



**CdS/CdTe GÜNEŞ HÜCRELERİNDE MoS₂ İNCE
FİLMİNİN ARA TABAKA OLARAK
KULLANILMASI VE ETKİSİ**

Arife EFE GÖRMEZ

Doktora Tezi

Nanobilim ve Nanomühendislik Ana Bilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Erdal SÖNMEZ

2020

(Her hakkı sakılıdır.)

T.C.
ATATÜRK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
NANOBİLİM VE NANOMÜHENDİSLİK ANABİLİM DALI

**CdS/CdTe GÜNEŞ HÜCRELERİNDE MoS₂ İNCE FİLMİNİN ARA TABAKA
OLARAK KULLANILMASI VE ETKİSİ**

(The Use and Effects of MoS₂ Thin Film as Interlayer in CdS/CdTe Solar Cells)

DOKTORA TEZİ

Arife EFE GÖRMEZ

Danışman: Doç. Dr. Erdal SÖNMEZ

Erzurum
Eylül, 2020

KABUL VE ONAY TUTANAĞI

Arife EFE GÖRMEZ tarafından hazırlanan “CdS/CdTe GÜNEŞ HÜCRELERİNDE MoS₂ İNCE FİLMİNİN ARA TABAKA OLARAK KULLANILMASI VE ETKİSİ” başlıklı çalışması 24/9/2020 tarihinde yapılan tez savunma sınavı sonucunda başarılı bulunarak jürimiz tarafından Nanobilim ve Nanomühendislik Ana Bilim Dalı, Nanomalzeme Bilim Dalında Doktora tezi olarak kabul edilmiştir.

Jüri Başkanı:	Unvan Ad SOYAD Üniversite Adı	
Danışman:	Unvan Ad SOYAD Üniversite Adı	
Jüri Üyesi:	Unvan Ad SOYAD Üniversite Adı	
Jüri Üyesi:	Unvan Ad SOYAD Üniversite Adı	
Jüri Üyesi:	Unvan Ad SOYAD Üniversite Adı	
İkinci Tez Danışmanı	Unvan Ad SOYAD Üniversite Adı	

Enstitü Yönetim Kurulunun
.../.../... tarih ve sayılı
kararı.

Bu tezin Atatürk Üniversitesi Lisansüstü Eğitim ve Öğretim Yönetmeliği'nin ilgili maddelerinde belirtilen şartları yerine getirdiğini onaylarım.

Unvan Ad SOYAD
Enstitü Müdürü

Bu çalışma, Ulusal Bilim, Teknoloji ve Yenilik Stratejisi (UBTYS) ile 2211/C Yurt içi lisansüstü burs programı kapsamında TÜBİTAK tarafından desteklenmiştir.

Not: Bu tezde kullanılan özgün ve başka kaynaklardan yapılan bildiriş, çizelge, şekil ve fotoğrafların kaynak olarak kullanımı, 5846 sayılı Fikir ve Sanat Eserleri Kanunundaki hükümlere tabidir.

ETİK BİLDİRİM VE İNTİHAL BEYAN FORMU

Doktora Tezi olarak Doç. Dr. Erdal SÖNMEZ danışmanlığında sunulan “CdS/CdTe GÜNEŞ HÜCRELERİNDE MoS₂ İNCE FİLMİNİN ARA TABAKA OLARAK KULLANILMASI VE ETKİSİ” başlıklı çalışmanın tarafımızdan bilimsel etik ilkelere uyularak yazıldığını, yararlanılan eserlerin kaynakçada gösterildiğini, Fen Bilimleri Enstitüsü tarafından belirlenmiş olan Turnitin Programı benzerlik oranlarının aşılmadığını ve aşağıdaki oranlarda olduğunu beyan ederiz.

Tez Bölümleri	Tezin Benzerlik Oranı (%)	Maksimum Oran (%)
Giriş	7	30
Kuramsal Temeller	2	30
Materyal ve Yöntem	8	35
Bulgular	6	20
Tartışma	6	20
Tezin Geneli	8	25

Not: Yedi kelimeye kadar benzerlikler ile Başlık, Kaynakça, İçindekiler, Teşekkür, Dizin ve Ekler kısımları tarama dışı bırakılabilir. Yukarıdaki azami benzerlik oranları yanında tek bir kaynaktan olan benzerlik oranlarının %5'den büyük olmaması gerekir.

Beyan edilen bilgilerin doğru olduğunu, aksi halde doğacak hukuki sorumlulukları kabul ve beyan ederiz.

Tez Yazarı (Öğrenci)	Tez Danışmanı
Arife EFE GÖRMEZ	Doç.Dr.Erdal SÖNMEZ
24.9.2020	24.9.2020
İmza:	İmza:

* Tez ile ilgili YÖKTEZ'de yayınlamasına ilişkin bir engelleme var ise aşağıdaki alanı doldurunuz.

☐ Tezle ilgili patent başvurusu yapılması / patent alma sürecinin devam etmesi sebebiyle Enstitü Yönetim Kurulunun/....../.... tarih ve sayılı kararı ile teze erişim 2 (iki) yıl süreyle engellenmiştir.

☐ Enstitü Yönetim Kurulunun/....../.... tarih ve sayılı kararı ile teze erişim 6 (altı) ay süreyle engellenmiştir.

TEŞEKKÜR

Her zaman yanımda olan ve bana güvenen, yanında çalışmaktan onur duyduğum ve mutlu olduğum ayrıca tecrübeleri ve bilgilerinden yararlandığım kıymetli hocalarım Sayın Doç. Dr. Erdal Sönmez'e ve Dr. Öğr. Üyesi Mücahit YILMAZ'a çok teşekkür ederim.

Doktora çalışmalarım süresince verdikleri önerilerle tez çalışmalarına sağladıkları katkılardan dolayı Prof.Dr. Hasan EFEOĞLU ve Prof. Dr. Mustafa SAĞLAM hocalarıma teşekkürlerimi arz ediyorum. Üretim ve ölçüm sürecinde laboratuvar olanakları için Prof.Dr. Oğuz DOĞAN'a teşekkürlerimi sunarım.

Deneysel çalışmalarım esnasında, karakterizasyon çalışmalarında yardımını esirgemeyen başta değerli hocam Uzm. Hasan Fevzi BUDAK, grup arkadaşlarım Adem AKDAĞ, Mustafa BÜYÜKHARMAN, Ayşegül SEZGİN, Ayşe KARATAŞ ve Mohamed BASYOONİ'ye, teşekkürü bir borç bilirim.

Bu süreçte bana güvenen ve destekleyen eşim Mustafa GÖRMEZ'e ve ailesine çok teşekkür ederim. Benimle birlikte bu süreci başından sonuna kadar geçiren, manevi güç aldığım canım kızım Hatice GÖRMEZ'e çok teşekkür ederim.

Güvenlerinden ve desteklerinden dolayı Arif GÖRMEZ ve eşi Ayşegül GÖRMEZ'e çok teşekkür ederim.

Ömrüm boyunca maddi ve manevi destekleriyle her zaman yanımda olan canım anneme, babama ve kardeşlerime teşekkür ederim.

Bu çalışmayı; Ulusal Bilim, Teknoloji ve Yenilik Stratejisi (UBTYS) ile 2211/C Yurt içi lisansüstü burs programı kapsamında destekleyen TÜBİTAK'a teşekkürlerimi sunarım.

Yapmış olduğum bu çalışmayı, sevgili babam İsmail EFE'ye ve canım annem Fatma EFE'ye ithaf ediyorum.

Arife EFE GÖRMEZ

ÖZET

DOKTORA TEZİ

CdS/CdTe GÜNEŞ HÜCRELERİNDE MoS₂ İNCE FİLMİNİN ARA TABAKA OLARAK KULLANILMASI VE ETKİSİ

Arife EFE GÖRMEZ

Danışman: Doç. Dr. Erdal SÖNMEZ

İkinci Tez Danışmanı: Dr. Öğr. Üyesi Mücahit YILMAZ

Amaç: Bu çalışmada CdS/CdTe güneş hücrelerinde MoS₂ ince filmlerinin ara tabaka olarak kullanılmasının hücre verimine etkisi incelenmiştir.

Yöntem: Çalışmada ince film tabakaları RF magnetron sıçratma cihazı ile büyütülmüştür. Sadece ara tabaka olarak kullanılan MoS₂ ince filmi iki aşamalı üretilmiştir. Öncelikle 400 °C'de reaktif manyetik alan sıçratma yöntemi ile farklı kalınlıklarda büyütülen Mo-O ince filmleri büyütülmüş ardından CVD cihazında sülfürizasyon yapılarak büyük ölçekli MoS₂ filmleri elde edilmiştir. İnce film tabakalarının hepsinin kalınlık ve sıcaklık optimizasyonları yapılmıştır. Aygıt, optimum şartlar kullanılarak yapılmıştır.

Bulgular: Tek tabakalı MoS₂'nin ara tabaka olarak kullanıldığı güneş hücresinde, MoS₂'siz güneş hücresine kıyasla Jsc değerinde hafif bir artış gözlemlenmiştir. Ancak çok tabakalı MoS₂'nin kullanılması ile Jsc değerinde tek tabakalı numuneye göre hafif bir düşüş belirlenmiştir. Tüm numunelerde açık devre gerilimi aynıdır. Doluluk oranı en düşük MoS₂'siz güneş hücresinde hesaplanırken, en büyük ise çok tabakalı MoS₂ kullanılan güneş hücresinde hesaplanmıştır. Tek tabaka ve çok tabakalı MoS₂ kullanımı dönüşüm verimini hafif bir şekilde arttırmıştır.

