

**T.C.  
ADYAMAN ÜNİVERSİTESİ  
LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**TiO<sub>2</sub> YÜZEYİNE Sn, Ca, Mg VE Al ATOMLARININ EKLENMESİ  
İLE OLUŞTURULAN KRİSTAL YAPILARIN BOYA DUYARLI  
GÜNEŞ HÜCRELERİNE UYGUNLUKLARININ YOĞUNLUK  
FONKSİYON TEORİSİ KULLANILARAK İNCELENMESİ**

**GAFFARİ YALÇIN**

**FİZİK ANABİLİM DALI**

**ADYAMAN, 2021**

## ÖZET

### Yüksek Lisans Tezi

# TiO<sub>2</sub> YÜZEYİNE Sn, Ca, Mg VE Al ATOMLARININ EKLENMESİ İLE OLUŞTURULAN KRİSTAL YAPILARIN BOYA DUYARLI GÜNEŞ HÜCRELERİNE UYGUNLUKLARININ YOĞUNLUK FONKSİYON TEORİSİ KULLANILARAK İNCELENMESİ

Gaffari YALÇIN

Adıyaman Üniversitesi  
Lisansüstü Eğitim Enstitüsü  
Fizik Anabilim Dalı

Danışman : Doç. Dr. Bayram TALİ  
İkinci Danışman : Doç. Dr. Salih AKBUDAK  
Yıl : 2021, Sayfa sayısı: 76  
Jüri : Prof. Dr. Eda SONBAŞ  
: Doç. Dr. Bayram TALİ  
: Doç. Dr. Abdullah CANDAN

Fosil yakıtların çevreye zarar vermesi ve rezervlerinin tükeniyor olması alternatif enerji kaynaklarına yönelimi gerektirmektedir. Bu alternatif enerji kaynaklarından en önemlisi olan güneş enerjisinden yeterince faydalanılamamaktadır. Güneş enerjisini elektrik enerjisine dönüştüren sistemler fotovoltaik sistemlerdir. Fotovoltaik sistemlerden enerji elde edilmesinde karşılaşılan en büyük problem enerji verimliliği düşüklüğü ve maliyetin yüksek olmasıdır. Bu nedenle bu çalışmada, yeni nesil güneş hücresi olan boya duyarlı güneş hücrelerine farklı atomlar ekleyerek oluşturulan kristal yapıların boya duyarlı güneş hücrelerine uygunluğu incelenmiştir. Quantum espresso simülasyon programı kullanılarak Sn, Ca, Mg ve Al elementleri TiO<sub>2</sub> tabanına eklenmiştir. TiO<sub>2</sub> tabanına eklenen bu elementlerin oluşturdukları kristal yapıların (TiO<sub>2</sub>Sn, TiO<sub>2</sub>Ca, TiO<sub>2</sub>Mg ve TiO<sub>2</sub>Al) atomik yapıları, toplam enerjisi, bant aralıkları ve durum yoğunlukları incelenmiştir. Daha sonra TiO<sub>2</sub> tabanına ikişer tane Sn, Ca, Mg ve Al elementleri eklenerek oluşturulan kristal yapıların (TiO<sub>2</sub>Sn<sub>2</sub>, TiO<sub>2</sub>Ca<sub>2</sub>, TiO<sub>2</sub>Mg<sub>2</sub> ve TiO<sub>2</sub>Al<sub>2</sub>) benzer özellikleri tekrar incelenmiştir. TiO<sub>2</sub> tabanına önce bir atom daha sonra iki atom eklenmesinin sebebi kristal yapıların özelliklerinin değişip değişmeyeceğini gözlemlemektir. Sonuç olarak kristal yapıların verileri analiz edilerek bu yapıların güneş hücreleri uygulamaları için uygun olup olmadıkları detaylı bir şekilde tartışılmıştır.

**Anahtar Kelimeler:** Yenilenebilir Enerji, Fotovoltaik Sistem, Yoğunluk Fonksiyon Teorisi, Quantum Espresso, Elektronik Bant Yapısı.

## ABSTRACT

### MSc Thesis

# INVESTIGATION OF THE SUITABILITY OF THE CRYSTAL STRUCTURES FORMED BY ADDING Sn, Ca, Mg AND Al ATOMS TO TiO<sub>2</sub> SURFACE BY USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY

Gaffari YALÇIN

Adiyaman University  
Graduate Education Institute  
Department of Physics

Supervisor : Assoc. Prof. Dr. Bayram TALİ  
Co- Supervisor : Assoc. Prof. Dr. Salih AKBUDAK  
Year : 2021 , Number of pages: 76  
Jury : Prof. Dr. Eda SONBAŞ  
: Assoc. Prof. Dr. Bayram TALİ  
: Assoc. Prof. Dr. Abdullah CANDAN

The fact that fossil fuels harm the environment and their reserves are running out require an orientation to alternative energy sources. Solar energy, which is the most important of these alternative energy sources, cannot be utilized sufficiently. Systems that convert solar energy into electrical energy are photovoltaic systems. The biggest problem encountered in obtaining energy from photovoltaic systems is low energy efficiency and high cost. Therefore, in this study, the suitability of crystal structures formed by adding different atoms to dye sensitive solar cells, which are new generation solar cells, to dye sensitive solar cells was investigated. Sn, Ca, Mg and Al elements were added to the TiO<sub>2</sub> base by using the Quantum Espresso simulation program. The atomic structures, total energy, band gaps and state densities of the crystal structures (TiO<sub>2</sub>Sn, TiO<sub>2</sub>Ca, TiO<sub>2</sub>Mg and TiO<sub>2</sub>Al) formed by these elements added to the TiO<sub>2</sub> base were investigated. Then, similar properties of the crystal structures (TiO<sub>2</sub>Sn<sub>2</sub>, TiO<sub>2</sub>Ca<sub>2</sub>, TiO<sub>2</sub>Mg<sub>2</sub> and TiO<sub>2</sub>Al<sub>2</sub>) formed by adding two Sn, Ca, Mg and Al elements to the base of TiO<sub>2</sub> were investigated again. The reason for adding one atom and then two atoms to the TiO<sub>2</sub> base is to observe whether the properties of the crystal structures will change or not. As a result, by analyzing the data of crystal structures, it has been discussed in detail whether these structures are suitable for solar cell applications.

**Keywords:** Renewable Energy, Photovoltaic System, Density Function Theory, Quantum Espresso, Electronic Band Structure.

## BEYAN

“TiO<sub>2</sub> Yüzeyine Sn, Ca, Mg ve Al Atomlarının Eklenmesi İle Oluşturulan Kristal Yapıların Boya Duyarlı Güneş Hücrelerine Uygunluklarının Yoğunluk Fonksiyon Teorisi Kullanılarak İncelenmesi” başlıklı tezimde çalışmaların tamamen akademik kurallara ve etik değerlere sadık kalınarak yürütüldüğünü ve yazımda yararlandığım eserlerin kaynakçada gösterilenlerden oluştuğunu ayrıca alıntılardan bilimsel etiğe uygun atıf yaparak yararlanmış olduğumu beyan ederim.

Gaffari YALÇIN

imza

## TEŐEKKÜR

Bu tezin planlanıp hazırlanmasında, konunun belirlenmesinde, verilerin toplanıp analiz edilmesinde, tezin yazımı sırasında öneri ve düzeltmeleriyle katkı sunan her türlü bilgi, tecrübe ve desteğini esirgemeyip bana maddi ve manevi güç veren, sabrı ve hoşgörüsü ile akademik çalışmalarımın haricinde bana örnek olan, yenilikçi fikirleri ile bana destek veren çok değerli danışman hocalarım Doç. Dr. Bayram TALİ ve Doç. Dr. Salih AKBUDAK'a çok teşekkür ederim.

Tezimi okuyup olumlu eleştiriler ve düzeltmelerde bulunan değerli arkadaşlarım Murat DURMAZ'a, Zelal Elif YILDIZ'a ve Doç. Dr. Niyazi YÜKÇÜ'ye, Dr. Öğr. Üyesi Serkan GÜLDAL'a ayrıca jüri üyelerim Doç. Dr. Abdullah CANDAN'a ve Prof. Dr. Eda SONBAŐ hocalarıma çok teşekkür ederim.

Ayrıca tez çalışmam boyunca bana manevi desteklerini esirgemeyen aileme teşekkürlerimi sunarım.

## İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	I
ABSTRACT.....	II
BEYAN.....	III
TEŞEKKÜR.....	IV
İÇİNDEKİLER.....	V
ÇİZELGELER DİZİNİ.....	VII
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	VIII
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	X
1. GİRİŞ.....	1
1.1. Rüzgar Enerjisi.....	2
1.2. Jeotermal Enerji.....	2
1.3. Biyokütle Enerjisi.....	3
1.4. Hidroelektrik Enerji.....	4
1.5. Hidrojen Enerjisi.....	5
1.6. Dalga Enerjisi.....	5
1.7. Güneş Enerjisi.....	6
1.8. Güneş Hücreleri.....	8
1.8.1. Birinci Nesil Güneş Hücreleri.....	11
1.8.2. İkinci Nesil Güneş Hücreleri.....	11
1.8.3. Üçüncü Nesil Güneş Hücreleri.....	13
1.8.4. Organik Güneş Hücreleri.....	14
2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR.....	16
3. MATERYAL VE YÖNTEM.....	19
3.1. Boya Duyarlı Güneş Hücreleri.....	19
3.1.1. Boya Duyarlı Güneş Hücrelerinin Çalışma Prensibi.....	21
3.2. Titanyum Dioksit ( TiO <sub>2</sub> ).....	22
3.3. Duyarlaştırıcı (Boya) Atomlar.....	24
3.3.1. Kalay (Sn).....	24
3.3.2. Kalsiyum (Ca).....	26
3.3.3. Magnezyum (Mg).....	26
3.3.4. Alüminyum (Al).....	27
3.4. Elektronik Bant Yapısı.....	27
3.5. Sözde Potansiyel Metodu.....	29
3.6. Durum Yoğunluğu.....	31
3.7. Toplam Enerji.....	31
3.8. Yoğunluk Fonksiyon Teorisi (YFT).....	32
3.8.1. Hohenberg – Kohn Teoremi.....	33
3.8.2. Kohn ve Sham Teoremi.....	33
3.9. Quantum Espresso.....	35
4. BULGULAR VE TARTIŞMA.....	36
4.1. Kalay Katkılanmış TiO <sub>2</sub> Kristal Yapının Fiziksel Özellikleri.....	37
4.2. Kalsiyum Katkılanmış TiO <sub>2</sub> Kristal Yapının Fiziksel Özellikleri.....	45
4.3. Magnezyum Katkılanmış TiO <sub>2</sub> Kristal Yapının Fiziksel Özellikleri.....	52

4.4. Alüminyum Katkılanmış TiO <sub>2</sub> Kristal Yapının Fiziksel Özellikleri .....	58
5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER .....	66
KAYNAKLAR .....	69
KİŞİSEL BİLGİLER.....	75



## ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 3.1 TiO <sub>2</sub> Örgü parametreleri	24
Çizelge 4.1 Kullanılan elementlerin sözde potansiyelleri	36
Çizelge 4.2 TiO <sub>2</sub> Sn kristalinin sözde potansiyelleri ve koşulları.	38
Çizelge 4.3 TiO <sub>2</sub> Sn kristal yapısının atomik yapılarının uzaysal koordinatları	39
Çizelge 4.4 TiO <sub>2</sub> Sn kristal yapısında toplam durum yoğunluğuna maksimum enerji veren elementler.	41
Çizelge 4.5 TiO <sub>2</sub> Sn <sub>2</sub> kristal yapısının atomik yapılarının uzaysal koordinatları.	43
Çizelge 4.6 TiO <sub>2</sub> Sn <sub>2</sub> kristal yapısında toplam durum yoğunluğuna maksimum enerji veren elementler.	44
Çizelge 4.7 TiO <sub>2</sub> Ca kristalinin sözde potansiyelleri ve şartları.	46
Çizelge 4.8 TiO <sub>2</sub> Ca kristal yapısında toplam durum yoğunluğuna maksimum enerji veren elementler.	48
Çizelge 4.9 TiO <sub>2</sub> Ca <sub>2</sub> kristal yapısında toplam durum yoğunluğuna maksimum enerji veren elementler.	51
Çizelge 4.10 TiO <sub>2</sub> Mg kristalinin sözde potansiyelleri ve şartları.	53
Çizelge 4.11 TiO <sub>2</sub> Mg kristal yapısında toplam durum yoğunluğuna maksimum enerji veren elementler.	54
Çizelge 4.12 TiO <sub>2</sub> Mg <sub>2</sub> kristal yapısında toplam durum yoğunluğuna maksimum enerji veren elementler.	57
Çizelge 4.13 TiO <sub>2</sub> Al kristalinin sözde potansiyelleri ve şartları.	59
Çizelge 4.14 TiO <sub>2</sub> Al kristal yapısında toplam durum yoğunluğuna maksimum enerji veren elementler.	61
Çizelge 4.15 TiO <sub>2</sub> Al <sub>2</sub> kristal yapısında toplam durum yoğunluğuna maksimum enerji veren elementler.	64



## ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 1.1 Fotoelektrik olayın şematik gösterimi [11].....	8
Şekil 1.2 Elektromanyetik spektrum [13] .....	9
Şekil 1.3 Enerji bant yapısının sembolik gösterimi [14].....	10
Şekil 1.4 Çok eklemlı güneş hücrelerinin seri ve paralel bağlantı şekilleri.....	13
Şekil 3.1 Boya duyarlı güneş hücresinin katmanlarının (elektrolit, boya, Pt/SnO <sub>2</sub> film, yalıtkan, SnO <sub>2</sub> film) şematik gösterimi [29] .....	19
Şekil 3.2 Boya duyarlı güneş hücresi çalışma prensibi [39]......	22
Şekil 3.3 TiO <sub>2</sub> Kristal yapıların (anataz, rutil, brukit) kullanım alanlarına göre farklı eksenlerden görünümü [41] .....	23
Şekil 3.4 Boya olarak kullanılan atomlar a) kalay (Sn), b) kalsiyum (Ca), c) magnezyum (Mg) ve d) alüminyum (Al) atom modelleri gösterilmektedir [47]. .....	25
Şekil 3.5 Enerji bant yapısının sembolik gösterimi [14].....	28
Şekil 3.6 Öz elektron, değerlik elektron ve çekirdekten oluşmuş bir atom ( Atom'un taralı bölgesi öz bölgesidir)......	29
Şekil 3.7 Sözde (pseudo)-potansiyel ve sözde (pseudo)-dalga fonksiyonu grafik gösterimi.....	31
Şekil 4.1 TiO <sub>2</sub> kristalinin atomik yapısının şematik gösterilmesi.....	37
Şekil 4.2 TiO <sub>2</sub> tabanına Sn elementinin eklenmesi ile oluşan kristal yapının atomik yapısı görünmektedir.....	37
Şekil 4.3 TiO <sub>2</sub> Sn kristal yapısında bant aralığı ve enerji dağılımı görünmektedir. ...	39
Şekil 4.4. TiO <sub>2</sub> Sn kristal yapısında durum yoğunluğu görünmektedir. ....	40
Şekil 4.5. TiO <sub>2</sub> Sn kristal yapısının toplam enerjisi görünmektedir. ....	41
Şekil 4.6 TiO <sub>2</sub> tabanına iki Sn elementinin eklenmesi ile oluşan kristal yapının atomik yapısı görünmektedir. ....	42
Şekil 4.7. TiO <sub>2</sub> Sn <sub>2</sub> kristal yapısında bant aralığı ve enerji dağılımı görünmektedir. .	43
Şekil 4.8 TiO <sub>2</sub> Sn <sub>2</sub> kristal yapısında durum yoğunluğu görünmektedir.....	44
Şekil 4.9. TiO <sub>2</sub> Sn <sub>2</sub> kristal yapısının toplam enerjisi görünmektedir. ....	45
Şekil 4.10 TiO <sub>2</sub> tabanına Ca elementinin eklenmesi ile oluşan kristal yapının atomik yapısı görünmektedir.....	46
Şekil 4.11 TiO <sub>2</sub> Ca kristal yapısında bant aralığı ve enerji dağılımı görünmektedir. .	47
Şekil 4.12 TiO <sub>2</sub> Ca kristal yapısında durum yoğunluğu görünmektedir.....	47
Şekil 4.13 TiO <sub>2</sub> Ca kristal yapısının toplam enerjisi görünmektedir. ....	48
Şekil 4.14 TiO <sub>2</sub> tabanına iki tane Ca elementinin eklenmesi ile oluşan kristal yapının atomik yapısı görünmektedir. ....	49
Şekil 4.15 TiO <sub>2</sub> Ca <sub>2</sub> kristal yapısında bant aralığı ve enerji dağılımı görünmektedir. 50	
Şekil 4.16 TiO <sub>2</sub> Ca <sub>2</sub> kristal yapısında durum yoğunluğu görünmektedir. ....	50
Şekil 4.17 TiO <sub>2</sub> Ca <sub>2</sub> kristal yapısının toplam enerjisi görünmektedir.....	51
Şekil 4.18 TiO <sub>2</sub> tabanına bir tane Mg elementinin eklenmesi ile oluşan kristal yapının atomik yapısı görünmektedir. ....	52
Şekil 4.19 TiO <sub>2</sub> Mg kristal yapısında bant aralığı ve enerji dağılımı görünmektedir. 53	
Şekil 4.20 TiO <sub>2</sub> Mg kristal yapısında durum yoğunluğu görünmektedir.....	54
Şekil 4.21 TiO <sub>2</sub> Mg kristal yapısının toplam enerjisi görünmektedir. ....	55

Şekil 4.22 TiO <sub>2</sub> tabanına iki tane Mg elementinin eklenmesi ile oluşan kristal yapının atomik yapısı görünmektedir. ....	55
Şekil 4.23 TiO <sub>2</sub> Mg <sub>2</sub> kristal yapısında bant aralığı ve enerji dağılımı görünmektedir. ....	56
Şekil 4.24 TiO <sub>2</sub> Mg <sub>2</sub> kristal yapısında durum yoğunluğu görünmektedir. ....	57
Şekil 4.25 TiO <sub>2</sub> Mg <sub>2</sub> kristal yapısının toplam enerjisi görünmektedir.....	58
Şekil 4.26 TiO <sub>2</sub> tabanına bir tane Al elementinin eklenmesi ile oluşan kristal yapının atomik yapısı görünmektedir. ....	59
Şekil 4.27 TiO <sub>2</sub> Al kristal yapısında bant aralığı ve enerji dağılımı görünmektedir... ..	60
Şekil 4.28 TiO <sub>2</sub> Al kristal yapısında durum yoğunluğu görünmektedir. ....	61
Şekil 4.29 TiO <sub>2</sub> Al kristal yapısının toplam enerjisi görünmektedir.....	62
Şekil 4.30 TiO <sub>2</sub> tabanına iki tane Al elementinin eklenmesi ile oluşan kristal yapının atomik yapısı görünmektedir. ....	62
Şekil 4.31 TiO <sub>2</sub> Al <sub>2</sub> kristal yapısında bant aralığı ve enerji dağılımı görünmektedir..	63
Şekil 4.32 TiO <sub>2</sub> Al <sub>2</sub> kristal yapısında durum yoğunluğu görünmektedir. ....	64
Şekil 4.33 TiO <sub>2</sub> Al <sub>2</sub> kristal yapısının toplam enerjisi görünmektedir. ....	65

## SİMGELER VE KISALTMALAR

### Simgeler Ve Kısaltmalar

Al	: Alüminyum
BDGH	: Boya duyarlı güneş hücresi
CdTe	: Kadmiyum tellür
CdS	: Kadmiyum sülfür
CH	: Karbonhidrat
Co	: Kobalt
Ca	: Kalsiyum
eV	: Elektron volt
E <sub>g</sub>	: Yasak bant aralığı
E <sub>f</sub>	: Fermi enerji seviyesi
Fe	: Demir
FTO	: Florin katkılanmış kalay oksit
GNU	: Genel kamu lisansı
H <sub>2</sub> O	: Su
ITO	: İndiyum katkılanmış kalay oksit
UV	: Morötesi
LiCl	: Lityum klorür
LiBr	: Lityum bromür
LiNO <sub>3</sub>	: Lityum nitrat
Mn	: Mangan
Mg	: Magnezyum
Nb <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	: Niyobyum penta Oksit
Ni	: Nikel
Nb <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	: Niyobyum penta Oksit
Pt	: Platin
SiH <sub>4</sub>	: Silene gazı
Sn	: Kalay
SnO <sub>2</sub>	: Kalay dioksit
SEM	: Taramalı elektron mikroskobu
TiO <sub>2</sub>	: Titanyum dioksit
TPD	: Trifenilen diamin
XRD	: X ışını kırınımı
YFT	: Yoğunluk fonksiyon teorisi
ZnO	: Çinko Oksit

## 1. GİRİŞ

Dünya nüfusunun artması enerji ihtiyacının sürekli olarak artmasına sebep olmaktadır. Artan bu enerji ihtiyacının yaklaşık %81,6'sı fosil yakıtlar olarak bilinen pahalı, insana ve doğaya zarar veren, tehlikeli, sürdürülebilir olmayan, siyasi ve ekonomik sorunlar yaratan yakıtlar tarafından karşılanmaktadır [1]. Fosil yakıtların çok hızlı bir şekilde tüketilmesi bu yakıtların fiyatlarının artmasına ve küresel ısınma gibi pek çok soruna sebep olmaktadır. Bu sebeplerden dolayı insanlar alternatif enerji kaynakları kullanmaya yönelmektedir. Gelişmiş olan ülkeler enerji ihtiyaçlarını fosil yakıtlardan karşılarken aynı zamanda yenilenebilir enerji kaynaklarına yatırım yapmaktadırlar [1]. Gelişmekte olan ülkeler arasındaki Türkiye, enerji ihtiyacının büyük bir kısmını yurt dışından karşılamaktadır. Bundan dolayı Türkiye yenilenebilir enerji kaynaklarına daha büyük yatırımlar yapmak zorundadır.

Enerji kaynaklarını iki gruba ayırmak mümkündür. Bunlar yenilenemeyen ve yenilenebilir enerji kaynaklarıdır [1]. Petrol, doğalgaz ve kömür yenilenemeyen enerji kaynakları arasında sıralanabilir. Bu kaynakların yenilenemeyen enerji kaynakları arasında olma sebebi meydana gelme sürelerinin çok uzun olması ve tüketim hızının üretim hızından çok daha fazla olmasıdır. Artan tüketim miktarı göz önünde bulundurulduğunda 50 yıl içerisinde var olan kaynakların tüketileceği düşünülmektedir. Bu sebepten dolayı bütün dünya yenilenebilir enerji kaynaklarına yönelmek zorunda kalmıştır [1-3]. Yenilenebilir enerji, sürekli olarak kendini yenileyebilen, doğada sınırsız olan kullandıkça bitmeyen enerjidir. Son 15 yılda yenilenebilir enerjinin üretim ve tüketimine verilen önem tüm dünyada artmıştır. Yenilenebilir Enerji Kaynakları; Rüzgar, Hidroelektrik, Biyokütle, Jeotermal, Hidrojen, Dalga, Akıntı, Gelgit ve Güneş Enerjisi şeklinde sıralanabilir. Güneş enerjisi sınırsız enerji kaynağı olarak değerlendirilmekte olup rüzgar, gelgit, dalga ve jeotermal enerjileri potansiyel olarak sınırlı kabul edilmektedir [4].

**1.1. Rüzgar Enerjisi**

Rüzgar, yüksek basınç ile alçak basınç bölgeleri arasında havanın yer değiştirmesidir. Bu hava akımı her zaman basıncın yüksek olan bölgesinden alçak olan bölgesine doğru hareket eder. İki bölge arasındaki basınç farkı ne kadar fazla olursa hava akımının sürati de o kadar artar [5].

Rüzgar enerjisi, rüzgar türbinleri ile elde edilmektedir. Rüzgar türbinlerinin pervaneleri rüzgar hızının uygun seviyelere çıkması ile dönmeye başlar. Rüzgar türbinlerinin üzerindeki pervanelerin dönme hareketi kinetik enerjinin açığa çıkmasını sağlar. Açığa çıkan bu enerji, özel sistemler kullanılarak elektrik enerjisine dönüştürülmektedir. Rüzgar türbinlerinin üzerinde yer alan pervane kanatları, jeneratör ve şaft elektrik üretilmesinde önemli rol alır [5].

Rüzgar santrallerinin yakıt ve işletme maliyetinin olmaması, dışa bağımlılığı azaltması ve çevreye yok denecek kadar az zarar veriyor olması bu enerjinin önemli avantajlarından. Ayrıca tek olarak ya da gruplar şeklinde imal edilip kullanılabilir olması, kirlilik yaratmaması ve çiftçilik faaliyetlerine engel olmaması bu enerjinin diğer avantajlarından [5].

Rüzgar türbinlerinden elektrik üretebilmek için rüzgar hızının uygun değerde olması gerekir. Rüzgarın az ya da fazla esmesi türbinleri çalıştırmaz. Bu durum rüzgar enerjisinin dezavantajıdır. Ayrıca rüzgar enerji santrallerinin yatırım maliyetinin yüksek olması, çok fazla gürültü yapması, türbinlere çarpan kuşların ölmelerine ve kuşların göç yollarının değişmesine sebep olması bu enerjinin dezavantajları olarak sıralanabilir [5].

**1.2. Jeotermal Enerji**

Yerkürenin derinliklerindeki kayaçların içinde birikmiş olan ısı enerjisinin akışkan maddelerce taşınarak depolanması ile oluşmuş buhar, kuru buhara ve sıcak suya jeotermal kaynak denir [6].

Jeotermal enerji, yer altında bulunan sıcak su kaynaklarının yeryüzüne çıkarılması ve çıkarılan su buharının itici gücünden dolayı kullanılan panellerde

hareket enerjisi üretir [7]. Hareket enerjisi ise kullanılan özel sistemler sayesinde elektrik enerjisine dönüştürülür.

Jeotermal enerji yılın 365 günü kullanılmaya elverişlidir. Bu yönüyle güneş ve rüzgar enerjisinden daha avantajlı görünmektedir [8]. Veriminin yüksek olması, doğrudan elde edilebildiği için maliyetinin düşük olması ve diğer santrallere göre çok daha az çevre sorunu yaratması bu enerjinin avantajları arasındadır. Birden fazla amaçla kullanılıyor olabilmesi (elektrik üretimi, ısı gibi), patlama, yangın, zehirlenme gibi riskler taşımaması, sürekli güç üretilebilmesi ve hava değişimlerinden etkilenmemesi gibi avantajları da sıralanabilir [5].

Jeotermal enerji üretimi esnasında açığa çıkan hidrojen sülfür gazının salınması bu enerjinin oluşturduğu çevresel sorunlardandır [8]. Jeotermal enerji tesislerinin kurulmasının maliyetli olması, içerdiği bor elementinden kaynaklı atılacağı suları kirletmesi bu enerjinin dezavantajları arasında sıralanabilir [5].

### **1.3. Biyokütle Enerjisi**

Odun, kömür, tarım ürünleri, orman parçası organik atıkları, hayvan dışkıları, metan ve alkol mayalanması, çeşitli su bitkileri gibi biyolojik kaynaklardan elde edilen enerji türüne biyokütle enerjisi denir [5]. Kısaca açıklanacak olursa organik maddelerden farklı yollarla elde edilen enerji türüne biyokütle enerjisi denir.

Biyokütle enerjisi daha çok ısınmak amaçlı kullanılmaktadır. Bu enerjinin ham maddesi hayvan gübresi, odun, kömür ve yakılacak odundur. Bunun yanında; kentsel atıklardan, enerji tarım ürünlerinden, tarımsal endüstri atıklarından farklı teknikler kullanılarak katı, sıvı ve gaz yakıtlar elde edilebilmektedir. Diğer bir ifadeyle bileşenleri CH (karbonhidrat) bileşiği olan hayvansal ve bitkisel asıllı tüm maddeler biyokütle enerji kaynağını oluşturur [5].

Bitkiler yapısında buldukları klorofil sayesinde güneş enerjisini yakalayarak hava ve sudaki karbondioksit gazını karbonhidrat bileşiklerine dönüştürür. Bu karbonhidrat bileşikleri yakıldığında tekrar karbondioksit ve su haline dönüşür ve böylece güneşten emilen enerji açığa çıkmış olur. Bu şekilde biyokütle güneş enerjisini depolayan bir pil görevi görmüş olur [9].

Sera etkisi olmayan bir yakıttır. Bunun sebebi atmosferden ne kadar karbon gazı alıyor ise aynı miktarda karbondioksit salmasıdır [9]. Biyokütle enerjisi, sanayinin gelişmesini ve petrol ithalatının azalmasını sağlayarak ekonomik yapının gelişmesine katkıda bulunur. Bunların yanında kırsal kesimlerde sosyo-ekonomik yapının gelişmesini sağlaması, doğanın ve çevrenin korunmasını sağlaması ve sürdürülebilir enerjiye katkıda bulunması bu enerjinin avantajları arasında sıralanabilir. Çevresel sorunların çıkması ve çevre kirliliğine neden olması bu enerjinin dezavantajlarıdır [5].

