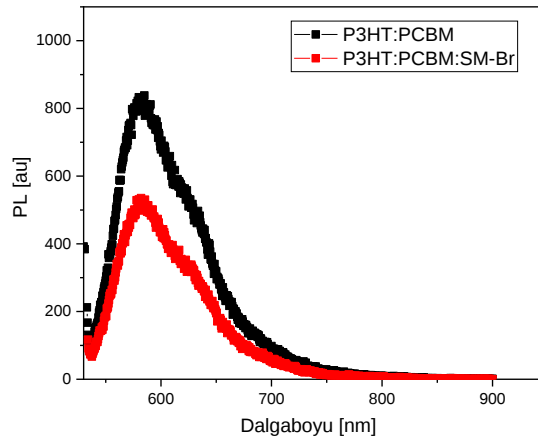
$$\begin{aligned} E_{HOMO} &= -e \left(E_{1/2(Ox.,dye)} - E_{1/2(Fe)} + 4.8 \right) \\ E_{LUMO} &= E_{HOMO} + E_g \\ E_g &= 1240 / \lambda_{abs,edge} \end{aligned} \quad (3.1)$$

Sonuç olarak, HOMO seviyesi 5,70eV, LUMO seviyesi ise 3,25e V olarak hesaplandı ve bant aralığı da 2,45e V olarak belirlendi. Teorik bant aralığı değerinin, deneysel değere çok yakın ve oldukça iyi bir uyum içerisinde olduğu gözlenmiştir. Deneysel sonuçlara bağlı olarak, Şekil 3.8'de enerji seviyelerini gösteren diyagramı çizildi. P3HT - PCBM'nin HOMO-LUMO seviye değerlerini literatürden alınmıştır [77-78]. SM-Br molekülünün Şekil 3.8'de P3HT ve PCBM'nin enerji seviyelerinin yük transferi için uygun olduğu gözlenmiştir.



Şekil 3.8 Aktif tabakada kullanılan malzemelerin enerji seviyelerinin karşılaştırılması

Fotoluminesans spektroskopisi, birbirinden ayrılmış elektron-delik çiftlerinin verimsiz emisyonu ve heteroyapılarda yük transferini araştırmak için etkin bir araçtır [79]. Şekil 3.9, P3HT: PCBM ve P3HT: PCBM: SM-Br'nin aktif tabakalarının PL grafiğini göstermektedir.

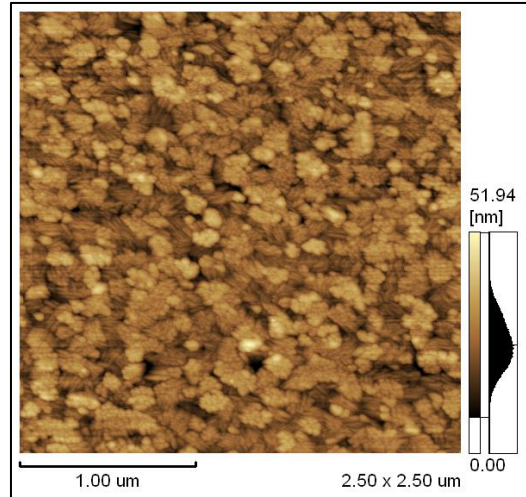


Şekil 3.9 Farklı aktif tabaka filmlerinin PL grafiği

Şekil 3.9'da görüldüğü gibi, P3HT: PCBM ve P3HT: PCBM: SM-Br'nin PL eğrileri ile kıyaslandığında P3HT: PCBM'nin fotoluminesansının yaklaşık % 60'ının sönmüldüğü gözlenmiştir. Bu da P3HT: PCBM:SM-Br arasında bir yük transferinin işaretidir.

3.1.4 SM-Br Molekölünün Morfolojik ve Yapısal Analizi

SM-Br molekülünün morfolojik yapısını incelemek için Atomik Kuvvet Mikroskobu (AFM) çalışmaları yapılmıştır. AFM tekniği mikro ve nanoyapılı ince filmlerin yüzey analizinde kullanılan etkili bir tekniktir. Şekil 3.10'da görüleceği gibi SM-Br molekülünden elde edilen ince filmin AFM görüntüsü görülmektedir. Sağdaki skala, yükseklik skalasını göstermekte olup yüzey üzerindeki tepe ve çukur arasındaki farkı göstermektedir. AFM resimlerinden anlaşılacağı gibi filmin yüzeyi tamamen kapladığı görülmektedir. İri tanecikler arasında çubuksu yapılar gözlenmiştir. Bu çubuksu yapıların düzenli bir şekilde yönlenmesinin sağlanması, morfolojinin düzenlenmesi açısından önemli olabilir. AFM görüntülerinden böyle bir yapının filmin kristalizasyonuna sebep olup olamayacağı sorusu ortaya çıktığından, ayrıca SM-Br molekülünün kristal yapısını incelemek için XRD analizleri yapılmıştır.

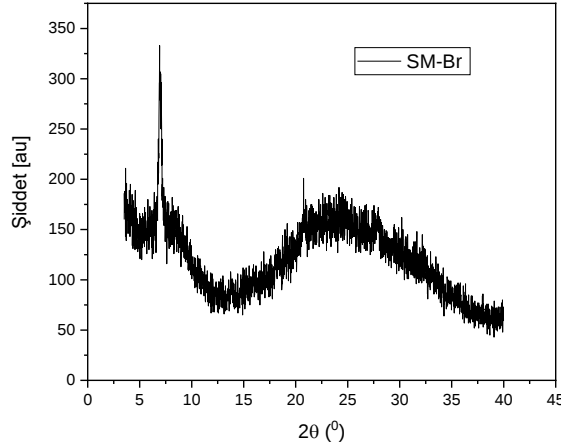


Şekil 3.10 SM-Br molekülünün AFM görüntüsü

Şekil 3.11, SM-Br molekülünün XRD görüntüsünü göstermektedir. Burada SM-Br molekülünün kristal yapısının bir göstergesi olan $2\theta=6.9^\circ$ 'da kuvvetli keskin bir pik yapmıştır. Bu keskin pikle birlikte 25° civarındaki geniş pik, SM-Br molekülünün yarı kristal özellikte olduğunun bir göstergesidir. Yarı maksimumdaki tam genişlik (FWHM) değeri $2\theta=6.9^\circ$ de belirlenerek, XRD verilerinden aşağıdaki Scherrer formülü kullanılarak kristalit boyutu hesaplanmıştır.

$$D = \frac{K\lambda}{\beta \cos\theta} \quad (3.2)$$

K boyutsuz bir şekil sabiti olup 1'e yakındır ve genellikle 0.9 civarı alınır. λ , X ışınlarının dalga boyu, β , FWHM değeri ve θ ise Bragg açısıdır. XRD verilerinden elde edilen değerlere göre kristalit boyutu 1.574 nm olarak hesaplanmıştır ve d aralığı da 1.27 nm olarak belirlenmiştir.

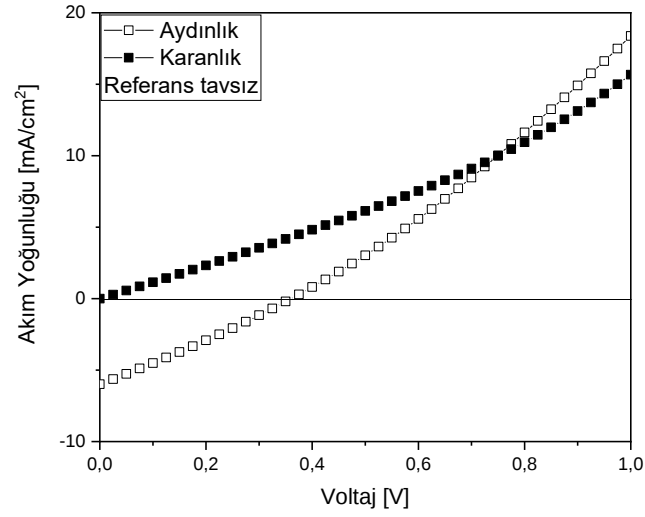


Şekil 3.11 SM-Br molekülünün XRD görüntüsü

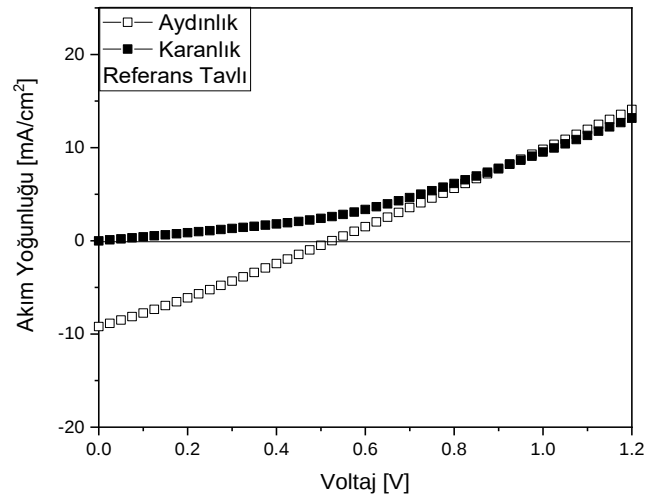
3.1.5 SM-Br Molekülü İçeren Organik Güneş Pillerinin Akım Yoğunluğu -Voltaj Karakteristikleri