Sonuç: CdS/CdTe arasına yasak bant aralığı CdS ile CdTe arasında olan bir kaç nanometre kalınlığında atılan sülfürlü bir tabakanın (MoS₂) verimi bir miktar artırdığı belirlenmiştir

Anahtar Kelimeler: CdS/CdTe, Güneş hücresi, MoS₂

Eylül 2020, 141 sayfa

ABSTRACT

DOCTORAL DISSERTATION

THE USE AND EFFECTS OF MoS₂ THIN FILM AS INTERLAYER IN CdS / CdTe SOLAR CELLS

Arife EFE GÖRMEZ

Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Erdal SÖNMEZ

Co-supervisor: Assist. Prof. Dr. Mücahit YILMAZ

Purpose: In this study, it was aimed to investigate the effect of using MoS₂ thin films as an interlayer in CdS/CdTe solar cells.

Method: In the study, thin film layers were grown with rf magnetron sputtering. Thin film, which is used only as an interlayer, is produced in two stages. First of all, Mo-O thin films grown in different thicknesses by reactive magnetic field sputtering method at 400 °C were enlarged, then large-scale MoS₂ films were obtained by sulfurization in CVD. thickness and temperature optimizations of all thin film layers were made. the device was made using optimum conditions.

Findings: In the solar cell where monolayer MoS₂ is used as an interlayer, a slight increase in J_{sc} value was observed compared to solar cell without MoS₂. However, with the use of multi-layer MoS₂, a slight decrease in J_{sc} value was determined compared to the single-layer sample. Open circuit voltage is the same in all samples. While the Fill factor is calculated in the solar cell without the lowest MoS₂, the largest is calculated in the solar cell using multi-layer MoS₂. The use of monolayer and multilayer MoS₂ slightly increased conversion efficiency.

Results: It is possible to say that a layer of sulfur with a few nanometers thickness between CdS/CdTe increases the conversion efficiency, but its values are very close to each other.

Keywords: CdS/CdTe, Solar cells, MoS₂

September 2020, 141 pages

İÇİNDEKİLER

KABUL VE ONAY TUTANAĞI.....	i
ETİK BİLDİRİM VE İNTİHAL BEYAN FORMU	ii
TEŞEKKÜR	iii
ÖZET	iv
ABSTRACT	v
İÇİNDEKİLER.....	vi
TABLolar DİZİNİ.....	ix
ŞEKİLLER DİZİNİ	x
SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ	xiv
GİRİŞ.....	1
Fotovoltaik Enerji Dönüşümü	1
PV teknolojiler	1
Yarıiletkenler ve Güneş Hücreleri	4
Yarıiletkenler.....	4
P-N Eklemleri.....	5
Denge durumunda homoeklemler	5
Heteroeklemler	6
Güneş Hücreleri	7
Güneş spektrumu ve Air Mass (AM).....	7
Güneş hücresi parametreleri.....	8
CdTe Güneş Hücreleri.....	10
CdS/CdTe yapısı ve özellikleri	11
CdTe/CdS Güneş Hücresinin Çalışma Mekanizması	14
Optoelektronik Uygulamalarda Yeni Nesil Malzemelerin Kullanımı	15
İki Boyutlu Malzemelerin Güneş Hücrelerinde Kullanılması	19
MoS ₂ Malzemesinin Yapısı ve Özellikleri.....	20
MoS ₂ Üretim Teknikleri.....	23
Mekanik eksfoliasyon	24
Kimyasal eksfoliasyon	24
Kimyasal buhar biriktirme / buhar fazı büyüme süreci (CVD).....	26
Manyetik alan sıçratma metodu	28
Hidrotermal interkalasyon.....	28
Hidrotermal metod	29

MoS ₂ Uygulamaları.....	29
Mekanik.....	30
Biyosensörler	30
Gaz algılama.....	31
Kimyasal uygulama.....	31
Katalitik aktivite.....	31
Optoelektronik cihazlar	31
Süperkapasitörler.....	32
KURAMSAL TEMELLER.....	33
CdS /CdTe Güneş Hücreleri.....	33
MoS ₂ Malzemesinin Üretimi.....	34
MoS ₂ Malzemelerin Güneş Hücrelerinde Kullanılması.....	35
MATERYAL ve YÖNTEM	41
Giriş.....	41
Tez Çalışmasında Kullanılan Malzemeler ve Cihazlar	42
İnce Filmlerinin Üretimi	42
Altaşların hazırlanması ve temizlenmesi	44
FTO üzerine SnO ₂ üretimi.....	44
CdS ve CdTe Üretimi.....	44
MoS ₂ üretimi	45
MoO ₃ üretimi	46
Mo kaplama.....	46
İnce Filmlerin Karakterizasyonları	47
GIXRD ölçümleri.....	47
Raman spektrumlarının alınması.....	48
FE-SEM görüntülemeleri	48
AFM ile yüzey topografilerinin belirlenmesi.....	48
Fotoluminesans ölçümlerinin alınması	49
UV-VİS ölçümlerinin alınması ve bant aralıklarının hesaplanması	49
Çok Katmanlı Güneş Hücresinin Üretimi ve Karakterizasyonu	51
Çok katmanlı güneş hücresinin üretimi	51
Çok katmanlı güneş hücresinin karakterizasyonu.....	54
ARAŞTIRMA BULGULARI ve TARTIŞMA	55
Giriş.....	55
SnO ₂ ince filmlerinin morfolojik ve yapısal karakterizasyonu ve değerlendirilmesi	55

CdS İnce Filmlerinin Tavlama Sıcaklığına Bağlı Olarak Yapısal, Optiksel ve Elektriksel Karakterizasyonu ve Değerlendirilmesi	57
CdTe İnce Filmlerinin Sıcaklığa Bağlı Yapısal ve Optiksel Karakterizasyonu ve Değerlendirilmesi	77
MoO ₃ Filminin Yapısal Karakterizasyonu ve Değerlendirilmesi	92
FTO/SnO ₂ /CdS/MoS ₂ Yapısının, MoO ₃ Kalınlığına Bağlı Yapısal ve Optiksel Karakterizasyonu ve Değerlendirilmesi	94
FTO/ SnO ₂ / CdS/ CdTe/MoO ₃ /Mo ve FTO/ SnO ₂ / CdS/ MoS ₂ / CdTe /MoO ₃ / Mo Güneş Hücrelerinin Yapısı ve Fotovoltaik Performansı ve Değerlendirilmesi.....	104
SONUÇLAR ve ÖNERİLER	107
Sonuçlar.....	107
Öneriler	108
KAYNAKLAR.....	109
EKLER	119
EK 1. CdS ince filmlerinin AFM görüntülerinden elde edilen tanecik boyutlarına ilişkin görseller.....	119
EK 2. CdTe ince filmlerinin AFM görüntülerinden elde edilen tanecik boyutlarına ilişkin görseller.....	121
ÖZGEÇMİŞ.....	123

TABLÖLAR DİZİNİ

Tablo 1. İnce filmlerin üretim parametreleri.....	43
Tablo 2. Farklı tavlama şartlarında büyütülen CdS ince filminin XRD analizlerinden elde edilen yapısal parametreleri	61
Tablo 3. CdS ince filmlerin Raman FWHM değerleri.....	63
Tablo 4. FESEM den elde edilen CdS filmlerinin kalınlıkları	67
Tablo 5. CdS filmlerinin AFM ortalama yüzey pürüzlülüğü.....	67
Tablo 6. CdS ince filmlerinin A/V iletkenlik değerleri	77
Tablo 7. Farklı tavlama şartlarında büyütülen CdTe ince filminin XRD den elde edilen yapısal parametreleri	80
Tablo 8. FESEM kalınlık ölçüm sonuçları	84
Tablo 9. Farklı tavlama şartlarında büyütülen CdTe ince filminin AFM den elde edilen ortalama yüzey pürüzlülüğü değerleri.....	85
Tablo 10. Farklı tavlama şartlarında büyütülen CdTe ince filminin AFM den elde edilen tane sayıları	85
Tablo 11. Farklı tavlama şartlarında büyütülen CdTe ince filminin bant aralığı	90
Tablo 12. MoS ₂ 'siz ve MoS ₂ 'li fotovoltaiik güneş hücresine ait parametreler	106

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 1. Güneş hücresi çeşitleri.	2
Şekil 2. Güneş hücrelerinin yıllara göre gelişimi (Ludin <i>et al.</i> 2018)	4
Şekil 3. Termal denge durumunda bir p-n eklemının enerji bant diyagramı.	6
Şekil 4. n-p heteroeklemının temas kurulmadan önce ve sonraki bant diyagramı.	7
Şekil 5. Kara cisim, AM 0 ve AM 1.5 spektrumu.	8
Şekil 6. Bir güneş hücresinin karanlıkta ve aydınlıktaki I-V eğrisi.	9
Şekil 7. Seri ve şönt dirençli bir güneş pilinin eşdeğer devresi.	10
Şekil 8. Yıllara göre CdTe güneş hücrelerinin verimi (Lee and Ebong 2017).	11
Şekil 9. CdS/CdTe güneş hücresinin yapısı.	12
Şekil 10. CdS/ CdTe heteroeklemi.	14
Şekil 11. Grafen, grafit, karbon nano tüp (CNT) ve fullerene yapılar.	15
Şekil 12. Geçiş-metal dikalkojenlerinin periyodik tablodaki dağılımı. Periyodik tabloda M ile tanımlanan ve pembe renk ile kısmen ve tam renklendirilmiş elementler TMDC'lere ait geçiş-metallerini gösterirken X ile gösterilen grupta yer alan sarı renk ile renklendirilmiş elementler kalkojenleri göstermektedir (Karataş 2020). ..	17
Şekil 13. Geçiş-metal dikalkojenlerinin yapısı. Sarı atomlar kalkojen grubununu ve mavi atomlar geçiş metallerini temsil etmektedir.	18
Şekil 14. Yıllara göre MoS ₂ ile ilgili yapılan yayın sayısı (Krishnan <i>et al.</i> 2019).	20
Şekil 15. (a) S ve Mo tabakalarının altıgen yapısı; (b) Yan görünüm şeması.	21
Şekil 16. MoS ₂ band yapıları (Ye 2018).	23
Şekil 17. MoS ₂ 'nin nano katmanların mekanik olarak mekanik eksfoliasyon yöntemi ile elde edilmesine ilişkin şematik diyagram ve resimler (Karataş 2020).	24
Şekil 18. Kimyasal eksfoliasyon yöntemi (Grayfer <i>et al.</i> 2017).	26
Şekil 19. CVD metodu (Y. Wang <i>et al.</i> 2020).	27
Şekil 20. Manyetik alan sıçratma metodu (Karataş, 2020).	28
Şekil 21. Hidrotermal metod (Chaudhary <i>et al.</i> 2018).	29
Şekil 22. MoS ₂ uygulamaları (Grayfer <i>et al.</i> 2017).	29
Şekil 23. MoS ₂ 'nin performansta mükemmel olduğu alanları.	30
Şekil 24. RF magnetron sıçratma ve CVD yöntemiyle üretilen MoS ₂ üretim şeması.	35
Şekil 25. Farklı MoS ₂ katman kalınlığına sahip MoS ₂ /p-Si güneş hücrelerinin J-V eğrileri (Zhang <i>et al.</i> 2020.	37
Şekil 26. (a) MoS ₂ 'nin ayrıntılı üretim süreci ; (b) Grafen/MoS ₂ /Si Schottky bariyer güneş hücrelerinin ayrıntılı biriktirme işlemi (Ma <i>et al.</i> 2018).	38