#### **1.4. Hidroelektrik Enerji**

Diğer yenilenebilir enerji kaynaklarına göre teknoloji gelişimi ileri seviyede olan bir enerji kaynağı türüdür. Hidroelektrik enerji kaynağının su olması, hidroelektrik santrallerin bir su kaynağı üzerinde kurulmasını zorunlu hale getirmektedir [5].

Hidroelektrik santrallerin kurulma nedeni akan suyun gücünü elektrik enerjisine dönüştürmektir. Akan suyun gücünü ise suyun düşüş ya da akış sürati belirler. Büyük bir nehir düşünecek olursak, buradan akan su yüksek miktarda enerji taşır. Yüksek bir enerji elde etmenin yolu, suyu çok yüksek bir yerden düşürmektir. Bu yolla borular ya da kanallar içine alınan su, türbine doğru akar ve elektrik üretimi için pervane şeklinde kolları olan türbinlerin dönmesini sağlar. Bu türbinler jeneratörlerle bağlıdır ve bu enerjiyi elektrik enerjisine dönüştürür. Yağmur, kar ve dolu yağışları sonucunda yükseklerdeki suların potansiyel enerjisi jeneratör ve türbinler yardımıyla elektrik enerjisine dönüştürülür [5].

Elektrik enerjisi üretirken atmosfere sera gazı vermemesi, kurulan barajların su hızını keserek erozyon riskini azaltması çevre sorunları yaratmamasının bir göstergesidir. Hidroelektrik santrallerin ekonomik ömrünün uzun olması, işletme kolaylığı ve esnekliğinin olması ve enerjinin depolanabiliyor olması sayesinde dışa bağımlılığı azaltması bu enerjinin avantajları arasındadır [5].

Hidroelektrik santrallerinin kurulum maliyetinin yüksek olması bu enerji üzerine yatırım yapılmasını engellemektedir. Hidroelektrik santralleri, kuruldukları

bölgelerde tarım arazilerinin tuzlanmasına ve çoraklaşmasına ve insanların topraklarını boşaltmasına sebep olabilir. Santrallerin kurulacağı bölgelerde bitki ve ağaçların kesilmesi bölgedeki bitki örtüsü ile su ve kara canlılarının yaşam alanlarında değişiklikler oluşturması bu enerjinin dezavantajlarından [5].

### **1.5. Hidrojen Enerjisi**

Hidrojen, rengi ve kokusu olmayan, havadan çok daha hafif, tamamen zehirsiz ve evrenin en basit elementidir. Bilinen bütün yakıtlar içerisinde birim kütle başına en fazla enerji içeriğine sahip yakıt hidrojendir. 1 kg hidrojenin sahip olduğu enerji 2,1 kg doğal gaz ya da 2,8 kg petrolün sahip olduğu enerjiye denk gelmektedir fakat birim enerji başına hacmi yüksektir. Hidrojen, doğada bileşikler halinde bulunur ve en çok bilinen bileşiği ise (H<sub>2</sub>O) sudur [5].

Hidrojen enerjisi, temiz ve kullanımı kolay olan, ısı ve patlama enerjisi gerektiren enerji sistemlerinde atmosfere su ya da su buharı veren bir enerji türüdür. Bu enerjinin üretimi sırasında su buharı dışında atmosfere zarar verecek hiçbir bileşeni yoktur [5].

Yakıt hücreleri hidrojen ve oksijeni dönüştürmek için kullanılmaktadır. Bu hücreler oksijen ve hidrojeni elektrokimyasal reaksiyonda karışmasını sağlayarak elektrik, su ve ısı üretirler. Yakıt hücreleri pil görevi görerek elektrokimyasal reaksiyonun ürettiği enerjiyi yararlı elektrik enerjisine dönüştürmektedir [10].

Yapısında karbon bulunmadığı için çevresel sorunlar yaratmayan bir enerjidir. Kirli hava ve asit yağmurlarına sebep olacak herhangi bir kimyasal madde bulundurmamaktadır. Taşıdığı enerjinin kolay bir şekilde elektrik enerjisine çevrilebiliyor olması, gemi, uçak ve denizaltıları için ideal bir yakıt olması bu enerjinin avantajları arasında sıralanabilir. Hidrojenin kapalı yerlerde uzun süre tutulmasının sızma ihtimali yüksek olduğu için zor olması bu enerjinin dezavantajıdır [5].

### **1.6. Dalga Enerjisi**

Yenilenebilir enerji kaynakları dünya üzerinde düzenli bir dağılıma sahipken



dalga enerjisi bunların dışındadır [5]. Dünya yüzeyinin farklı ısısından kaynaklanan rüzgarların deniz yüzeyinde esmesi ile oluşan dalgalardaki güçten elde edilen enerjiye dalga enerjisi denir. Avrupa ülkeleri yenilenebilir enerji kaynaklarından olan bu enerjiden yararlanmaya başlamıştır. Dalga enerjisinin önemli bir özelliği enerji yoğunluğunun yüksek olmasıdır. Bu yoğunluk, yenilenebilir enerji kaynakları içerisinde dalga enerjisinin yüksek değere sahip olmasını sağlar [5].

Dalga enerjisi tükenmeyen enerji kaynağıdır. Çevreyi ve doğayı kirletmiyor olması, temiz içme suyu elde etmede kullanılabilir olması önemli avantajlarından. Bunların yanında işsizliği azaltması ve ekonomik açıdan yeni iş imkanları sağlaması, okyanus ve deniz diplerindeki zenginlikleri keşfetmemizi sağlaması dalga enerjisinin avantajları arasında sıralanabilir. Elektrik üretebilmek için her dalga boyuna göre yeniden bir tasarım yapmak gerekmektedir. Tek cins bir enerji sisteminin olması dezavantaj olarak değerlendirilmektedir [5].

### **1.7. Güneş Enerjisi**

Güneş enerjisi yenilenebilir enerji kaynağından olup dünyamızın en önemli enerjisidir. Güneş ışınları daha milyonlarca yıl süreceğinden dolayı bitmeyen bir enerji kaynağıdır. Güneş, dünyadaki bütün enerji kaynaklarına doğrudan ya da dolaylı olarak temel oluşturmaktadır. Güneşten dünyaya gelen enerji, insanların kullandığı enerjinin yaklaşık 15-16 bin katı kadardır. Güneş ışınlarından dünyaya 170 milyar MeV ( mega elektron volt ) güçte enerji gelmektedir [5]. Günümüzde dünyaya ulaşan güneş enerjisi, ısıya ve elektrik enerjisine çevrilerek değerlendirilmektedir. Bu enerji ısı enerjisine dönüştürülürken “toplaç”, elektrik enerjisine dönüştürülürken de “güneş hücreleri” kullanılmaktadır.

Güneş enerjisinin kullanımı çok eskiye dayanmaktadır. Tarım ürünlerinin ve bazı besinlerin kurutulma işlemi çok eskilerden beri varlığını korumaktadır. Günümüzde güneş enerjisi özellikle ısı enerjisine dönüştürülerek kullanılmaktadır. Her geçen gün güneş enerjisinden elektrik üretimi artmaktadır.

Güneş enerjisinin kullanıldığı 3 temel alan vardır. Bunlar:

**1-** Yapıların ısıtılmasında,

2- Güneş enerjisinin elektrik enerjisine dönüştürülerek kullanılmasında,

3- Güneş enerjisi yardımı ile sudan Hidrojen gazının elde edilmesi ve elektrik üretilmesinde kullanılmasıdır.

Fotovoltaik hücreler gürültü yapmayan, çevreyi kirletmeyen, hareketli bir mekanizmaya ihtiyacı olmayan güneş enerjisini herhangi bir aracı kullanmadan güneş izleme düzeni ve güç dönüştürücüleri kullanılarak elektrik enerjisine çeviren sistemlerdir. Güneş elektrik santralleri, giderek yaygınlık kazanan ve güneş enerjisini doğrudan elektrik enerjisine dönüştüren sistemlerdir.

Fotovoltaik güç sistemleri bugün çok pahalı olarak görünmesine rağmen yakın gelecekte güç üretimine önemli katkısı olabilecek sistemler olarak değerlendirilmektedir. Bütün dünyada bu konu üzerinde yoğun araştırma ve çalışmalar sürdürülmektedir.

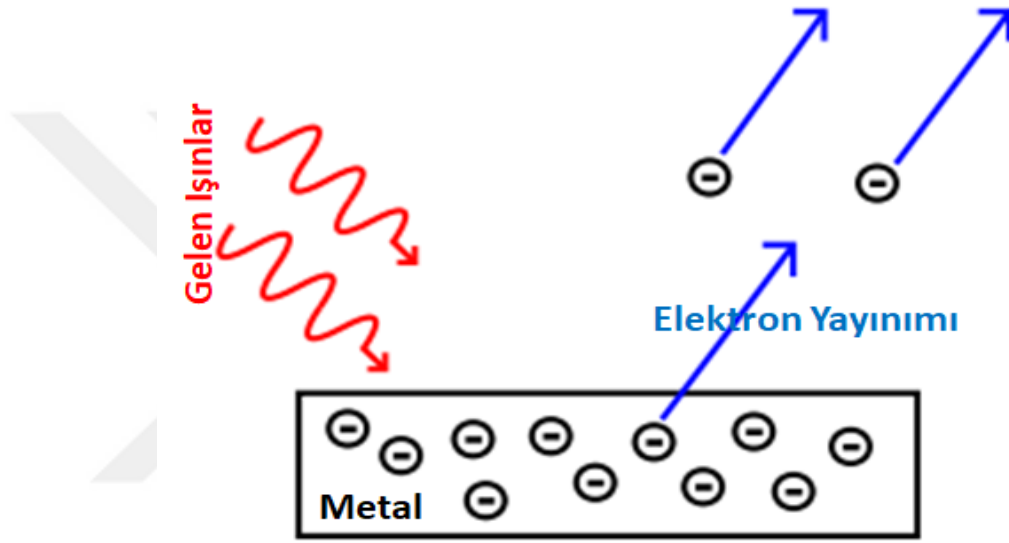
Güneş enerjisi, başlangıçta hesap makineleri, kol saatleri gibi malzemelerde kullanılırken giderek daha geniş kullanım alanlarına yayılmıştır. Daha sonra uzay araçlarına enerji sağlamada, uzay çalışmalarında, güneş hücreleri kullanılmıştır. Günümüzde güneş enerjisi kullanılarak güneş uçakları, elektrik santralleri, güneş enerjisi ile çalışan otomobiller vs bulunmaktadır.

Güneş enerjisi temiz, sürekli ve yenilenebilir bir enerji çeşididir. Yakıt ihtiyacı ve mekanik yıpranma olayı olmayan, uzun süre çalışabilen, güvenilir, dayanıklı ve uzun ömürlü bir enerjidir. Güneş enerjisinin kullanıldığı sistemlerin kolaylıkla taşınabiliyor olması, çevre dostu olması bu enerjinin avantajlarından. Ayrıca elektrik şebeke hattı olmayan ya da bu hattın kullanılmasının maliyetli olduğu bölgelerde güneş hücresinin kullanımının ekonomik olması güneş enerjisinin avantajları arasında gösterilebilir [5].

Güneş hücrelerinin verimliliklerinin düşük olması (ortalama %15 civarı), fotovoltaik hücrelerin üretim maliyetinin ve depolama ünitelerinin bakım maliyetinin yüksek olması güneş enerjisinin dezavantajları olarak sıralanabilir [5].

### 1.8. Güneş Hücreleri

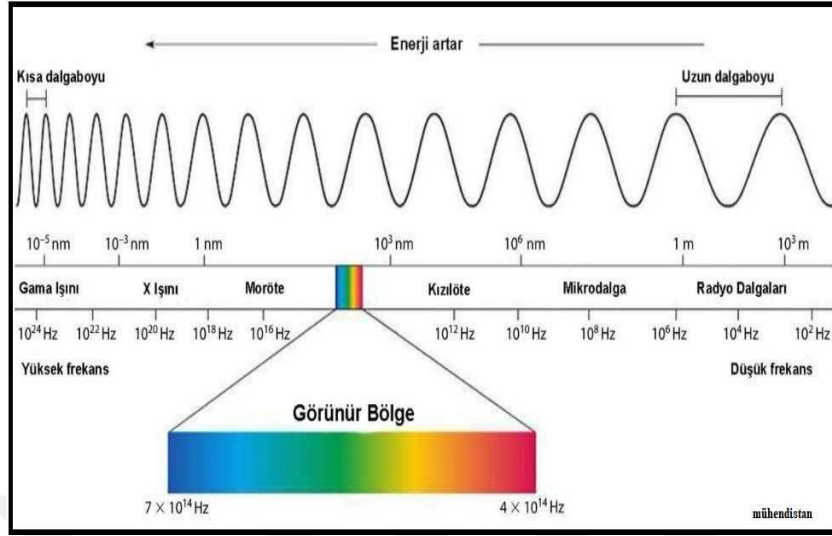
Güneş hücreleri, fotovoltaik sistemler olarak da adlandırılır. Fotovoltaik hücreler, çalışma prensibi olarak Einstein'ın fotoelektrik etki prensibine dayanmaktadır. Şekil 1.1'de fotoelektrik olayın şematik gösterimi verilmiştir. Fotoelektrik olay metal bir yüzeyden elektron koparabilecek enerjiye sahip bir fotonun çarptığı metal yüzeyden elektron kopması olayıdır.



Şekil 1.1 Fotoelektrik olayın şematik gösterimi [11]

Fotovoltaik hücreler, görünür bölge dalga boyundaki ışınlarının metal yüzeyden elektron kopması yardımı ile çalışmaktadır. Dolayısıyla fotovoltaik sistemlerin çalışmasında, gelen ışık, yüzeyler ve kopan elektronun direnç üzerinden geçmesi önem kazanmaktadır.

Elektromanyetik spektrum ve özelliklerini Şekil 1.2'de görebilmek mümkündür. Elektromanyetik spektrum dalgaların sahip olduğu dalga boyuna göre  $\gamma$ -ışını, x-ışını, morötesi, görünür bölge, kızılötesi, mikrodalga ve radyo dalgalarından oluşmaktadır. Dalga boyu uzunluğu küçükten büyüğe doğru, frekans değerleri ise büyükten küçüğe doğru sıralanmıştır [12]. Dalga boyu küçüldükçe frekansı ve enerjisi artmaktadır, bu durumu denklem 1.1 iyi bir şekilde özetlemektedir.



Şekil 1.2 Elektromanyetik spektrum [13]

$$E = hf \quad (1.1)$$

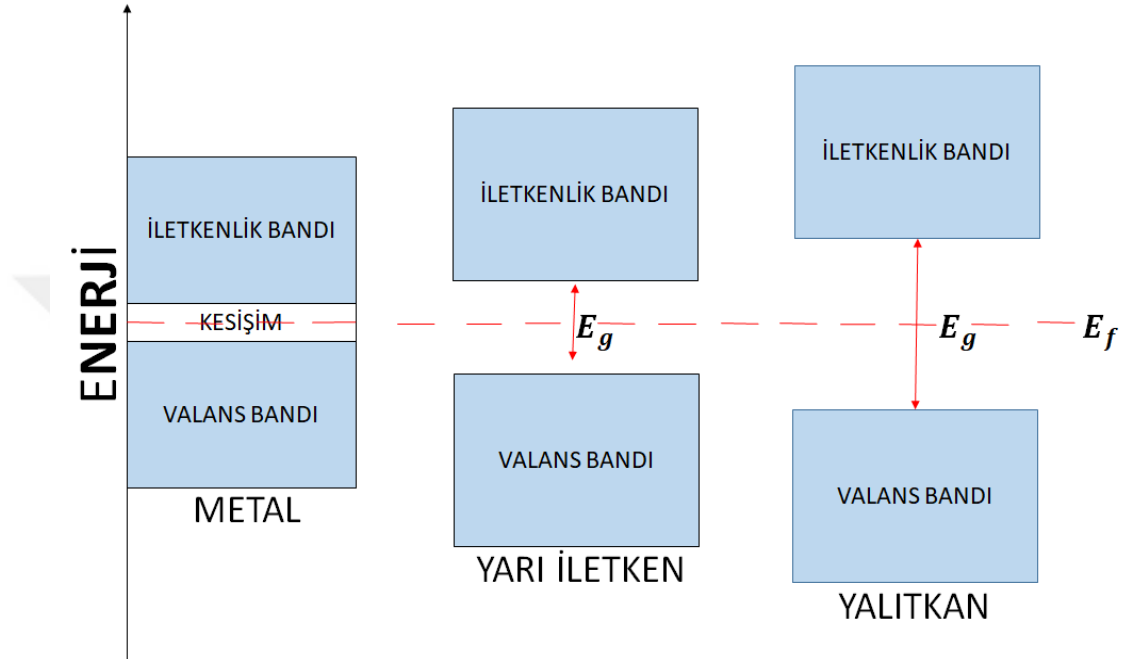
Burada,  $E$  enerji,  $h$  plank sabiti ve  $f$  gelen ışının frekansıdır.

Görünür bölge dalga boyu, insan gözünün algılayabildiği bölgedir. Sağlıklı bir insan görünür bölge aralığı dalga boyu tam olarak belirlenmemiş olmakla birlikte yaklaşık 360 nm ile 700 nm arasındaki dalga boylarına karşılık gelmektedir [12].

Fotonun materyalden elektron koparabilmesi materyalin özelliğine bağlıdır. Metallerde, iletkenlik durumu, bant teorisi ile açıklanabilir. Fotovoltaik sistemlerde güneş ışığını soğuracak malzemeler, yasak enerji aralığı güneş spektrumları ile uyumlu olan yarı iletken malzemeler olmalıdır.

Malzemeler, madde içerisindeki elektriksel yük taşıyıcılarının hareketine göre iletken, yarı iletken ve yalıtkan olarak sınıflandırılabilir. Atomlar çekirdekten uzaklaştıkça çekirdek ile olan bağları zayıflar. Çekirdekten en uzakta bulunan elektronlar, maddenin yapısını belirleyen değerlik elektronlardır. İyi bir iletken olan metallerde, değerlik elektronlar komşu atomlar arasında rahatça hareket ederler. Metallerde, buldukları enerji düzeyinden daha yüksek bir enerji düzeyine çıkmadan rahatça hareket edebilen bu elektronlara 'serbest elektron' denir. Fotovoltaik sistemlerde metal malzemelerin kullanılması uygun değildir. Bunun nedeni metallerdeki serbest elektronların, gelen fotonun frekansına kolayca cevap vererek

ışığı geri yansıtmasıdır. Ayrıca metallerde, elektronları artı yüklerden ayrı tutabilecek bir enerji aralığının bulunmaması fotovoltaik sistemlerde kullanılmaya elverişli olmadığını göstermektedir.



Şekil 1.3 Enerji bant yapısının sembolik gösterimi [14]

Şekil 1.3'de görüldüğü gibi elektronların yasak olduğu enerjiler, yalıtkanlarda ve yarı iletkenlerde değerlik elektronlarının bulunduğu enerji düzeyi ile bulunabileceği bir sonraki enerji düzeyi arasında bulunan enerji düzeyleridir. Değerlik elektronların bulunduğu enerji bandına "valans bandı", yasak enerji aralığından sonra elektronların bulunabileceği ilk enerji bandına ise "iletkenlik bandı" denir. Maddelerin iletken mi yarı iletken mi ya da yalıtkan mı olduğunu yasak enerji aralığının büyüklüğü belirler.

Güneş hücrelerinin yapılışı, Charles Fritts tarafından ilk olarak 1883 yılında rapor edilmiştir. Güneş hücreleri, üzerine düşen ışığı elektriğe dönüştüren sistemlerdir [15]. Bilim insanları, 1883 yılından önceki yıllarda elektrik-ışık ilişkisini gözlemlemiştir ama kurulan ilk fotovoltaik sistem Charles Fritts'in yaptığı çalışmadır.

Teknolojinin gelişimi ve toplanan bilgiler sayesinde daha verimli güneş sistemleri kurmak daha ucuz hale gelmiştir. Güneş hücreleri üç temel başlık altında toplanabilir.

**1.8.1. Birinci Nesil Güneş Hücreleri**

Birinci nesil güneş hücreleri kristal yapılı silisyum hücrelerden yapılmıştır. Tek kristal silisyum ve çok kristal silisyum hücreleri olarak iki farklı şekilde incelenmektedir.

Tek kristal silisyum güneş hücreleri; Güneş hücrelerinde en çok kullanılan malzemedir. Tek kristal silisyum malzemesi ile üretilen güneş hücreleri en çok kızıl ötesi ışığa duyarlıdır. Bu hücrelerin verimleri %25 civarındadır [15, 16].

Güneş hücrelerinde silisyum kullanılmasının nedeni optik, elektrik ve yapısal özelliklerinin değişmemesi ve silisyumun fotovolttaik hücrelerde başarısının bulunmasıdır.

Silisyum oksijenden sonra doğada en fazla bulunan elementtir ve doğada kum ve kuvars şeklinde bulunur. Kum olarak bulunan silisyumun saflık derecesi düşük olmasına rağmen kuvarsın %99'u silisyumdur.

Tek kristalli güneş hücresinin yapısında; en üstte iletici ızgara, yansıtma özelliği olmayan kaplama, 1µm kalınlığında ve çok ince n tipi silikon katman, akım üretiminde kullanılan dar bir elektrik alanı, n tipi silikon katmana ters katkılanmış p tipi silikon katman ve alt kontak elektron bulunur [15, 16].

Çok kristal silisyum güneş hücreleri; Silisyumun eritilerek kalıplara konulması ve soğutulup ince levhalar haline getirilmesi sonucu oluşurlar. Tek kristal silisyum hücrelere kıyasla daha ucuzdur ama silisyumun iç direncinin olması bu hücrelerin verimini düşürmüştür (%15 civarı). Bu verimin düşmesinde çok kristal hücrenin damar büyüklüğünün küçük olması da etkilidir. Bunun yanında çok kristal malzemenin de üretilmesi tek kristal malzemeye göre daha kolaydır [15, 16].

**1.8.2. İkinci Nesil Güneş Hücreleri**

İkinci nesil güneş hücrelerine yönelimin başlıca sebebi birinci nesil hücrelerinin maliyetinin fazla olmasıdır. Silisyumun saflaştırılması için çok fazla enerji tüketilmesi ve çok fazla malzeme kullanılması silisyum tabanlı hücrelerin maliyetini yükseltmiştir. İkinci nesil güneş hücreleri ince tabaka amorf silikon, kristal

silikondan yapılmış ince film güneş hücreleri, entegre seri devrelerde yapılan ince film güneş hücreleri, nano gözenekli  $TiO_2$ 'den yapılan güneş hücreleri ve kadmiyum tellür olarak incelenebilir.

İnce tabaka amorf silikon güneş hücreleri; ilk defa 1970'lerin ortalarında güneş hücrelerinin yapısında kullanılmaya başlamıştır. Amorf silikon yarı iletken bir madde olup aynı zamanda çok ince bir aktif tabakaya sahip ve kristal silikona oranla daha az enerji kullanılıp ve düşük maliyetle elde edilmektedir. İnce tabaka amorf silikon güneş hücreleri diğer silikon güneş hücresinden tamamen farklı bir yapıya sahip ve p-i-n yapısını kullanmaktadır. Bu hücrelerin verimleri düşüktür ve piyasada bulunan modellerinin verimi %10'un altındadır [15, 17, 18].

Kristal silikondan yapılmış ince film güneş hücreleri; ince film teknolojisinin avantajlarından faydalanmak için yapılan çalışmalardandır. Örnek verecek olursak, entegre modül üretimi ışığı tutan tabakanın kalınlığının azalmasını sağlar. Güneş ışınları birkaç mikrometre kalınlığındaki hücrenin tam tersi yönüne uygulandığında radyasyon emilimi sağlanmış olur. İki mikrometre kalınlığındaki silikon tabakanın verimi %15 civarındadır. Silikon ince film güneş hücresinin verim artırma işlemi bu hücreyi  $700^{\circ}C$ 'de çöktürmek gerekir [15, 17, 18].

Entegre seri devrelerde yapılan ince film güneş hücreleri; güneş modülünün hücreleri modül voltaj değeri hücrelerinden büyük olursa seri bağlanması gerekmektedir. Bu güneş hücrelerinin üretim esnasında üç adım uygulanmaktadır. Önce cam tabaka indiyum oksitle giydirilip aktif tabaka çöktürülür ve son olarak da diğer şerit ile bağlanır [15, 17, 18].

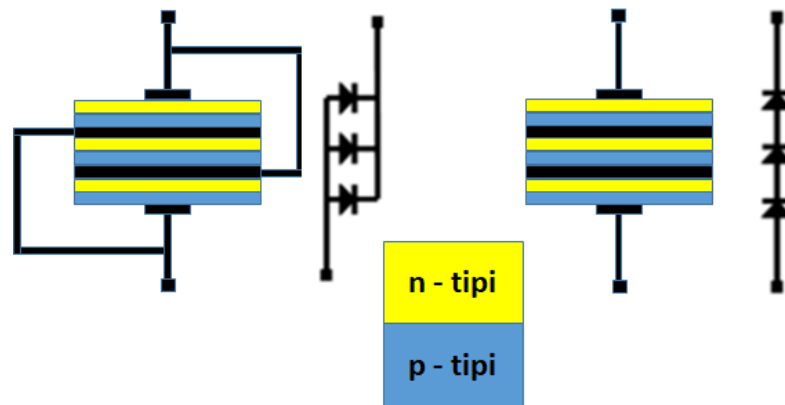
Nano gözenekli  $TiO_2$ 'den yapılan güneş hücreleri; Bu hücrelerde titanyum dioksit ( $TiO_2$ ) kullanılır. Bu çeşit güneş hücrelerine aktiflik,  $TiO_2$  yüzeyine rubidyum tabakası emdirmekle verilir. Bu bölgenin geniş olması güneşten gelen ışınların emilmesini sağlar. Emilen rubidyum  $TiO_2$ 'e çok güçlü bağlı olduğundan elektron  $TiO_2$ 'e sadece birkaç piko saniyede bağlanır. Bu güneş hücrelerinin maliyetinin düşük olması ve yapım aşamalarındaki sürecin düşük olması onu cazip hale getirmektedir. Diğer yandan bu hücrelerin içyapısı diğer hücrelerden farklıdır ve tam anlamıyla araştırılan bir hücre değildir. Son çalışmalarda hücrenin verimi %10'a ulaşmıştır [15, 17, 18].

Kadmiyum tellür; çok kristalli bir yapıya sahiptir ve gelen ışınları soğurmaktaki verimi yüksektir. Gelen ışını %90 civarında soğurur. Üretimi kolay ve ucuzdur. Verimleri %7 civarındadır. Kadmiyumun zehirli bir madde olması üretim aşamalarında hem çok az kullanılmasını hem de önlem alınmasını gerektirmektedir [15].

Bakır İndiyum Galyum diSeleneid güneş hücresi; Bakır İndiyum Galyum diSeleneid'den tasarlanmaktadır. Bu tasarım yarı iletken malzemenin esnek bir taban üzerine yerleştirilerek yapılmıştır. Bu güneş hücresi diğer ince film güneş hücrelerinden daha fazla verime sahiptir. Ayrıca depolama sürecinde pahalı olan vakumlama yöntemine alternatif olarak daha ucuz maliyetli depolama yöntemleri uygulanabilmektedir [17].

### 1.8.3. Üçüncü Nesil Güneş Hücreleri

Üçüncü nesil güneş hücreleri solar mürekkepler, silikon tel, nanotüp, organik boya vb. soğurucu katmanlarından oluşur. Güneş hücreleri üretiminde bu organik maddelerin alternatif olmasının nedeni yüksek soğurma oranları ve esnek yapıda üretilebilmeleridir. Üçüncü nesil organik hücreler üzerinde birçok çalışma yapılmıştır. Yapılan çalışmaların birçoğu düşük verimlilik, yüksek maliyetler ve kararsızlık sorunlarından dolayı henüz laboratuvar ortamı dışında çalışılmamış ve ticarileşmemiş durumdadır. Çok eklemli güneş hücreleri, kuantum parçacık güneş hücreleri üçüncü nesil organik güneş hücrelerindedir.



Şekil 1.4 Çok eklemli güneş hücrelerinin seri ve paralel bağlantı şekilleri



Çok eklemli güneş hücreleri; Bu hücrelerin yapılış amacı, birden fazla katman oluşturarak ve her bir katmanı farklı dalga boyundaki ışık spektrumlarına duyarlı şekilde tasarlayıp verimliliği arttırmaktır. Bu şekilde tek katmanlı bir güneş hücresine göre daha verimli hale gelmiş olurlar. Oluşturulan bu katmanlar organik, inorganik veya hibrit olabilirler. Hem paralel hem de seri bağlanabilirler. Paralel ve seri bağlantı şekilleri Şekil 1.4’de gösterildiği gibidir.

Paralel bağlantılarda, kullanılan ara elektrotlar her çeşit hücreden yük toplanmasını sağlar. Ara elektrotlar foton kaybetmemek için saydam olmalıdırlar. Çok eklemli güneş hücrelerinden %40’a kadar verim elde etmek mümkündür [17].