Akım yoğunluğu-voltaj (J-V) eğrilerinden faydalanarak hazırlanan güneş pillerinin verimleri hesaplanmıştır. Bu amaçla, tersine çevrilmiş yapıda üç farklı organik güneş pili hazırlanmıştır. Aktif tabakaya SM-Br molekülünün etkisini incelemek amacıyla içerisinde SM-Br molekülü bulunmayan referans güneş pilleri hazırlanmıştır. Bu referans güneş pillerinin aktif tabakasında sadece, ısıtıl işlem uygulanmış ve hiç ısıtıl işlem uygulanmamış (tavlanmamış) P3HT: PCBM bulunmaktadır. Aktif tabakaya ısıtıl işlemi uygulamak için referans güneş pillerine ait sadece P3HT: PCBM tabakasına 120 °C'de 4 dakika ısıtıl işlem uygulanmıştır. SM-Br molekülü içeren aktif tabaka ise SM-Br: P3HT: PCBM şeklindedir ve herhangi bir ısıtıl işlem uygulanmamış yani, tavlama işlemi yapılmamıştır.

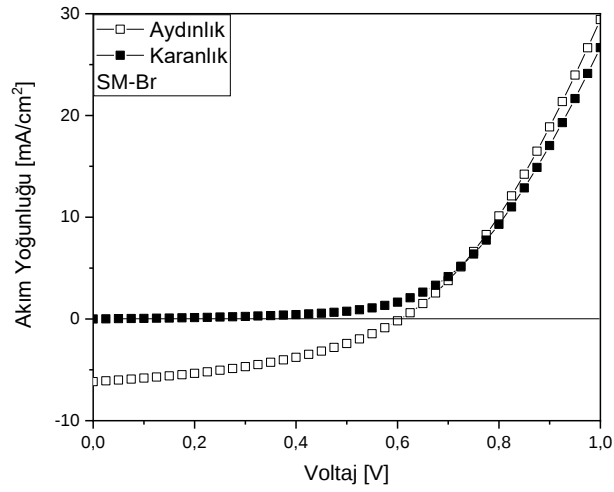
Şekil 3.12’de, incelenen aygıtların akım yoğunluğu-voltaj (J-V) grafikleri gösterilmektedir.



(a)



(b)



(c)

Şekil 3.12 (a) Tavlanmamış referans cihazının J-V eğrisi b) Tavlanmış aktif tabakalı referans cihazının J-V eğrisi (c) Tavlanmamış aktif tabakada SM-Br molekülü olan referans cihazların J-V eğrileri.

J-V grafiklerinden elde edilen üretilmiş cihazların fotovoltaiik parametreleri Tablo 1’de gösterilmiştir.

Tablo 3.1 İncelenen aygıtların fotovoltaiik parametreleri

Aktif Tabaka	J_{sc} (mA/cm ²)	V_{oc} (V)	FF	η (%)
P3HT: PCBM (Tavlanmamış)	5.98	0.375	0.25	0.56
P3HT: PCBM (Tavlanmış)	9.20	0.525	0.27	1.30
P3HT: PCBM:SM-Br (Tavlanmamış)	6.16	0.625	0.39	1.50

Literatürde P3HT: PCBM aktif tabakasının ısıtılmasının cihaz performansını arttırdığı gözlemlenmiştir. Isıtılma, literatürde P3HT'nin kısmen kristalleşmesine sebep olmuştur ve bu kristalizasyon P3HT: PCBM karışımının organizasyonu için oldukça uygun olduğu bilinmektedir. İyileştirilmiş kristallik yük taşıyıcılarının daha iyi taşınmasına ve daha iyi bir yük ayırmasına yol açar dolayısıyla bu da aygıt performansını artırır [80]. Bu deneyde ısıtılmanın aygıt performansını arttırdığını ve P3HT: PCBM aktif tabakasına SM molekülü ilave edildiğinde ısıtılmaya gerek kalmadan aygıt performansında artış gözlemlenmiştir.

Yeni bir siyano içeren ve fulleren olmayan alıcı molekülü YTÜ Kimya Bölümünden Dr. Çiğdem YÖRÜR GÖRECİ tarafından sentezlendi ve karakterize edildi. P3HT: PCBM esaslı hacim heteroeklemlili organik güneş pillerinde üçlü bileşenli aktif tabaka kullanıldığında performansı araştırıldı. Aktif tabakaya SM-Br molekülünün eklenmesi ile verimde % 15'lik bir artış gözlemlendi. SM-Br molekülünün kristal yapısı, yük aktarımının iyileştirilmesine yardımcı olur. Üçlü bileşenli karışımlarda karışıma eklenen malzemenin HOMO-LUMO enerji seviyelerinin aktif tabakada bulunan diğer bileşenlerin enerji seviyeleriyle uyumlu olması halinde, fotoluminesansta sönümlenme gözlemlenebilir. Bu tür bir sönümlenme de bir yük transferinin işareti olabilir. Bununla birlikte, SM-Br molekülü aktif tabakaya eklendiğinde, fotoluminesansın % 60'ının sönümlendiği gözlemlenmiştir. Öte yandan, bu çalışmanın en ilginç başarılarından birisi, aktif tabakaya eklenen ilave SM-Br molekülünün ısıtılma işlemi gerektirmemesidir. Literatürde, P3HT: PCBM'in aktif tabaka olarak kullanıldığı güneş pillerinde aktif tabakaya üretim sonrası sıcaklık uygulanarak verim artırılmaktadır. Termal ısıtılma, P3HT: PCBM cihazlarında yüksek verimlilik için önemli bir adımdır. Bununla birlikte, büyük ölçekli bir fabrikasyon için termal ısıtılma, bir zaman geciktirme ve işlemi bloke etme adımı olabilir. Bu nedenle, SM-Br molekülü eklenerek bu adımın ortadan kaldırılması önem arz etmektedir ve önemli bir avantaj olarak kaydedilebilir.

3.2 3,3'- (2,5- Dibutiloksi- 1,4- fenilen) -bis (2-(4-klorofenil) akrilonitril) Bileşiğinin Sentezi (C₃₂H₃₀Cl₂N₂O₂) (SM-Cl)

Molekülünün Organik Güneş Pillerinde Kullanılması

Burada çalışması yapılmış olan 3,3'-(2,5-Dibutiloksi-1,4-fenilen)-bis(2-(4-klorofenil) akrilonitril (SM-Cl), dört aşamada hazırlanmıştır.

3.2.1 SM-Cl Molekülünün Sentezi

1.Basamak: 1,4-Dibutiloksibenzen Bileşiğinin Sentezi (Bileşik 4, C₁₄H₂₂O₂)

Bileşik 4, n-butilbromür ve hidrokinonun KOH varlığında reaksiyona sokulmasıyla elde edildi. Bileşiğin yapı karakterizasyonu FTIR ve LC-MS spektroskopileriyle gerçekleştirildi. Verim: %91, e.n: 47-49°C. FTIR (ATR) ν (cm⁻¹): 2956, 2933 ve 2872 (alifatik CH gerilimleri), 1042 (Ar-O gerilimi), 973 (C-O-C gerilimi). LC-MS (m/z): 227.2 [M+5] + (C₁₄H₂₂O₂ hesaplanan; 222.3).

2.Basamak:1,4-Bis(bromometil)-2,5-dibutiloksibenzen Bileşiğinin Sentezi (Bileşik5, C₁₆H₂₄Br₂O₂)

Bileşik 5'in sentezi için, Bileşik 2 (1.5 mmol), paraformaldehit (15 mmol), NaBr (7.5 mmol) ve asetik asit (5 mL) karışım halinde hazırlanarak 70 °C'ye kadar ısıtıldı. Daha sonra konsantre sülfürik asit (0.4 mL) ve asetik asit (0.75 mL) karışımı damla damla eklendi. Bu reaksiyonun 4 saat boyunca kaynatıldı. Reaksiyonun sonucunda karışım oda sıcaklığına kadar soğutularak süzüldü. Daha sonra çözücü buharlaştırılarak kolon kromatografisi (heksan: etilasetat / 40:1) ile saf hale getirildi. Bileşik 5 saf olarak elde edildi.

Verim: % 77, e.n: 85-86°C. FTIR (ATR) ν (cm⁻¹): 2932, 2917 ve 2850 (alifatik CH gerilimleri), 1509 (CH₂ gerilimi), 1032 (Ar-O gerilimi), 905 (C-O-C gerilimi). LC-MS (m/z): 453.4 [M+ 2Na] + (C₁₆H₂₄Br₂O₂ hesaplanan; 408.2).