Şekil 27. Farklı MoS ₂ katman kalınlığına sahip güneş hücrelerinin J-V eğrileri (Ma <i>et al.</i> 2018).	39
Şekil 28. TFSA-GR / MoS ₂ / PSi / Si / TiOx güneş hücresinin şematik gösterimi (Jang <i>et al.</i> 2020).	39
Şekil 29. Farklı L _n için TFSA-GR/MoS ₂ /PSi/Si güneş hücrelerinin J-V eğrileri (Jang <i>et al.</i> 2020).	40
Şekil 30. Bu çalışmada tasarlanan güneş hücresinin şematik gösterimi.	41
Şekil 31. Magnetron sıçratma sistemi.	43
Şekil 32. CVD sistemi.	45
Şekil 33. MoS ₂ üretim şeması. (KARATAŞ 2020)	46
Şekil 34. AFM ile yüzey pürüzlülüğü ölçümü.	49
Şekil 35. 400 °C’de büyütülen MoO ₃ filminin kalınlık ölçümü, 2D ve 3D AFM görüntüleri.	49
Şekil 36. (a) FTO/SnO ₂ /CdS (b) FTO/SnO ₂ /CdS/ 90 snMoO ₃ (c) FTO/SnO ₂ /CdS/ Tek Tabakalı MoS ₂ (d) FTO/SnO ₂ /CdS/ Tek Tabakalı MoS ₂ /CdTe	51
Şekil 37. (a) FTO/SnO ₂ /CdS (b) FTO/SnO ₂ /CdS/180 sn MoO ₃ (c) FTO/SnO ₂ /CdS/ÇokTabakalı MoS ₂ (d) FTO/SnO ₂ /CdS/ Çok Tabakalı MoS ₂ /CdTe	51
Şekil 38. Güneş hücresi üretim şeması.	53
Şekil 39. Güneş hücresi bant diyagramı.	54
Şekil 40. FTO, FTO/SnO ₂ ve Cam/SnO ₂ ince filmlerine ait XRD grafiği.	56
Şekil 41. (a) FTO/SnO ₂ ince filmine ait 2D, 3D ve histogram AFM görüntüsü, (b) tanecik boyutlarına ilişkin görsel.	57
Şekil 42. SnO ₂ ince filminin kalınlık ölçümü.	57
Şekil 43. <i>in-situ</i> tavllanmış CdS ince filmlerin XRD grafikleri.	59
Şekil 44. <i>Ex-situ</i> tavllanmış CdS ince filmlerin XRD grafikleri.	60
Şekil 45. <i>In-situ</i> tavllanmış CdS ince filmlerin Raman grafikleri.	62
Şekil 46. <i>Ex-situ</i> tavllanmış CdS ince filmlerin Raman grafikleri.	63
Şekil 47. (a-f) RT ve sırasıyla <i>in-situ</i> , 100, 200, 300, 400, ve 500 °C’de tavllanmış CdS ince filmlerinin FE-SEM görüntüleri.	65
Şekil 48. (a-f) RT ve sırasıyla <i>ex-situ</i> , 100, 200, 300, 400, ve 500 °C’de tavllanmış CdS ince filmlerinin FE-SEM görüntüleri.	66
Şekil 49. (a-f) RT, <i>in-situ</i> sırasıyla 100, 200, 300, 400, and 500 °C’de tavllanmış CdS ince filmlerinin AFM görüntüleri.	68
Şekil 50. (a-f) RT, <i>ex-situ</i> sırasıyla 100, 200, 300, 400, and 500 °C’de tavllanmış CdS ince filmlerinin AFM görüntüleri.	69

Şekil 51. (a), (b), (c) ve (d) sırasıyla <i>in-situ</i> ve <i>ex-situ</i> tavllanmış CdS ince filmlerinin geçirgenlik ve soğurma spektrumları.	71
Şekil 52. <i>in-situ</i> tavllanmış CdS ince filmlerinin $(\alpha h\nu)^2$ - $h\nu$ grafiklerinin tavlama sıcaklığına bağlı değişimleri.	72
Şekil 53. <i>ex-situ</i> tavllanmış CdS ince filmlerinin $(\alpha h\nu)^2$ - $h\nu$ grafiklerinin tavlama sıcaklığına bağlı değişimleri.	72
Şekil 54. <i>in-situ</i> ve <i>ex-situ</i> tavllanmış CdS ince filmlerinin $(\alpha h\nu)^2$ - $h\nu$ grafiklerinin tavlama sıcaklığına bağlı değişimleri.	73
Şekil 55. (a), (b), (c) ve (d) sırasıyla <i>in-situ</i> ve <i>ex-situ</i> tavllanmış CdS ince filmlerinin k ve n değerleri.	74
Şekil 56. (a), (b), (c) and (d) <i>in-situ</i> ve <i>ex-situ</i> tavllanmış CdS ince filmlerinin (ϵ_1) ve (ϵ_2) grafikleri.	75
Şekil 57. (a) ve (b) <i>in-situ</i> ve <i>ex-situ</i> tavllanmış CdS ince filmlerinin PL grafikleri.	76
Şekil 58. (a) ve (b) <i>in-situ</i> ve <i>ex-situ</i> tavllanmış CdS ince filmlerinin I-V eğrileri.	77
Şekil 59. <i>in-situ</i> tavllanmış CdTe ince filmlerin XRD ölçümleri.	79
Şekil 60. <i>Ex-situ</i> tavllanmış CdTe ince filmlerin XRD ölçümleri.	79
Şekil 61. <i>İn-situ</i> tavllanmış CdTe ince filmlerin Raman grafikleri.	81
Şekil 62. <i>Ex-situ</i> tavllanmış CdTe ince filmlerin Raman grafikleri.	81
Şekil 63. (a-f) RT, sırasıyla <i>in-situ</i> 100, 200, 300, 400, and 500 °C’de tavllanmış CdTe ince filmlerinin FESEM görüntüleri.	83
Şekil 64. (a-f) RT, sırasıyla <i>ex-situ</i> 100, 200, 300, 400, and 500 °C’de tavllanmış CdTe ince filmlerinin FESEM görüntüleri.	84
Şekil 65. (a-e) RT, sırasıyla <i>in-situ</i> 100, 200, 300 ve 400 °C’de tavllanmış CdTe ince filmlerinin AFM görüntüleri.	86
Şekil 66. (a-e) RT, sırasıyla <i>ex-situ</i> 100, 200, 300 ve 400 °C’de tavllanmış CdTe ince filmlerinin AFM görüntüleri.	87
Şekil 67. (a), (b), (c) ve (d) <i>İn-situ</i> ve <i>ex-situ</i> tavllanmış CdTe ince filmlerinin geçirgenlik ve soğurma spektrumları.	89
Şekil 68. <i>in-situ</i> tavllanmış CdTe ince filmlerinin $(\alpha h\nu)^2$ - $h\nu$ grafiklerinin tavlama sıcaklığına bağlı değişimleri.	90
Şekil 69. <i>ex-situ</i> tavllanmış CdS ince filmlerinin $(\alpha h\nu)^2$ - $h\nu$ grafiklerinin tavlama sıcaklığına bağlı değişimleri.	90
Şekil 70. (a), (b), (c) ve (d) sırasıyla <i>in-situ</i> ve <i>ex-situ</i> tavllanmış CdTe ince filmlerinin n,k grafikleri.	91