Kuantum parçacık güneş hücreleri; bu hücrelerin çapları 2-10 nm arasında değişen yarı iletken parçacıklardan oluşur. Bu parçacıklar silikon germanyumdan oluşur. Germanyum’a alternatif olarak CdS, CdSe, CdTe gibi bileşikler de kullanılabilir. Bu parçacıkların üretiminde kristal boyutlarının kontrol edilebilmesi, materyalin iletken özelliğini kontrol etme imkânı sağlar. Bu da kuantum parçacıklarının güneş hücrelerinde kullanılmasını sağlamaktadır.

Büyük boyutlu parçacıkların enerji seviyeleri küçük boyutlu parçacıklara göre daha düşüktür. Bunun sebebi ise büyük parçacıkların daha dar bir enerji seviyesine sahip olmasıdır. Dolayısıyla büyük boyutlu parçacıklar küçük boyutlu parçacıklara göre düşük enerjili fotonları soğururlar. Kuantum parçacık güneş pillerinin verimleri %5 civarındadır [16].

#### **1.8.4. Organik Güneş Hücreleri**

Organik güneş hücrelerinin inorganik güneş hücrelerinden farkı kolay üretilebiliyor olması, geniş yüzeylere kaplanabilmesi, düşük maliyetli olması ve daha farklı özellikler kazandırabiliyor olmasıdır [16]. İletken polimerler; çok sayıda ve basit monomerlerin birleşmesiyle oluşurlar. Günümüzde iletken polimerler güneş hücrelerinde, transistörlerde, sensörlerde ve diğer elektronik cihazlarda kullanılmaktadır. Ayrıca polimerler, düşük maliyetli, daha az toksit olan üretim metotları sunmaktadır.

Brabec fotovoltaiğin öne çıkan özelliklerini şu şekilde sıralamıştır [16];

- ✓ Esnek ve yarı saydamdırlar,
  - ✓ Hücrelerde geniş bölgeler bunlarla kaplanabilirler,
  - ✓ Farklı malzemelerle kolay bir şekilde bütünleşebilirler,
  - ✓ Ekonomik olarak uygun bir özelliklerinin olması şeklinde sıralamıştır,
- Organik güneş hücrelerinde ışık dört farklı şekilde elektrik akımına dönüşür.

Bunlar;

- 1) Yük ayrışımının oluşması,
- 2) Fotonların absorbe edilmesiyle eksitonların oluşumu,
- 3) Eksitonların polimer içerisine difüze olması,
- 4) Yük ayrıştıktan sonra elektronların katot kutbuna, boşlukların da anot kutbuna taşınması,

Ayrılmış olan negatif ve pozitif yüklerin bir çiftinde depolanan potansiyel enerji, yüklerin elektrokimyasal potansiyel farkına veya Fermi seviyelerinin farklarına eşittir. Yük taşıyıcıların elektrota elektron ulaştırmak için itici bir kuvvete ihtiyacı vardır. Bu itici kuvvetin oluşumu genellikle elektron ve boşlukların elektrokimyasal potansiyelindeki bir eğimdir [16].

İki katmanlı organik güneş hücreleri; bu hücreler n tipi ve p tipi yarı iletkenlerin üst üste yığılması ile oluşturulmuştur. Birçok farklı malzemenin birleşimi ile oluşan bu hücrelerde ara yüzeyden yalnızca 10-20 nm uzaklıkta oluşan eksitonlar, heteroeklem yüzeyine ulaşabilmektedir. Bu durum, ara yüzeye oldukça uzak olan absorbe edilmiş fotonların kayıplarına neden olmaktadır. Bu sebepten dolayı verimlilikleri düşüktür [16].

**2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR**

Mesut Ekmekçi, sıcak su borusu kontrol ve test otomasyonu, çinko oksit güneş hücresi üretimi adlı çalışmasında çinko oksit (ZnO) güneş hücresi üretimi ve karakterizasyonunu yapmıştır. Bu amaç doğrultusunda, Ag katkılı ZnO, nanoçubuk ve nanoçiçek yapılarında sentezlenmiş ve EDX, SEM ve XRD analizleri ile yapılar karakterize edilmiştir. Bu yapılar boya duyarlı güneş hücrelerinde denenmiş, verimlilikleri karakterize edilmiştir [19].

Mesut Ekmekçi, nanomateryaller kullanımıyla organik güneş hücrelerinin üretimi, karakterizasyonları ve güneş enerjisi santrallerinin kurulumu adlı çalışmasında organik güneş hücresi üretimi yapmıştır. Yapım aşamasında, alüminyum katkılı çinko oksit (Al: ZnO), mangan katkılı çinko oksit (Mn:ZnO) ve magnezyum katkılı çinko oksit (Mg: ZnO) nanomateryalleri mikrodalga fırın kullanılarak hidrotermal tekniklerle sentezlenmiştir. Daha sonra nanomateryallerin kristal yapıları XRD çalışmaları ile analiz edilmiş, hazırlanan nanomateryaller Taramalı Elektron Mikroskobu (TEM) ile incelenmiştir. Mg:ZnO ve Mn:ZnO nanomateryallerin soğurma ve geçirgenlikleri UV spektro fotometre kullanılarak araştırılmış ve absorpsiyon verileri kullanılarak enerji bant boşlukları hesaplanmıştır. Sentezlenen bu nanomateryaller ile boya duyarlı güneş hücreleri yapılmıştır. BDGH'inde trifenilen diamin (TPD) ve N719 boyaları boya malzemesi olarak kullanılmıştır [20].

Buğra Kocaman, boya duyarlı güneş hücreleri için yeni sistemlerin geliştirilmesi ve karakterizasyonu adlı çalışmasında boya duyarlı güneş hücrelerinde kullanılması amaçlanmış 5 µm boyutundaki monodispers gözenekli titanyum dioksit mikropartiküllerin hücre verimlilikleri üzerindeki etkileri incelenmiştir. BDGH'nin negatif kısmını oluşturan elektrot için TiO<sub>2</sub>, pozitif kısmı için ise platin elektrot kullanılmıştır. BDGH florin katkılı kalay oksit kaplı cam yüzeyler üzerinde oluşturulan elektrotlar ve LiI/I<sub>2</sub> içeren elektrolit çözeltisi kullanılarak elde edilmiştir. BDGH'de TiO<sub>2</sub> katmanı, 20 nm boyutunda TiO<sub>2</sub> nanopartikül (verim %0,34), 5 µm boyutunda monodispers-gözenekli TiO<sub>2</sub> partiküller (verim %2,39) ve 5 µm boyutunda

altın nanopartikül katkılı monodispers-gözenekli TiO<sub>2</sub> partiküller (verim %3,13) ile oluşturulmuştur [21].

Burak Tekin, tek adımlı elektrokimyasal biriktirme yöntemiyle sentezlenen CXTS (X=Co, Fe, Ni, Mn) yarıiletken malzemelerin BDGH'inde karşıt elektrot olarak kullanılması adlı çalışmasında Cu<sub>2</sub>XSnS<sub>4</sub> ince filmleri sülfürsüz ortamda 500°C sıcaklık ve 60 dk parametrelerinde tavlama işlemi gerçekleştirilmiş ve Cu<sub>2</sub>XSnS<sub>4</sub> ince filmleri elde edilmiştir. Bu ince filmlerin elektriksel ve yapısal özellikleri X-ışını difraksiyonu, döngülü voltametri, Raman spektrometresi yöntemleri kullanılarak incelenmiştir. X-ışını difraksiyonu ve Raman spektrumuna göre filmlerin yapısında ikincil faz bulunmamış ve filmlerin kristal özelliğe sahip olduğu görünmüştür. Döngülü voltametri analizinde ise filmlerin elektrokatalitik aktiviteleri Co > Fe > Ni > Mn şeklinde sıralanmıştır. Co elementinin elektrokatalitik aktivitesi yüksek çıkmasının nedeni bu elementin yüksek iletkenliğinin olmasındandır. Cu<sub>2</sub>XSnS<sub>4</sub> türevleri BDGH'de karşıt elektrot olarak Platin yerine kullanılmış ve enerji dönüşüm verimlilikleri Cu<sub>2</sub>CoSnS<sub>4</sub> > Cu<sub>2</sub>FeSnS<sub>4</sub> > Cu<sub>2</sub>ZnSnS<sub>4</sub> > Cu<sub>2</sub>NiSnS<sub>4</sub> > Cu<sub>2</sub>MnSnS<sub>4</sub> şeklinde sıralanmıştır. Cu<sub>2</sub>CoSnS<sub>4</sub> filmi karşıt elektrot olarak BDGH'sinde kullanıldığında, en uzun elektron transfer ömrüne ve en iyi anahtarlama özelliğine sahip olduğu gözlemlenmiştir [22].

Sümeýra Bekleviçuyulası, BDGH'de kullanılmak üzere doğal boya üretimi adlı çalışmasında organik boya üretmiştir. Bu çalışmada dört farklı alternatif boya üzerinde çalışılmıştır; Böğürtlen, karadut, yaban kirazı ve frambuaz. Bunlar ön işlem geçirmesinin ardından 40°C'de 60 dk ultrasonik banyoda ekstraksiyon işlemine tabi tutulmuştur. İşlem sonrasında elde edilmiş olan doğal boya içindeki meyve parçacıkları çıkarılmıştır. Bu boyaların antosiyanın yönünden hangi pH yönünden zengin olduğunu anlayabilmek için beş farklı pH değerinde çalışılmıştır. Antosiyanın yönünden zengin olan pH değeri 1 olarak görülmüştür. Pigment yoğunluğuna göre de yaban kirazı > böğürtlen > karadut > frambuaz olarak sıralanmıştır. Doğal boyaların BDGH sistemlerindeki TiO<sub>2</sub> yarıiletkeni yüzeyindeki boyama ve güneş ışığı altındaki solma özelliklerinin incelenmesi için F-katkılı kalay oksit (FTO) ile kaplı şeffaf cam ve TiO<sub>2</sub> karışımı hazırlanmıştır. Boyama özelliklerine göre TiO<sub>2</sub> yüzeyinde böğürtlen

ve karadut dört ay kalabilirken frambuaz ve karadut iki ay kalabilmiştir. Sonuç olarak en iyi sonucu veren meyve yaban kirazı olmuştur [23].

Deniz Gültekin, ZnO nanoyapılı elektrotlar kullanarak boya duyarlı güneş hücrelerinin geliştirilmesi adlı çalışmasında BDGH’de fotoelektrot olarak kullanılmak amacıyla nanorod, nanotoz ve nanopartikül içeren (ZnO) kaplamalarının üretimi ve karakterizasyonu amaçlanmıştır. ZnO nanoyapılı kaplamalar yapılırken üç farklı (sol-jel, hidrotermal büyüme, homojen çöktürme) üretim yöntemiyle elde edilmiştir. Farklı karakterizasyon teknikleri ile ZnO kaplamaların yapısal ve kristalografik özellikleri incelenmiştir. Üretilen tüm ZnO kaplamalarının çok kristalli yapıda olduğu belirlenmiştir. Daha sonra ZnO yapılı BDGH’nin fotovoltaj performansları ölçülmüştür. Üretim ve yöntem parametrelerinin ZnO yapılı BDGH performanslarını doğrudan etkilediği gözlemlenmiştir. Yapılan bu çalışmada solüsyon konsantrasyonunun artması, hücre performans değerlerinin düşmesine sebep olmuştur. 0,5 molariteli kıvrımlı ağ morfolojisine sahip ince film kaplamalı BDGH’nin diğer kaplamalar ile üretilen hücreler arasında en yüksek enerji verimi sağladığı gözlemlenmiştir [24].

Wassila Saidi ve arkadaşları boya duyarlı güneş hücre uygulamalarında kullanılan  $TiO_2$  üzerine  $B_2O_3$  ekleyerek optik ve yapısal özelliklerinde meydana gelen değişmeyi incelemişlerdir [25].

Zegao Wang ve arkadaşları silisyum katkılı indirgenmiş grafeni sentezleyerek boya duyarlı güneş hücreleri ve süper kapasitör uygulamalarında kullanmıştır [26].

Nicole Wollschläger ve arkadaşları boya duyarlı güneş hücrelerinde kullanılan gözenekli  $TiO_2$  nano parçacık filmlerin gözenekli içyapısını iyon demeti tomografisi ve taramalı elektron mikroskobu kullanarak incelediler [27].

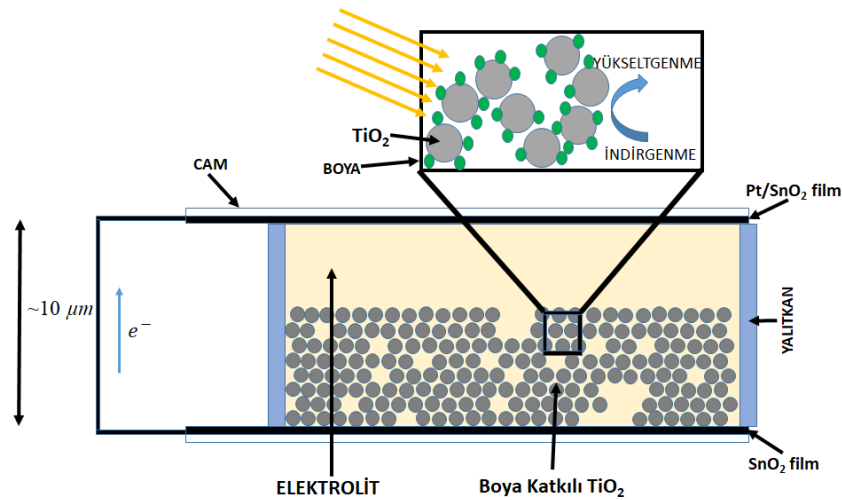
### 3. MATERYAL VE YÖNTEM

Bu tez çalışmasının amacı  $TiO_2$  bileşiği taban olarak kullanılıp, bu tabana Quantum Espresso simülasyon programı ile kalay (Sn), kalsium (Ca), magnezyum (Mg) ve alüminyum (Al) elementleri boya malzemesi olarak eklenerek, boya duyarlı güneş hücreleri oluşturmaktır. Oluşturulan yeni boya duyarlı güneş hücrelerini (BDGH)'nin atomik yapıları, toplam enerjisi, bant aralıkları ve durum yoğunlukları yoğunluk fonksiyon teorisi (YFT) kullanılarak hesaplanmıştır.

Bu bölümde ise BDGH'nin ne olduklarından, nasıl çalıştıklarından bahsedilecek ayrıca BDGH'nin yukarıdaki özelliklerinin hesaplanmasında yoğunluk fonksiyon teorisi ve dayandığı teoremlerden bahsedilecektir. Bu ilke ve teoremlerle çalışan Quantum Espresso programının özelliklerinden bahsedilecektir.

#### 3.1. Boya Duyarlı Güneş Hücreleri

M. Gratzel ve B. Oregan [28] 1991 yılında yaptıkları çalışmalar sonucunda Boya Duyarlı Güneş Hücrelerini (BDGH) ortaya çıkarmışlardır. Son 10 yıl içerisinde bu hücrelere çok büyük bir ilgi gösterilmeye başlanmıştır. Artan bu ilginin sebebi bu hücrelerin silisyum tabanlı güneş hücrelerine göre düşük maliyet ve üretimdeki avantajlarıdır.



Şekil 3.1 Boya duyarlı güneş hücresinin katmanlarının (elektrolit, boya,  $Pt/SnO_2$  film, yalıtkan,  $SnO_2$  film) şematik gösterimi [29]

Şekil 3.1’de BDGH’ nin yapısına bakacak olursak,

- 1) İki İletken cam,
- 2) Yarı iletken katman ( $TiO_2$ ),
- 3) Duyarlaştırıcı (boya) kısım,
- 4) Elektrolit çözeltisi,
- 5) Katalizör olarak beş temel kısımdan oluştuğunu görmüş oluruz.

Yarı iletken cam ve yarı iletken katman BDGH’ nin çalışan elektrotunu, diğer iletken cam ve katalizör ise karşı elektrotu oluşturur.

Çalışan Elektrot BDGH’ nin negatif kutbunu oluşturur. Bu kısımda yarı iletken katman ( $TiO_2$ ) ve saydam ince iletken cam bulunur. İletken cam olarak indiyum katkılanmış kalay oksit (ITO) veya florin katkılanmış kalay oksit (FTO) kullanılmaktadır. Bu camların şeffaf ve düşük dirence sahip olması birçok elektronik alanda kullanılmasını sağlamıştır. Bunun yanında yüksek ısıya karşı dayanıklıdır [30, 31].

BDGH’ de genellikle yarı iletken olarak  $TiO_2$  kullanılmasına rağmen onun yerine  $ZnO$ ,  $SnO_2$  ve  $Nb_2O_5$  gibi malzemeler de kullanmak mümkündür. Daha çok  $TiO_2$  kullanılmasının sebebi piyasada bol miktarda bulunması, ucuz olması, mekanik ve kimyasal olarak kararlı yapıda olması ve toksik bulundurmamasıdır [32]. Bu tezde  $TiO_2$  kullanılma sebepleri Bölüm 3.2’ de daha ayrıntılı olarak tartışılacaktır.

BDGH’ de  $TiO_2$ ’ in 3 temel görevi vardır.

- 1) Yüzey alanı oluşturarak boyanın tutunabilmesini sağlamak
- 2) Boyanın uyarılması sonucu ondan kopan elektronu kabul etmek
- 3) Boyadan aldığı elektronu iletken cam yüzeyine iletmesini sağlamaktır [32].

Duyarlaştırıcı (Boya) boyanın temel görevi yarı iletken katman olan  $TiO_2$ ’ ye elektron sağlamaktır. Boya içerisinde bulunan elektronlar üzerine ışık çarptıkça uyarılmış hale geçerler ve boyadan ayrılıp  $TiO_2$ ’ e geçerler. Uyarılmış boya kaybettiği elektronu ise elektrolit çözeltisinde gerçekleşen redoks tepkimeleri sayesinde tekrar kazanır ve çalışmasına devam eder. Bu tezde boya için kullanılan maddelerin ayrıntıları Bölüm 3.2’ de verilecektir.

Yapılan çalışmalar sonucunda BDGH’ de Rutenyum kullanılması daha iyi sonuçlar vermiştir. BDGH’ de Rutenyumun sıklıkla kullanılmasının sebebi güneş ışığı

tarafından iyi bir şekilde uyarılmasıdır [33].

Yükseltgenme ve indirgenme olaylarının gerçekleştiği, içinde farklı iyonların bulunduğu sıvı elektrolit olarak tanımlanır. Genellikle  $I^3^- / I^-$  (tri-iyodür/iyodür) redoks çiftinden oluşur ve boyanın kaybettiği elektronun tekrar kazanılmasını sağlayarak elektrik devresinin tamamlanmasını sağlar. Uyarılmış olan boya iyodür tarafından indirgenir ve kaybettiği elektronu kazanmış olur. Tri-iyodür/iyodür redoks çifti BDGH'nin verimini doğrudan etkilemektedir [34].

Elektrolit çözeltisinin olması gereken ideal özelliklerden bahsedecek olursak;

- İçinde bulunan maddelerin çok iyi bir şekilde çözülmüş olması gerekir (yüksek oranda yük taşıyabilmek için).
- Kullanılan çözücünün yüksek difüzyon katsayısına sahip olması gerekir.
- Yükseltgenme ve indirgenme olayları sırasında kararlı bir yapıda olması gerekir.
- Boya duyarlı hücrenin diğer kısımlarıyla tepkimeye girmiyor olması gerekir.

Elektrolit çözeltisi sıvı olduğundan uçuculuğu ve akması problem yaratabilmektedir. Bunun üzerine, bu probleme çözüm bulmak için araştırmalar yapılmıştır ve sonuç olarak elektrolit olarak katı elektrolitler bulunmuştur. Katı elektrotların verimi sıvı elektrotlara göre düşüktür [35].

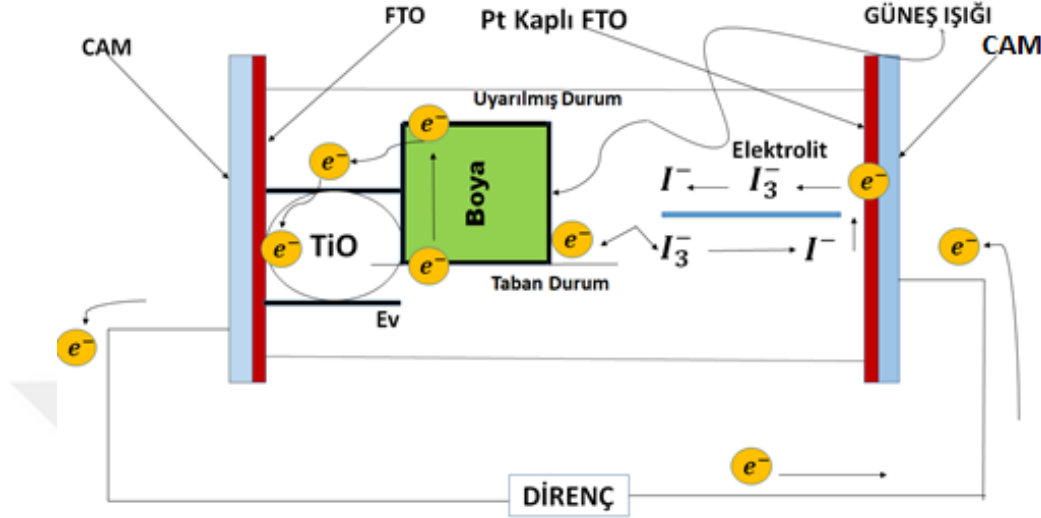
Karşı elektrot BDGH'nin pozitif kutbunu oluşturur. İletken cam ve katalizör bu kısımda bulunur. Katalizör, iletken cam üzerinde ve genellikle platin, grafit veya polimerlerden oluşan bir katmandır [36, 37]. Katalizör olarak genellikle platin kullanılmasının nedeni elektrolit içerisinde bulunan  $I^3^- / I^-$  redoks çiftini çok iyi katalize etmesidir. Bunun yanında ışığı iyi bir şekilde yansıtabilmesi BDGH'de kullanımını arttırmıştır [38].

### **3.1.1. Boya Duyarlı Güneş Hücrelerinin Çalışma Prensibi**

BDGH'nin çalışma prensibini fotosentez olayına benzetmek mümkündür. Fotosentezde klorofil, güneş ışığını absorbe ederek bitki yapraklarında karbondioksit



gazını su yardımıyla besin ve oksijene çevirir. Bu temel fotosentez olayı baz alınarak BDGH sistemleri geliştirilmiştir.



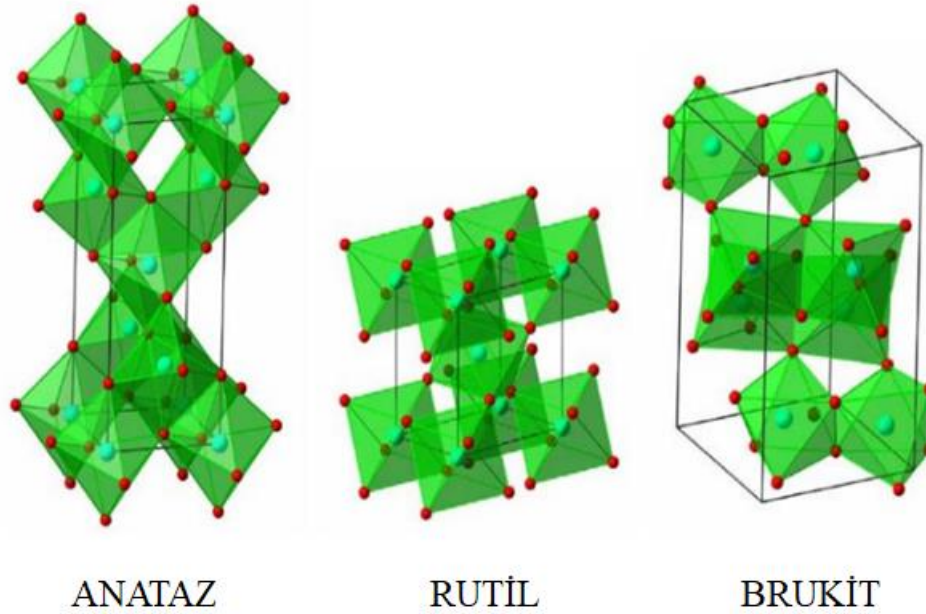
Şekil 3.2 Boya duyarlı güneş hücresi çalışma prensibi [39].

Şekil 3.2'yi inceleyecek olursak, boya üzerine düşen güneş ışığı boyayı uyarır ve boya yükseltgenerek (elektron kaybeder) elektronunu yarı iletken katmana ( $\text{TiO}_2$ ) iletir. Yarı iletken katman bu elektronu kabul eder ve iletken cam yüzeyine iletir. İletken cam bu elektronu karşı elektrot üzerinde bulunan katalizör görevi yapan platine iletir. Platin ise bu elektronu elektrolit içerisinde bulunan  $\text{I}^3^- / \text{I}^-$  redoks çiftinden tri-iyodürü indirir ve tri-iyodür elektron kazanmış olur. Elektrolit içindeki yükseltgenme ve indirgenmeler sonucu iyodür, uyarılmış halde bulunan boyayı indirir ve boya kaybettiği elektronu tekrar kazanmış olur. Uyarılmış haldeki boyanın indirgenmesi nano saniye derecesinde gerçekleşir ve böylece elektrik devresi tamamlanmış olur [40].

### 3.2. Titanyum Dioksit ( $\text{TiO}_2$ )

Titanyum dioksit yeryüzünde doğal olarak bulunan, işlenebilen ve gıda renklendiricisi olarak bilinen bir mineraldir. Bu mineralin en önemli işlevi (pigment olmak şartıyla) boya, kaplama, ilaç, plastik, kâğıt, gıda ve kozmetik ürünlerine parlaklık, beyazlık ve donukluk sağlamasıdır.

TiO<sub>2</sub>'nin uçak ve uzay araçları yapımı, kimya sanayisi, gemi ve otomobil üretimi, silah sanayisi ve sağlık sektörü, güneş pilleri gibi pek çok kullanım alanı bulunmaktadır.



Şekil 3.3 TiO<sub>2</sub> Kristal yapıların (anataz, rutil, brukit) kullanım alanlarına göre farklı eksenlerden görünümü [41]

TiO<sub>2</sub> yarıiletken bir madde olup elektromanyetik ışınımı absorbe etme özelliğine sahiptir. Işık enerjisini absorbe etmesi valans bandında bulunan elektronun iletkenlik bandına geçmesine neden olur. Uyarılan elektron ve geride kalan elektron boşluğu hareketli olup katı yüzeyde redoks reaksiyonunun gerçekleşebileceği bir yere doğru hareket eder. Uyarılan elektronun iletkenlik bandında kalma süresi ne kadar kısa olursa fotokatalizör olarak kullanılması o kadar güçlenir [42].

TiO<sub>2</sub>'nin iyi bir kimyasal kararlılığı ve karakteristik özellikleri vardır. Sahip olduğu bu karakteristik özellikler TiO<sub>2</sub>'nin kullanım alanlarını belirler. Bu özellikleri ise şekil, boyut ve kristal yapı oluşturur. TiO<sub>2</sub>'nin kristal yapıları rutil, brukit ve anataz yapılarıdır [43].

Şekil 3.3'de TiO<sub>2</sub>'nin üç ana yapıda kristalleri gösterilmiştir. Bu kristallerin örgü parametreleri Çizelge 3.1'de verilmiştir.

Çizelge 3.1 TiO<sub>2</sub> Örgü parametreleri

TiO <sub>2</sub> Kristal Yapıları	A	B	C
Rutil	4,584 Å	4,584 Å	2,953 Å
Anataz	3,782 Å	3,782 Å	9,502 Å
Brukit	5,436 Å	9,166 Å	5,135 Å

Rutil ve Anataz yapılarında kenar ilişkisi  $a = b \neq c$  şeklinde olup brukit yapıda kenar ilişkisi  $a \neq b \neq c$  şeklindedir [43]. TiO<sub>2</sub>'nin Rutil ve Anataz kristal yapısı tetragonal, Brukit kristal yapısı ise rombiktir [44]. Rutil TiO<sub>2</sub> genellikle ince film gibi elektronik aletlerde kullanılmaktadır. TiO<sub>2</sub>'nin bu yapısı kimyasal kararlığa ve yüksek termal özelliğine sahip olduğundan araştırmacılar tarafından ilgi görmüş ve yeni elektronik ve optik cihazlarda kullanılmıştır [45].

Son yıllarda TiO<sub>2</sub> bileşiğinin en fazla kullanıldığı alan güneş pilleri olmuştur. Bunun sebebi yapılan çalışmalarda, belirli bir dalga boyunda gelen ışığı yansıma kaybına uğratmayan ve bilinen en iyi madde özelliği göstermesidir.

Bu tez çalışmasında rutil TiO<sub>2</sub> taban olarak kullanıp, Al, Mg, Sn, Ca elementleri ayrı ayrı absorbe edilerek güneş ışığının zemin üzerinde yansıma kaybına uğramasını en az seviyelere indirip bu enerjiden daha fazla verim alınması amaçlanmıştır.