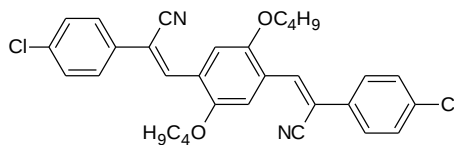
3. Basamak: 2,5-Dibutiloksibenzen-1,4-dikarbaldehit Bileşiğinin Sentezi (Bileşik 6, C₁₆H₂₂O₄)

Bileşik 6'nın sentezi için, Bileşik 5 (0.5 mmol) ve NaHCO₃ (7.5 mmol), 8 mL DMSO içerisinde karıştırılır ve karışım 115 ° C'ye kadar ısıtılır. Karışım giderek sarı floresan bir renk alır. Reaksiyon 30 dakika bu sıcaklıkta devam

eder. Bu reaksiyon sonucu elde edilen karışım 100 ml su içerisine dökülür ve kloroform ile ekstrakte edilir. Çözücü buharlaştırılarak geri de kalan sarı madde kurutulur.

Verim: % 75, e.n: 74-76°C. FTIR (ATR) ν (cm⁻¹): 2958, 2923 ve 2851 (alifatik CH gerilimleri), 1678 (C=O gerilimi), 1203 (C-O gerilimi). LC-MS (m/z): 278.1 [M]⁺ (C₁₆H₂₂O₄ hesaplanan; 278.3).

4.Basamak: 3,3'- (2,5-didesiloksi-1,4-fenilen)- bis (2-(4-bromofenil) akrilonitril) (SM-Cl, C₄₄H₅₄Br₂N₂O₂)



Şekil 3.13 SM-Cl molekülünün sentezi

SM-Cl molekülünün sentezi için, 0.25 g NaOH, 10 mL etanol ve 5 mmol 4-(klorofenil)asetonitril bileşiğinden bir çözelti hazırlandı. Çözelti 5-10 dakika oda sıcaklığında ve azot atmosferinde karıştırıldı. Bu sürenin sonunda, aldehit bileşiği olarak Bileşik 6'dan, 2.5 mmol karışıma ilave edilerek azot atmosferinde ve oda sıcaklığında 2 saat boyunca reaksiyon devam edildi. Reaksiyonun ilerlemesi TLC kontrolleri tarafından yapıldı ve oluşan çökelti reaksiyon sonunda süzüldü ve ürün normal atmosfer altında kurutuldu. Verim: % 91, e.n: 82-84 °C, Renk: turuncu katı, M_A: 545.499 g/mol. FTIR (ATR) ν (cm⁻¹): 3050 (aromatik CH gerilimi), 2211 (CN gerilimi), 1503 (C=C gerilimi). ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃): δ 8.02 (s, 2H, 2 -C=CH), 7.90 (s, 2H, 2 ArH), 7.65 (d, J= 8.5 Hz, 4H, ArH), 7.48-7.43 (m, 4H, ArH), 4.15 (t, J= 3.5 Hz, 4H, 2 OCH₂), 1.68-1.55 (m, 4H, OCH₂CH₂), 1.02 (t, J= 3.1 Hz, 6H, 2 CH₃). ¹³C NMR (100 MHz, CDCl₃): δ 151.8 (ArC), 136.4 (ArCq), 135.1 (ArCq) 132.9 (C=CH), 132.8 (C=CH), 129.2 (2xArCq-Cl), 127.3 (ArC), 118.0(2xCN), 110.8(CCN), 69.5 (OCH₂) ppm. LC-MS (m/z): 545.3 [M]⁺ (C₃₂H₃₀Cl₂N₂O₂ hesaplanan; 545.5).

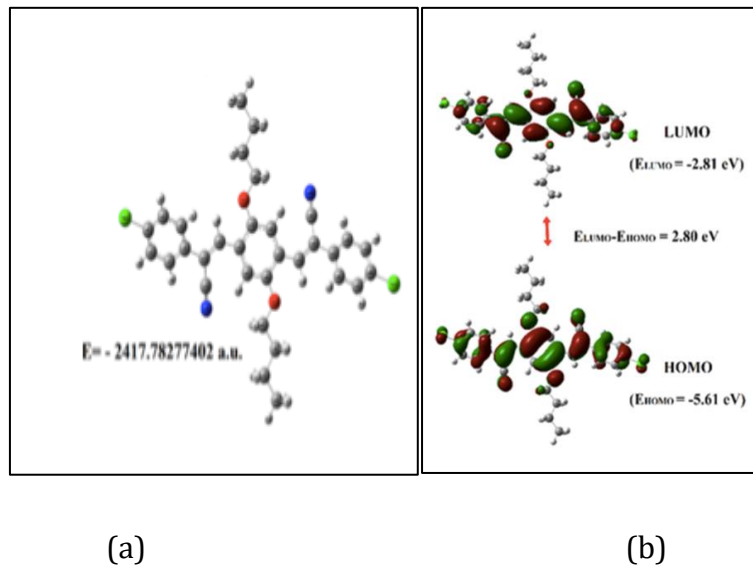
3.2.2 Aygıt Yapımı

SM-Cl molekülü içeren aygıtlar da SM-Br içeren aygıtlarda olduğu gibi ve bölüm 3.1.2'de detaylandırıldığı gibi, aynı aygıt mimarisinde hazırlanmıştır.

Genel olarak, asit işlemleri uygulanarak ITO kaplı camlar üzerinden ITO'nun bir bölümü kaldırılmış, daha sonra camlar ultrasonic banyoda temizlenerek, TiO_x filmleri kaplanmış ve 450 °C'de ısıtılarak işlem uygulanmıştır. P3HT: PCBM-SM-Cl karışımı dönel kaplama yöntemiyle kaplanarak 100 nm Ag termal buharlaştırma yöntemiyle kaplanmıştır.

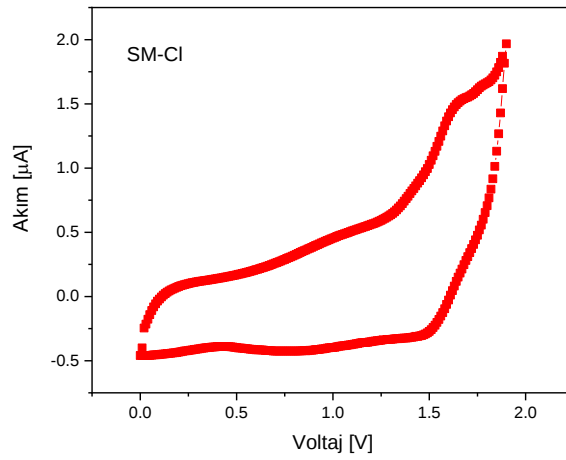
3.2.3 SM-Cl Molekülünün HOMO-LUMO Enerji Seviyelerinin Teorik ve Deneysel Olarak Belirlenmesi

Yoğunluk fonksiyonel Teori (DFT) moleküler sistemlerin, yapısal, spektroskopik, termodinamik, manyetik ve elektronik özelliklerinin belirlenmesi için kullanılan en yaygın metotlar arasındadır. Çalışmanın bu kısmında da SM-Br molekülünde olduğu gibi, DFT metodu B3LYP değiş tokuş korelasyon fonksiyonu ile birlikte kullanılarak sentezlenen moleküller için spektroskopik ve elektronik çalışmalar yapıldı. Tüm hesaplamalar Gaussian 09 W paket programı ile birlikte GaussView 5 moleküler görsel programı kullanılarak, TDDFT/B3LYP metodu ile 6-31 G(d) temel setinde hesaplandı.



Şekil 3.14 SM-Cl molekülünün DFT/B3LYP metodu kullanılarak 6-31 G(d) temel setinde hesaplanmış (a) optimize edilmiş yapıları ve enerjileri (b) moleküler orbital sınırları ve HOMO-LUMO enerji seviyeleri

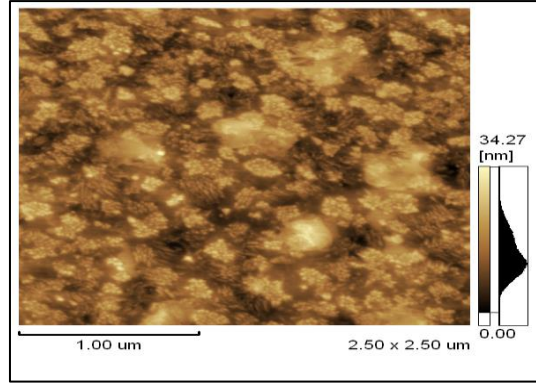
Şekil 3.14’de görüldüğü gibi teorik LUMO seviyesi -2.81 eV ve teorik HOMO seviyesi -5.61 eV olarak hesaplanmıştır. 2.81 eV’lik bir band aralığına sahip olduğu belirlenmiştir. Deneysel LUMO seviyesi, 3. bölümde belirtilen yöntemle -3.32 eV ve HOMO seviyesi de -5.73 eV olarak belirlenmiş olup, band aralığı 2.41 eV’a karşılık gelmektedir. Arada %17’lik bir fark bulunmaktadır. Bu farkın teorik sonuçların vakum ortamında deneysel sonuçların ise çözelti ortamında gerçekleşmesinden kaynaklandığı düşünülmektedir. Böyle bir fark literatürle de uyumludur.