Şekil 71. (a), (b), (c) ve (d) sırasıyla <i>in-situ</i> ve <i>ex-situ</i> tavlanmış CdTe ince filmlerinin ϵ_1 ve ϵ_2 grafikleri.....	92
Şekil 72. 400 °C’de büyütülen MoO ₃ filminin XRD grafiği.....	93
Şekil 73 (a), (b) Sırasıyla 400 °C’de büyütülen MoO ₃ filminin 2D ve 3D AFM görüntüleri (c) tanecik boyutlarına ilişkin görseller.	93
Şekil 74. FTO/SnO ₂ /CdS/tek tabakalı- FTO/SnO ₂ /CdS/çok tabakalı MoS ₂ Raman grafikleri.	95
Şekil 75. Tek tabakalı MoS ₂ ve çok Tabakalı MoS ₂ Raman grafikleri.....	95
Şekil 76. FTO/SnO ₂ /CdS/tek tabakalı MoS ₂ Raman haritalama.....	96
Şekil 77. FTO/SnO ₂ /CdS/çok tabakalı MoS ₂ Raman haritalama.....	97
Şekil 78. (a) MoS ₂ ’siz (b) Tek tabakalı MoS ₂ (c) Çok tabakalı MoS ₂ optik mikroskop görüntüsü.....	98
Şekil 79. FTO/SnO ₂ /CdS/tek tabakalı MoS ₂ 2D, 3D, histogram AFM görüntüleri ve tanecik boyutlarına ilişkin görseller.	99
Şekil 80. FTO/SnO ₂ /CdS/çok tabakalı MoS ₂ 2D, 3D, histogram AFM görüntüleri ve tanecik boyutlarına ilişkin görseller.	100
Şekil 81. FTO/SnO ₂ /CdS, FTO/SnO ₂ /CdS/tek tabakalı MoS ₂ ve FTO/SnO ₂ /CdS/çok tabakalı MoS ₂ geçirgenlik spektrumları.	101
Şekil 82. FTO/SnO ₂ /CdS, FTO/SnO ₂ /CdS/çok tabakalı MoS ₂ ve FTO/SnO ₂ /CdS/çok tabakalı MoS ₂ soğurma spektrumları.....	102
Şekil 83. Tek tabakalı MoS ₂ ve çok tabakalı MoS ₂ PL.....	103
Şekil 84. (a) FTO/SnO ₂ /CdS/Tek tabakalı MoS ₂ (b) FTO/SnO ₂ /CdS/Çok tabakalı MoS ₂ Raman Haritalama.....	104
Şekil 85. Fotovoltaik bir güneş hücresinin J-V eğrisi.	105
Şekil 86. MoS ₂ ’siz ve MoS ₂ ’li güneş hücrelerinin fotovoltaik dönüşüm verimliliği.....	105

SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ

Simgeler

%	: Yüzde
°C	: Santigrat derece
A	: Absorption (soğurma)
Ar	: Argon
CdO	: Kadmiyum oksit
CdS	: Kadmiyum sülfür
CdTe	: Kadmiyum tellür
cm	: Santimetre
Cu	: Bakır
D	: Kristalite boyutu
e-	: Elektron
E _g	: Yasak bant aralığı
Fe	: Demir
g /m ³	: Yoğunluk
hν	: Foton enerjisi
I ₀	: Gelen ışığın şiddeti
K	: Değeri 0,89 ile 0,94 arasında olan sabit
kJ	: Kilojoule
kJ/mol	: Kilojoule/ Mol
MHz	: Megahertz
Mo	: Molibden
MoO ₃	: Molibden oksit
MoS ₂	: Molibden disülfür
Ni	: Nikel
nm	: Nanometre
Θ	: Kırınım açısı
O ₂	: Oksijen
Pa	: Paskal
ppb	: 1 milyarlık parçacık sayısı
ppm	: 1 milyondaki parçacık sayısı
Pt	: Platin

R	: Göreli direnç değışimi
RL	: Yük direnci
Rn	: Tabaka direnci
Rs	: Seri direnç
S	: Gaz duyarlılık
s	: Saniye
SiC	: Silisyum karbür
SnO₂	: Kalayoksit
t	: İnce film kalınlığı
T	: Geçen ışığın geçirgenlik yüzdesi
V	: Volt
Vc	: Giriş gerilimi
Vout	: Çıkış gerilimi
W	: Watt
α	: Soğurma katsayısı
β	: Yarı maksimumda tam genişlik
λ	: Dalga boyu
μm	: Mikrometre
χ^2	: Uyum derecesi

Kısaltmalar

AFM	: Atomik kuvvet mikroskobu
CIGS	: Bakır indiyum galyum selen
CIS	: Bakır indiyum selen
CNT	: Karbon nanotüp
CVD	: Kimyasal buhar biriktirme
CZTS	: Bakır çinko kalay sülfür
DC	: Doğru akım
DI	: Deiyonize
ED	: Elektrodpozisyon
FE-SEM	: Alan etkili taramalı elektron mikroskobu
FET	: Alan etkili transistörler
FTO	: Flor katkılı kalay oksit
FWHM	: Baskın pike ait max şiddetin yarısındaki genişlik
GH	: Güneş hücresi

GIXRD	: Grazing Incidence X-Ray difraction
GMO	: Geçiş metali oksitleri
HER	: Hidrojen üretim reaksiyonu
IPA	: Iso-propil alkol
ITO	: Indium Tin Oxide
J_m	: Maksimum akım yoğunluğu
J_{sc}	: Kısa devre akım yoğunluğu
LED	: Işık yayan diyot
OLED	: Işık yayan diyotlar
OPV	: Organik fotovoltaiik
PCE	: Fotovoltaiik enerji dönüşümü
PECVD	: Plazma etkili kimyasal buhar biriktirme
PV	: Fotovoltaiik
PVD	: Fiziksel buhar biriktirme
qV_s	: Yüzey bant bükülmesi
RF	: Radyo frekansı
rGO	: İndirgenmiş grafen oksit
RT	: Room temperature
S_{ccm}	: Dakika başına akan standart santimetreküp
SEM	: Taramalı elektron mikroskobu
SLG	: Cam
TMDC	: İki boyutlu geçiş metal dikalkajonleri
TMO	: Geçiş metali oksitleri
UV	: Ultra Violet

GİRİŞ

Fotovoltaik Enerji Dönüşümü

Becquerel tarafından 1839 yılında yapılan çalışmada fotoelektrokimyasal etki, elektrolit içine batırılmış halojen tuzu kaplı platin elektrotlar kullanılarak keşfedilmiştir. Bu deney PV çalışmaların kaynağı olarak kabul edilmektedir. Becquerel'den sonra Smith, 1873'te selenyum çubuklarının foto iletken özelliklere sahip olduğunu göstermiştir. Smith'in bu çalışması tüm katı maddelerle ilgili ilk çalışma olmuştur. 1940'larda, eser miktarda safsızlık içeren silikon malzeme kullanan Ohl tarafından p-n birleşimi keşfedilmiştir. Güneş hücreleri için mevcut teknoloji ilk olarak 1954'te yarıiletken kullanarak Chapman ve Fuller tarafından rapor edilmiştir. Silikon güneş hücrelerinin potansiyeli anlaşıldıktan sonra, ilk pazarları uzay uyduları olmuştur. Bununla birlikte, teknolojiye gelişmeler, maliyet/enerji oranını düşürmekte ve aynı zamanda hücre performansını arttırmaktadır. Ayrıca, enerji talebindeki artışla birlikte fosil yakıt miktarı azalmış ve bu durumda güneş hücrelerinin ticari uygulamalardaki kullanımını yaygınlaştırmıştır (Coşar 2019).

Küresel enerji talebini karşılamak için fosil yakıtların kullanılması, karbondioksit ve diğer sera gazlarının salınması nedeni ile çevre kirliliğine yol açtıklarından toplum için önemli bir endişe kaynağı olmaktadır. Bu nedenle, temiz ve yenilenebilir enerji kaynaklarının kullanılması acil ve önemli bir gerekliliktir. Güneş enerjisi, yenilenebilir, temiz, çevre dostu, sürdürülebilir, bol ve kolay ulaşılabilir olduğu için fosil yakıtlara umut vadeden bir alternatif olmuştur. Bu yüzden son zamanlarda ortaya çıkan PV teknolojilerin performansını ve istikrarını iyileştirmek için birçok araştırma yapılmaktadır (Hatamvand *et al.* 2020).

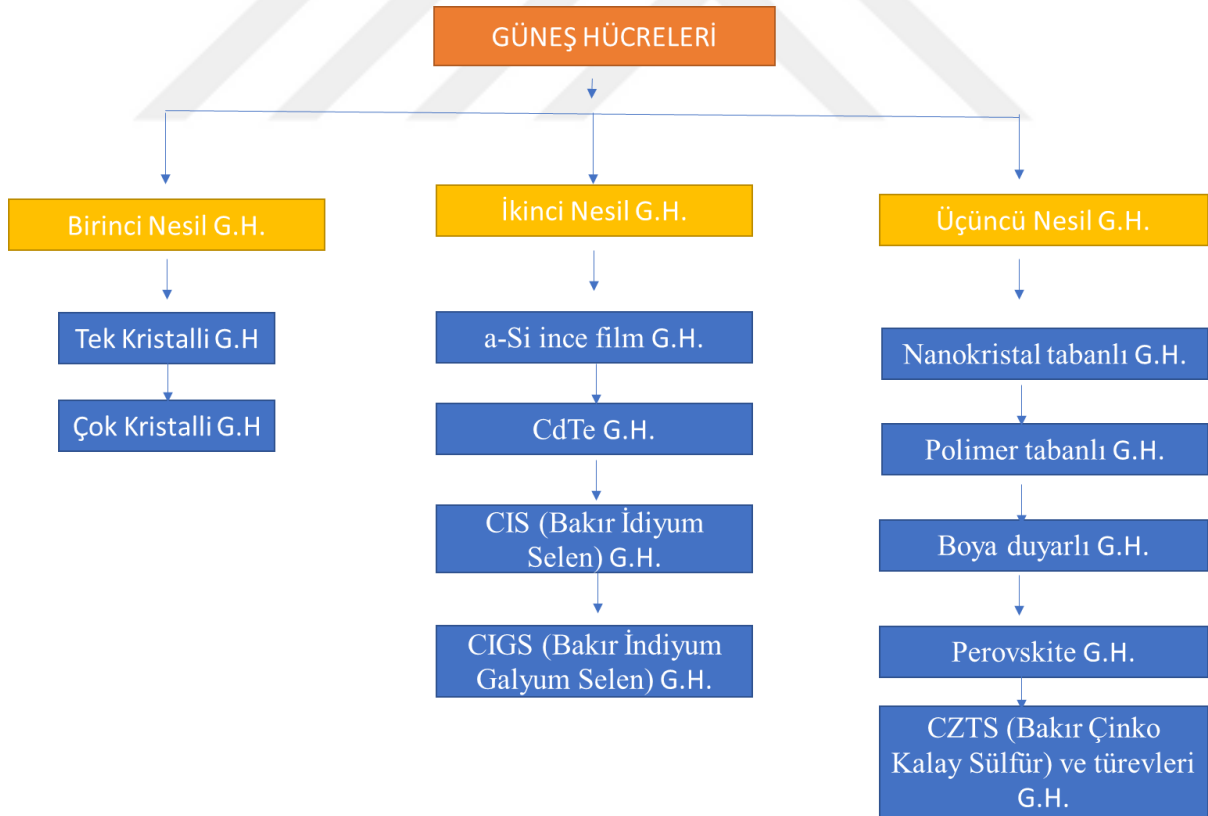
PV teknolojiler

PV'nin doğuşu 1954'te, ABD'nin Bell Laboratuvarı'nda %4,5 güç dönüşüm verimliliğine (PCE) sahip kristal silikon tabanlı güneş hücresi geliştirmesi ile olmuştur. O zamandan beri, araştırmacılar aktif olarak düşük maliyetli bir cihaz yapısı ve PV etkisini gösteren bazı yeni malzemeler aramaktadırlar (Roy *et al.* 2020).