### 3.3. Duyarlaştırıcı (Boya) Atomlar

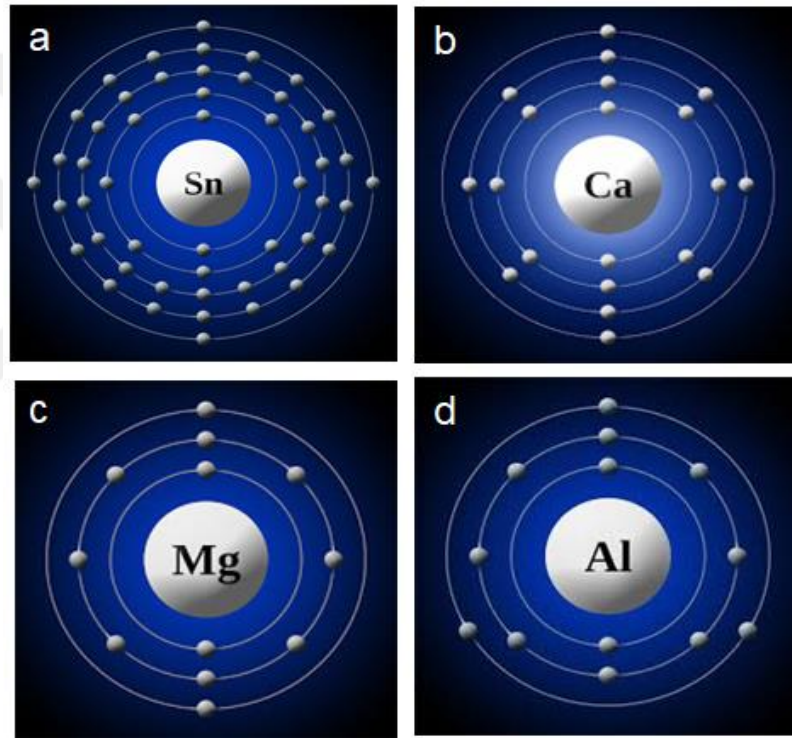
Bu bölümde TiO<sub>2</sub> tabanına katkılanan boya elementleri Sn, Ca, Mg ve Al hakkında ayrıntılı bilgiler verilecektir.

#### 3.3.1. Kalay (Sn)

Atom numarası 50, simgesi Sn, atom ağırlığı 118.710 g/mol, periyodik cetvelde 4A grubunda yer alır, rengi gümüş beyazdır ve korozyona karşı dayanıklıdır. Yumuşak olup kolayca tel ve levha haline getirilebilen bir metaldir. Bu özelliğinden dolayı metallerin kaplanmasında kullanılır. Kalay pahalı bir metaldir. İki çeşidi vardır,

beyaz kalay ve gri kalay. Birincisi beyaz kalay bildiğimiz metalik kalaydır. Bu 13 dereceden düşük sıcaklıkta, metalik olmayan gri kalaya dönüşür. İkincisi ise gri kalay 13,2 dereceden daha düşük sıcaklıklarda, kübik sistem halinde ortaya çıkar. Gri kalay çok az kullanıma sahiptir. Kalay zehirsizdir. Yumuşak ve bükülgen ama dövülgen değildir. İlk çağlardan beri tunç yapımında kullanılan bir elementtir [46].

Kuvvetli asitlerle ve kuvvetli bazlarla reaksiyona girdiğinden dolayı etkili bir metaldir. Saf su ile reaksiyona girmez, metallere alaşım yapar, onlara sertlik ve dayanıklılık kazandırır [46].



Şekil 3.4 Boya olarak kullanılan atomlar a) kalay (Sn), b) kalsiyum (Ca), c) magnezyum (Mg) ve d) alüminyum (Al) atom modelleri gösterilmektedir [47].

Kalay elementinin pek çok kullanım alanı vardır. Kimya sanayisinde; kimyasal madde, alaşımlarda, yağ ve hava filtrelerinde, boyada, parfümde, kurşun alaşımlarında, sabunda ve diş macunu yapımında kullanılmaktadır. Elektronik ve elektronik sanayisinde; kaportada ve radyatörde kullanılmaktadır. Teneke yapımında, kaplamacılıkta, lehim ve otomotiv endüstrisinde, uçak ve gemi endüstrisinde, matbaacılıkta, mutfak malzemelerinde, cam endüstrisinde, süper iletken mıknatıslar da, kurşun alaşımlarında kullanılır [46].

Bu tezde Sn elementi TiO<sub>2</sub> tabanı üzerine boya malzemesi olarak kullanılıp yüzeyden daha fazla elektron koparabilmek amaçlanmıştır.

### **3.3.2. Kalsiyum (Ca)**

Atom numarası 20, simgesi Ca, atom ağırlığı 40,08, periyodik tabloda 2A grubunda bulunmaktadır. Bu element gümüşü beyaz renkte olup toprak alkali metal grubundadır. Kalsiyum dünyada en çok bulunan elementler sırasında 5. sırada olup elementler arasında ise 3. Sırada bulunmaktadır. Bu element kurşun kadar serttir. Saf olarak kullanıldığında kesilebilir, şekil verilebilir, preslenebilir, tel ve levha haline getirilebilir bir elementtir [48].

Kalsiyum elementinin zehirleyici bir etkisi vardır bunun yanında tüm canlıların yaşamında etkili olan temel elementler arasındadır. Kemiklerde, dişlerde, mercan ve yumurta kabuğunda bulunur. Deniz suyunda %0,15 oranında bulunur.

Kalsiyum elementi metal olarak, alüminyum alaşımlarda, dökme demirde, grafit durumundaki karbonun denetlenmesinde, bizmut ve kurşunun ayrılmasında kullanılır. Ayrıca çelik türlerinin çoğunun oksitlenmesine engel olur. Bu elementin özellikleri arasında yanmayı zorlaştırması, buna bağlı olarak da ısıtma işlemi ihtiyacını azaltması, kurşun alaşımlarını sertleştirici etkisi de bulunmaktadır. Kalsiyum elementinin suyla reaksiyona girme özelliği vardır bu nedenle alkol tarzında kuru çözücülerin üretiminde kullanılan bir elementtir [48]. Bu tezde Ca elementi TiO<sub>2</sub> tabanı üzerine boya malzemesi olarak kullanılıp yüzeyden daha fazla elektron koparabilmek amaçlanmıştır.

### **3.3.3. Magnezyum (Mg)**

Atom sayısı 12, simgesi Mg, atom sayısı 12, atom ağırlığı 24,32, periyodik tabloda 2A (toprak alkali metalleri) grubunda bulunan bir elementtir. Yer kabuğunda bulunma sırasında yedinci, Evrende bulunma sırasında ise sekizinci sırada bulunan metaldir. “Sir Humphrey Davy tarafından 1808’de İngiltere’de keşfedilmiştir” [49].

Hafif metal gerektiren alaşımlarda, uçaklarda, füzelerde, roketlerde kullanılır. Alüminyuma benzeyen yapısal özellikleri vardır ancak, yanıcı özelliği olduğu için yüksek sıcaklıklarda ile temas gerektiren durumlarda kullanılmaz [49].

Magnezyum piroteknik, fotoğrafik flaş ampullerde ve işaret fişeklerinde kullanılır. Magnezyum oksit olarak; bazı antiasitlerde kullanılır. Bazı boya ve mürekkep türlerinde Magnezyum karbonat olarak, optik merceklerde parlama ve yansımaları önlemede ise Magnezyum florür ince bir film olarak kullanılır [49]. Bu tezde Mg elementi  $TiO_2$  tabanı üzerine boya malzemesi olarak kullanılıp yüzeyden daha fazla elektron koparabilmek amaçlanmıştır.

### **3.3.4. Alüminyum (Al)**

Atom numarası 13, simgesi Al, atom ağırlığı 26,982, yoğunluğu 2,7 olan  $660^{\circ}C$ 'de eriyen beyaz renkli, hafif ve kolay işlenen bir elementtir. Periyodik tabloda 3A grubunda, 3. Periyotta bulunur. Hans Christian Oersted tarafından 1825'de Danimarka'da keşfedilmiştir.

Doğada serbest halde bulunamayıp yer kabuğunun en çok bulunan üçüncü elementidir. Daha çok bileşikler halinde bulunur. Boksit cevherinin elektroliz edilmesiyle elde edilir. Saf formu çok yumuşaktır. Bu formuna %1'den az demir veya silisyum eklenmesi sertleşip güçlenmesini sağlar [50].

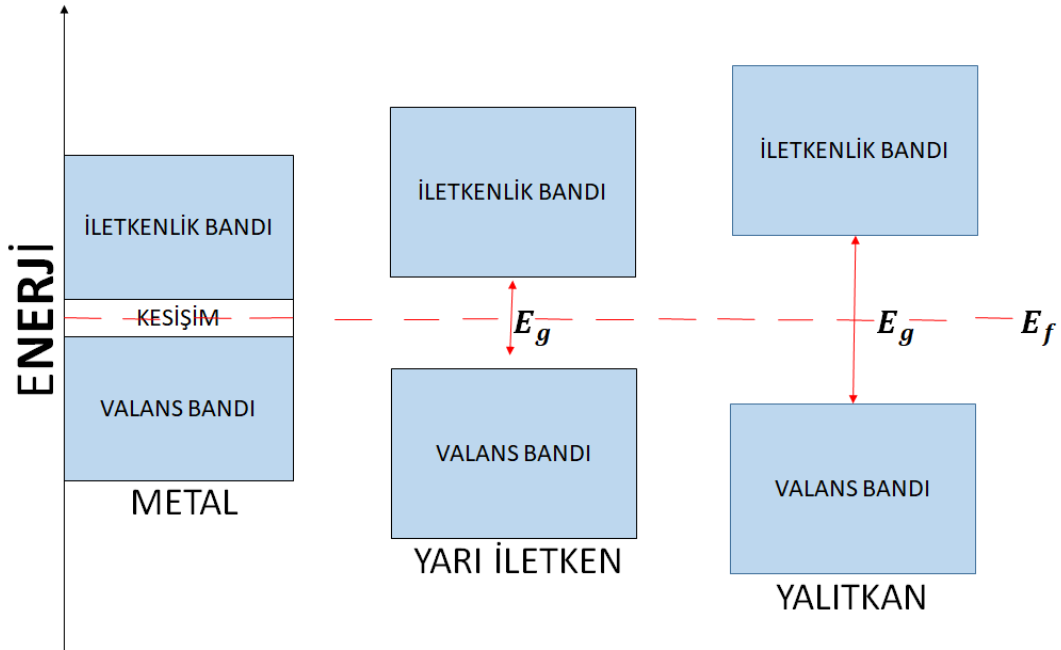
Al elementinin kullanım alanları: Roket ve uçak parçaları, elektronik cihazlardan yapı malzemeleri, mutfak eşyalarından folyo ve meşrubat kutuları, iletkenliği bakır kadar iyi olmasa da hafif olmasından kaynaklı elektrik iletim hatları ve bunların yanında lazerler için sentetik yakut ve safir yapımı olarak verilebilir [50].

Bu tezde Al elementi  $TiO_2$  tabanı üzerine boya malzemesi olarak kullanılmıştır. Boya malzemesi olarak kullanılması, güneşten gelen ışınların yüzeyden daha fazla elektron koparabilmesi amaçlıdır.

## **3.4. Elektronik Bant Yapısı**

Bir atomda elektronlar Pauli Dışarlama İlkesine uygun olarak farklı enerji

seviyelerini işgal ederken birden fazla atom molekül oluşturmak için bir araya geldiğinde durum farklılaşır. Örneğin Oksijen atomunun sekiz tane elektronu vardır ve bu elektronların konfigürasyonu  $1s^2 2s^2 2p^6$  şeklindedir. İki O atomu  $O_2$  molekülünü oluşturursa bu durumda 1s seviyesini işgal etmek isteyen 4 tane elektron olacaktır. Pauli dışarlama ilkesine göre zıt spinli iki elektron 1s seviyesinde bulunabileceğinden bu problem 1s seviyesinin enerjileri birbirine yakın iki farklı seviyeye bölündüğünü düşünmekle çözülür. 1s seviyesindeki yarımla sayısı molekülü oluşturan atom sayısı arttıkça artacaktır. Bu durum kristaller için de geçerlidir. Kristallerin yarımla enerji seviyeleri arasındaki fark yaklaşık  $10^{-23}$  eV kadar küçüktür. Yani bu seviyeleri sürekli bir bant gibi düşünmek mümkündür [51].



Şekil 3.5 Enerji bant yapısının sembolik gösterimi [14].

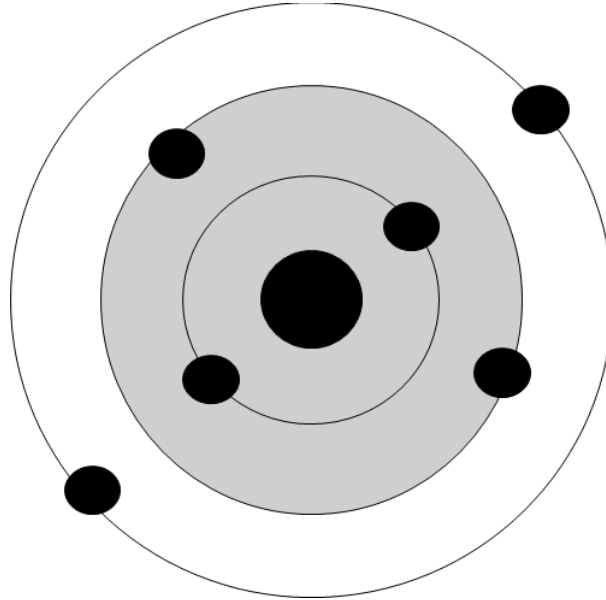
Elektronlar, orbitalleri düşük enerji seviyelerinden yüksek enerji seviyelerine doğru doldururlar. Düşük seviyeli orbitaller tam dolu olduklarından elektronlar hareket edemezken, yüksek enerjili orbitallerdeki elektronlar kristal içinde serbestçe hareket edebilirler. Metallerde valans bandı (yarı dolu ya da tam dolu) ile iletkenlik bandı (yarı dolu veya boş) arasındaki enerji farkı yok ise elektronlar rahatça hareket edebilir ve elektriksel iletkenlikleri fazla olur. Yarı iletken ve yalıtkanlarda valans

bandı ile iletkenlik bandı arasında bir yasak enerji aralığı ( $E_g$ ) vardır. Yarıiletkenler 0-3 eV arası  $E_g$ 'ye sahip iken, daha büyük değere sahip olanlar yalıtkan sınıfına girerler.

Şekil 3.5'de  $E_g$  yasak bant aralığını  $E_f$  ise fermi enerji seviyesini göstermektedir. Metallerde iletkenlik bandı ile valans bandı arasında fark bulunmaz hatta iç içe de geçebilir,  $E_g$ 'nin büyüklüğüne göre de yarıiletken mi ya da yalıtkan mı olduğu anlaşılır [52].

### 3.5. Sözde Potansiyel Metodu

Bu yaklaşımda bir atom, değerlik elektronları ve öz elektronları olarak iki parçadan oluşan sistem olarak düşünülmektedir. Bu sistem oksijen atomu düşünülerek daha iyi anlaşılabilir. Oksijen atomunun 8 elektronundan 6 tanesi değerlik elektron geriye kalan 2 tanesi ise çekirdekle birlikte öz bölgesini oluştururlar. Şekil 3.6'da öz elektronları ve değerlik elektronlardan oluşmuş bir sistem görülmektedir. Sözde potansiyel teorisine göre bir sistemin kimyasal veya fiziksel özellikleri incelenirken öz bölgesinde bulunan elektronlar katkı yapmazken değerlik elektronlar kullanılır [53, 54, 55].



Şekil 3.6 Öz elektron, değerlik elektron ve çekirdekten oluşmuş bir atom ( Atom'un taralı bölgesi öz bölgesidir).



Bir sistemin elektronik özelliklerini belirlemek için sözde potansiyel teorisi esas alınarak Schrödinger Denklemi'nden yararlanılabilir:

$$H\Psi = \varepsilon\Psi \quad (3.1)$$

Denklem 3.1'de  $H$  hamiltonyeni, kinetik enerji ile öz elektronlardan kaynaklanan  $V_A$  etkin potansiyelinin toplamıdır.  $\Psi$  dalga fonksiyonu ise, değerlik elektronlardan kaynaklanan bir  $\phi$  fonksiyonu ile öz bölgesindeki elektronlardan kaynaklanan  $\phi_c$  toplamı şeklinde denklem 3.2'de verildiği gibi yazılabilir [53, 55].

$$\Psi = \phi + \sum_c b_c \phi_c \quad (3.2)$$

Denklem 3.2'de  $b_c$  katsayıları  $\Psi$  ve  $\phi_c$ 'nin  $\langle \Psi | \phi_c \rangle = 0$  şeklinde dik olmalarını sağlayan normalizasyon sabitlenir ve denklem aşağıdaki şekilde yazılabilir [53, 55]:

$$H\phi + \sum_c (\varepsilon - E_c | \phi_c \chi \phi_c |) \phi = \varepsilon\phi \quad (3.3)$$

Denklem 3.3'de  $E_c$  ifadesi öz bölgesindeki bir enerji öz değeridir. Denklem 3.3 eşitliğinden denklem (3.4) ve (3.5) denklemleri yazılabilir.

$$(H + V_R)\phi = \varepsilon\phi \quad (3.4)$$

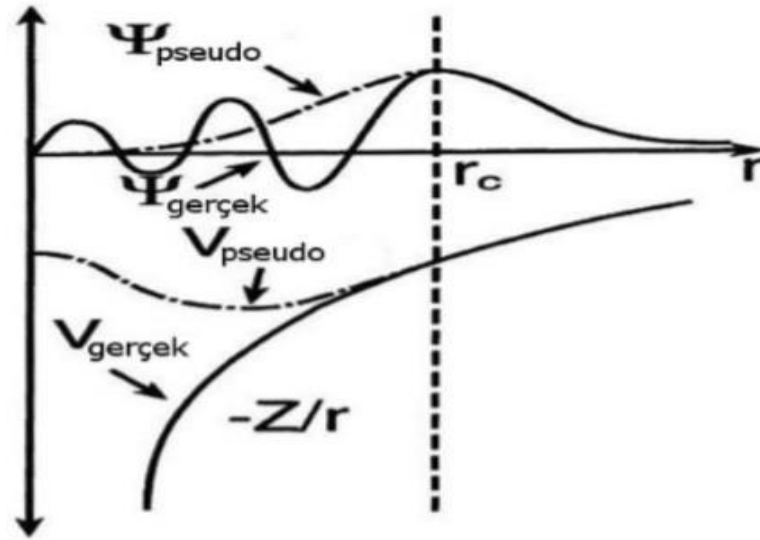
$$(T + V_{ps})\phi = \varepsilon\phi \quad (3.5)$$

Denklem 3.4'deki  $V_R$  itici bir potansiyel operatörü olup 3.5 denklemindeki  $V_{ps}$  aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$V_{ps} = V_A + V_R \quad (3.6)$$

$V_R$  itici potansiyeli ile  $V_A$  etkin potansiyelinin toplamı zayıf etkili bu  $V_{ps}$  potansiyelini verir. Bu şekilde ifade edilen potansiyele sözde potansiyel denir. Kısa menzilli olması ve çabuk yakınsaması sebebiyle dalga fonksiyonu hesaplarında kullanılır [53, 55].

Şekil 3.7’de sözde dalga fonksiyonu ( $\Psi_{pseudo}$ ), sözde potansiyel eğrisi ( $V_{pseudo}$ ), gerçek potansiyel ( $V_A$ ) ve gerçek dalga fonksiyonu ( $\Psi_{gerçek}$ ) ve ( $r_c$ ) öz bölgesinin yarıçapıdır [53, 55].



Şekil 3.7 Sözde (pseudo)-potansiyel ve sözde (pseudo)-dalga fonksiyonu grafik gösterimi.

### 3.6. Durum Yoğunluğu

Bir sistemin durum yoğunluğu yoğun madde fiziğinde ve katı hal fiziğinde, uygun her bir enerji seviyesindeki enerji aralığı başına hal sayısını tanımlar. Yani partükiler bir sistemde  $r(E)$  kuantum hal sayısının ne kadar yoğunlukta bulunduğunu veya birim enerji başına kuantum hal sayısını gösterir. Hal sayısı  $N(E)$ ,

$$N(E) = \int_E^{\Delta E} \rho(E) dE \quad (3.7)$$

### 3.7. Toplam Enerji

Toplam enerji grafikleri adım sayısına göre yaklaşıklık grafikleridir. Bu grafikler, hangi adımdan sonra yapının kararlı hale geldiğini gösterir. Enerjinin minimum olduğu adım en kararlı noktadır. Kararlı adımın bilinmesi bu adımdan sonra

yapılacak işlemlerin gereksiz olduğunu gösterir. Böylece hesaplama zamanından tasarruf sağlanmış, verilerin depolanması kısmında gereksiz yer kaplanması engellenmiş olur.

### **3.8. Yoğunluk Fonksiyon Teorisi (YFT)**

YFT kristal katılar, izole moleküller ve ara yüzeyler gibi sistemlerin araştırılıp incelenmesi ve bu sistemlerin özelliklerinin tahmin edilmesi için yaygın bir şekilde kullanılan hesapsal bir yöntemdir [53]. Bu teoride dalga fonksiyonları yerine elektron yoğunluğu temel alınarak enerji hesaplamaları yapılmıştır. YFT’de yapılan ilk çalışmalar Fermi ve Thomas modeli (1927 yılında) ile başlatılmıştır [54]. Bu modellerde elektron-elektron ve çekirdek-çekirdek etkileşimleri elektron yoğunluğunun bir fonksiyonu olarak kabul görmüştür. İlk çalışmalarda elektrona ait korelasyon ve değiş tokuş terimlerine dikkat etmedikleri için hesaplamalar başarısız olmuştur. 1928 yılında Paul Dirac bu terimleri ekleyerek daha kullanışlı hale getirmiştir. Daha sonra Hohenberg-Kohn bu teoremi geliştirmiş, Kohn ve Sham daha pratik hale getirmiştir.

Yoğunluk fonksiyon teorisinde üç temel kavram vardır [54]. Bunlar;

1) Elektron Yoğunluğu ( $\rho$ ): Herhangi bir noktadaki elektron yoğunluğu olup  $\rho = \rho(r)$  ile verilir.

2) Homojen Elektron Gazı Modeli: sisteme düzgün dağılmış bir bölgedeki yük dağılımının n tane elektron varlığı ve sistemi nötr duruma getirecek kadar pozitif yükten oluştuğu varsayımına dayalı idealleştirilmiş bir modeldir. Enerji ifadeleri YFT modeliyle elde edilmiştir. Elektron dağılımını ise V hacimli bir küp içinde olduğu düşünülerek, V’nin ve n’nin sonsuza yaklaştığı farazisiyle elektron yoğunluğunun ( $\rho = n/V$ ) sabit olduğu kabul edilmiştir.

3) Fonksiyonel: Bağımsız bir a değişkenine bağlı değişkene fonksiyon denilmektedir ve f(a) ile gösterilir. Bir F fonksiyonu f(a)’a bağlı ise F, a’ya bağlı bir fonksiyondur denilir ve F[f] ile ifade edilir.

Yoğunluk fonksiyon teorisini diğer teorilerden ayıran bazı özellikler şunlardır; hesaplama işlerinde kullanışlı olması, deneysel sonuçlara çok yakın sonuçlar vermesi,

manyetik özellik gösteren katılarda da spin polarize etki hesabının ilave edilmesiyle uygulanabilir olması diye sıralanabilir [54].

Yoğunluk fonksiyonel teori hesapları yapan programlar, düzlem tabanlı dalga fonksiyonu kullanan programlar (Quantum Espresso, VASP, WIEN2K, CASTEP vb.) ve baz seti kullanan programlar (FHI-AIMS, ORCA, GAUSSIAN, SIESTA vb.) olmak üzere ikiye ayrılır.

Bu çalışmada kullandığımız program Quantum Espresso'dur.

### 3.8.1. Hohenberg – Kohn Teoremi

Bu teorem bir  $V_{dış}(r)$  potansiyelinin etkisinde hareket eden elektronlardan oluşan bir sistemle ilgili bir teoremdir. Toplam enerji ( $E$ ), yük yoğunluğu  $n(r)$ 'nin fonksiyonu olarak denklem 3.8'de gösterildiği gibi yazılabilir.

$$E[n(r)] = \int n(r) V_{dış}(r) dr + F[n(r)] \quad (3.8)$$

Denklem 3.8'de  $E[n(r)]$  elektron yoğunluğunun bir fonksiyonu olup aşağıdaki şekilde tanımlanmıştır [56].

$$F[n] = T + V_{e-e} \quad (3.9)$$

Denklem 3.9'da  $T$  kinetik enerji  $V_{e-e}$ 'de elektron-elektron etkileşme enerjisidir. Bu teorem anlaşılır bir teorem olmasına rağmen sistemin taban durumu elektron yoğunluğunu bulmak için kullanışlı değildir.

### 3.8.2. Kohn ve Sham Teoremi

Bu teorem Hohenberg-Kohn teoremindeki  $F[n]$  fonksiyonunu geliştirmiştir. Bu fonksiyonun gelişmesi yoğunluk fonksiyon teorisinin gelişmesinde önemli rol almıştır [57].

$$F[n(r)] = T_0 + \frac{1}{2} \iint \frac{n(r_1)n(r_2)}{|r_1-r_2|} dr_1 dr_2 + E_{dte} \quad (3.10)$$

$E_{dte}$  terimi, çok cisim değiş tokuş etkileşimlerini ifade eder ve böylece toplam enerji ifadesi aşağıdaki şekli alır:

$$E[n] = T_0[n] + \int dr V_{dış}(r) n(r) + \frac{e^2}{2} \iint dr_1 dr_2 \frac{n(r_1)n(r_2)}{|r_1-r_2|} + E_{dte}[n] \quad (3.11)$$

Formüldeki  $n(r)$  elektron yük yoğunluğunun bir göstergesidir. Bu formülden yararlanarak hamiltonyen;

$$H = T_0[n(r)] + V_{KS}[n(r)] \quad (3.12)$$

Şeklinde yazılabilir. Bu denklemdeki  $V_{KS}[n(r)]$  ifadesi Kohn-Sham potansiyeli denir ve denklem 3.13'de gösterildiği gibidir.

$$V_{KS}[n] = V_{dış}(r) + V_H(r) + V_{dte}(r) \quad (3.13)$$

Denklemde  $V_{dış}(r)$  elektronların hareket ettiği potansiyeli olup,  $V_{dte}$  bilinmeyen bir değiş tokuş etkileşim potansiyeli,  $V_H(r)$  Coulomb potansiyelini ifade etmektedir.

$V_{dte}$  ifadesi denklem 3.14'te gösterilen şekilde yazılabilir [49].

$$V_{dte} = \frac{\partial E_{dte}[n]}{\partial n(r)} \quad (3.14)$$

Birbiriyle etkileşmediği kabul edilen elektronların dalga fonksiyonları  $\phi_j(r), (j=1,2,3,\dots,N)$  olmak üzere Kohn-Sham eşitlikleri olarak bilinen denklemler aşağıda verilen denklemler gibi yazılabilir [56]:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{KS}(r) \right] \phi_j(r) = \epsilon_j \phi_j(r) \quad (3.15)$$

$$n(r) = \sum_{j=1}^N |\phi_j(r)|^2 \quad (3.16)$$

Denklem 3.15'in parantez içindeki ifadesi Kohn-Sham denklemini ifade ederken 3.16 denklemini dalga fonksiyonuna bağlı olarak yazılan temel hal elektronik

yük yoğunluğunu ifade eder. Bu denklemlerin en önemli özelliği kendi kendilerini doğrulayabilmeleridir. Taban durumu toplam enerji hesabı denklem 3.14 ve 3.15’de verilen Khon-Sham denklemleri kullanılır [57, 58].

### **3.9. Quantum Espresso**

Quantum Espresso malzeme modellemesi ve elektronik yapı hesaplamaları için yoğunluk-fonksiyonel teoriye, düzlem dalgalara ve sözde-potansiyellere (ultrasoft, norm-koruyucu ve projektör ile arttırılmış dalga) dayalı entegre bir bilgisayar kodları paketidir. ESPRESSO kısaltması, Elektronik Yapı, Simülasyon ve Optimizasyonda Araştırma İçin Açık Kaynak Paketi anlamına gelir. Genel Kamu Lisansı (GNU) koşulları altında dünya genelindeki araştırmacılarca ücretsiz olarak erişilebilir [59].

Quantum Espresso, yeni elektronik yapı algoritmalarının orijinal yazarlarından bazıları tarafından geliştirilen ve test edilen ve son yirmi yılda dünya çapında öncü malzeme modelleme grupları tarafından uygulanan yeni yapılandırılmış elektronik yapı kodları üzerine kuruludur. Yenilik ve verimlilik hala temel odak noktasıdır. Büyük ölçüde paralel mimarilere özel önem verilmiş ve kullanıcı dostu olma çabası içindedir. Quantum Espresso, elektronik yapı hesaplamaları alanında aktif olan araştırmacıların, kendi kodlarını kullanarak veya kendi uygulamalarını kullanarak projeye katılmaya teşvik edildikleri, açık kaynaklı bir proje ruhu içinde bağımsız ve birlikte çalışabilir kodların dağıtımına doğru ilerlemektedir [59].