Şekil 3.15 SM-Cl molekülünün döngüsel voltametri sonucu

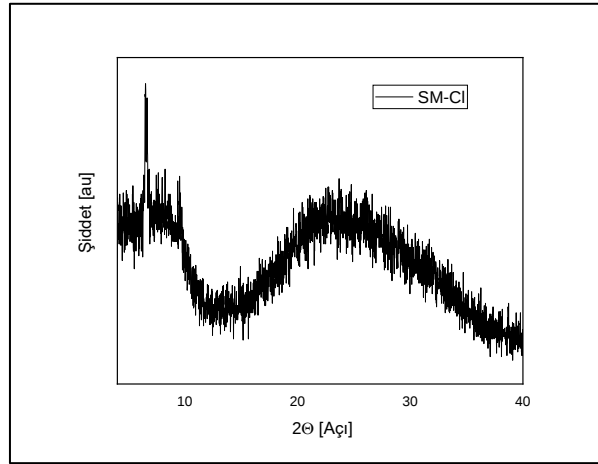
3.2.4 SM-Cl Molekülünün Morfolojik ve Yapısal Analizi

Şekil 3.16 ‘de SM-Cl molekülünün AFM görüntüsünü göstermektedir. SM-Cl molekülünün oldukça farklı olduğu görülmektedir. Yüzey pürüzlülüğü yüksek olmamakla birlikte yüzeyde görünen parlak yapılar, floresan özellik gösterebilir mi ve yine yüzeydeki çubuksu yapılar, kristalیک bir yapıya sahip mi sorularının araştırılması hususunu ortaya koymaktadır.



Şekil 3.16 SM-Cl molekülünün AFM görüntüsü

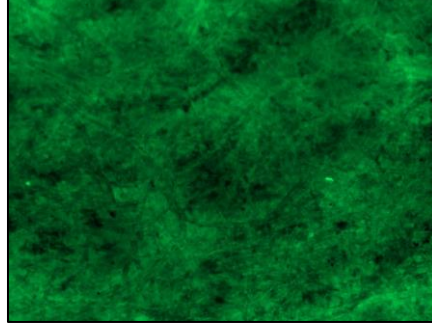
Şekil 3.17’de SM-Cl molekülünün XRD grafiğini göstermektedir. 6.4° civarındaki şiddetli pik ve bunu takiben 25° civarındaki geniş pik, malzemenin malzemenin yarıkristal bir yapıya sahip olduğunu bir göstergesidir. Scherrer bağıntısı kullanılarak, FWHM, kullanılarak kristalit boyutu 2.36 nm ve d aralığı da 1.36 nm olarak belirlenmiştir.



Şekil 3.17 SM-Cl molekülünün XRD görüntüsü

Şekil 3.18’de, 510 nm’de uyarılmış SM-Cl filmlerin floresan mikroskobu görüntülerini göstermektedir. Yerel mikroyapılar yük taşıyıcılarının yaşam ömrünü etkilemektedir ve floresan görüntülerinde parlak ve sönük alanların oluşmasına neden olmaktadır. Floresan mikroskobu görüntülerinden görüldüğü üzere, sadece parlak alanlar mevcut olup sönük alanlar gözlenmemiştir. Bu da SM-Cl molekülünün tüm film boyunca homojen olduğunu göstermektedir. Floresan şiddeti, filmdeki ışımasız kusur

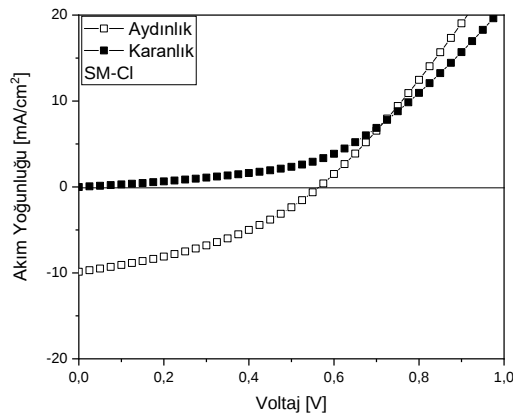
durumlarıyla ters orantılı olduğundan, floresans durumlarının artmış olması yüzey ve tüm hacim boyunca daha az kusur durumlarının oluşmuş olmasına işaret etmektedir.



Şekil 3.18 SM-Cl molekülünün floresans mikroskobu görüntüsü

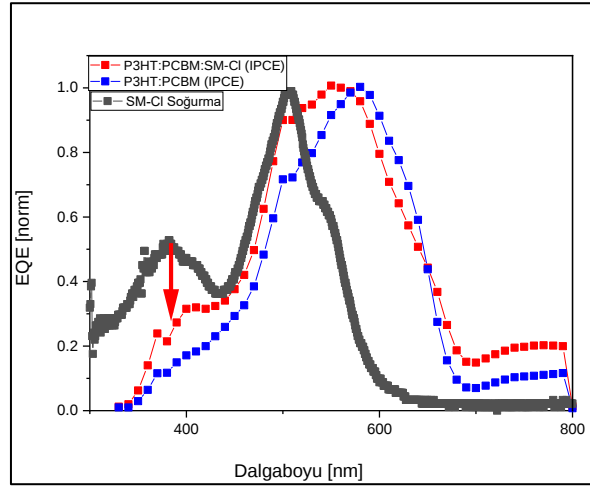
3.2.5 SM-Cl Molekülü İçeren Organik Güneş Pillerinin Akım Yoğunluğu-Voltaj Karakteristikleri

Şekil 3.19'da P3HT: PCBM içerisine SM-Cl molekülü eklenerek hazırlanmış tersine çevrilmiş organik güneş pillerinin akım-gerilim karakteristiklerini göstermektedir. Bu aygıt için $J_{sc}=9.9 \text{ mA/cm}^2$, $V_{oc}=0.575 \text{ V}$ ve dolgu faktörü $FF=0.38$ olarak hesaplanmıştır. Bu da %2.16'lık bir verime karşılık gelmektedir. SM-Cl molekülü eklenmiş güneş pillerinin verimi, referans güneş pillerine göre daha yüksek olduğundan SM-Cl molekülünün yük yaratılması ve taşınması mekanizmalarına katkıda bulunduğu görülmektedir.



Şekil 3.19 P3HT: PCBM içerisine eklenen SM-Cl molekülünün akım yoğunluğu-gerilim (J-V) eğrisi

Şekil 3.20’de SM-Cl içeren ve içermeyen güneş pillerinin normalize dış kuantum verimi (EQE) ve SM-Cl ince filminin soğurma eğrilerini göstermektedir. Kuantum verimi grafiklerinin normalize edilmesinin sebebi, soğurma ve EQE eğrilerinin birbirleriyle daha sağlıklı kıyaslanmasıdır ve dış kuantum verimi, güneş pili tarafından toplanan yük taşıyıcılarının sayısının dışarıdan güneş pili üzerine gelen belli enerjideki fotonların sayısına oranını ifade etmektedir. EQE eğrileri ve güneş pili yapısında kullanılan malzemelerin soğurma eğrileri kıyaslanarak yük yaratılma mekanizmalarına katkıda bulunup bulunmadıkları belirlenebilir. Şekilden görüldüğü gibi 400 nm civarında kırmızı okla belirtilen pikler sadece aygıt içerisinde SM-Cl molekülü bulunduğunda gözlenmektedir ve SM-Cl molekülünün soğurma eğrisinde de benzer bir pikin bulunması, SM-Cl molekülünün aktif olarak yük yaratılma mekanizmasına katkıda bulunduğunu göstermektedir.



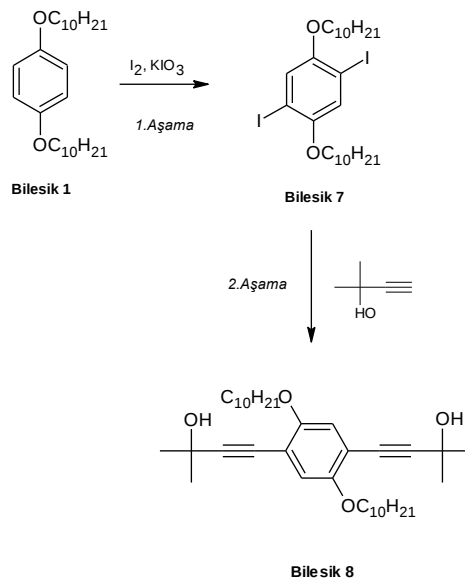
Şekil 3.20 SM-Cl molekülü içeren ve içermeyen organik güneş pillerinin normalize kuantum verimi, SM-Cl ince filminin soğurma grafiği

Sonuç olarak, SM-Cl molekülü aktif olarak, hem yük yaratılma ve hem de yük taşınma mekanizmalarına katkı sağlamaktadır.