Güneş enerjisi kullanımının önemi her geçen yıl biraz daha artmaktadır. Güneş enerjisinin doğrudan elektrik enerjisine dönüşümü, son kullanıcıya yakın olabilme özelliği, gürültüsüz ve doğaya zarar vermeyen yapısı, bakım gerektirmeyen özellikte olması bu alanı çekici kılmaktadır. Güneş ışığından elektrik elde etmek için kullanılan güneş hücresi (fotovoltaik hücre) üretimi, yenilik ve geliştirme faaliyetlerinin yoğun bir şekilde devam ettiği rekabetçi bir

alandır. Bu alanda verimlilik artışı ve maliyetin düşürülmesine yönelik çalışmalar son yıllarda hız kazanmıştır. Günümüzde pek çok farklı formlarda güneş hücreleri yapılmaktadır. 1. nesil olarak isimlendirilen güneş hücreleri tek ve çok kristal güneş hücrelerini ifade etmekte olup en eski güneş hücresi tipidir. 2. nesil güneş hücreleri ise a-Si ince film güneş hücreleri, mc-Si güneş hücreleri, CdTe güneş hücreleri, CIS ve CIGS güneş hücrelerini içermektedir. Güneş hücreleri içinde nanoteknolojiye dayanan güneş hücreleri olarak ifade edilen 3. nesil güneş hücreleri son yıllarda dikkatleri kendine çekmektedir. Bu güneş hücreleri; nanokristal tabanlı güneş hücreleri, polimer tabanlı güneş hücreleri, boya ile duyarlılaştırılmış güneş hücreleri, perovskite güneş hücreleri ve CZTS ve türevleri olan CZTSe, CZTSSe güneş hücrelerini kapsamaktadır.

Tek eklemden meydana gelen geleneksel güneş hücrelerinin sahip olduğu verimliliğin üst sınırı (Shockley-Queisser Limit) (Shockley and Queisser 1961) %31-%41 arasındadır. Bu limiti aşmak için üçüncü nesil güneş hücreleri potansiyel olarak ortaya çıkmıştır. Bu hücreler üzerinde çalışmalar son yıllarda hız kazanarak devam etmektedir. Güneş hücresi çeşitleri Şekil 1’de verilmiştir.



Şekil 1. Güneş hücresi çeşitleri

a) Nanokristal güneş hücreleri: Nano boyuttaki kristallerin kuantum sınırlılık etkisinden dolayı yasak bant aralığı değişebilmektedir. Bu değişim nano kristalin boyutuyla

ilişkilidir. Ayrıca indirekt olan yasak bant aralıkları da direkt yasak bant aralığına dönüşebilmektedir. Böylece istenilen yasak bant aralığı oluşturularak optik soğurucu bir yapı meydana getirilebilmektedir. Bu özelliği kullanan güneş gözeleri 3. nesil güneş hücreleri içinde yer alıp oldukça popüler bir konudur.

b) Polimer tabanlı güneş hücreleri: Polimer tabanlı güneş hücreleri polimer içeren esnek güneş hücreleridir. Polimerler kendini tekrar eden büyük moleküllerden meydana gelmekte olup bazı formları fotovoltaiik etki göstermektedir. Organik güneş hücreleri de bu gruba girmektedir.

c) Boya ile duyarlılaştırılmış güneş hücreleri: Grätzel hücreleri olarakta bilinen ve ince film güneş hücreleri içinde yer alan düşük maliyetli bu güneş hücreleri, ışığın nano kristal TiO_2 üzerine adsorblanmış olan boya molekülleri tarafından soğurulması prensibine dayanır. Işığı soğuran boya uyarılmış hale geçer ve uyarılan boya molekülü bir elektronunu titanyum oksidin iletkenlik bandına iletir. İletilen elektronlar, TiO_2 filmindeki nano kristal yapılı ağ boyunca ilerleyerek saydam elektrota ulaşır ve buradan da dış devreye geçer. Bir elektronunu TiO_2 'in iletkenlik bandına aktarmasıyla oluşan boya katyonları, redoks çifti içeren elektrolit tarafından nötral hale indirgenir. Yükseltgenen elektrolit ise dış devre üzerinden platinlenmiş elektroda gelen elektron tarafından indirgenir. Bu şekilde organik boya esaslı güneş hücrelerinin çalışması sırasında net yük her zaman sıfırdır. Dolayısı ile kimyasal olarak bir değişme meydana gelmez. Bu elektron aktarım süreçleri sonunda foto-akım meydana gelir. Organik boya esaslı güneş hücrelerinde sürekli akım elde etmek için bu indirgenme-yükseltgenme işlemlerinin sürekli tekrarı gerekir. Bu güneş hücrelerinde verimlilik yüksek olsa da pek çok kısıtlılığa sahiptir.

d) Perovskit güneş hücreleri: 2006 yılında üretilen ilk perovskit güneş hücreleri fotovoltaiik alanında gelecek vaad eden bir konum almıştır. Bu malzeme adını perovskit kristal yapıdan almaktadır. Bu yapının genel formülü ABX_3 'dür. A ve B katyonu X ise anyonu temsil etmektedir. Perovskite güneş hücrelerinde ışık absorblayan tabaka yaygın olarak hibrit organik-inorganik kurşun veya kalay halojenür içeren yapılar kullanılmaktadır. Bu yapıların bant aralıkları 1,5-2,3 eV arasında değişmektedir. Bu tip güneş hücreleri ucuz olmasına karşın stabilite problemlerine sahiptir. Günümüzde en çok çalışılan konular arasında yer almaktadır.

e) Bakır çinko kalay sülfür güneş hücreleri: CZTS güneş gözeleri 1990'lı yıllarda sentezlenmiş ve dörütlü yarıiletken bileşik yapılarına verilen isimdir. Bu bileşiğin türevleri olan CZTSe ve CZTSSe de bu gruba girmektedir. CZTS'ler CIGS gibi optik ve elektronik özellikler sunmaktadır (Taşıyıcı konsantrasyonu ve absorbsiyon katsayısı) ve ince film güneş hücrelerinde absorblayıcı tabaka olarak kullanmak için oldukça uygundur. CIGS ve CdTe gibi

İki veya daha fazla elemandan oluşan yarıiletkenlere bileşik yarıiletkenler denir. Örneğin; GaAs, GaN gibi III-V yarıiletkenleri ve CdTe, CdS vb. gibi II-VI yarıiletkenleri vb. (Evani 2017)

P-N Eklemleri

Denge durumunda homoeiklemler

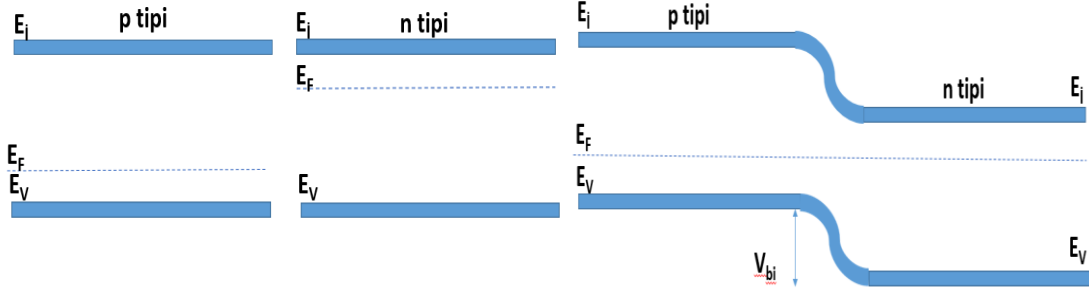
Aynı malzemeden p tipi ve n tipi yarıiletken birbirlerine temas ettirildiğinde bir homoeiklem oluşmaktadır. Şekil 3 (solda), dengedeki p ve n tipi yarıiletkenlerin bant diyagramını göstermektedir. n-tipi bölge yüksek bir elektron konsantrasyonuna, p-tipi bölge ise yüksek bir boşluk konsantrasyonuna sahiptir. Fermi enerji seviyesi, p tipi yarıiletkende değerlik bandına, n-tipi yarıiletkende ise iletim bandına daha yakın olan 0 K'deki bir elektronun maksimum enerjisi olarak tanımlanmaktadır (Evani 2017).

p ve n yarıiletkenleri arasında bir temas sağlandığında, n bölgesinden elektronlar p bölgesine hareket ederken, benzer şekilde p bölgesindeki boşluklar n bölgesine doğru hareket ederler. Yük taşıyıcıların bu difüzyonu, difüzyon akımını oluşturur ve sırasıyla alıcı iyon (negatif) ve donör iyonları (pozitif) oluşur. Bu iyonlar bir elektrik alanı oluşturur. Bu elektrik alanı, tükenme bölgesi (boşluk yük bölgesi olarak da adlandırılır) adı verilen bir bölgeye yayılır ve difüzyon akımına eşit ve zıt bir akım oluşturmaktadır. Eklemin her iki tarafında pozitif ve negatif yüklerin birikmesinden kaynaklanan potansiyele dahili potansiyel (V_{bi}) denir. Termal denge altında, Fermi enerjisi p-n eklemi boyunca mekânsal olarak süreklidir. Sonuç olarak, iletim ve değerlik bantları qV_{bi} 'ye eşit bir miktarda bükülür. Buna engel potansiyeli denir ve iç kısımdaki bir elektronun p tarafındaki iletim bandına geçmek için üstesinden gelmesi gereken enerjiyi temsil eder. Bir p-n ekleminin bant diyagramı denge altında Şekil 3'te gösterilmiştir (sağda).