## 4. BULGULAR VE TARTIŞMA

Bölüm 3’de; BDGH’den, nasıl çalıştığından, TiO<sub>2</sub> kristal yapısına, Sn, Ca, Mg ve Al gibi değişik atomların katılarak değişik BDGH’leri oluşturulduğundan bahsedildi. Genel olarak, elektronik bant yapısı, sözde potansiyel, durum yoğunluğu ve toplam enerjilerden bahsedildi. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisini kullanarak BDGH’nin bu özelliklerinin analizleri Quantum Espresso paket programı aracılığı ile yapılmıştır.

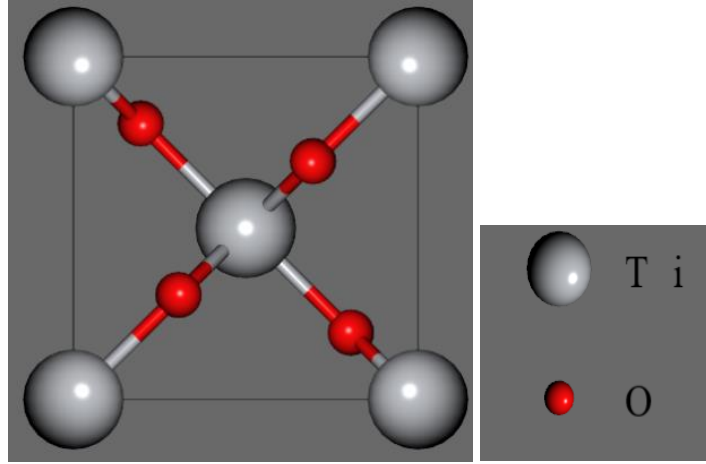
Bu bölümde, TiO<sub>2</sub> kristal yapısından türetilerek, TiO<sub>2</sub>Sn, TiO<sub>2</sub>Ca, TiO<sub>2</sub>Mg, TiO<sub>2</sub>Al ve TiO<sub>2</sub>Sn<sub>2</sub>, TiO<sub>2</sub>Ca<sub>2</sub>, TiO<sub>2</sub>Mg<sub>2</sub>, TiO<sub>2</sub>Al<sub>2</sub> kristal yapılarının, bant yapısı, sözde potansiyelleri, durum yoğunlukları ve toplam enerjileri Quantum Espresso paket programı ile hesaplanan ayrıntılar verilecektir. Kullanılan elementlerin sözde potansiyelleri Çizelge 4.1’de verilmiştir.

Çizelge 4.1 Kullanılan elementlerin sözde potansiyelleri

Atom	Sözde Potansiyel
Ti	Ti.pbe-sp-vanak.UPF
O	O.pbe-rrkjus.UPF
Al	Al.pbe-rrkj.UPF
Mg	Mg.pbe-spni-rrkjuspl.1.0.0.UPF
Sn	Sn.pbe-dn-rrkjuspl.1.0.0.UPF
Ca	Ca.pbe-nsp-van.UPF

Bu çalışmada, TiO<sub>2</sub> tabanı üzerine Sn, Ca, Mg ve Al elementleri ayrı ayrı absorbe edildi ve elektronik bant aralığı, durum yoğunluğu ve toplam enerjisi incelendi.

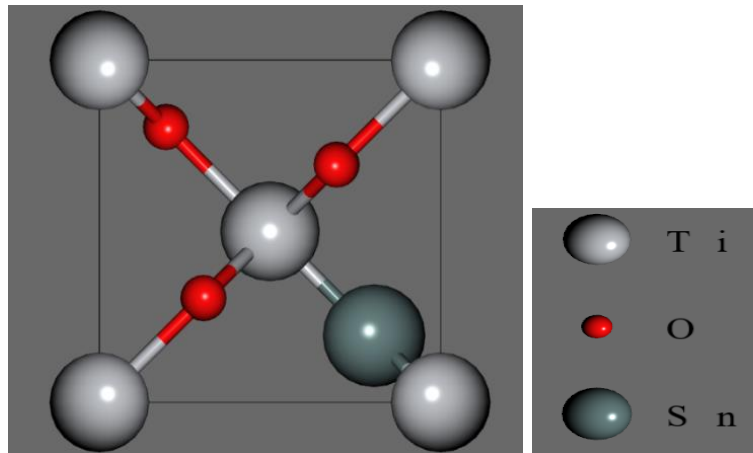
Şekil 4.1’e bakıldığında köşelerde bulunan büyük küreler titanyum elementlerini ve içteki küçük kırmızı renkteki kürelerin ise oksijen elementlerini temsil ettiğini görürüz.



Şekil 4.1 TiO<sub>2</sub> kristalinin atomik yapısının şematik gösterilmesi.

#### 4.1. Kalay Katkılanmış TiO<sub>2</sub> Kristal Yapının Fiziksel Özellikleri

TiO<sub>2</sub> kristal tabanındaki oksijen elementlerinden birinin yerine bir tane kalay (Sn) elementi eklendiğinde, yeni kristal yapının görünümü Şekil 4.2'deki gibi olduğu görülmektedir. Sn elementi şekilden de görüldüğü üzere TiO<sub>2</sub> bileşiğine absorbe edilerek yeni bir kristal yapıya (TiO<sub>2</sub>Sn) kavuşturulmuş oldu. TiO<sub>2</sub>Sn yapısı TiO<sub>2</sub> yapısından farklı olup bunun BDGH için kullanışlı olup olmadığını incelemek için bazı fiziksel özelliklerinin (elektronik bant yapısı, durum yoğunluğu ve toplam enerjisi) analizleri yapılarak incelenmiştir.



Şekil 4.2 TiO<sub>2</sub> tabanına Sn elementinin eklenmesi ile oluşan kristal yapının atomik yapısı görünmektedir.



TiO<sub>2</sub>Sn yapısının Quantum Espresso paket programı ile analizlerinin yapılabilmesi için ilk adım olarak sahip olduğu bazı sözde potansiyellerin ve sağlamaları gereken koşulların belirlenmesi gerekmektedir.

Çizelge 4.2 TiO<sub>2</sub>Sn kristalinin sözde potansiyelleri ve koşulları.

Potansiyel	Koşul
P.P Typ	USPP
XC FUNCTIONAL	PBE
CUTOFF OF W.F.	47.074 Ry
CUTOFF OF CHARGE	249.909 Ry

Bu çalışmada, Çizelge 4.2'den de görüleceği üzere bazı sözde potansiyel tipleri ve onları sınırlandıran bazı koşullar seçilmiştir. P.P Typ potansiyeli için sınırlandırılmış sözde potansiyel (USPP) şartı kullanılacaktır.

Değiş tokuş fonksiyoneli (XC FUNCTIONAL) potansiyeli için Perdew Burke Ernzerhof (PBE) koşulu kullanılacaktır.

Kesme dalga fonksiyonu (CUTOFF OF W.F.) için 47.074 Ry koşulu kullanılacaktır.

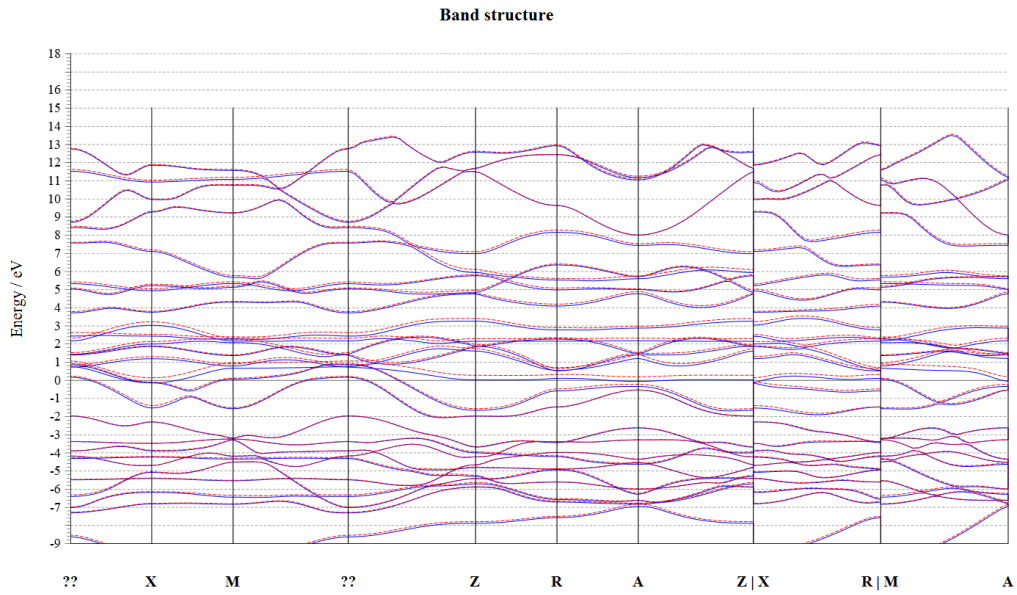
Kesme yük değeri (CUTOFF OF CHARGE) için ise de 249.909 Ry şartı kullanılacaktır.

TiO<sub>2</sub>Sn kristal yapısında bulunan atomların uzaysal konumları üç boyutlu olarak Çizelge 4.3'de görülmektedir.

Çizelge 4.3 TiO<sub>2</sub>Sn kristal yapısının atomik yapılarının uzaysal koordinatları

ELEMENT	UZAYSAL KOORDİNATLAR		
	X	Y	Z
Ti	0.000000	0.000000	0.000000
Ti	2.325892	2.325892	1.484957
O	3.233404	3.233404	0.000000
O	0.907512	3.744272	1.484957
O	1.418380	1.418380	0.000000
Sn	3.744272	0.907512	1.484957

TiO<sub>2</sub>Sn kristalinin elektronik bant yapısı; enerji gösterimi Şekil 4.3'de görüldüğü gibidir.

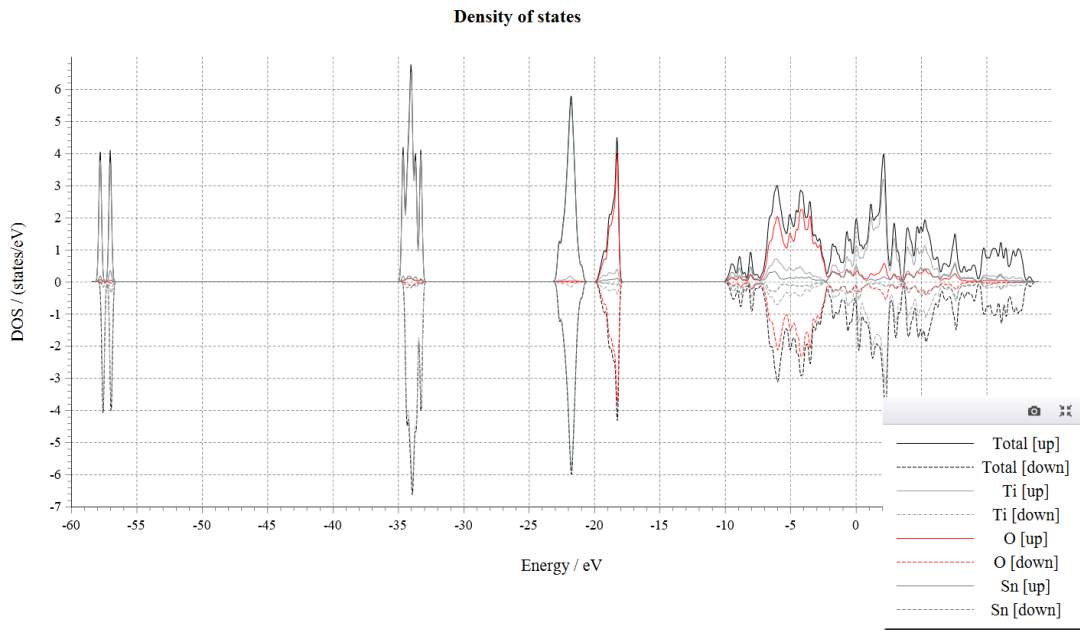
Şekil 4.3 TiO<sub>2</sub>Sn kristal yapısında bant aralığı ve enerji dağılımı görünmektedir.

Şekil 4.3, TiO<sub>2</sub>Sn kristal yapısının enerjisinin simetri noktalarına göre dağılım ve bant grafiğidir. Grafiğin Y eksenini yapının enerjisine karşılık gelirken, X eksenini ise Brillouin bölgesindeki farklı simetri noktalarına karşılık gelir. İletim bandının

minimum noktası 13.5 eV, valans bandının maksimum noktası -7 eV olarak belirlenmiştir. Eğer iletim bandının minimum noktası ile valans bandının maksimum noktası Fermi ( $E=0$  eV'da) noktasında kesişiyorsa bu malzeme iletkenlik özelliği, kesişmeyip yasak enerji aralığının 0-3 eV arasında olması durumunda yarı iletken özellik, 3 eV den fazla olması durumunda yalıtkan özellik göstermektedir.

Şekil 4.3 incelendiğinde iletim bandının minimum noktası ile valans bandının maksimum noktası Fermi ( $E=0$  eV'da) noktasında kesişmediği için bu malzeme yarı iletken özellik göstermektedir. Bu durum ise  $TiO_2$  tabanına Sn elementi eklendiğinde yarı iletken özellik gösterdiği için BDGH'de kullanılabilir bir yapı olduğunu gösterir.

$TiO_2Sn$  kristalinin durum yoğunluğu Şekil 4.4 'de görüldüğü gibi bulunmuştur.



Şekil 4.4.  $TiO_2Sn$  kristal yapısında durum yoğunluğu görünmektedir.

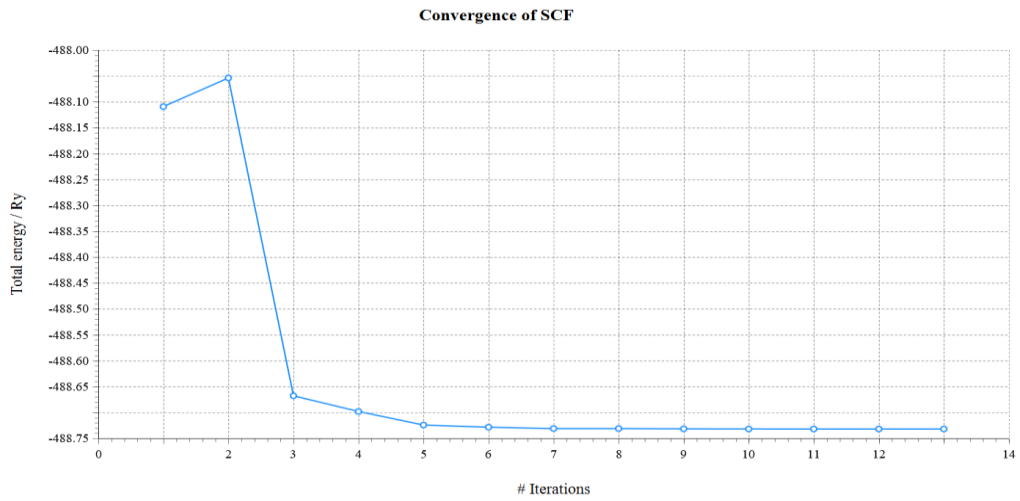
Şekil 4.4'de verilen grafiğin Y eksenini durum yoğunluğuna karşılık gelirken X eksenini enerjiye denk gelir. Elementlerin hangi enerjiler arasında maksimum katkı sağladığını görebilmek için bileşiğin durum yoğunluk grafikleri incelenmelidir.

Şekil 4.4 daha yakından incelendiğinde Çizelge 4.4'de verilen enerjiler arasında toplam durum yoğunluğuna maksimum katkıların hangi elementlerden geldiğini görmüş oluruz.

Çizelge 4.4 TiO<sub>2</sub>Sn kristal yapısında toplam durum yoğunluğuna maksimum enerji veren elementler.

ENERJİ(eV)	Sn	Ti	O
-57 ile -58	✓		
-33 ile -35	✓		
-21 ile -23		✓	
-18 ile -20			✓
-7,5 ile -10	✓		
-2 ile -7,5			✓
-2,5 ile 3		✓	
3 ile 7		✓	
7 ile 9,5	✓		
9,5 ile 13,5		✓	

TiO<sub>2</sub>Sn kristal yapısında toplam enerji dağılımı Şekil 4.5’de gösterildiği gibidir.



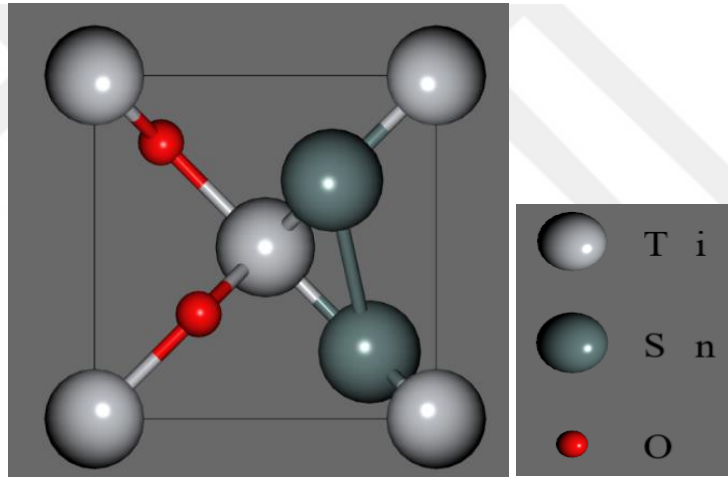
Şekil 4.5. TiO<sub>2</sub>Sn kristal yapısının toplam enerjisi görünmektedir.

Şekil 4.5’de verilen grafikte Y eksenini toplam enerjiye karşılık gelirken X eksenini iterasyon eksenine karşılık gelir. Toplam enerji grafiği enerjinin adım sayısına

göre yaklaşıklık grafiğidir. Grafiğe göre enerjinin maksimum olduğu nokta 2. adım minimum olduğu nokta ise 7. adım olarak görülmektedir. Enerjinin minimum olması bileşiğin en kararlı olduğu noktayı göstermektedir. Buna göre 7. adımdan sonra bileşik kararlı hale gelmiştir. Yapılan hesaplarda 7. adımdan sonraki adımları dahil etmek gereksizdir. Hesaplama yapılırken 7. adıma kadar olan kısımlar dahil edilmiştir. Böylece hesaplama zamanından tasarruf edilmiş, kullanılan bilgisayara gereksiz yere bilgi depo edilmemiştir.

Benzer analizleri,  $TiO_2$  tabanına bir kalay (Sn) atomuna ek olarak bir Sn atomu daha ekleyerek yapmak ve sonuçlarını karşılaştırmak istedik. Buradan itibaren, iki tane kalay (Sn) atomunun analizleri yapılacaktır.

İki Sn atomunun eklendiğindeki kristal yapının şematik gösterimi Şekil 4.6'da görüldüğü gibidir.



Şekil 4.6  $TiO_2$  tabanına iki Sn elementinin eklenmesi ile oluşan kristal yapının atomik yapısı görünmektedir.

Şekil 4.6'dan da görüleceği üzere  $TiO_2$  yapısında bulunan O elementlerinden iki tanesi çıkarılıp onların yerine iki tane Sn atomu eklenmiştir. Köşelerde bulunan küreler Ti elementini, aradaki kırmızı renkli (küçük) küreler O atomlarını, Ti ile O atomları arası büyüklükteki atomlar ise Sn atomlarını göstermektedir.

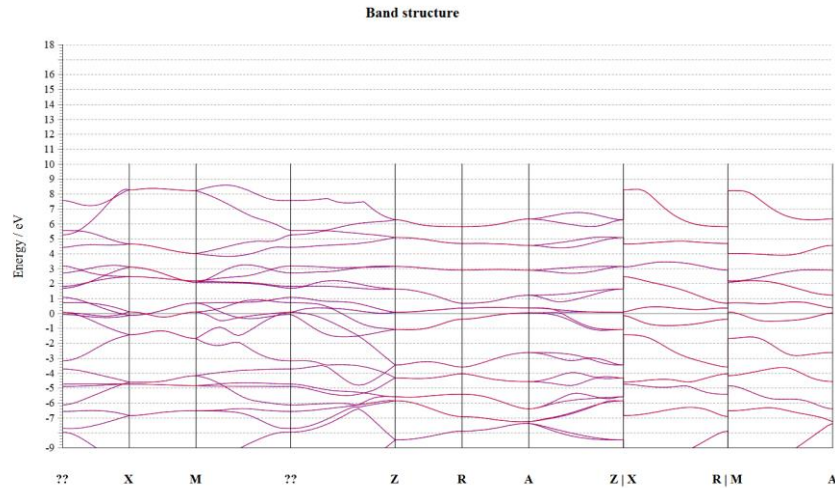
$TiO_2Sn_2$  kristal yapının sözde potansiyel tipleri ve sağlaması gereken koşullar Çizelge 4.2 verilen ile aynıdır.

TiO<sub>2</sub>Sn<sub>2</sub> kristal yapısında bulunan atomların uzaysal konumları üç boyutlu olarak Çizelge 4.5’de görülmektedir.

Çizelge 4.5 TiO<sub>2</sub>Sn<sub>2</sub> kristal yapısının atomik yapılarının uzaysal koordinatları.

ELEMENT	UZAYSAL KOORDİNATLAR		
	X	Y	Z
Ti	0.000000	0.000000	0.000000
Ti	2.325892	2.325892	1.484957
O	3.233404	3.233404	0.000000
O	0.907512	3.744272	1.484957
Sn	1.418380	1.418380	0.000000
Sn	3.744272	0.907512	1.484957

TiO<sub>2</sub>Sn<sub>2</sub> bileşiğinin elektronik bant yapısı; enerji gösterimi aşağıda görülen Şekil 4.7’de görüldüğü gibidir.

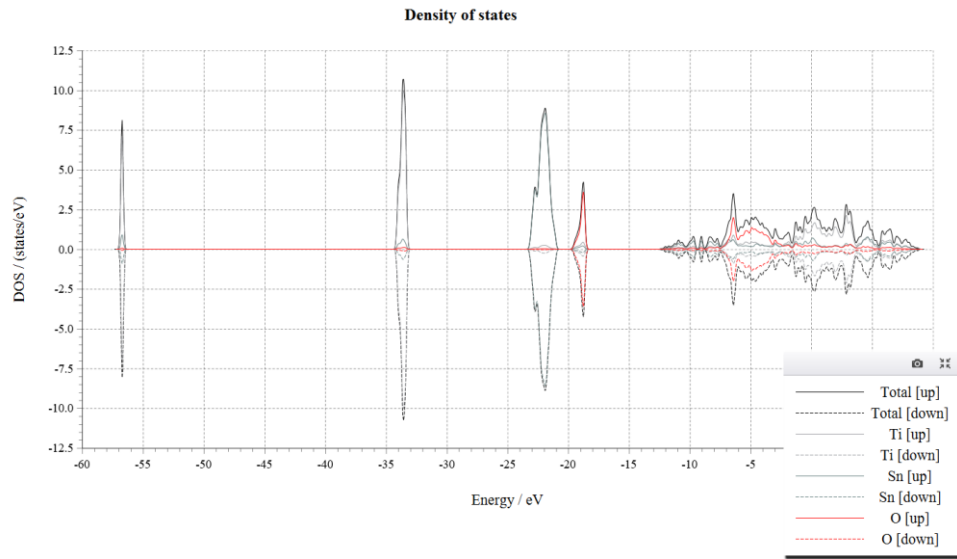


Şekil 4.7. TiO<sub>2</sub>Sn<sub>2</sub> kristal yapısında bant aralığı ve enerji dağılımı görünmektedir.

Şekil 4.7 incelendiğinde iletim bandının minimum noktası ile valans bandının maksimum noktası Fermi (E=0 eV’da) noktasında kesiştiği için bu malzeme iletken özellik göstermektedir. Bu durum ise TiO<sub>2</sub> tabanına iki tane Sn elementi eklendiğinde

yarı iletken özellik göstermediği için BDGH’de kullanılmayacak bir yapı olduğunu gösterir.

TiO<sub>2</sub>Sn<sub>2</sub> için durum yoğunluğu Şekil 4.8’de görüldüğü gibi bulunmuştur. Şekil 4.8 daha yakından incelendiğinde Çizelge 4.6’de verilen enerjiler arasında toplam durum yoğunluğuna maksimum katkıların hangi elementlerden geldiğini görmüş oluruz.

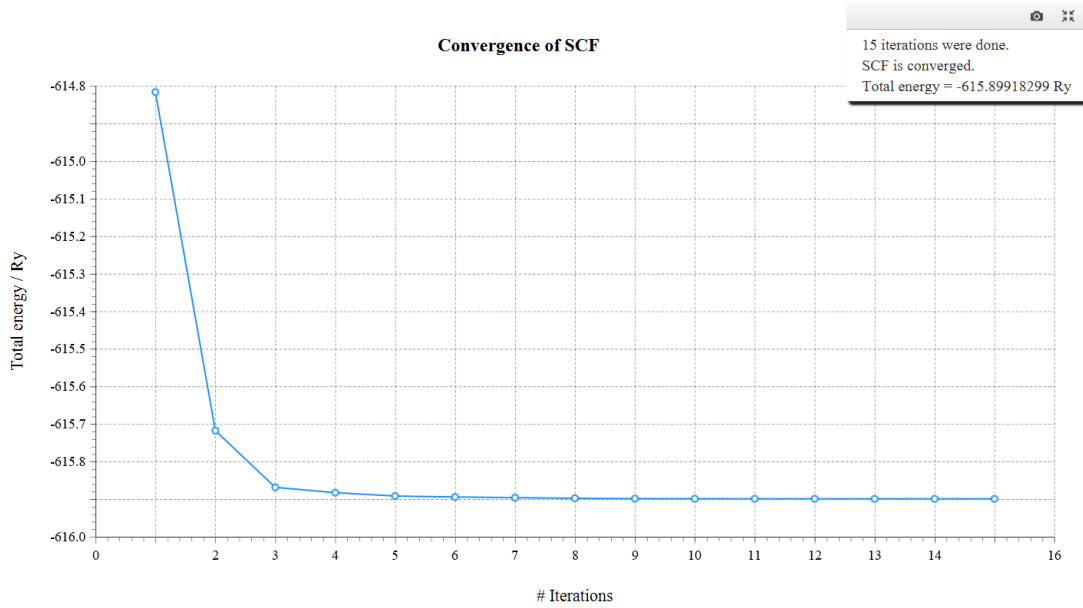


Şekil 4.8 TiO<sub>2</sub>Sn<sub>2</sub> kristal yapısında durum yoğunluğu görünmektedir.

Çizelge 4.6 TiO<sub>2</sub>Sn<sub>2</sub> kristal yapısında toplam durum yoğunluğuna maksimum enerji veren elementler.

ENERJİ(eV)	Sn	Ti	O
-56,5 ile -57,5	✓		
-33 ile -34	✓		
-18 ile -19,5			✓
-13,5 ile -11,5	✓		
-11,5 ile -9	✓		
-9 ile -8	✓		
-8 ile -7	✓		
-7 ile -2			✓
-2 ile 3,5		✓	
3,5 ile 5,5	✓		
5,5 ile 9		✓	

TiO<sub>2</sub>Sn kristal yapısında toplam enerji dağılımı Şekil 4.9'da gösterildiği gibidir. Şekil 4.9'da verilen grafikte Y eksenini toplam enerjiye karşılık gelirken X eksenini iterasyon eksenine karşılık gelir. Şekil 4.9 incelendiğinde 6. adımdan sonra bileşik kararlı hale gelmiştir. Yapılan hesaplamalarda 6. adımdan sonraki adımları dahil edilmemiştir. Böylece hesaplama zamanından tasarruf edilmiş, kullanılan bilgisayara gereksiz yere bilgi depo edilmemiştir.

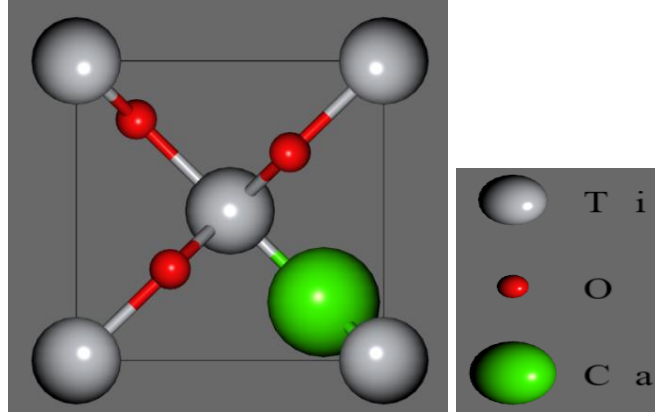


Şekil 4.9. TiO<sub>2</sub>Sn<sub>2</sub> kristal yapısının toplam enerjisi görünmektedir.

#### 4.2. Kalsiyum Katkılanmış TiO<sub>2</sub> Kristal Yapının Fiziksel Özellikleri

TiO<sub>2</sub> kristal tabanında bu defa oksijen elementlerinden birinin yerine bir tane Ca elementi eklendiğinde, yeni kristal yapının görünümü Şekil 4.10'daki gibi olduğu görülmektedir. Ca elementi şekilden de görüldüğü üzere TiO<sub>2</sub>Sn yapısında da yapıldığı gibi yeni bir kristal yapıya (TiO<sub>2</sub>Ca) kavuşturulmuş oldu. TiO<sub>2</sub>Ca yapısının BDGH için kullanışlı olup olmadığını incelemek için TiO<sub>2</sub>Sn yapısında yapılan analizler yapılarak incelenmiştir.