3.3 P7 Polimerinin Üçlü Bileşenli Organik Güneş Pillerinde Kullanılması

3.3.1 P7 Polimerinin Sentezi ve Karakterizasyonu

P7 polimeri iki monomer kullanılarak hazırlanmıştır. Monomer 1 SM-Cl molekülüdür. Monomer 2 (1,4-Bis(3-metil-3-hidroksi-1-2,5-didesiloksibenzen)) ise iki aşamada sentezlenmiştir (Şekil 3.19). Daha sonra Monomer 1 ve Monomer 2' nin aşağıda belirtilen uygun koşullar altında Sonogashira reaksiyonuna girmesiyle polimerleşme ürünü P7 meydana gelmiştir. Sentezler Dr. Çiğdem YÖRÜR GÖRECİ tarafından gerçekleştirilmiştir.



Şekil 3.21 Monomer 2'nin sentezi

Monomer 2'nin Sentezi:

1. Basamak: 1,4-Diiyodo-2,5-didesiloksibenzen Bileşiğinin Sentezi (Bileşik 7, $C_{26}H_{44}I_2O_2$)

Bileşik 7, Bileşik 1' in (3.6 mmol), iyot (4.3 mmol), potasyum iyodat (1.8 mmol), asetik asit (50 mL), sülfirik asit (1 mL) ve su (5 mL) karışımına eklenerek 6 saat geri soğutucu altında kaynatılmasıyla elde edildi. Karışım soğutulduktan sonra ortama $Na_2S_2O_4$ eklendi ve çöken kısım süzüldü, etanol

ile yıkandı. Elde edilen ürün etanol/kloroform (1:1) karışımından kristallendirilerek saflaştırıldı. Bileşiğin yapı karakterizasyonu FTIR, ¹H NMR ve LC-MS spektroskopileriyle gerçekleştirildi.

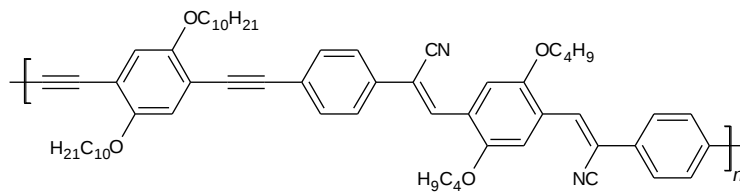
Verim: % 73, e.n: 73-74°C. FTIR (ATR): ν = 2918 ve 2850 (alifatik C-H gerilimleri), 1510 (C=C gerilimi), 1473 (alifatik C-H eğilimleri), 1232 (C-O gerilimi) cm^{-1} . ¹H NMR (500 MHz, CDCl_3): δ = 6.84 (s, 2H, Ar-H), 3.91 (t, 4H, 2 x OCH_2), 1.80 (q, 4H), 1.50 (q, 4H), 1.20-1.40 (m, 16H), 0.90 (t, 6H, 2 X CH_3) ppm. LC-MS: 641.7 [M]⁺ ($\text{C}_{26}\text{H}_{44}\text{I}_2\text{O}_2$ hesaplanan; 642.4).

2.Basamak:1,4-Bis(3-metil-3-hidroksi-1-butinil)-2,5-didesiloksibenzen
Bileşiği nin Sentezi (Bileşik 8, $\text{C}_{36}\text{H}_{58}\text{O}_4$)

Bileşik 8, Bileşik 7'nin (10 mmol), Pd (PPh_3)₂Cl₂ (0.28 mmol) ile birlikte kuru toluen (40 mL) içerisindeki karışımına kuru trietilamin (50 mL) eklenerek azot atmosferinde 1 saat karıştırıldı. Ardından 10 mL trietilamindeki CuI (0.5 mmol) ortama eklendi. En son olarak da ortama 3-metil-3-hidroksi-butin (0.024 mol) eklendi. Reaksiyona 55 °C'de 5,5 saat devam edildi. Sonra çöken kısım uzaklaştırıldı. Çözücü uçurularak sarı yağimsı madde elde edildi. Kolon kromatografisi ile saflaştırıldı. Bileşiğin yapı karakterizasyonu FTIR, ¹H NMR ve LC-MS spektroskopileriyle gerçekleştirildi.

Verim: % 69, e.n: 112-114°C. FTIR (ATR): ν = 3311 ve 3295 (OH gerilimi), 2984 ve 2936 (alifatik C-H gerilimleri), 2225 ($\text{C}\equiv\text{C}$ gerilimi) 1457 (C=C gerilimi), 1163 (C-O gerilimi) cm^{-1} . ¹H NMR (500 MHz, CDCl_3): δ = 7.46 (m, 2H, Ar-H), 3.83 (t, 4H, J= 6.5 Hz, 2 x OCH_2), 2.0 (brs, 2H, 2 x OH), 1.63 (s, 12H, CH_3 -, butil), 1.20-1.40 (m, 24H, $-(\text{CH}_2)_6-$), 0.87 (t, 6H, 2 X CH_3) ppm. LC-MS (m/z): 600.3 [M+ 2Na]⁺ ($\text{C}_{36}\text{H}_{58}\text{O}_4$ hesaplanan; 554.8).

P7 Polimerinin Sentezi:



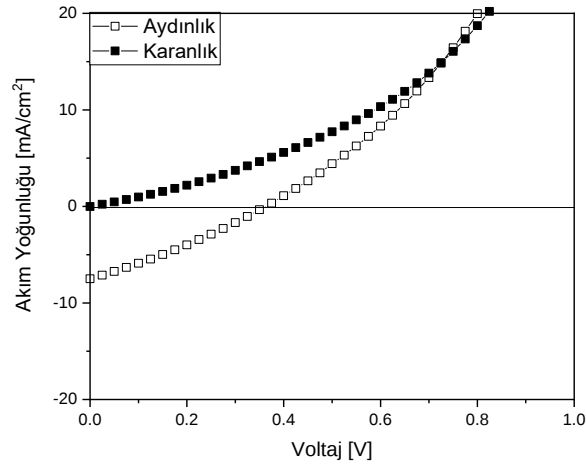
Şekil 3.22 P7 polimeri

Polimer sentezi için Pd (PPh₃)₂Cl₂ (0.0876 mmol), CuI (0.333 mmol), PPh₃ (0.48 mmol) ve benziltriethylamonyum klorür (PTC) (0.0628 mmol), toluen (10 mL) ve 3 mL 5.5 mol/L NaOH çözeltisine eklenerek oda sıcaklığında 30 dakika karıştırıldı. Daha sonra Monomer 1 olarak seçilen SM-Cl ve Monomer 2 olarak da Bileşik 8 (1 mmol) ortama eklendi Reaksiyon karışımı 20 saat 90 °C'de karıştırıldı. Daha sonra oda sıcaklığına soğutuldu ve karışım 300 mL %5 HCl içeren metanol çözeltisine eklendi. Karışım 5 saat karıştırıldı. Çöken kısım süzüldü, HCl, su ve metanol ile yıkandı. Katı kısım toluende çözülür, çözünmeyen kısım uzaklaştırıldı. Çözücü uçuruldu, metanolden kristallendirildi ve kurutuldu. Polimerin yapı karakterizasyonu FTIR ve GPC analizleri ile gerçekleştirildi.

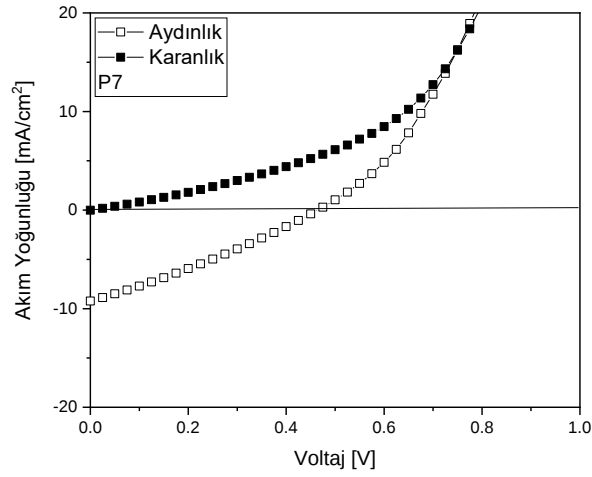
Verim: % 40, e.n > 250 °C. FTIR (ATR): ν = 3056 (aromatik CH gerilimi), 2925 ve 2853 (alifatik C-H gerilimleri), 2490 (C $\equiv$ C gerilimi), 2212 (CN gerilimi), 1589 (C=C gerilimi), 1027 (C-O gerilimi) cm⁻¹. GPC (THF): (M_n)= 1.353 (M_w)= 1.747, polidispersite: M_w/M_n = 1.29.