Dahilipotansiyel:

$$V_{bi} = \left(\frac{kT}{q}\right) \ln\left(\frac{N_A N_D}{n_i^2}\right) \quad (1)$$

N_A ve N_D 'nin p ve n tipi bölgelerde alıcı ve verici konsantrasyonları, n_i intrinsic taşıyıcı Konsantrasyonu, k Boltzmann sabiti ve T mutlak sıcaklıktır (Evani 2017).



Şekil 3. Termal denge durumunda bir p-n ekleminin enerji bant diyagramı

Heteroeklemler

Heteroeklemler iki farklı yarıiletken malzeme arasında oluşturulurlar. Bant hizalamalarına bağlı olarak Tip I, II ve III olarak adlandırılırlar. Şekil 4 (solda), bir temas kurulmadan önceki tip I heteroekleminin n-p bant diyagramını göstermektedir. E_{gn} ve E_{gp} bant aralıkları, Φ_n ve Φ_p yarıiletkenlerin iş fonksiyonları ve χ_n , χ_p sırasıyla n ve p tipi yarıiletkenlerin elektron ilgileridir (Evani 2017).

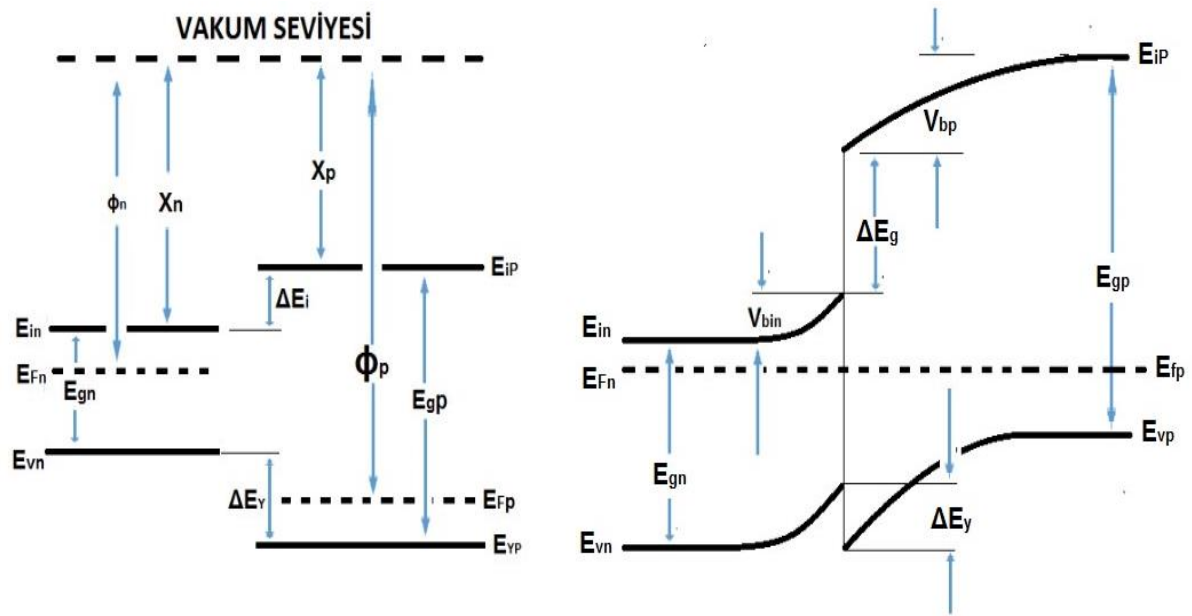
Bir birleşim oluştuğunda, homoeklemlerde olduğu gibi, Fermi enerjisi denge koşulları altında malzeme boyunca sürekli dir. Fermi enerjileri hizalandığında, iletim bandındaki (ΔE_i) ve değerlik bandındaki (ΔE_v) fark, yarıiletken bant aralıkları (ΔE_G) arasındaki farka uyum sağlar. İletim ve değerlik bantlarındaki farklar şu şekilde verilir:

$$\Delta E_i = \chi_p - \chi_n \quad (2)$$

$$\Delta E_v = E_{gp} - E_{gn} - \Delta E_i \quad (3)$$

Toplam dahili potansiyeli (V_{bi}), kısmi dahili potansiyellerinin ($V_{bn} + V_{bp}$) toplamına eşittir. Burada V_{bn} ve V_{bp} , n ve p yarıiletkenlerinin denge durumundaki engel potansiyelleridir.

Bir homoeklem ile heteroeklem arasındaki en büyük fark, taşıyıcılar (elektronlar ve boşluklar) tarafından görülen engel yüksekliğidir. Homoeklemlerde boşluk ve elektron akımlarının büyüklüğü katkılama seviyeleri ile belirlenir. Heteroeklem durumunda, n ve p tarafındaki dahili potansiyellerindeki fark nedeniyle, engel elektronlar ve boşluklar tarafından görülenle aynı değildir. Şekil 4'teki (sağda) elektronlar için engel yüksekliği boşluklardan daha büyüktür (Evani 2017).



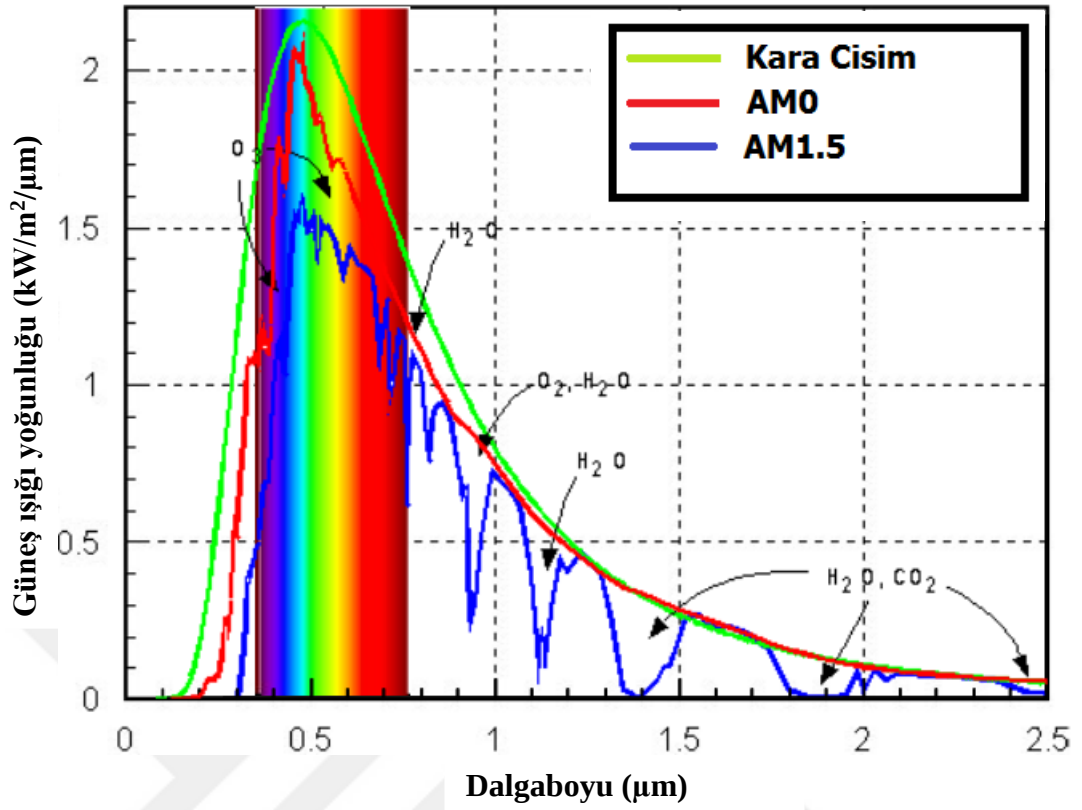
Şekil 4. n-p heteroekleminin temas kurulmadan önce ve sonraki bant diyagramı

Güneş Hücreleri

Güneş spektrumu ve Air Mass (AM)

Yeryüzünde meydana gelen güneş ışınımının güç yoğunluğu atmosferin dışında sabittir ve W/m^2 olarak ifade edilir. Güneş radyasyonu dünyanın yüzeyine ulaşmadan önce atmosferin çeşitli bileşenleri (su buharı, CO_2 vb.) tarafından emilir veya saçılır. Yerel atmosfere ek olarak, enlem, mevsim ve kirlilik gibi faktörler de dünyanın yüzeyine ulaşan güneş enerjisini etkiler. Konumun değişmesi ile birlikte güneş enerjisi yoğunluğunda da değişiklikler meydana gelir. AM adı verilen bu miktar, ışığın dünya atmosferinden geçerken güneş enerjisi yoğunluğundaki değişimini ölçmek için kullanılır. AM, güneşin radyasyonunun en kısa yola normalize edilmiş yol uzunluğu olarak tanımlanır. $AM = 1/\cos\theta$, formülü ile verilir. Burada θ ilgili noktadaki yol uzunluğu ile güneşin zirvede olduğu normal arasındaki açıdır. AM 0, uzaydaki güç yoğunluğunu ifade ederken, AM 1.0 güneş zirvede olduğunda ki güç yoğunluğunu ifade etmektedir. AM 0 koşulunda ölçülen güç yoğunluğu $1,353 \text{ kW/m}^2$ ve AM 1.0'da 1040 W/m^2 'dir.