Şekil 4.10 TiO<sub>2</sub> tabanına Ca elementinin eklenmesi ile oluşan kristal yapının atomik yapısı görünmektedir.

Şekil 4.10'dan da görüleceği üzere TiO<sub>2</sub> yapısında bulunan O elementlerinden bir tanesi çıkarılıp onun yerine bir tane Ca atomu eklenmiştir. Köşelerde bulunan küreler Ti atomlarını, aradaki kırmızı renkli (küçük) küreler O atomlarını, Ti atomlarından büyük atom ise Ca atomunu göstermektedir.

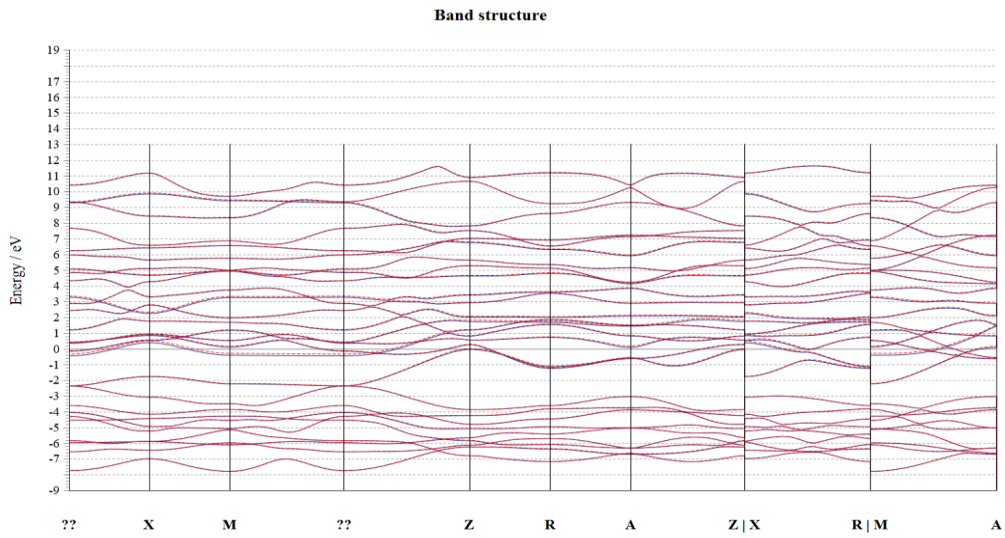
Çizelge 4.7 TiO<sub>2</sub>Ca kristalinin sözde potansiyelleri ve şartları.

Potansiyel	Koşul
P.P Typ	USPP
XC FUNCTIONAL	PBE
CUTOFF OF W.F.	25.000 Ry
CUTOFF OF CHARGE	225.000 Ry

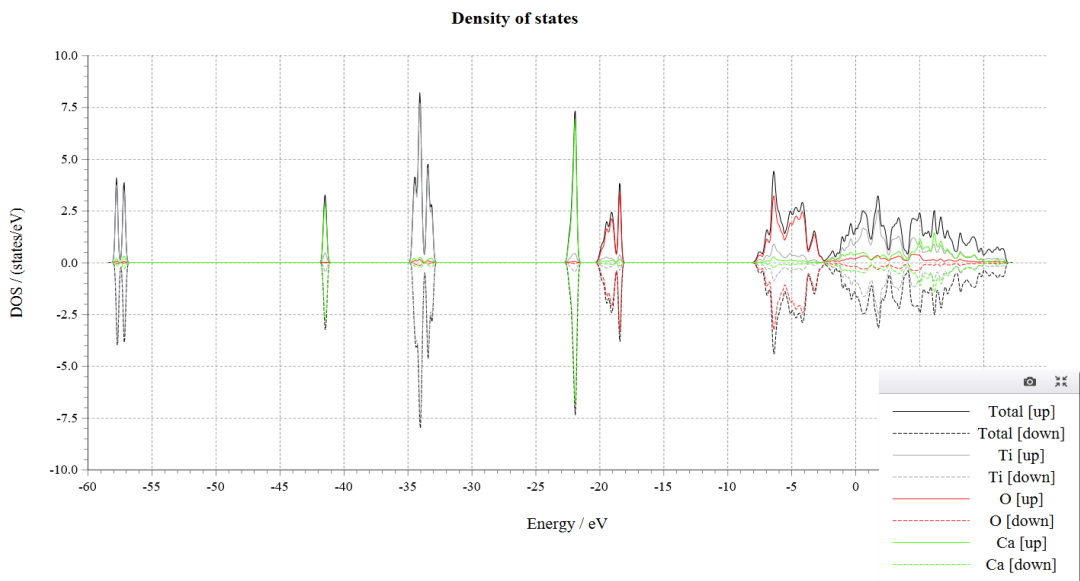
Çizelge 4.7'den de görüleceği üzere TiO<sub>2</sub>Sn kristalinde (Çizelge 4.2) kullanılan sözde potansiyeller ile aynıdır. Kesme dalga fonksiyonu (CUTOFF OF W.F.) ve Kesme yük değeri (CUTOFF OF CHARGE) için kullanılan koşullar değişmiştir. Kesme dalga fonksiyonu (CUTOFF OF W.F.) için 25.000 Ry koşulu, Kesme yük değeri (CUTOFF OF CHARGE) için ise de 225.000 Ry şartı kullanılacaktır.

Çizelge 4.3'te TiO<sub>2</sub>Sn kristal yapısındaki Sn atomunun bulunduğu uzaysal koordinat yerine Ca atomu eklenmiştir. Çizelge 4.3'deki uzaysal koordinatlar bu bölümde de geçerlidir.

TiO<sub>2</sub>Ca kristalinin elektronik bant yapısı; enerji gösterimi Şekil 4.11’de görüldüğü gibidir. Şekil 4.11 incelendiğinde iletim bandının minimum noktası ile valans bandının maksimum noktası Fermi (E=0 eV’da) noktasında kesiştiği için bu malzeme iletken özellik göstermektedir. Bu durum ise TiO<sub>2</sub> tabanına Ca elementi eklendiğinde yarı iletken özellik göstermediği için BDGH’de kullanılmayacak bir yapı olduğunu gösterir.



Şekil 4.11 TiO<sub>2</sub>Ca kristal yapısında bant aralığı ve enerji dağılımı görünmektedir.



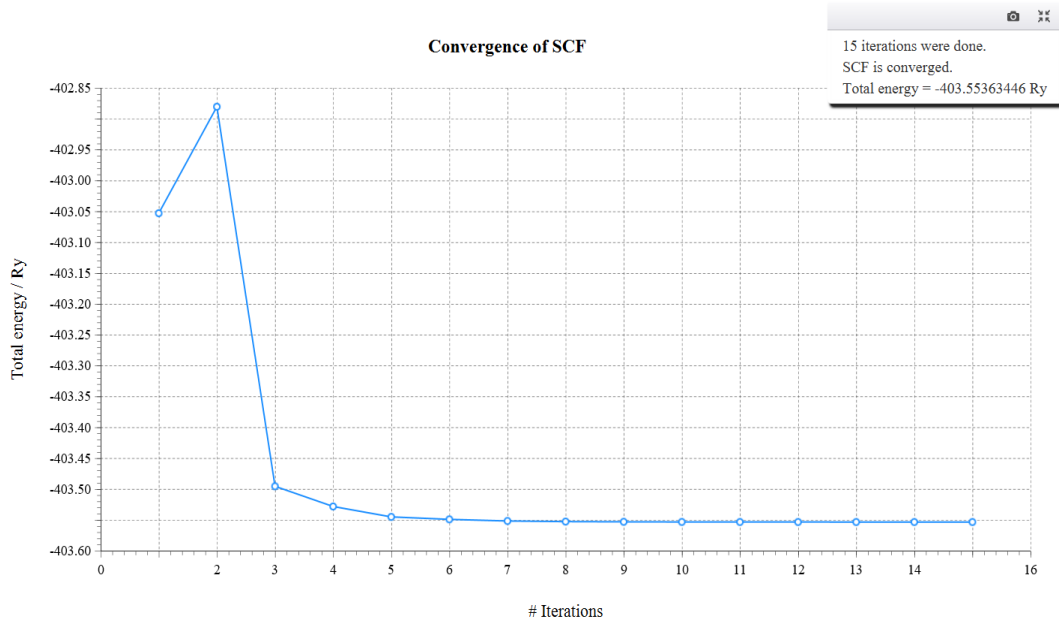
Şekil 4.12 TiO<sub>2</sub>Ca kristal yapısında durum yoğunluğu görünmektedir.

TiO<sub>2</sub>Ca için durum yoğunluğu ise aşağıdaki Şekil 4.12’de gösterildiği gibi bulunmuştur. Şekil 4.12 daha yakından incelendiğinde Çizelge 4.8’de verilen enerjiler arasında toplam durum yoğunluğuna maksimum katkıların hangi elementlerden geldiğini görmüş oluruz.

Çizelge 4.8 TiO<sub>2</sub>Ca kristal yapısında toplam durum yoğunluğuna maksimum enerji veren elementler.

ENERJİ	Ca	Ti	O
-58,5 ile -57	✓		
-42 ile -41	✓		
-35 ile -33	✓		
-22,5 ile -21,5	✓		
-20 ile -18			✓
-8 ile -2,5			✓
-2,5 ile 4		✓	
4 ile 12	✓		

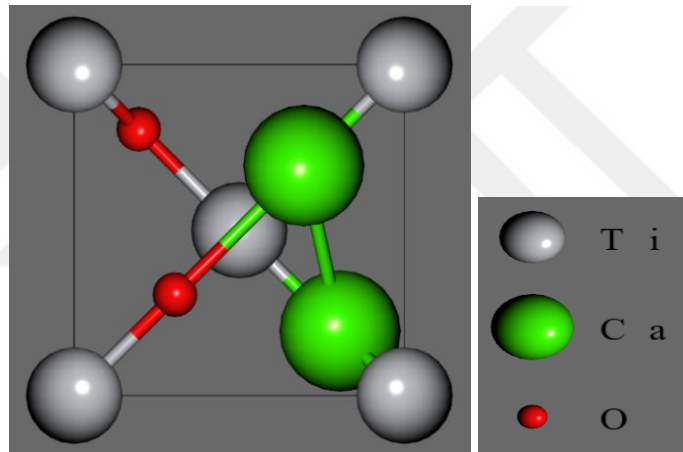
TiO<sub>2</sub>Ca kristal yapısında toplam enerji dağılımı Şekil 4.13’de gösterildiği gibidir.



Şekil 4.13 TiO<sub>2</sub>Ca kristal yapısının toplam enerjisi görünmektedir.

Şekil 4.13’de verilen grafikte Y eksenini toplam enerjiye karşılık gelirken X eksenini iterasyon eksenine karşılık gelir. Şekil 4.13 incelendiğinde 6. adımdan sonra bileşik kararlı hale gelmiştir. Yapılan hesaplarda 6. adıma kadar olan bölge dahil edilmiştir, 6. adımdan sonraki adımları işleme dahil etmek gereksizdir. Böylece hem hesaplama zamanından tasarruf edilmiş hem de kullanılan bilgisayara gereksiz yere bilgi depo edilmemiştir.

Benzer analizleri,  $TiO_2$  tabanına iki Ca atomu ekleyerek yaptık ve karşılaştırdık. Buradan itibaren, iki tane Ca atomunun analizleri yapılacaktır.  $TiO_2$  tabanına iki Ca atomu eklendiğinde oluşan kristal yapının şematik gösterimi Şekil 4.14’de görüldüğü gibidir.

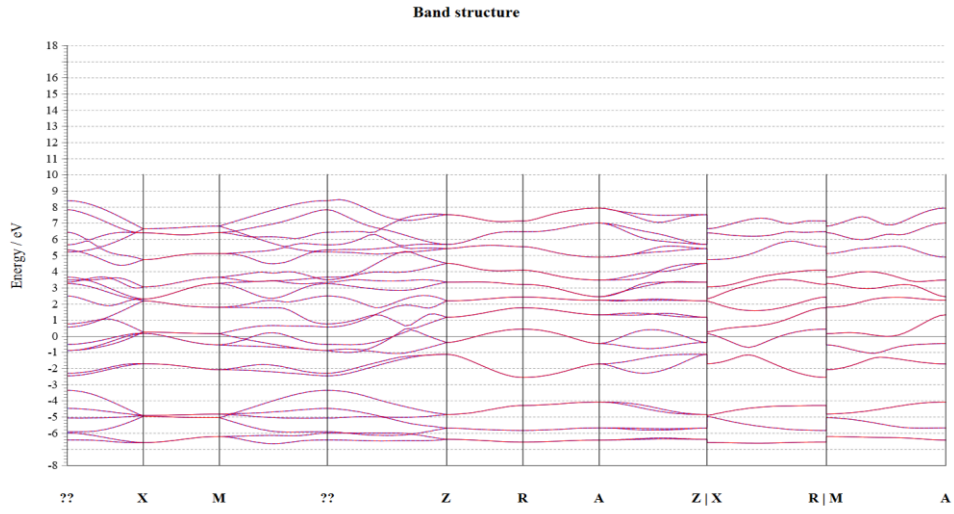


Şekil 4.14  $TiO_2$  tabanına iki tane Ca elementinin eklenmesi ile oluşan kristal yapının atomik yapısı görünmektedir.

Şekil 4.14’den da görüleceği üzere  $TiO_2$  yapısında bulunan O elementlerinden iki tanesi çıkarılıp onların yerine iki tane Ca atomu eklenmiştir. Köşelerde bulunan küreler Ti atomlarını, aradaki kırmızı renkli (küçük) küreler O atomlarını, Ti atomlarından büyük olan ve yeşil renkteki atomlar ise Ca atomlarını göstermektedir.

Çizelge 4.3’te  $TiO_2Sn$  kristal yapısındaki iki tane O atomunun bulunduğu uzaysal koordinat yerine iki tane Ca atomu eklenmiştir. Çizelge 4.3’deki uzaysal koordinatlar bu bölümde de geçerlidir.

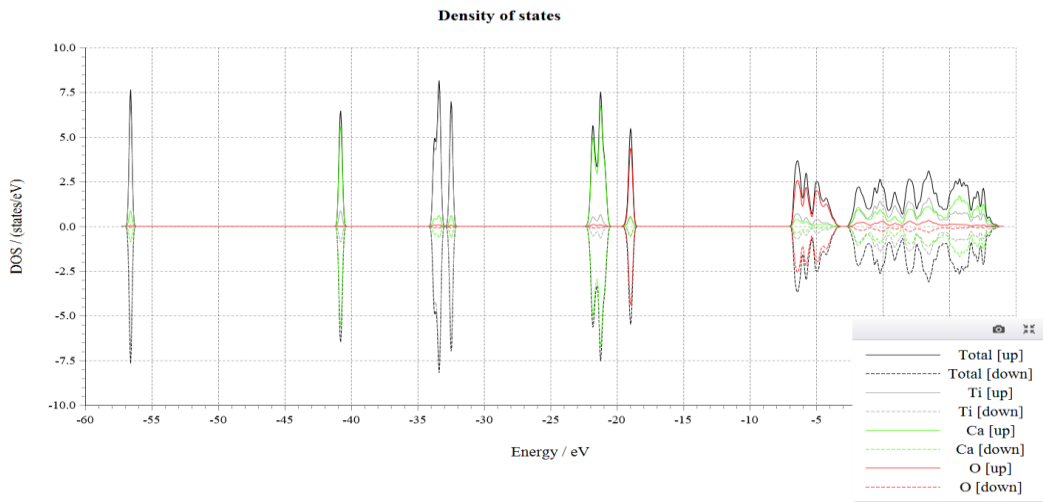
$TiO_2Ca_2$  kristalinin elektronik bant yapısı; enerji gösterimi Şekil 4.15’de görüldüğü gibidir.



Şekil 4.15  $\text{TiO}_2\text{Ca}_2$  kristal yapısında bant aralığı ve enerji dağılımı görünmektedir.

Şekil 4.15 incelendiğinde iletim bandının minimum noktası ile valans bandının maksimum noktası Fermi ( $E=0$  eV'da) noktasında kesiştiği için bu malzeme iletken özellik göstermektedir.  $\text{TiO}_2$  tabanına bir tane Ca elementi eklendiğinde gözlemlenen sonuç ile iki tane eklenmesi ile gözlemlenen sonuç aynıdır.  $\text{TiO}_2$  tabanına bir ya da iki tane Ca elementi eklendiğinde gözlemlenen sonuç BDGH'de kullanılmayacak bir yapı olduğudur.

$\text{TiO}_2\text{Ca}_2$  için durum yoğunluğu ise aşağıdaki Şekil 4.16'da gösterildiği gibi bulunmuştur.



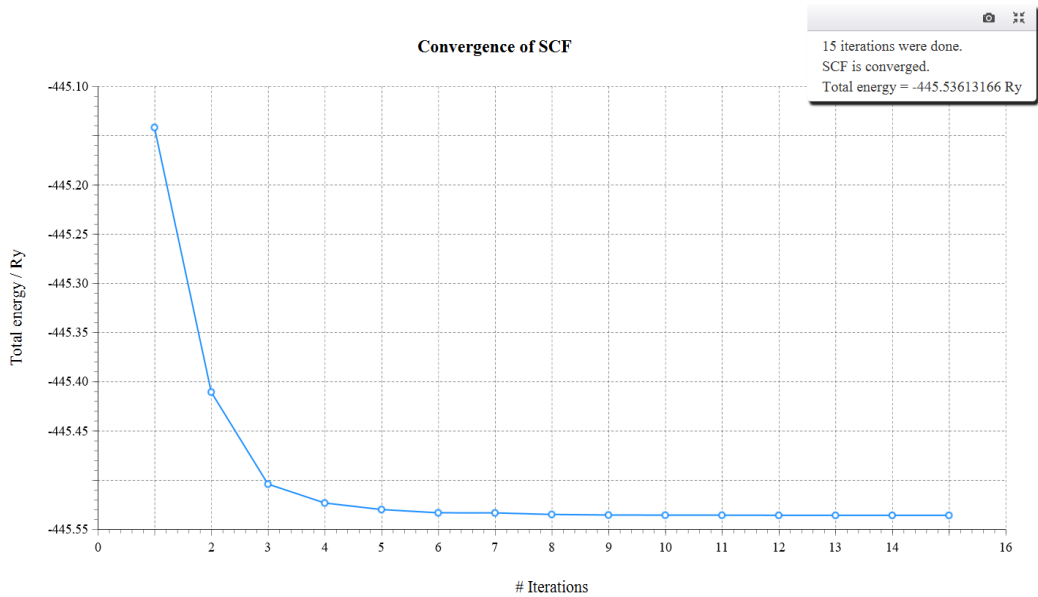
Şekil 4.16  $\text{TiO}_2\text{Ca}_2$  kristal yapısında durum yoğunluğu görünmektedir.

Şekil 4.16 daha yakından incelendiğinde Çizelge 4.9’da verilen enerjiler arasında toplam durum yoğunluğuna maksimum katkıların hangi elementlerden geldiğini görmüş oluruz.

Çizelge 4.9 TiO<sub>2</sub>Ca<sub>2</sub> kristal yapısında toplam durum yoğunluğuna maksimum enerji veren elementler.

ENERJİ	Ca	Ti	O
-57 ile -56,5	✓		
-42,5 ile -41,5	✓		
-34 ile -33		✓	
-33 ile -32		✓	
-22,5 ile -21	✓		
-19,5 ile -18,5			✓
-7 ile -3			✓
-3 ile 4,5		✓	
4,5 ile 8,5	✓		

TiO<sub>2</sub>Ca kristal yapısında toplam enerji dağılımı Şekil 4.17’de gösterildiği gibidir.



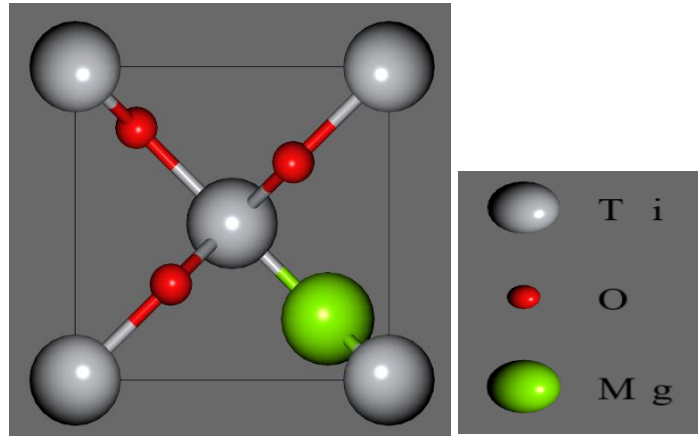
Şekil 4.17 TiO<sub>2</sub>Ca<sub>2</sub> kristal yapısının toplam enerjisi görünmektedir.

Şekil 4.17 incelendiğinde enerjinin minimum olduğu an bileşiğin kararlı olduğu anlamına geldiğinden bileşik 11. adımdan sonra kararlı hale gelmiştir. Bileşiğin kararlı olduğu adımdan sonraki adımlar yapılan hesaplara dahil edilmemiştir. Böylece hesaplama zamanından tasarruf edilmiş ve gereksiz bilgiler kullanılan bilgisayarda depo edilmemiştir.

### 4.3. Magnezyum Katkılanmış $TiO_2$ Kristal Yapının Fiziksel Özellikleri

$TiO_2$  kristal tabanında bu defa oksijen elementlerinden birinin yerine bir tane Mg elementi eklendiğinde, yeni kristal yapının görünümü Şekil 4.18'deki gibi olduğu görülmektedir. Mg elementi şekilden de görüldüğü üzere  $TiO_2Ca$  yapısında da yapıldığı gibi yeni bir kristal yapıya ( $TiO_2Mg$ ) kavuşturulmuş oldu.  $TiO_2Mg$  yapısının BDGH için kullanışlı olup olmadığını incelemek için  $TiO_2Ca$  yapısında yapılan analizler yapılarak incelenmiştir.

$TiO_2$  tabanına bir tane Magnezyum (Mg) eklendiğindeki görünümü aşağıdaki Şekil 4.18'de görüldüğü gibidir.



Şekil 4.18  $TiO_2$  tabanına bir tane Mg elementinin eklenmesi ile oluşan kristal yapının atomik yapısı görünmektedir.

Şekil 4.18'den de görüleceği üzere  $TiO_2$  yapısında bulunan O elementlerinden bir tanesi çıkarılıp onun yerine bir tane Mg atomu eklenmiştir. Köşelerde bulunan küreler Ti atomlarını, aradaki kırmızı renkli (küçük) küreler O atomlarını, sağ alt

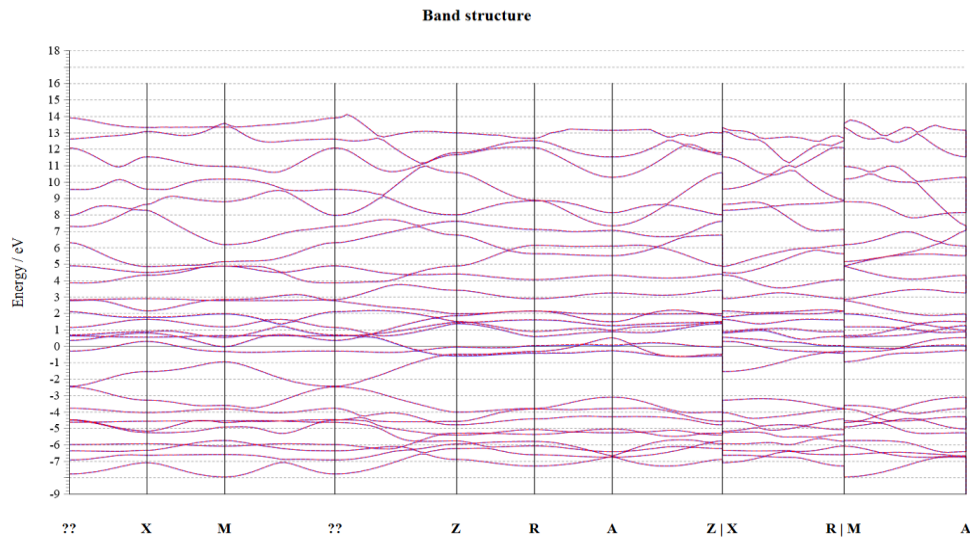
köşede bulunan Ti atomunun yanında olan yeşil renkteki atom ise Mg atomunu göstermektedir.

Çizelge 4.10 TiO<sub>2</sub>Mg kristalinin sözde potansiyelleri ve şartları.

Potansiyel	Koşul
P.P Typ	USPP
XC FUNCTIONAL	PBE
CUTOFF OF W.F.	58.121 Ry
CUTOFF OF CHARGE	385.115 Ry

Çizelge 4.10'dan da görüleceği TiO<sub>2</sub>Ca kristalinde kullanılan sözde potansiyeller ile aynı potansiyeller kullanılmıştır. Kesme dalga fonksiyonu ve Kesme yük değeri koşulları değişmiştir. Kesme dalga fonksiyonu (CUTOFF OF W.F.) için 58.121 Ry koşulu, Kesme yük değeri (CUTOFF OF CHARGE) için ise de 385.115 Ry şartı kullanılacaktır.

Çizelge 4.3'te TiO<sub>2</sub>Sn kristal yapısındaki Sn atomunun bulunduğu uzaysal koordinat yerine Mg atomu eklenmiştir. Çizelge 4.3'teki uzaysal koordinatlar bu bölümde de geçerlidir.

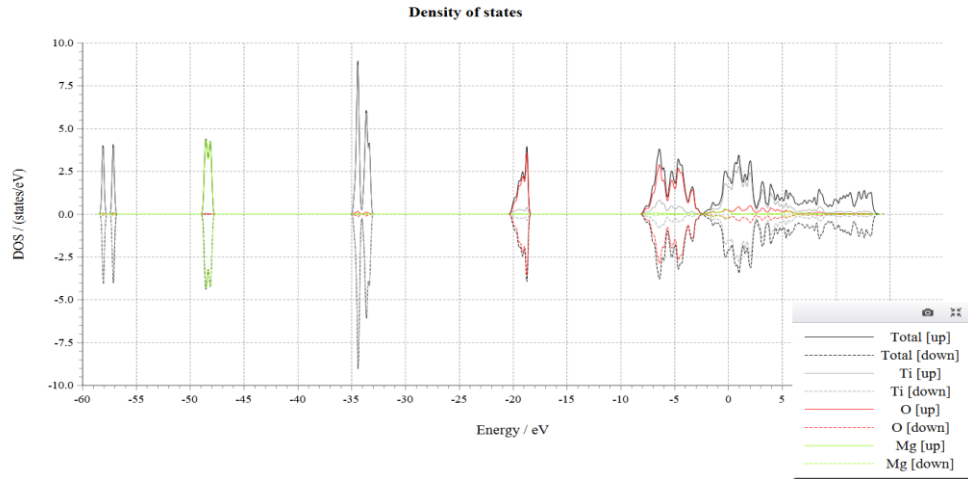


Şekil 4.19 TiO<sub>2</sub>Mg kristal yapısında bant aralığı ve enerji dağılımı görünmektedir.



TiO<sub>2</sub>Mg kristalinin elektronik bant yapısı Şekil 4.19 da gösterildiği gibidir. Şekil 4.19 incelendiğinde iletim bandının minimum noktası ile valans bandının maksimum noktası Fermi (E=0 eV'da) noktasında kesiştiği için bu malzeme iletken özellik göstermektedir. Bu durum ise TiO<sub>2</sub> tabanına Mg elementi eklendiğinde yarı iletken özellik göstermediği için BDGH'de kullanılmayacak bir yapı olduğunu gösterir.

TiO<sub>2</sub>Mg kristalinin durum yoğunluğu ise Şekil 4.20'de gösterildiği gibi bulunmuştur. Şekil 4.20 daha yakından incelendiğinde Çizelge 4.11'de verilen enerjiler arasında toplam durum yoğunluğuna maksimum katkıların hangi elementlerden geldiğini görmüş oluruz.

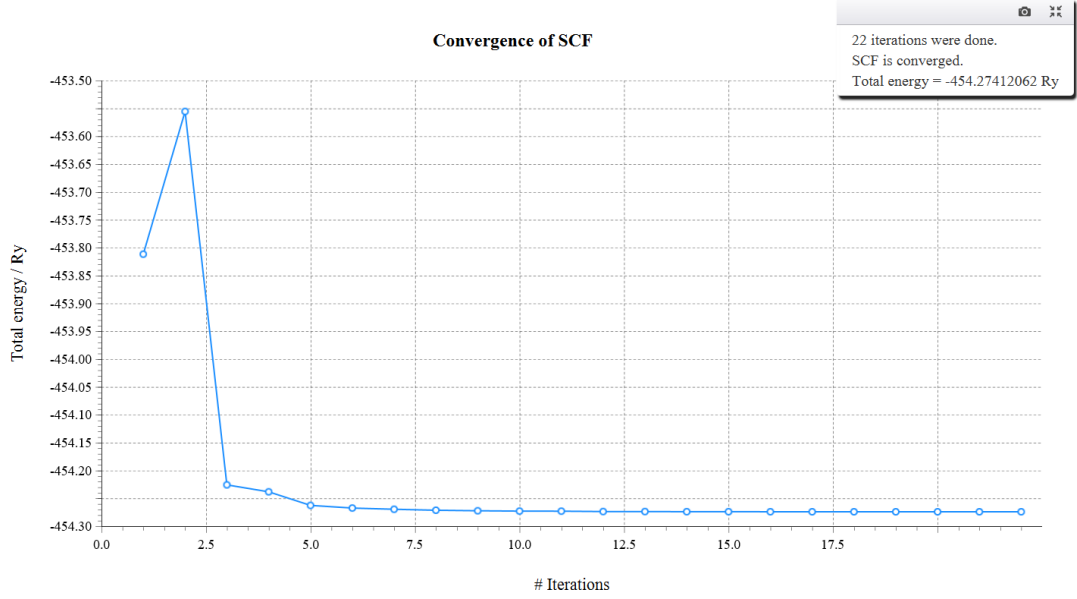


Şekil 4.20 TiO<sub>2</sub>Mg kristal yapısında durum yoğunluğu görünmektedir.