3.3.2 P7 Polimeri ile Hazırlanan Organik Güneş Pillerinin Akım-Gerilim Karakterizasyonu

P7 polimerinin tersine çevrilmiş yapıdaki organik güneş pillerinin akım-gerilim karakteristiklerine etkisinin daha iyi incelenebilmesi için aktif tabakada P7 polimeri içermeyen ve aktif tabakası tavlanmamış referans güneş pilleri hazırlanarak kıyaslama yapıldı. Referans güneş pilleri için J_{sc} =7.49 mA/cm², V_{oc} =0.375 V ölçüldü ve FF=0.27 olarak hesaplandı. Verim ise % 0.76 olarak belirlendi. Aktif tabakasında P7 polimeri içeren organik güneş pilleri için ise J_{sc} =9.46 mA/cm², V_{oc} =0.474 V olarak ölçüldü ve FF=0.28 olarak hesaplandı. Verim ise % 1.26 olarak belirlendi.



(a)



(b)

Şekil 3.23 (a) Referans P7 polimeri içermeyen, tavlanmamış (b) P7 polimeri içeren güneş pillerinin akım-gerilim karakteristikleri

Akım-gerilim karakteristiklerinden anlaşılaçağı üzere, P7 polimeri içeren tersine çevrilmiş güneş pillerinin verimi, referans pillere göre daha yüksek olduğı belirlenmiştir. Bu da, P7 polimerinin yük transferine ve taşınmasına katkı sağladığını göstermektedir.

Çalışmada ilk olarak, Dr. Çiğdem YÖRÜR GÖRECİ tarafından sentezlenen ve karakterize edilen 3,3'-(2,5-desiloksi-1,4-fenilen)-bis(2-(4-bis(2-bromofenil)akrilonitril) (SM-Br) molekülü, P3HT: PCBM aktif tabakası içerisine üçüncü bileşen olarak eklenerek tersine çevrilmiş organik güneş pilleri hazırlandı. Aktif tabakaya SM-Br molekülünün eklenmesi ile PCE'de % 15'lik bir artış gözlemlendi. SM-Br molekülünün kristal yapısı, yük aktarımının iyileştirilmesinde etkili olduğu düşünülmektedir. Fotoluminesansta gözlemlenen sönümlenme, bir yük transferinin göstergesi olabilir. Öte yandan, bu çalışmanın en ilginç başarılarından biri, aktif eklenen ilave SM-Br molekülünün ısı tavlama gerektirmemesidir. Termal tavlama, P3HT: PCBM cihazlarında yüksek verimlilik için çok önemli bir adımdır. Bununla birlikte, büyük ölçekli bir fabrikasyon için termal tavlama, bir zaman geciktirme ve işlemi bloke etme adımı olabilir. Bu nedenle, ilave bir SM-Br molekülü, böylesi bir soruna sebep olacak bir adımın gerekli olmaması için bir avantaj sağlamıştır.

Tez çalışmasında araştırılan bir diğer molekül ise yine Dr. Çiğdem YÖRÜR GÖRECİ tarafından sentezlenen ve karakterize edilen, 3,3'-(2,5-dibortiloksi-1,4-fenilen)-bis(2-(4(-klorofenil) akrilonitril) SM-Cl molekülüdür. SM-Br molekülüne benzer şekilde P3HT: PCBM aktif tabakası içerisine katılarak tersine çevrilmiş organik güneş pilleri hazırlanmış ve karakterize edilmiştir. Aktif tabaka içerisine SM-Cl molekülü eklenmesinin aygıt performansını arttırdığı gözlenmiştir.

Küçük moleküllerin yanı sıra, polimer bir malzeme de (P7), P3HT: PCBM aktif tabakası içerisine eklenerek organik güneş pilleri hazırlanmıştır. Polimer malzemenin aktif tabakaya eklenmesiyle aygıt performansının arttığı gözlenmiştir. Ancak, küçük moleküllere kıyasla polimer malzemenin

Özellikle fulleren malzemelerin sentezinin zor ve pahalı olması sebebiyle fulleren içermeyen organik moleküllerin sentezi ve karakterizasyonu büyük önem arz etmektedir. Organik güneş pillerinde donör malzemelerin çeşidinin bol olmasına rağmen, akseptör malzemeler oldukça sınırlı kalmaktadır. Bu sebeple, çözünürlüğü yüksek ve enerji seviyeleri organik güneş pillerinde sıklıkla kullanılan donör malzemelerin enerji seviyeleriyle uyumlu akseptör malzemelerin üretilmesi önemlidir.

- [1] A. Yadav ve P. Kumar, "Enhancement in Efficiency of PV Cell through P&O Algorithm", *Int. J. Technol. Res. Eng.*, vol.2, no.11, pp. 2642-2644,2015.
- [2] M.T. Kibria, A. Ahammed, S.M. Sony, F. Hossain," A Review: Comparative studies on different generation solar cells technology", *Int. Conf. Environ. Asp. Bangladesh.*, pp.51- 53,2014.
- [3] D.Kearns ve Calvin,M., "Photovoltaic Effect and Photoconductivity in LaminatedOrganic Systems," *J. Chem. Phys.*, vol.29, no. 4, pp.950–951, 1958.
- [4] D.L. Morel, E.L. Stogryn, K. Ghosh, T. Feng, P.E. Purwin, R.F. Shaw, C. Fishman,G.R.Bird ve P. Piechowski, "Organic Photovoltaic Cells - Correlations between Cell Performance and Molecular-Structure", *J. Phys. Chem.*, vol. 88, no. 5, pp. 923–933, 1984.
- [5] C.W. Tang, "Two-layer organic photovoltaic cell", *Appl. Phys. Lett.*, vol.48, no.2, pp.183 185, 1986.
- [6] N.S. Sariciftci, L. Smilowitz, A.J. Heeger, ve F. Wudl, "Photoinduced electron transfer from a conducting polymer to buckminster fullerene", *Science*, vol.258, no.5087, pp.1474-1476,1992.
- [7]S.E.Shaheen,C.J.Brabec, N.S. Sariciftci, F. Padinger, T.C. Fromherz, &J. Hummelen, "2.5% efficient organic plastic solar cells", *Applied Physics Letters.*, vol.78, no. 6, pp.841– 843, 2001.
- [8] F. Padinger, R.S. Rittberger, ve N.S. Sariciftci, "Effects of postproduction treatment om plastic solar cells", *Adv. Funct. Mater.*, vol.13, no. 1, pp. 85-88, 2003.
- [9] J.Y. Kim, S.H. Kim, H.H. Lee, K. Lee, W. Ma, X. Gong, ve A.J. Heeger, "New architecture for high-efficiency polymer photovoltaic cells using solution-based titanium oxide as an optical spacer", *Adv. Mater.*, vol.18, no. 5, pp. 572– 576, 2006.
- [10]SungHeum.Park,Mario.Leclerc,AlanJ.Heeger,Kwanghee.Lee,"Bulkheterojunctions solar cells with internal quantum efficiency approaching %100", *Nature Publishing.*, vol.3 p.no.5, pp.297-302,2009.
- [11]Zhou.Jiaoyan,Wan.Xiangjian,Liu.Yongsheng,Zuo.Yi,Li.Zhi,He.Guangrui,Long.Guankui, Ni. Wang, Li. Chenxi, Su. Xuncheng, Chen. Yongsheng, "Small Molecules Based on Benzo [1,2-b:4,5-b'] dithiophene Unit for High-Per, vol.134, no.39, pp.16345-16351, 2012.
- [12]Zhang.Qian,Bin,Kan.,Feng,Liu.,Guankui,Long.,Xiangjian,Wan.,Xiaoqing,Chen.,Yi,Zuo., Wang Ni.,Huijing, Zhang., Miaomiao, Li., Zhicheng, Hu., Fei, Huang., Yong, Cao., Ziqi, Liang., Mingtao, Zhang., Thomas, P. Russell., Yongsheng, Chen.," Small-molecule solar cells with efficiency over 9 %", *Nature Photonics.*, vol.9, no.1, pp. 35-41, 2015.