AM 1.5, dünya çapında ölçülen güneş hücresi verimliliğini karşılaştırmak için küresel standart olarak seçilmiştir ve 844 W/m^2 güç yoğunluğuna sahiptir. Kolaylık sağlamak için spektrum 1000 W/m^2 'ye normalize edilmiştir. Şekil 5, AM 0 ve AM 1.5 spektrumunu göstermektedir (Evani 2017).



Şekil 5. Kara cisim, AM 0 ve AM 1.5 spektrumu

Güneş hücresi parametreleri

Şekil 6, karanlık ortam ve ışık altında ki bir güneş hücresinin I-V özelliklerini göstermektedir. Bu eğri kullanılarak güneş hücresinin tüm performans parametreleri hesaplanabilmektedir. Güneş hücreleri için başlıca performans parametreleri şunlardır:

- Kısa Devre Akım (J_{SC}),
- Açık Devre Gerilimi (V_{OC}),
- Dolum faktörü (FF)
- Verimlilik (η)

Kısa Devre Akımı (J_{SC}), bir güneş hücresinde gerilimin olmadığı ($V=0$) zamanki akım değeridir. Aşağıdaki formülle ifade edilir.

$$J_{SC} = (I_S e^{\frac{qV}{AkT}} - 1) - I_{Ph} \quad (4)$$

I_S ters doygunluk akımı, I_{Ph} foto akımdır.

Açık Devre Gerilimi (V_{OC}), kısa devre akımının sıfır olduğu anda ölçülen gerilimdir. Aşağıdaki formülle ifade edilir.

$$V_{OC} = \left(\frac{AkT}{q} \right) \ln \left(\frac{I_{Ph}}{I_S} \right) + 1 \quad (5)$$

Dolum faktörü (FF), açık devre gerilimi, kısa devre akımı ve maksimum gerilim- akımın oranı ile doğrudan ilişkilidir. Belirli bir akım voltaj eğrisi için mümkün olan maksimum alan FF'yi belirlemektedir.

$$FF = \frac{(V_{max}I_{max})}{(V_{OC}I_{SC})} \quad (6)$$

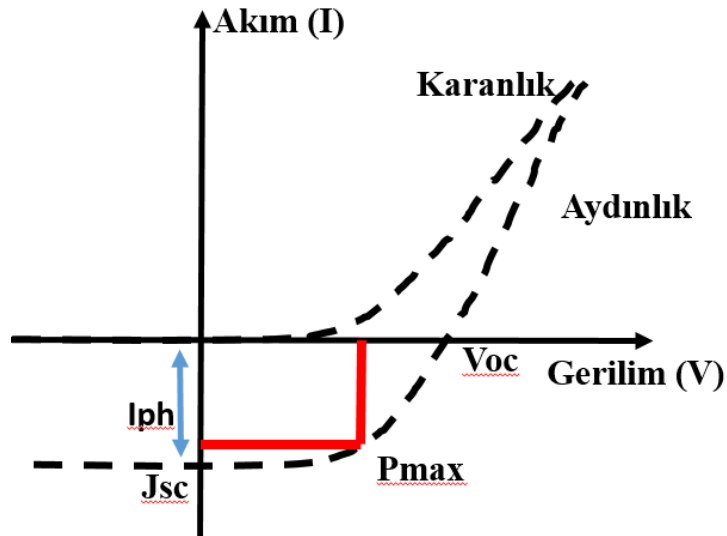
Güneş pilinin (η) verimliliği, pilin çıkış gücünün, güneş hücresine uygulanan güneş ışığının gücü ile birbirine oranı şeklinde tanımlanır. Voc, Isc ve FF tarafından üç parametre kullanılarak hesaplanır. Aşağıdaki ifadede P_{in} , gelen ışık gücüdür (Evani 2017).

$$\eta = \left(\frac{P_{max}}{P_{in}} \right) = \frac{(V_m I_m)}{P_{in}} = \frac{(V_{OC} I_{SC} FF)}{P_{in}} \quad (7)$$

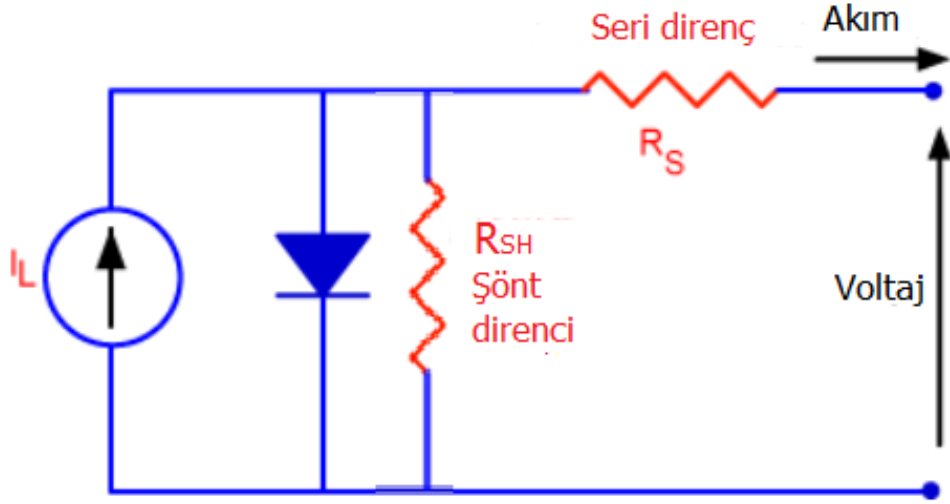
Bir güneş hücresinin verimliliği seri (R_s) ve şönt (R_{sh}) dirençlerinden etkilenir. İdeal bir güneş hücresinde seri direnc sıfır, şönt direnç sonsuzdur. Tüm uygulamadaki cihazlar sonlu seri ve şönt dirençlere sahiptir. Seri ve şönt dirençleri dikkate alınarak, akım için yeni denklem şu şekilde yazılabilir:

$$I = I_S \left(e^{\frac{q(V-I_{RS})}{AkT}} - 1 \right) - I_{Ph} + \frac{(V-I_{RS})}{R_{Sh}} \quad (8)$$

Seri direnç, kontakların direncine ve aygıt büyüklüğüne bağlıdır. Boşluklar, tane sınırları ve güneş hücresindeki dislokasyonlar gibi kusurlar düşük şönt direncine neden olmaktadır. Düşük şönt direnci, Voc değerlerini düşüren yüksek kaçak akımlar üretir. Seri direnç FF'yi de azaltır. Şekil 7, seri ve şönt dirençli bir güneş hücresinin eşdeğer devresini göstermektedir (Evani 2017).



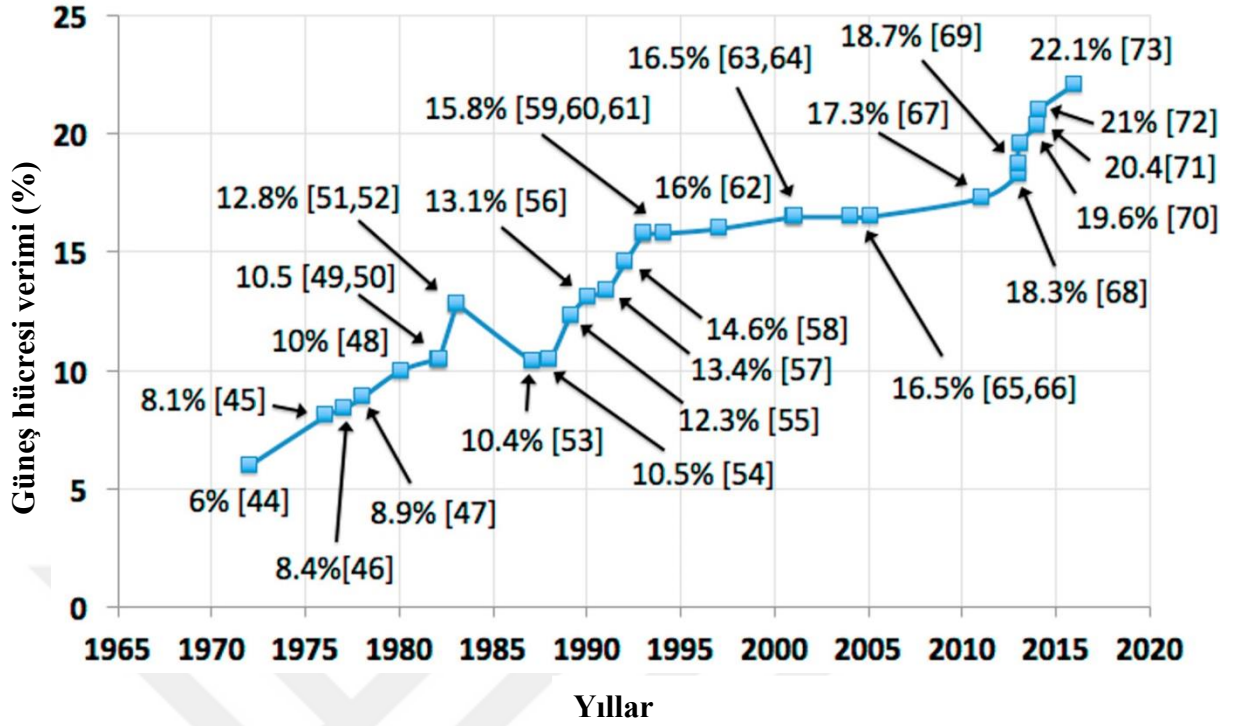
Şekil 6. Bir güneş hücresinin karanlıkta ve aydınlıktaki I-V eğrisi



Şekil 7. Seri ve şönt dirençli bir güneş pilinin eşdeğer devresi

CdTe Güneş Hücreleri

CdTe güneş hücresi için ilk önemli laboratuvar çalışması Bonnet ve Rabenhorst (Şekil 8) tarafından 1972'de rapor edilmiştir. Daha sonrasında ise CdTe, tüm ince film güneş hücreleri içinde birincil aday olmuştur. Büyük bir soğurma katsayısına sahip CIGS gibi doğrudan bant boşluğu olan bir malzemedir. Ayrıca çok çeşitli yöntemler kullanılarak üretilabilen kararlı bir bileşiktir. Hem istiflenme hem de yüzey rekombinasyonu bloke edilirse yüksek verimli hücreler üretmek için ince bir CdTe filmi yeterlidir (Lee *et al.* 2017). CdTe'nin optik soğurma yolu, oldukça kısa olduğundan dolayı, iyi bir iletken yüzeyinde yüzeysel homoeklem oluşturması zordur. Bu nedenle bir pencere tabakası ile heteroeklem oluşturmak daha uygun olmaktadır. CdTe ile birçok yarıiletken heteroeklemi oluşturularak verimi yüksek güneş pili hücreleri üretme çalışmaları yapılmıştır. Bu çalışmaların sonucunda en yüksek performanslı CdTe hücreleri, şeffaf bir pencere tabakası olarak CdS in n-CdS/p-CdTe yapısında Şekil 9'da gösterilen bir üst tabaka konfigürasyonunda üretilmiştir. (Aydın 2013). Yıllara göre CdTe güneş hücrelerinin verim grafiği şekil 8'de verilmiştir (Lee and Ebong 2017).