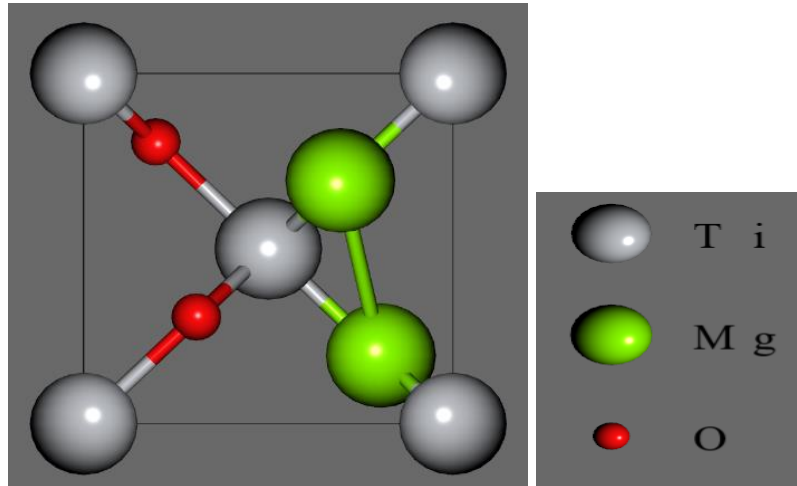
Çizelge 4.11 TiO<sub>2</sub>Mg kristal yapısında toplam durum yoğunluğuna maksimum enerji veren elementler.

ENERJİ(eV)	Mg	Ti	O
-59 ile -57			✓
-49 ile -48	✓		
-35 ile -33			✓
-20 ile -18			✓
-7 ile -2			✓
-2 ile 3		✓	
12 ile 14		✓	

TiO<sub>2</sub>Mg kristal yapısında toplam enerji dağılımı Şekil 4.21’de gösterildiği gibidir. Şekil 4.21 incelendiğinde 7,6. adımdan sonra bileşik kararlı hale gelmiştir. Yapılan hesaplara 7,6. adımdan önceki adımlar dahil edilmiştir. Böylece hesaplama zamanından tasarruf edilmiş, kullanılan bilgisayara gereksiz yere bilgi depo edilmemiştir.



Şekil 4.21 TiO<sub>2</sub>Mg kristal yapısının toplam enerjisi görünmektedir.



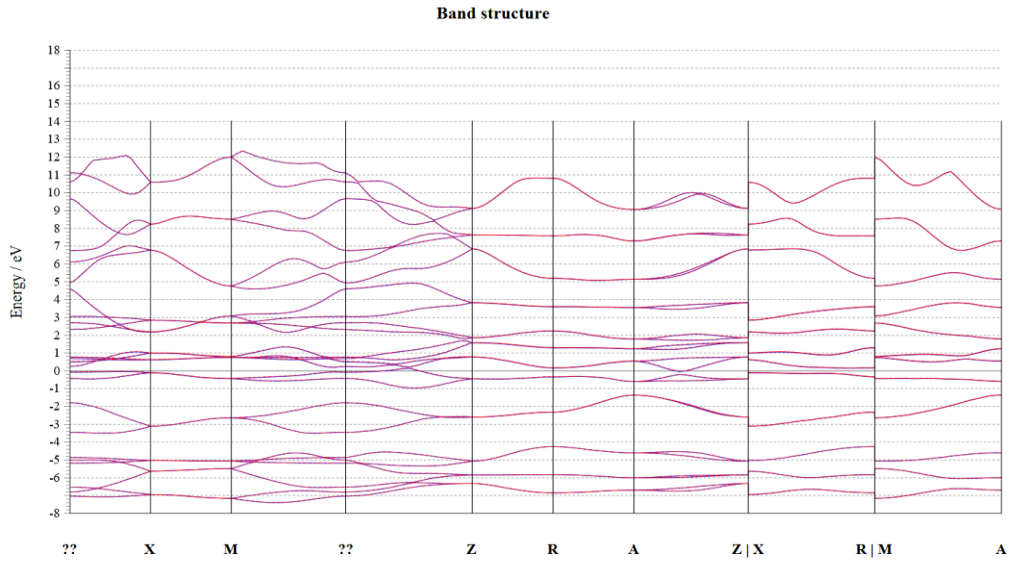
Şekil 4.22 TiO<sub>2</sub> tabanına iki tane Mg elementinin eklenmesi ile oluşan kristal yapının atomik yapısı görünmektedir.

Benzer analizleri,  $\text{TiO}_2$  tabanına iki Mg atomu ekleyerek yaptık ve karşılaştırdık. Buradan itibaren, iki tane Mg atomunun analizleri yapılacaktır. İki Mg atomunun eklendiğindeki kristal yapının şematik gösterimi Şekil 4.22’de görüldüğü gibidir.

Şekil 4.22’den de görüleceği üzere  $\text{TiO}_2$  yapısında bulunan O elementlerinden iki tanesi çıkarılıp onun yerine iki tane Mg atomu eklenmiştir. Köşelerde bulunan küreler Ti atomlarını, aradaki kırmızı renkli (küçük) küreler O atomlarını, iç kısımda bulunan yeşil renkli atomlar ise Mg atomlarını göstermektedir.

Çizelge 4.3’de  $\text{TiO}_2\text{Sn}$  kristal yapısındaki iki tane O atomunun bulunduğu uzaysal koordinat yerine iki tane Mg atomu eklenmiştir. Çizelge 4.3’deki uzaysal koordinatlar bu bölümde de geçerlidir.

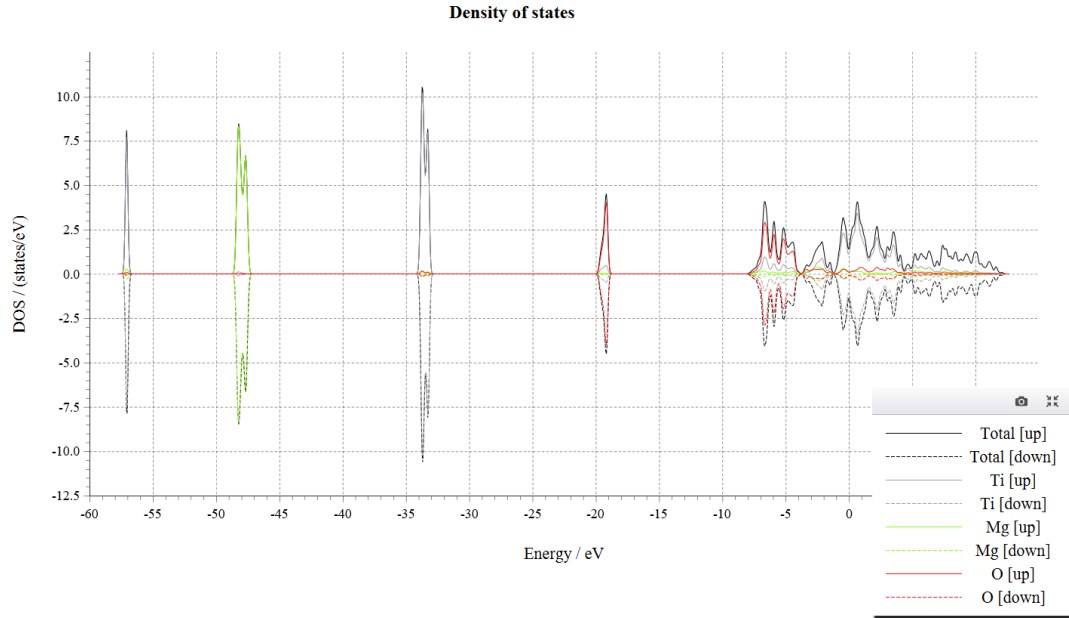
$\text{TiO}_2\text{Mg}_2$  kristalinin elektronik bant yapısı; enerji gösterimi Şekil 4.23’te görüldüğü gibidir.



Şekil 4.23  $\text{TiO}_2\text{Mg}_2$  kristal yapısında bant aralığı ve enerji dağılımı görünmektedir.

Şekil 4.23 incelendiğinde iletim bandının minimum noktası ile valans bandının maksimum noktası Fermi ( $E=0$  eV’da) noktasında kesiştiği için bu malzeme iletken özellik göstermektedir. Bu durum ise  $\text{TiO}_2$  tabanına iki tane Mg elementi eklendiğinde yarı iletken özellik göstermediği için BDGH’de kullanılamayacak bir yapı olduğunu gösterir.

TiO<sub>2</sub>Mg<sub>2</sub> kristalinin durum yoğunluğu ise aşağıdaki Şekil 4.24’de gösterildiği gibi bulunmuştur.



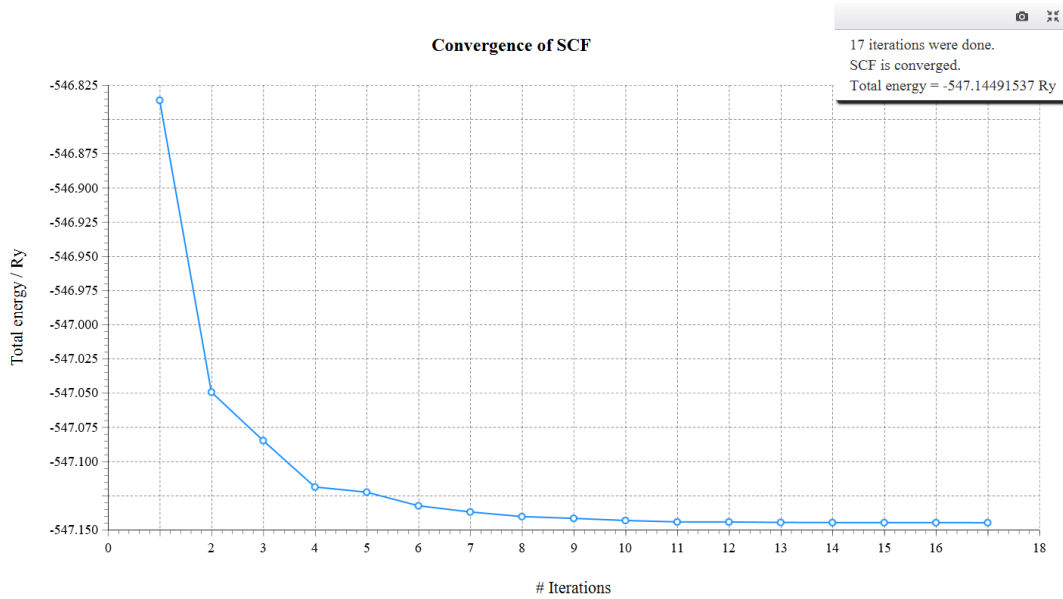
Şekil 4.24 TiO<sub>2</sub>Mg<sub>2</sub> kristal yapısında durum yoğunluğu görünmektedir.

Şekil 4.24 daha yakından incelendiğinde Çizelge 4.12’de verilen enerjiler arasında toplam durum yoğunluğuna maksimum katkıların hangi elementlerden geldiğini görmüş oluruz.

Çizelge 4.12 TiO<sub>2</sub>Mg<sub>2</sub> kristal yapısında toplam durum yoğunluğuna maksimum enerji veren elementler.

ENERJİ (eV)	Mg	Ti	O
-58 ile -57	✓		
-48,5 ile -47,5	✓		
-34 ile -33			✓
-20 ile -18,5			✓
-8 ile -3,5			✓
-3,5 ile -1,5		✓	
-1,5 ile 4		✓	
4 ile 12		✓	

TiO<sub>2</sub>Mg<sub>2</sub> kristal yapısında toplam enerji dağılımı Şekil 4.25’de gösterildiği gibidir. Şekil 4.25’de verilen grafikte Y eksenini toplam enerjiye karşılık gelirken X eksenini iterasyon eksenine karşılık gelir. Şekil 4.25 incelendiğinde 11. adımdan sonra bileşik kararlı hale gelmiştir. Yapılan hesaplamalara 11. adımdan sonraki adımları dahil etmek gereksiz olduğundan 11. adımdan sonraki adımlar dahil edilmemiştir. Böylece hesaplama zamanından tasarruf edilmiş, kullanılan bilgisayara gereksiz yere bilgi depo edilmemiştir.

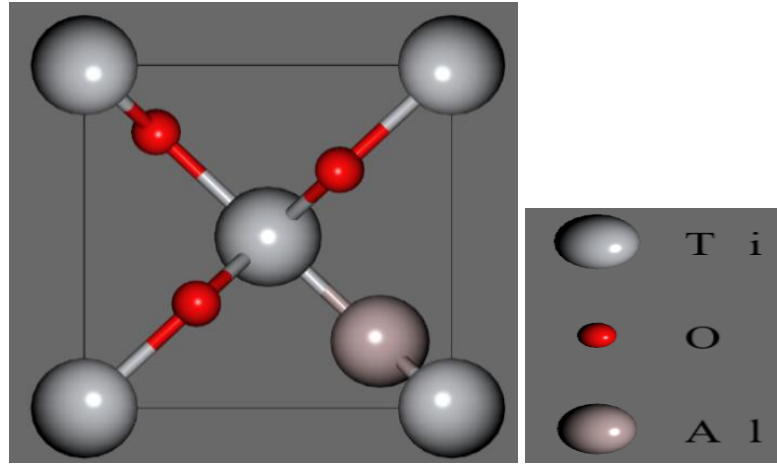


Şekil 4.25 TiO<sub>2</sub>Mg<sub>2</sub> kristal yapısının toplam enerjisi görünmektedir.

#### 4.4. Alüminyum Katkılanmış TiO<sub>2</sub> Kristal Yapının Fiziksel Özellikleri

TiO<sub>2</sub> kristal tabanında bu defa oksijen elementlerinden birinin yerine bir tane Al elementi eklendiğinde, yeni kristal yapının görünümü Şekil 4.26’daki gibi olduğu görülmektedir. Al elementi şekilden de görüldüğü üzere TiO<sub>2</sub>Mg yapısında da yapıldığı gibi yeni bir kristal yapıya (TiO<sub>2</sub>Al) kavuşturulmuş oldu. TiO<sub>2</sub>Al yapısının BDGH için kullanışlı olup olmadığını incelemek için TiO<sub>2</sub>Mg yapısında yapılan analizler yapılarak incelenmiştir.

TiO<sub>2</sub> tabanına bir tane Al atomu eklendiğindeki görünümü aşağıdaki Şekil 4.26’da görüldüğü gibidir.



Şekil 4.26 TiO<sub>2</sub> tabanına bir tane Al elementinin eklenmesi ile oluşan kristal yapının atomik yapısı görünmektedir.

Şekil 4.26'dan da görüleceği üzere TiO<sub>2</sub> yapısında bulunan O elementlerinden bir tanesi çıkarılıp onun yerine bir tane Al atomu eklenmiştir. Köşelerde bulunan küreler Ti atomlarını, aradaki kırmızı renkli (küçük) küreler O atomlarını, iç kısımda bulunan atom ise Al atomlarını göstermektedir.

Çizelge 4.13 TiO<sub>2</sub>Al kristalinin sözde potansiyelleri ve şartları.

Potansiyel	Koşul
P.P Typ	USPP&NCPP
XC FUNCTIONAL	PBE
CUTOFF OF W.F.	25.000 Ry
CUTOFF OF CHARGE	225.000 Ry

Çizelge 4.13'den de görüleceği üzere Çizelge 4.7'de kullanılan sözde potansiyeller aynı olup P.P Typ potansiyeline ek olarak (NCPP) şartı kullanılacaktır.

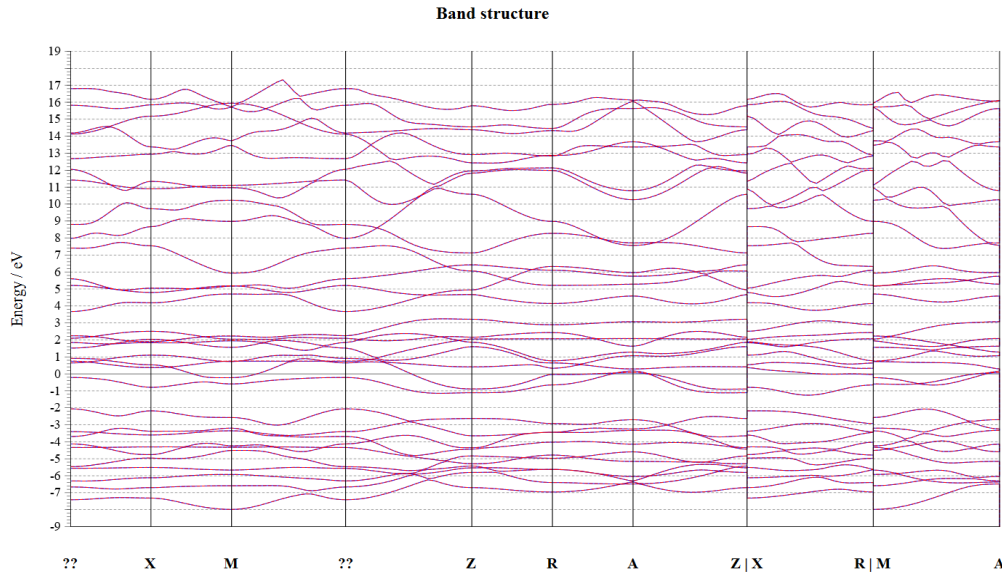
Değiş tokuş fonksiyoneli (XC FUNCTIONAL) potansiyeli için Perdew Burke Ernzerhof (PBE) koşulu kullanılacaktır.

Kesme dalga fonksiyonu (CUTOFF OF W.F.) için 25.000 Ry koşulu kullanılacaktır.

Kesme yük değeri (CUTOFF OF CHARGE) için ise de 225.000 Ry şartı kullanılacaktır.

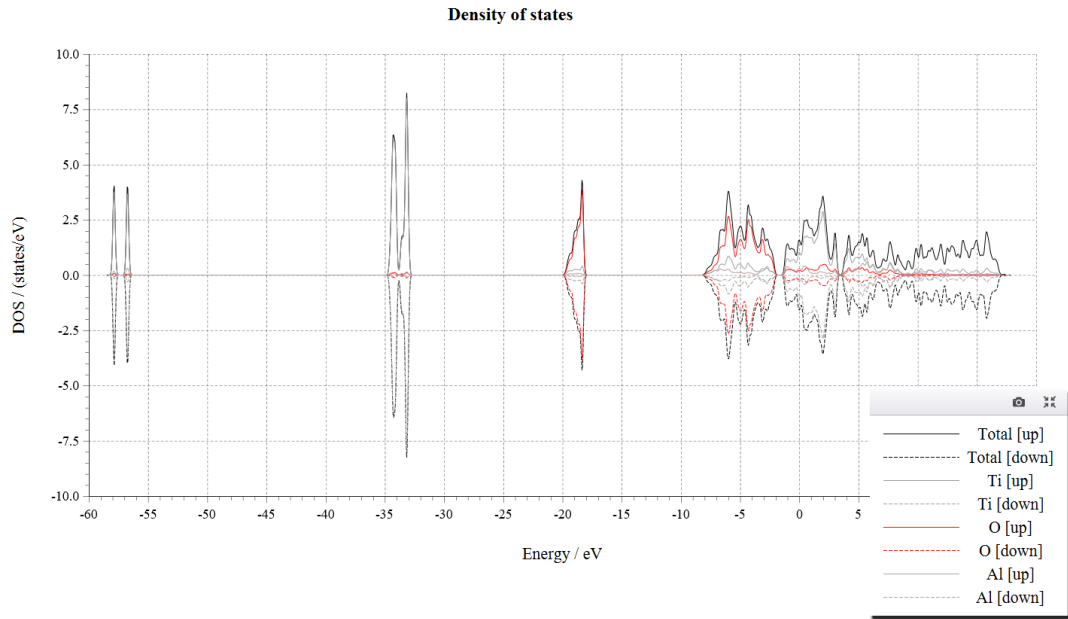
Çizelge 4.3'de  $TiO_2Sn$  kristal yapısındaki Sn atomunun bulunduğu uzaysal koordinat yerine Al atomu eklenmiştir. Çizelge 4.3'deki uzaysal koordinatlar bu bölümde de geçerlidir.

$TiO_2Al$  bileşiğinin elektronik bant yapısı; enerji gösterimi Şekil 4.27'de verilmiştir.



Şekil 4.27  $TiO_2Al$  kristal yapısında bant aralığı ve enerji dağılımı görünmektedir.

Şekil 4.27 incelendiğinde iletim bandının minimum noktası ile valans bandının maksimum noktası Fermi ( $E=0$  eV'da) noktasında kesiştiği için bu malzeme iletken özellik göstermektedir. Bu durum ise  $TiO_2$  tabanına Al elementi eklendiğinde yarı iletken özellik göstermediği için BDGH'de kullanılmayacak bir yapı olduğunu gösterir.  $TiO_2Al$  kristalinin durum yoğunluğu ise aşağıdaki Şekil 4.28'de gösterildiği gibi bulunmuştur.



Şekil 4.28 TiO<sub>2</sub>Al kristal yapısında durum yoğunluğu görünmektedir.

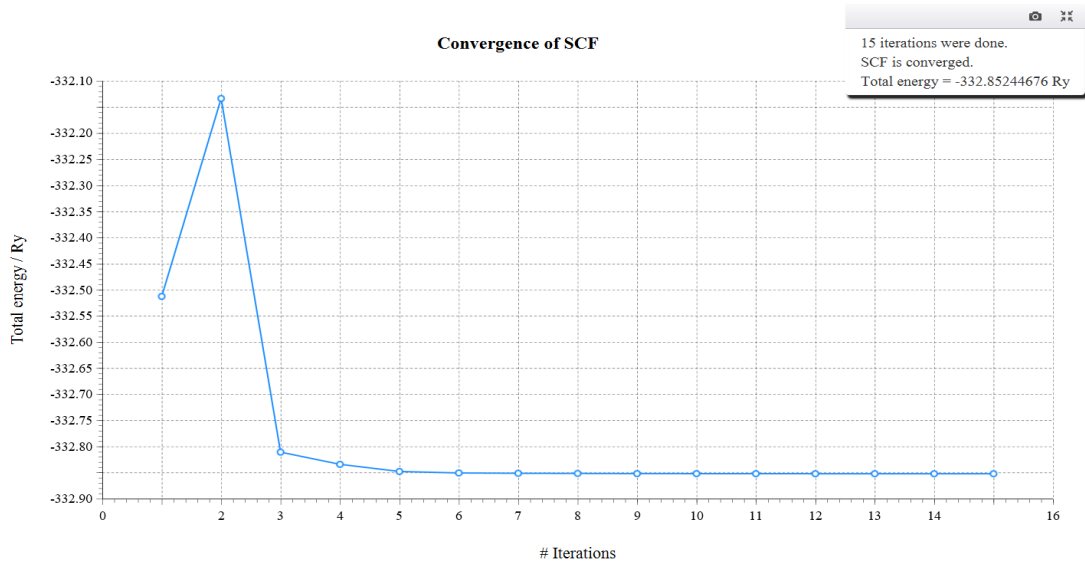
Şekil 4.28 daha yakından incelendiğinde Çizelge 4.14’de verilen enerjiler arasında toplam durum yoğunluğuna maksimum katkıların hangi elementlerden geldiğini görmüş oluruz.

Çizelge 4.14 TiO<sub>2</sub>Al kristal yapısında toplam durum yoğunluğuna maksimum enerji veren elementler.

ENERJİ (eV)	Al	Ti	O
-58 ile -56		✓	
-35 ile -31		✓	
-20 ile -18			✓
-8 ile -2			✓
-2 ile 3	✓		
3 ile 17	✓		

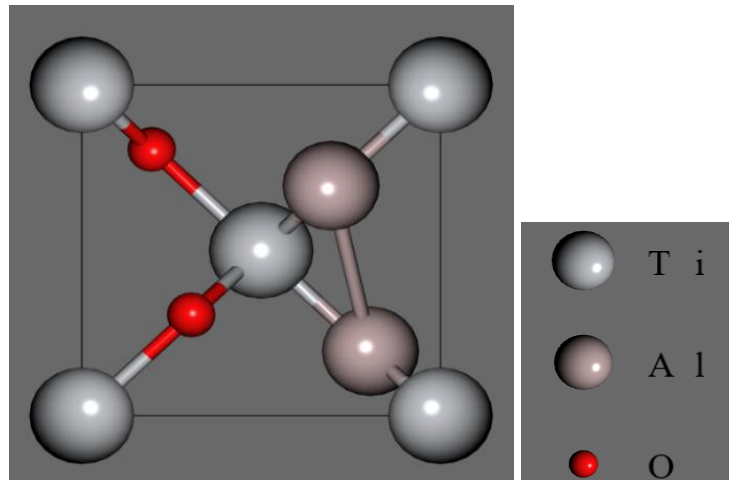


TiO<sub>2</sub>Al kristal yapısında toplam enerji dağılımı Şekil 4.29'da gösterildiği gibidir. Şekil 4.29'da verilen grafikte Y eksenini toplam enerjiye karşılık gelirken X eksenini iterasyon eksenine karşılık gelir. Şekil 4.29 incelendiğinde 6. adımdan sonra bileşik kararlı hale gelmiştir. Yapılan hesaplamalarda 6. adımdan sonraki adımlar dahil edilmemiştir. Böylece hesaplama zamanından tasarruf edilmiş, kullanılan bilgisayara gereksiz yere bilgi depo edilmemiştir.



Şekil 4.29 TiO<sub>2</sub>Al kristal yapısının toplam enerjisi görünmektedir.

TiO<sub>2</sub> tabanına iki tane Al atomu eklendiğindeki görünümü aşağıdaki Şekil 4.30'da görüldüğü gibidir.

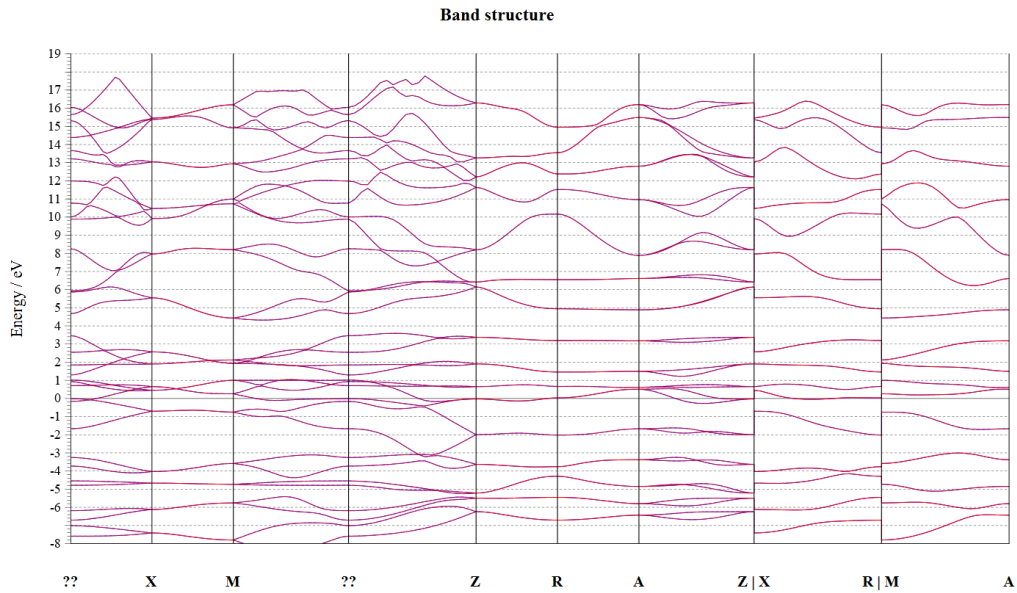


Şekil 4.30 TiO<sub>2</sub> tabanına iki tane Al elementinin eklenmesi ile oluşan kristal yapının atomik yapısı görünmektedir.

Şekil 4.30'dan da görüleceği üzere  $\text{TiO}_2$  yapısında bulunan O elementlerinden iki tanesi çıkarılıp onların yerine iki tane Al atomu eklenmiştir. Köşelerde bulunan küreler Ti atomlarını, aradaki kırmızı renkli (küçük) küreler O atomlarını, iç kısımda bulunan atomlar ise Al atomlarını göstermektedir.

Çizelge 4.3'de  $\text{TiO}_2\text{Sn}$  kristal yapısındaki Sn atomunun bulunduğu uzaysal koordinat yerine Al atomu eklenmiştir. Çizelge 4.3'deki uzaysal koordinatlar bu bölümde de geçerlidir.