- [13] Zuo.Xiao,Xue.Jia,Liming.Ding,"Ternary organic solar cells offer 14% power conversion efficiency", Science Bulletin, vol.62, no. 23, pp. 1562-1564, 2017.
- [14] Jianxiao.Wang,Jian. Wang, Fujun. Zhang," Ternary polymer solar cells achieving 11.78% efficiency with two fluorinated non-fulleren acceptors", Organic Electronics, vol.67, pp. 253-258, 2019.
- [15] Yuanbao.Lin,Yuliar.Firdaus,MohamadInsan.Nugraha,Feng.Liu,Safakath.Karuthedath, AbdulHamid.Emwas,Weimin.Zhang,Akmaral.Seitkhan,Marios.Neophytou,Hendrik.Fa ber,Emre.Yengel, Iain.McCulloch, Leonidas.Tsetseris, Frédéric. Laquai, Thomas D. Anthopoulos," 17.1% Efficient Single-Junction Organic Solar Cells Enabled by n-Type Doping of the Bulk-Heterojunction", Advanced Science., Rev., vol. 7, pp. 1903419, 2020.
- [16] R.Baños,F.Manzano-Agugliaro,F.G. Montoya, C. Gil, A. Alcayde, J. Gómez,"Optimization methods applied to renewable and sustainable energy: A review," Renew. Sustain Energy Rev., vol. 15, pp. 1753–1766,2011.
- [17] J.Wu,Z. Lan,J. Lin, M. Huang,Y. Huang, L. Fan,G. Luo,"Electrolytes in dye-sensitized solar cells", Chem. Rev., vol. 115, pp. 2136–2173, 2015.
- [18] I. Dincer, "Renewable energy and sustainable development: a crucial review", Renew Sustain. Energy Rev., vol. 4, pp. 157–175, 2000.
- [19] D.M. Chapin,C.S. Fuller,G.L. Pearson,"A new silicon p-n junction photocell for converting solar radiation into electrical power", J. Appl. Phys., vol. 25, pp. 676–677,1954.
- [20] M.A. Contreras, L.M. Mansfield, B. Egaas, J. Li, M. Romero, R. Noufi, E. Rudiger-voigt, W. Mannstadt," Wide Bandgap Cu (In, Ga) Se₂ solar cells with improved energy conversion efficiency", Prog. Photovolt Res. Appl., vol. 15, pp. 659–676,2007.
- [21] A.MohammadBagher,"TypesofSolarCellsandApplication",Am.J.Opt.Photonics,vol.3, pp. 94-113, 2015.
- [22] CS.W.Glunz,R.Preu,D.Biro,"Crystalline silicon solar cells.State-of-the-art and future developmentsin:A.Sayigh",ComprehensiveRenewableEnergy,Elsevier,Amsterdam, pp. 353-387,2012.
- [23] J.Szlufcik,S.Sivothythaman,J.F.Nijs,R.P.Mertens, R. Van Overstraeten,"Lowcost industrial technologies of crystalline silicon solar cells", Proc. Ieee. 85, pp. 711–730, 1997.
- [24] T.Saitoh,"30Yearsof progress in crystalline silicon solar cells",Proceedings of 3rd Congress on Photovoltaic Energy Conversion 3, pp. 23-28, 2003.

- [25] S. Okamoto, "M. Nishida, 23.5% efficient silicon solar cell with rear micro contacts of cSi/muc-Si: H heterostructure", 26th IEEE Photovolt. Spec. Conf., pp. 255–258, 1997.
- [26] M.A. Green, J. Zhao, A. Wang, S.R. Wenham, "Progress and outlook for high-efficiency crystalline silicon solar cells", Sol. Energy Mater. Sol. Cells., vol.65, pp. 9–16, 2001.
- [27] O. Schultz, S.W. Glunz, G.P. Willeke, "Multicrystalline silicon solar cells exceeding 20% efficiency", Prog. Photovoltaics Res. Appl., vol.12, pp. 553–558, 2004.
- [28] P. Yadav, K. Pandey, B. Tripathi, M. Kumar, "Investigation of interface limited charge extraction and recombination in polycrystalline silicon solar cell: Using DC and AC characterization techniques", Sol. Energy, vol. 116, pp. 293–302, 2015.
- [29] R.C. Chittik, J.H. Alexander, H.F. Sterling, "The Preparation and Properties of Amorphous Silicon", J. Electrochem. Soc., vol.116, no.1, pp. 77-81, 1969.
- [30] D.E. Carlson, C.R. Wronski, "Amorphous silicon solar cell", Appl. Phys. Lett., vol.28, pp. 671-673, 1976.
- [31] C.R. Wronski, D.E. Carlson, R.E. Daniel, A.R. Triano, "Electrical properties of a-Si solar cells", 1976 Int. Electron Devices Meet., pp. 75–78, 1976.
- [32] A. Catalano, R. V D'Aiello, J. Dresner, B. Faughnan, A. Firester, J. Kane, H. Schade, Z.E. Smith, G. Swartz, A. Triano, "Attainment of 10% Conversion Efficiency in Amorphous Silicon Solar Cells", in: Conf. Rec. IEEE Photovolt. Spec. Conf., pp. 1421–1422, 1982.
- [33] D.L. Staebler, C.R. Wronski, "Reversible Conductivity Changes in Discharge-Produced Amorphous Si", Appl. Phys. Lett., vol. 31, pp. 292–294, 1977.
- [34] T. Matsui, H. Sai, T. Suezaki, M. Matsumoto, K. Saito, I. Yoshida, M. Kondo, "Development of Highly Stable and Efficient Amorphous Silicon Based Solar Cells", 28th Eur. Photovolt. Sol. Energy Conf. Exhib. Dev. Proceedings, pp. 2213-2217, 2013.
- [35] H. Sai, K. Maejima, T. Matsui, T. Koida, M. Kondo, S. Nakao, Y. Takeuchi, H. Katayama, I. Yoshida, "High-efficiency microcrystalline silicon solar cells on honeycomb textured substrates grown with high-rate VHF plasma-enhanced chemical vapor deposition", Jpn. J. Appl. Phys., vol. 54, no. 8S1, 2015.
- [36] A.A. Taylor, J.D. Major, G. Kartopu, D. Lamb, J. Duenow, R.G. Dhere, X. Maeder, S.J.C. Irvine, K. Durose, B.G. Mendis, "A comparative study of microstructural stability and sulphur diffusion in CdS/CdTe photovoltaic devices", Sol. Energy Mater. Sol. Cells, Vol.141, pp. 341–349, 2015.

- [37] W.P.R. Liyanage, J.S. Wilson, E.C. Kinzel, B.K. Durant, M. Nath, "Fabrication of CdTe nanorod arrays over large area through patterned electrodeposition for efficient solar energy conversion", *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 133, pp. 260–267, 2015.
- [38] D. Bonnet, H. Rabenhorst, "New Results on the Development of a thin film p-CdTe/n-CdS heterojunction solar cell", *Proceedings of 9th IEEE Photovoltaic Specialist Conference*, New York, pp. 129-131, 1972.
- [39] C. Ferekides, J. Britt, Y. Ma, L. Killian, "High efficiency CdTe solar cells by close spaced sublimation", in: *Conf. Rec. IEEE Photovolt. Spec. Conf.*, pp. 389–393, 1993.
- [40] A. Romeo, M. Terheggen, D. Abou-Ras, D.L. Bätzner, F.-J. Haug, M. Kälin, D. Rudmann, A.N. Tiwari, "Development of thin-film Cu (In, Ga) Se₂ and CdTe solar cells", *Prog. Photovoltaics Res. Appl.*, vol. 12, pp. 93–111, 2004.
- [41] M. Contreras, J. Tuttle, D. Du, Y. Qi, A. Swartzlander, A. Tennant, R. Noufi, "Graded band-gap Cu (In, Ga) Se₂ thin-film solar cell absorber with enhanced open-circuit voltage", *Appl. Phys. Lett.*, vol. 63, pp. 1824–1826, 1993.
- [42] T. Nakada, M. Mizutani, "18% efficiency Cd-free Cu (In, Ga) Se₂ thin-film solar cells fabricated using chemical bath deposition (CBD)-ZnS buffer layers", *Japanese J. Appl. Physics, Part 2 Lett.*, vol. 41, pp. L165–L167, 2002.
- [43] *Photovoltaics Report Prepared by Farunhofer Institute for Solar Energy Systems*, pp. 1- 43, 2013.
- [44] G. Yu, A.J. Heeger, "Charge separation and photovoltaic conversion in polymer composites with internal donor/acceptor heterojunctions", *J. Appl. Phys.*, vol.78, pp. 4510–4515, 1995.
- [45] A.R. Jordehi, "Parameter estimation of solar photovoltaic (PV) cells: A review", *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 61, pp. 354–371, 2016.
- [46] S.M. Sze, K.K. Ng, J.-P. Colinge, C.A. Colinge, "Physics of semiconductor devices", Wiley, 2002.
- [47] S. Günes, H. Neugebauer ve N.S. Sarıçiftci, "Conjugated Polymer-Based Organic Solar Cells", *Chem.Rev.*, vol.107, no. 4, pp. 1324-1338, 2007.
- [48] A.J. Heeger, "Semiconducting and metallic polymers: the fourth generation of polymeric materials", *Curr. Appl. Phys.*, vol.1, pp. 247–267, 2001.
- [49] F. Wudl, "The chemical properties of Buckminsterfullerene (C₆₀) and the Birth and Infancy of Fulleroids", *Acc. Chem. Res.*, vol. 25, pp. 157–161, 1992.