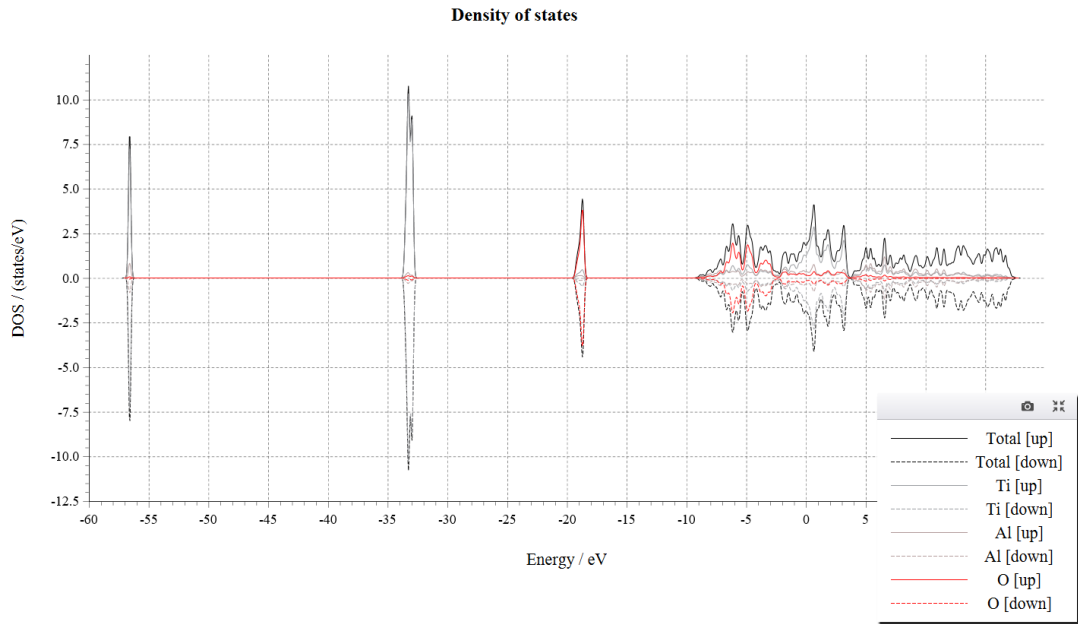
$\text{TiO}_2\text{Al}_2$  bileşiğinin elektronik bant yapısı; enerji gösterimi Şekil 4.31'de verilmiştir.



Şekil 4.31  $\text{TiO}_2\text{Al}_2$  kristal yapısında bant aralığı ve enerji dağılımı görünmektedir.

Şekil 4.31 incelendiğinde iletim bandının minimum noktası ile valans bandının maksimum noktası Fermi ( $E=0$  eV'da) noktasında kesiştiği için bu malzeme iletken özellik göstermektedir.  $\text{TiO}_2$  tabanına iki tane Al elementi eklenmesi bu yapıyı yarı iletken özellik haline getirmemiştir.  $\text{TiO}_2\text{Al}_2$  kristal yapısı  $\text{TiO}_2\text{Al}$  yapısında da olduğu gibi BDGH'de kullanılmayacak bir yapıdır.

$\text{TiO}_2\text{Al}_2$  durum yoğunluğu ise Şekil 4.32'de gösterildiği gibi bulunmuştur;



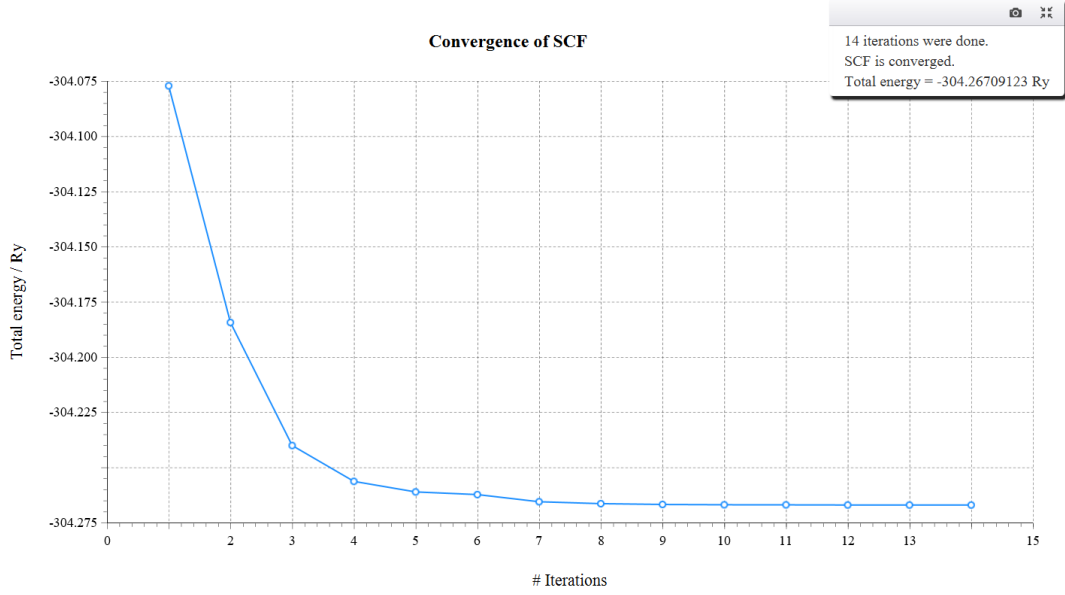
Şekil 4.32  $\text{TiO}_2\text{Al}_2$  kristal yapısında durum yoğunluğu görünmektedir.

Şekil 4.32 daha yakından incelendiğinde Çizelge 4.15’de verilen enerjiler arasında toplam durum yoğunluğuna maksimum katkıların hangi elementlerden geldiğini görmüş oluruz.

Çizelge 4.15  $\text{TiO}_2\text{Al}_2$  kristal yapısında toplam durum yoğunluğuna maksimum enerji veren elementler.

ENERJİ (eV)	Al	Ti	O
-57,5 ile -56,5	✓		
-34 ile -32,5		✓	
-19 ile -18			✓
-9 ile -2,5			✓
-2,5 ile 3		✓	
3 ile 18	✓		

$\text{TiO}_2\text{Al}_2$  kristal yapısında toplam enerji dağılımı Şekil 4.33’de gösterildiği gibidir.



Şekil 4.33 TiO<sub>2</sub>Al<sub>2</sub> kristal yapısının toplam enerjisi görünmektedir.

Şekil 4.33'de verilen grafikte Y eksenini toplam enerjiye karşılık gelirken X eksenini iterasyon eksenine karşılık gelir. Şekil 4.33 incelendiğinde 9. adımdan sonra bileşik kararlı hale gelmiştir. Dokuzuncu adımdan sonraki adımlar hesaplamaya dahil edildiğinde gereksiz yere bilgi depo edileceğinden ve hesaplama süresi uzayacağından 9. adımdan sonraki adımlar dahil edilmemiştir.

**5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER**

Bu çalışmada, boya duyarlı güneş hücresinin  $TiO_2$  tabanına farklı elementler eklenerek oluşturulan kristal yapıların BDGH'de kullanılmasına uygun olup olmadıkları incelenmiştir. Amaçlanan hedefe ulaşmak için QUANTUM ESPRESSO programı kullanılarak oluşturulan kristal yapıların iletken malzeme veya yarı iletken malzeme oldukları saptanmak istenmiştir.

$TiO_2$  tabanına Al elementi absorbe edilerek oluşturulan kristal yapının durum yoğunluğu, toplam enerjisi ve elektronik bant yapısı ayrı ayrı incelenmiştir.  $TiO_2Al$  ve  $TiO_2Al_2$  yapılarının durum yoğunluk grafikleri incelenmiş olup hangi enerjiler arasında hangi elementlerin maksimum katkı sağladığı tespit edilmiştir.  $TiO_2Al$  ve  $TiO_2Al_2$  yapılarının toplam enerji grafikleri incelendiğinde bu yapıların hangi adımda kararlı hale geldiği gözlemlenmiş olup, gözlemlenen adımdan sonrası hesaplamalara dahil edilmemiştir.  $TiO_2$  tabanına bir tane Al eklenmesi ile oluşan kristal yapının elektronik bant yapısı incelendiğinde, iletim bandının minimum noktası ile valans bandının maksimum noktasının Fermi ( $E=0$  eV) noktasında kesişmesinden dolayı iletken özellik gösterdiği gözlemlenmiştir.  $TiO_2$  tabanına iki tane Al elementi eklendiğinde oluşturulan kristal yapının iletken özellik gösterdiği tekrarlanmıştır. Bu kristal yapı için eklenen atom sayısının yapının iletkenlik karakterini değiştirmedeği gözlemlenmiştir. Sonuç olarak  $TiO_2$  tabanına bir veya iki tane Al elementinin eklenmesi ile oluşan yapının BDGH'de kullanılması uygun değildir.

$TiO_2$  tabanına Mg elementi eklenerek oluşturulan kristal yapının durum yoğunluğu, toplam enerjisi ve elektronik bant yapısı ayrı ayrı incelenmiştir.  $TiO_2Mg$  ve  $TiO_2Mg_2$  yapılarının durum yoğunluk grafikleri incelenmiş olup hangi enerjiler arasında hangi elementlerin maksimum katkı sağladığı tespit edilmiştir.  $TiO_2Mg$  ve  $TiO_2Mg_2$  yapılarının toplam enerji grafikleri incelendiğinde bu yapıların hangi adımda kararlı hale geldiği gözlemlenmiş olup, gözlemlenen adımdan sonrası hesaplamalara dahil edilmemiştir.  $TiO_2$  tabanına Mg elementi absorbe edilerek oluşturulan kristal yapının elektronik bant yapısı incelendiğinde iletim bandının minimum noktası ile valans bandının maksimum noktasının Fermi ( $E=0$  eV) noktasında kesiştiğinden dolayı iletken özellik gösterdiği gözlemlenmiştir.  $TiO_2$  tabanına iki tane Mg elementi

eklendiğinde oluşturulan kristal yapı iletken özellik göstermiştir. Belirtilen kristal yapı için eklenen Mg atom sayısının artırılması bileşiğin iletkenlik özelliğini değiştirmemiştir. Sonuç olarak  $TiO_2$  tabanına bir veya iki tane Mg elementinin eklenmesi ile oluşan yapının BDGH’de kullanılması uygun değildir.

$TiO_2$  tabanına Ca elementi eklenerek oluşturulan kristal yapının durum yoğunluğu, toplam enerjisi ve elektronik bant yapısı ayrı ayrı incelenmiştir.  $TiO_2Ca$  ve  $TiO_2Ca_2$  yapılarının durum yoğunluk grafikleri incelenmiş olup hangi enerjiler arasında hangi elementlerin maksimum katkı sağladığı tespit edilmiştir.  $TiO_2Ca$  ve  $TiO_2Ca_2$  yapılarının toplam enerji grafikleri incelendiğinde bu yapıların hangi adımda kararlı hale geldiği gözlemlenmiş olup, gözlemlenen adımdan sonrası hesaplamalara dahil edilmemiştir.  $TiO_2$  tabanına Ca elementi absorbe edilerek oluşturulan kristal yapının elektronik bant yapısı incelendiğinde iletim bandının minimum noktası ile valans bandının maksimum noktasının Fermi ( $E=0$  eV) noktasında kesiştiğinden dolayı iletken özellik gösterdiği gözlemlenmiştir.  $TiO_2$  tabanına iki tane Ca elementi eklendiğinde oluşturulan malzemenin iletken özellik gösterdiği tekrarlanmıştır. Belirtilen kristal yapı için eklenen Ca atom sayısının artırılması yapının iletkenlik özelliğini değiştirmemiştir. Sonuç olarak  $TiO_2$  tabanına bir veya iki tane Ca elementinin eklenmesi ile oluşan yapının BDGH’de kullanılması uygun değildir.

$TiO_2$  tabanına Sn elementi eklenerek oluşturulan kristal yapının durum yoğunluğu, toplam enerjisi ve elektronik bant yapısı ayrı ayrı incelenmiştir.  $TiO_2Sn$  ve  $TiO_2Sn_2$  yapılarının durum yoğunluk grafikleri incelenmiş olup hangi enerjiler arasında hangi elementlerin maksimum katkı sağladığı tespit edilmiştir.  $TiO_2Sn$  ve  $TiO_2Sn_2$  yapılarının toplam enerji grafikleri incelendiğinde bu yapıların hangi adımda kararlı hale geldiği gözlemlenmiş olup, gözlemlenen adımdan sonrası hesaplamalara dahil edilmemiştir.  $TiO_2$  tabanına Sn elementi absorbe edilerek oluşturulan kristal yapının elektronik bant yapısı incelendiğinde iletim bandının minimum noktası ile valans bandının maksimum noktasının Fermi ( $E=0$  eV) noktasında kesişmediğinden dolayı yarı iletken özellik gösterdiği gözlemlenmiştir.  $TiO_2$  tabanına iki tane Sn elementi eklendiğinde oluşturulan kristal yapının iletken özellik gösterdiği gözlemlenmiştir. Sonuç olarak  $TiO_2$  tabanına bir tane Sn elementinin eklenmesi ile yarı iletken malzeme elde edilmiştir.  $TiO_2Sn$  kristal yapısı BDGH’nin yapısında

kullanılabilecek bir yapı olduğu gösterilmiştir. İki tane Sn elementinin eklenmesi ile oluşan yapının BDGH’de kullanılması uygun değildir.

Bu çalışma oluşturulan kristal yapılar dışında yapılar oluşturulup BDGH’nin gelişmesine katkıda bulunulabilir. Örneğin, TiO<sub>2</sub> kristal yapısına, Sn, Ca, Mg ve Al elementleri dışında elementler eklenip BDGH’de kullanılıp kullanılmayacağı araştırılabilir. Yarı iletken katman olan TiO<sub>2</sub> yüzeyi yerine ZnO kristal yapısı kullanılıp üzerine duyarlaştırıcılar (boya) eklenerek, oluşturulan kristal yapıların BDGH’de kullanılıp kullanılmayacağı araştırılabilir. Redoks tepkimelerinin gerçekleştiği elektrolit çözeltisi içerisinde bulunan I<sup>3-</sup>/I<sup>-</sup> çifti yerine farklı redoks çifti eklenerek BDGH’nin verimlilik incelemesi yapılabilir.

**KAYNAKLAR**

- [1] “Key World Energy Statistics. The International Energy Agency, 2013”, *The International Energy Agency*, <http://www.observatoire-du-nucleaire.org/IMG/pdf/2013-keyworld-aie.pdf>. [Erişim tarihi 14-Aralık-2020]
- [2] “Yenilenemez enerji kaynakları”, *akbil.net*, <http://www.akbil.net/yenilenemez-enerji-kaynaklari-nelerdir/>. [Erişim tarihi: 05- Şubat-2020]
- [3] “Yenilenebilir Enerji Teknolojileri, Yenilenebilir Enerji Kaynakları ve Önemi 522ee0421”, *T.C. Millî Eğitim Bakanlığı, Ankara, 2012*, [http://megep.meb.gov.tr/mte\\_program\\_modul/moduller\\_pdf/Yenilenebilir%20Enerji%20Kaynaklar%C4%B1%20Ve%20%C3%96nemi.pdf](http://megep.meb.gov.tr/mte_program_modul/moduller_pdf/Yenilenebilir%20Enerji%20Kaynaklar%C4%B1%20Ve%20%C3%96nemi.pdf). [Erişim tarihi 04-01-2021]
- [4] F.F. Aydın, , “Enerji Tüketimi ve Ekonomik Büyüme”, *Erciyes Üniversitesi İktisadi ve İdari Bilimler Fakültesi Dergisi*. Sayı. 35. 317-340,2010.
- [5] A.R.Ataman, “Türkiye’de yenilenebilir enerji kaynakları”, Yüksek lisans tezi, T.C.Ankara üniversitesi Sosyal bilimler enstitüsü Kamu yönetimi ve siyaset bilimi (yönetim bilimleri) Anabilim dalı, Ankara, 2007.
- [6] “Jeotermal enerji nedir”, *enerjiportali.com*, <https://www.enerjiportali.com/jeotermal-nedir-jeotermal-enerji-nedir/>. [Erişim tarihi: 20-07-2020]
- [7] “Jeotermal enerji”, *derszamani.net*, <https://www.derszamani.net/jeotermal-enerji-nasil-elde-edilir/>. [Erişim tarihi: 01- Ocak-2020]
- [8] “Jeotermal enerji nedir”, *elektrikde.com*, <https://www.elektrikde.com/jeotermal-enerji-nedir-avantajlari-ve-dezavantajlari/>. [Erişim tarihi: 01- Ocak-2020]
- [9] “Biyokütle enerjisi”, *tech-worm.com*, <https://www.tech-worm.com/biyokutle-enerjisi-nedir-avantaj-dezavantajlari-nelerdir/>. [Erişim tarihi: 03- Ocak-2020]
- [10] “Hidrojen enerjisi”, *cevrebilinci.com*, <http://www.cevrebilinci.com/hidrojen-enerjisi-nedir-ve-nasil-uretilir-avantajlari-ve-dezavantajlari/>. [Erişim tarihi: 03- Ocak-2020]
- [11] “Fotoelektrik-etki”, *evrimagaci.org*, <https://evrimagaci.org/fotoelektrik-etki-fotoelektrik-olay-nedir/>. [Erişim tarihi: 03- Ocak-2020]



- [12] K.J. Gaffney, , A.M Lindenberg, J. Larsson, , K. Sokolowski-Tinten, , C. Blome, O. Synnergren, , J. Sheppard, D. A. Reis, J. B. Hastings, “Ultrafast x-ray studies of structural dynamics at SLAC”, Proc. SPIE, SLAC-PUB-11509, 1-8, 2005.
- [13]“Elektromanyetik radyasyon”, *muhendistan.com*,  
<https://muhendistan.com/elektromanyetik-radyasyon-nedir/>. [Erişim tarihi: 03- Ocak-2020]
- [14] “Fotoelektrik-olayi-ve-compton-sacilmasi”, *fizikakademisi.com*,  
<https://fizikakademisi.com/2016/08/11/fotoelektrik-olayi-ve-compton-sacilmasi/>. [Erişim tarihi: 03- Ocak-2020]
- [15] C. E. Fritts, “On a new form of selenium cell and some electrical discoveries made by its use”, *American Journal of Science*, Vol. 26, Series 3, 465-472, 1883.
- [16] H.H.Öztürk, D.Kaya, *Güneş Enerjisi Elektrik Üretimi. Fotovoltaik Teknoloji Kitabı*. İstanbul: 2013.
- [17] “Güneş enerjisi”, *web.itu.edu.tr*, <http://web.itu.edu.tr/~kaymak/>. [Erişim tarihi: 05- Ocak-2020]
- [18] C.Walduf, , P. Schilinsky, , J. Hauch, C. J. Brabec, “*Material and device concepts for organic photovoltaics: towards competitive efficiencies*”. *Thin Solid Films* 451–452, 503–507,2004.
- [19] M. Ekmekçi, “Sıcak su borusu kontrol ve test otomasyonu, çinko oksit (zno) güneş hücresi üretimi”, Yüksek lisans tezi, Ege Üniversitesi, 2015.
- [20] M. Ekmekçi, “Nanomateriyaller kullanımıyla organik güneş hücrelerinin üretimi, karakterizasyonları ve güneş enerjisi santrallerinin kurulumu”, Doktora Tezi, Ege Üniversitesi, 2018.
- [21] B.Kocaman, “Boya duyarlı güneş hücreleri için yeni sistemlerin geliştirilmesi ve karakterizasyonu”, Yüksek lisans tezi, Hacettepe Üniversitesi, 2014.
- [22] B. Tekin, “Tek adımlı elektrokimyasal biriktirme yöntemi ile sentezlenen cxts (x=co,fe,zn,ni,mn) yarıiletken malzemelerin boya duyarlı güneş hücrelerinde karşıt elektrot olarak kullanılması”, Yüksek lisans tezi, Karamanoğlu Mehmetbey Üniversitesi, 2017.
- [23] S.Bekleviçuyulası, “Boya duyarlı güneş hücrelerinde kullanılmak üzere doğal boya üretimi”, Yüksek lisans tezi, Yıldız Teknik Üniversitesi, 2018.

- [24] D. Gültekin, “ZnO nanoyapılı elektrotlar kullanarak boya duyarlı güneş hücrelerinin geliştirilmesi”, Doktora tezi, Sakarya Üniversitesi, 2015.
- [25] W. Saidi, N. Hfaïdh, M. Rasheed, M. Girtan, A. Megriche and M. EL Maaoui, “Effect of B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> addition on optical and structural properties of TiO<sub>2</sub> as a new blocking layer for multiple dye sensitive solar cell application (DSSC)”, *RSC advances*, vol. 6, pp. 68819-68826, 2016.
- [26] Z. Wang, Y. Chen, P. Li, J. He, W. Zhang, Z.G.Y. Li and M. Dong, “Synthesis of silicon-doped reduced graphene oxide and its applications in dye-sensitive solar cells and supercapacitors”, *RSC advances*, vol.6, pp. 15080-15086,2016.
- [27] N. Wollschlager, L. Palesse, I. Hausler, K. Dirscherl, F. Oswald, S. Narbey, E. Ortel, V.- Dan Hodoroaba, “Characterization of the inner structure of porous TiO<sub>2</sub> nanoparticle films in dye sensitive solar cells by focused ion beam (FIB) tomography and transmission Kikuchi diffraction (TKD) in the scanning electron microscope (SEM)”, *Materials Characterization*, vol. 131, pp. 39-48, 2017.
- [28] B. Oregan and M. Gratzel, ‘A Low-Cost, High-Efficiency Solar-Cell Based on Dye-Sensitized Colloidal TiO<sub>2</sub> Films’, *Nature*, vol 353(6346), pp. 737-740, 1991.
- [29]“Organik-boya-esasli-nanokristal-yapili-ince-film-gunes-pili-uretimi”, *docplayer.biz.tr*, <https://docplayer.biz.tr/17645238-Organik-boya-esasli-nanokristal-yapili-ince-film-gunes-pili-uretimi.html/>. [Erişim tarihi: 15- Aralık-2019]
- [30] T. Stergiopoulos, I.M. Arabatzis, H. Cachet, P. Falaras, “Photoelectro chemistry at SnO<sub>2</sub> particulate fractal electrodes sensitized by a ruthenium complex: Solid-state solar cell assembling by incorporating a composite polymer electrolyte”, *Journal of Photochemistry and Photobiology A, Chemistry*, vol 155, pp. 163– 170, 2003.
- [31] H. Rensmo, K. Keis , H. Lindström , S. Södergren ,A. Solbrand , A. Hagfeldt , and S.E. Lindquist, “High light-to-energy conversion efficiencies for solar cells based on nanostructured ZnO electrodes”, *Journal of Physical Chemistry B*, vol 101, pp. 2598-2601, 1997
- [32] I.K. Konstantinou, T.A Albanis, “TiO<sub>2</sub>-assisted photocatalytic degradation of azo dyes in aqueous solution: kinetic and mechanistic investigations. Applied Catalysis B”, *Environmental*, vol 49, pp.1–14, 2004.

- [33] J.A. Mikroyannidis, P. Sureshb, M.S. Royc, G.D. Sharma, “Triphenylamine-and benzothiadiazole-based dyes with multiple acceptors for application in dye-sensitized solar cells.”, *Journal of Power Sources*, vol 195, pp. 3002– 3010, 2010.
- [34] G. Wolfbauer, A.M. Bond, J.C. Eklund, D.R. MacFarlane, “A channel flow cell system specifically designed to test the efficiency of redox shuttles in dye sensitized solar cells”, *Solar Energy Materials & Solar Cells*, vol 70, pp. 85- 101, 2001.
- [35] I. Chung, B.Lee, J. He, R.P.H. Chang, M.G. Kanatzidis, “All solid state dye sensitized solar cells with high efficiency”, *Nature*, vol 4857, 399, 486-U94, 2012.
- [36] H. Pettersson, T. Gruszecki, R. Bernhard, L. Häggman, M. Gorlov, G. Boschloo, T. Edvinsson, L. Kloo and A. Hagfeldt, “The Monolithic Multicell: A Tool for Testing Material Components in Dye-Sensitized Solar Cells, Progress in Photovoltaics: Research and Applications”, vol 15: pp. 113 –121, 2007.
- [37] Y. Saito, W. Kubo, T. Kitamura, Y. Wada, S. Yanagida, “I<sup>-</sup>/I<sub>3</sub><sup>-</sup> redox reaction behavior on poly (3,4 ethylenedioxythiophene) counter electrode in dye-sensitized solar cells”, *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, vol 164, pp. 153–157, 2004.
- [38] N. Papageorgiou, W. F. Maier and M. Grätzel, “An Iodine/Triiodide Reduction Electrocatalyst for Aqueous and Organic Media”, *Journal of The Electrochemical Society*, Vol. 144, No.3, 1997.
- [39] “Gunes\_enerjisi”, *benkoltd.com*,  
[http://benkoltd.com/suyapo/TemizEnerji/Gunes\\_Elektrik/gunes\\_enerji1.asp/](http://benkoltd.com/suyapo/TemizEnerji/Gunes_Elektrik/gunes_enerji1.asp/), [Erişim tarihi: 03- Ocak-2020]
- [40] M. Junghänel, “Novel aqueous electrolyte films for hole conduction in dye sensitized solar cells and development of an electron transport model”, *Freie Universität Berlin. Phd. Thesis*, 2007
- [41] O. Carp, C.L Huisman. and A. Reller, “Photoinduced reactivity of titanium dioxide”, *Progress in Solid State Chemistry*, vol.32, pp. 33-177, 2004.
- [42] E.P. Lautenschlager and P.Monaghan, “Titanium and Titanium Alloys as Dental Materials”, *International Dental Journal*, vol.43(3), pp. 245-253, 1993.
- [43] Diebold, ‘The Surface Science of Titanium Dioxide’, *Surface Science Reports*, vol.48(5-8), pp. 53-229, 2003.

- [44]. G. Buxbaum, and G. Pfaff, *Industrial Inorganic Pigments*, Wiley-VCH, Weinheim, 2005.
- [45] F. Labat, P. Baranek and Adamo, “Structural and electronic properties of selected rutile and anatase TiO<sub>2</sub> surfaces: an ab initio investigation”, *Journal of Chemical Theory and Computation*, vol.4(2), pp. 341-352, 2008.
- [46] “Kalay elementi özellikleri”, *kimyadersi.org*, <https://www.kimyadersi.org/kalay/>. [Erişim tarihi: 02- Şubat-2020]
- [47] “Kalay”, *lafsozluk.com*, <https://www.lafsozluk.com/2010/08/kalay.html> [Erişim tarihi: 02- Şubat-2020]
- [48] “Kalsiyum elementi özellikleri”, *kalsiyum.org*, <https://www.kalsiyum.org/kalsiyum-elementinin-ozellikleri/>. [Erişim tarihi: 02- Şubat-2020]
- [49] “Magnezyum elementi özellikleri”, *lafsozluk.com*, <https://www.lafsozluk.com/2010/08/magnezyum/>. [Erişim tarihi: 02- Şubat-2020]
- [50] “Aleminyum elementinin özellikleri”, *lafsozluk.com*, <https://www.lafsozluk.com/2010/06/aleminyum-elementi/>. [Erişim tarihi: 02- Şubat-2020]
- [51] Ş. Aydoğan, *Katıhal Fiziği. 2. Basım*. Ankara: Yay. No: 1072, 2014.
- [52] N. Körözlü “Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>X(X=Te,Se,S) Alaşımlarının ve WP, GdX(X=Bi,Sb) Bileşiklerinin Temel Fiziksel Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT)’ne Dayalı Yöntemlerle Hesaplanması”, doktora tezi (basılmamış), Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 2009.
- [53] “Yoğunluk fonksiyon teorisi”, *tdk.com.tr*, [https://www.tdk.com.tr/Yogunluk-Fonksiyonel-Teorisi\\_10090/](https://www.tdk.com.tr/Yogunluk-Fonksiyonel-Teorisi_10090/). [Erişim tarihi: 02- Şubat-2020]
- [54] M. Özdemir, “Benzensülfonik asit Hidrazit’in Konformasyon Analizi, Titreşim ve Kimyasal Kayma Değerlerinin DFT Metodu ile Hesaplanması”, Yüksek Lisans Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 2007
- [55] G.P. Srivastava, *The Physics of Phonons*, Bristol :Adam Hilger, , 1990.
- [56] P. Hohenberg, W. Khon, “Band Structure of New ReFeAsO Superconductors” *Journal of Modern Physics*, vol. 136, pp.864-871,1964.

[57] M.F. Li, *Modern Semiconductor Quantum Physics*, World Scientific Publishing Co, 1995.

[58] M.C Payne, M.P Teter, D.C. Allan, T.A. Arias, J.D Joannopoulos, “Iterative Minimization Techniques for Ab-initio Total Energy Calculations: Molecular Dynamics and Gradients”, *Rev. Of Mod. Phys*, vol.64, pp. 4, 1992.

[59]“Quantumespresso”,*iopscience.iop.org*,

<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0953-8984/21/39/395502/meta/>. [Eriřim tarihi: 02- řubat-2020]