- [50] J.-M. Nunzi, "Organic photovoltaic materials and devices", *Comptes Rendus Phys.*, vol. 3, pp. 523–542, 2002.
- [51] A.J. Mozer, N.S. Sariciftci, "Conjugated polymer photovoltaic devices and materials", *Comptes Rendus Chim.*, vol. 9, pp. 568–577, 2006.
- [52] I.D. Parker, "Carrier tunneling and device characteristics in polymer light-emitting diodes", *J. Appl. Phys.*, vol. 75, pp. 1656–1666, 1994.
- [53] C.J. Brabec, A. Cravino, D. Meissner, N.S. Sariciftci, T. Fromherz, M.T. Rispens, L. Sanchez, J.C. Hummelen, "Origin of the open circuit voltage of plastic solar cells", *Adv. Funct. Mater.*, vol. 11, pp. 374–380, 2001.
- [54] M.C. Scharber, D. Mühlbacher, M. Koppe, P. Denk, C. Waldauf, A.J. Heeger, C.J. Brabec, "Design rules for donors in bulk-heterojunction solar cells - Towards 10 % energy conversion efficiency", *Adv. Mater.*, vol. 18, pp. 789–794, 2006.
- [55] G.T. Mola, N. Abera, "Correlation between LUMO offset of donor/acceptor molecules to an open circuit voltage in bulk heterojunction solar cell", *Phys. B Condens. Matter.*, vol. 445, pp. 56–59, 2014.
- [56] G.G. Malliaras, J.R. Salem, P.J. Brock, J.C. Scott, "Photovoltaic measurement of the built-in potential in organic light emitting diodes and photodiodes", *J. Appl. Phys.*, vol. 84, pp. 1583–1587, 1998.
- [57] J.K.J. van Duren, J. Loos, F. Morrissey, C.M. Leewis, K.P.H. Kivits, L.J. van IJzendoorn, M.T. Rispens, J.C. Hummelen, R.A.J. Janssen, "In-Situ compositional and structural analysis of plastic solar cells", *Adv. Funct. Mater.*, vol. 12, pp. 665–669, 2002.
- [58] C.W.T. Bulle-Lieuwma, W.J.H. van Gennip, J.K.J. van Duren, P. Jonkheijm, R.A.J. Janssen, J.W. Niemantsverdriet, "Characterization of polymer solar cells by TOF-SIMS depth, profiling", *Appl. Surf. Sci.*, vol. 203–204, pp. 547–550, 2003.
- [59] C.C. Wu, C.I. Wu, J.C. Sturm, a. Kahn, "Surface modification of indium tin oxide by plasma treatment: An effective method to improve the efficiency, brightness, and reliability of organic light emitting devices", *Appl. Phys. Lett.*, vol. 70, pp. 1348–1350, 1997.
- [60] T. Brown, J. Kim, R. Friend, F. Cacialli, R. Daik, W. Feast, "Built-in field electroabsorption spectroscopy of polymer light-emitting diodes incorporating a doped poly (3,4-ethylene dioxythiophene) hole injection layer", *Appl. Phys. Lett.*, vol. 75, pp. 1679–1681, 1999.

- [61] C. Soci, I.W. Hwang, D. Moses, Z. Zhu, D. Waller, R. Gaudiana, C.J. Brabec, A.J. Heeger, "Photoconductivity of a low-bandgap conjugated polymer", *Adv. Funct. Mater.*, vol. 17, pp. 632–636, 1999.
- [62] L.M. Campos, A. Tontcheva, S. Günes, G. Sonmez, "H. Neugebauer, S. Sariciftci, F. Wudl, Supporting information extended photocurrent spectrum of a low-bandgap polymer in a bulk heterojunction solar cells", *Chemistry of Materials*, vol. 17, pp. 1–12, 2005.
- [63] C. Winder, "Sensitization of low bandgap polymer bulk heterojunction solar cells", *Thin Solid Films*, vol. 403–404, pp. 373–379, 2002.
- [64] D. Gupta, S. Mukhopadhyay, K.S. Narayan, "Fill factor in organic solar cells", *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 94, pp. 1309–1313, 2010.
- [65] M.S. Kim, B.G. Kim, J. Kim, "Effective variables to control the fill factor of organic photovoltaic cells", *ACS Appl. Mater. Interfaces*, vol. 1, pp. 1264–1269, 2009.
- [66] S. Barrau, V. Andersson, F. Zhang, S. Masich, J. Bijleveld, M.R. Andersson, O. Inganäs, "Nanomorphology of bulk heterojunction organic solar cells in 2D and 3D correlated to photovoltaic performance", *Macromolecules*, vol. 42, pp. 4646–4650, 2009.
- [67] J. Nelson, J.J. Kiatkowski, J. Kirkpatrick, J.M. Frost, "Modeling charge transport in organic photovoltaic materials", *Acc. Chem. Res.*, vol. 42, pp. 1768–1778, 2009.
- [68] M.J. Plater, J.P. Sinclair, S. Aiken, T. Gelbrich, M. B. Hursthouse, "The CA.M lattice revisited. Gel formation from a linear bis-isocyanuric acid and 2-amino-4,6-bis-(4-tert-butylphenylamino)-1,3,5-triazine", *Tetrahedron*, vol. 60, pp. 6385–6394, 2004.
- [69] S. Lightowler, M. Hird, "Palladium-Catalyzed Cross-Coupling Reactions in the Synthesis of Novel Aromatic Polymers", *Chem. Mater.*, vol. 16, no. 20, pp. 3963–3971, 2004.
- [70] Shao, Z. Li, J. Luo, H. Wang and J. Qin, "A Convenient Synthetic Route to 2,5-Dialkoxy terephthalaldehyde", *Synthetic Communications*, vol. 35, pp. 49–53, 2004.
- [71] A.D. Becke, "Density-functional thermochemistry. III. The role of exact Exchange", *J. Chem. Phys.*, vol. 98, no. 7, pp. 5648–5652, 1993.
- [72] C. Lee, W. Yang, R. G. Parr, "Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density", *Phys. Rev. B*, vol. 37, no. 2, pp. 785–789, 1988.
- [73] M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, H. B. Scuseria, G. E. Scuseria, Gaussian 09, Revision C.01, Gaussian Inc, Wallingford, CT, 2009.

- [74] R. Dennington, T. Keith, J. Millam, "GaussView, Version 5, Shawnee Mission KS", Semichem Inc, 2009.
- [75] A. Shafiee, M.M. Salleh, M. Yahaya, "Determination of HOMO and LUMO of [6,6]-Phenyl C61-butyric Acid 3-ethylthiophene Ester and Poly (3-octyl-thiophene-2, 5-diyl) through Voltametry Characterization", *Sains Malaysiana*, vol. 40, no. 2, pp. 173-176, 2011.
- [76] M. Lin, D. Li, X. Wang, C. Luo, Q. Ling, "Synthesis and optical properties of White phosphorescent carbazole-iridium copolymers", *Journal of Macromolecular Science, Part A: Pure and Applied Chemistry*, vol. 53, no. 4, pp. 222-226, 2016.
- [77] P. Khlyabich, B. Burkhart, A.E. Rudenko, B.C. Thompson, "Optimization and Simplification of Polymer-Fullerene Solar Cells through Polymer and Active Layer Design, *Polymer*", vol. 54, pp. 5267-5298, 2013.
- [78] J.Y. Kim, K. Lee, N.E. Coates, D. Moses, T.Q. Ngien, M. Dante, A.J. Heeger, "Efficient Tandem Polymer Solar Cells Fabricated by All Solution Processing", *Science*, vol. 317, pp. 222-225, 2017.
- [79] S. Luo, X. Qi, J. Li, L. Ren, G. Guo, Q. Peng, J. Li, J. Zhong, "Significant Photoluminescence Quenching and Charge Transfer in the MoS₂/Bi₂Te₃ Heterostructure", *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, vol. 128, pp. 337-342, 2019.
- [80] S. Anwar, H. Efstathiadis, S. Qazi, "Handbook of Research on Solar Energy Systems and Technologies edited by C. Smith", IGI Global, 2013.

Tezden Üretilmiş Yayınlar

İletişim Bilgisi: sinemnilisaz@gmail.com

Konferans Bildirileri

1. S. Nilisaz, S. Bozar, Ç. Yörür Göreci, M. Kazici, H. Moeini Alishah, M. B. Arvas, Y. Şahin, Ç. Şahin, S. Güneş, " İRENEC 10.Uluslararası %100 Yenilenebilir Enerji Konferansı", sayfa 13, 2020.