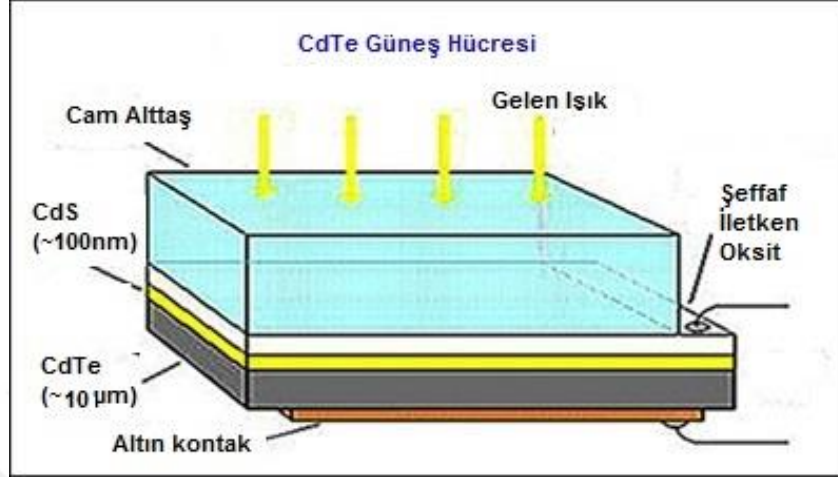
Şekil 8. Yıllara göre CdTe güneş hücrelerinin verimi (Lee and Ebong 2017)

CdS/CdTe yapısı ve özellikleri

CdS/CdTe yapısı 1950’li yıllardan günümüze kadar güneş hücrelerinde çalışılmakta olup pek çok türevi sentezlenmiş bir yapıdır. CdTe direkt bant aralığına sahip bir yarıiletken (E_g = 1,467 eV). Bu bant aralığı güneş hücreleri için bu malzemeyi çekici kılmaktadır (Gross *et al.* 2008). İnorganik bir bileşik olan CdS ise CdTe yarıiletkeninin güneş hücresi performansını manidar bir şekilde artırmış ve bu ikisi birlikte kullanılmaya başlanmıştır (Böer 2011). CdS sahip olduğu 2,5 eV’luk bant aralığı ile güneş hücrelerinde pencere tabakası olarak görev yapmaktadır. Tipik bir CdS/CdTe güneş hücresinin yapısı Şekil 9’da gösterilmektedir. Gerek CdS gerek CdTe farklı atomlarla katkılanarak n veya p tipine dönüştürülebilmektedir

Bonnet ve Rabnehorst CdTe'nin yüksek sıcaklıkta buhar fazı birikmesi ve CdS'nin yüksek vakumla buharlaşmasını içeren üç aşamalı bir işlemle ürettikleri CdTe-CdS p-n heteroeklemlili güneş hücreleri %6 verimlilik göstermiştir. Bu aygıtın özelliklerinden biri ise, Jsc'yi geliştirmek için taşıyıcıların taşınmasını artırmak amacıyla kademeli bir boşluk eklemesi içermesidir. Mo ve CdTe arasındaki arka teması içeren çeşitli sorunlarla karşılaşmışlardır. Çünkü saf Mo'ni bir alttaş olarak kullanmak oldukça yüksek seri direnç ve düşük FF neden olmuştur.

CdS/CdTe güneş hücreleri, tek kristalli silikon güneş hücrelerine göre belirgin bir maliyet avantajına sahiptir. Eastman Kodak Company'nin çalışmaları polikristal CdS ve CdTe'nin %8,9'luk bir verim meydana getirdiğini göstermiştir. Son yıllarda ise yaklaşık %22'lere kadar verim çıkmıştır (Birkmire *et al.* 2010).



Şekil 9. CdS/CdTe güneş hücresinin yapısı

Bu yapılar ışığında var olan güneş hücrelerinin performanslarını geliştirmek ve güneş ışığının büyük bir kısmını soğurması için birden çok katmana sahip malzemeler kullanılmıştır ve kullanılmaya devam etmektedir. İki boyutlu yapılar ve nanokristaller bu tür yapıların oluşturulmasında yoğun olarak kullanılmaktadır. Bu amaçla MoS₂/TiO₂ (Zhou *et al.* 2013), Ag₂O/TiO₂ (Zhou *et al.* 2010), CdTe/CdSe (Chuang *et al.* 2011), MoS₂/WS₂ (Xu *et al.* 2015), ZnS/CdS (Xu *et al.* 2015), CuS/ZnS (Zhang *et al.* 2011), CdS/MoS₂ (Zong *et al.* 2008), MoO₃/MoS₂ (Chen *et al.* 2011), P/Ag/Ag₂O/Ag₃PO₄/TiO₂ (Hu *et al.* 2015) ve (CdS/CdSe/ZnS)-duyarlı TiO₂ (Lee *et al.* 2010), yarıiletken nanokristal heteroeklemleri literatürde yer almaktadır.

-CdTe

Kadmiyum tellür, kadmiyum ve tellürden oluşan kristal formunda bir bileşiktir. CdTe, spektrumunun görünür kısmında yüksek bir optik soğurma katsayısına sahip ve yeryüzü güneş spektrumuyla yakından eşleşen yaklaşık 1,5 eV'luk bir bant aralığına sahip olduğu için PV uygulamalarında neredeyse mükemmel bir malzemedir. Ayrıca 0,5 µm'lik bir film, $\lambda = 700$ nm'deki mevcut fotonların %99'unun soğurulmasını sağlamaktadır. CdTe'nin nispeten büyük bir oluşum entalpisi ve iyi kimyasal stabilitesi vardır. Polikristal CdTe filmler, film kalınlığı ve biriktirme yöntemine bağlı olarak tane boyutları 0.1 ile 10 µm arasında değişebilmektedir (Birkmire *et al.* 2010). Büyütülen CdTe tabakası hem n-tipi olduğundan hem de yüksek dirençli p-tipi olduğundan her durumda uygun bir tavlama işlemi tabakayı p-tipine çevirebilir veya iletkenliğini artırabilir (Aydın 2013).

-CdS

P tipi CdTe soğurucu tabakasına seçilen tampon tabaka n tipi eklem malzemesi çoğunlukla CdS ince filmidir. İlk üretilen CdS/CdTe güneş hücresi örneklerinde CdS tabakası yalnızca geçirgen tabaka olarak kullanıldığından pencere tabakası olarak da tanımlanmıştır. Günümüzdeki tüm CdS/CdTe güneş pillerinde pencere tabakası SnOx benzeri geçirgen iletken film tabakalarıdır. Dolayısıyla CdS katmanı çok daha ince kullanılabilmektedir ve tampon tabaka olarak adlandırılmaktadır.

Güneş hücrelerinde tampon tabakalar için gerekli önemli hususlar;

1. Tampon veya tampon/pencere tabakası üzerine soğurucu malzemenin büyütülmesi için bir alt tabaka görevi görmektedir. Ayrıca büyük tanecikli ve düzgün kristal yapıda olması istenmektedir. Aynı zamanda soğurucu malzeme ve ön kontak arasında paralel direnç oluşturmayacak kadar da ince olmalıdır. Birkaç 10 nm kalınlığa sahip tabakalar bu şartları sağlamaktadır.
2. CdTe'nin biriktirilmesi veya büyütülmesi sonrası yüksek sıcaklıklarda uygulanan ısıtma işlemleri sırasında CdTe ve CdS birbiri içerisine difüze olmaktadır. Bu yüzden tampon tabaka tüm işlemler sonrasında tükenmeyecek bir kalınlığa sahip olmalıdır. Bu birbiri içerisinde meydana gelen difüzyon 1µm veya daha fazla mesafelerde olursa ışık altındaki akım değerini düşürecektir.
3. CdTe ve CdS arasındaki örgü uyumsuzlukları ara yüzey durumlarında artışa neden olur ve bu da aygıtın fotovoltaj performansını etkiler. Fakat pratik uygulamalarda 100 nm civarındaki bir karışım bölgesi ara geçişin yumuşak bir şekilde olmasını sağlar. Bu durum ara yüzey durumlarının gevşemesini sağlar.
4. Eğer CdS içerisindeki boşluk difüzyon uzunluğu L_p , tampon tabaka kalınlığı ile karşılaştırılabilir düzeyde ise CdS içerisinde soğurulan ışık akıma katkıda bulunabilir. Fakat bu durum tartışmalıdır ve genel olarak L_p 'nin çok küçük olduğu ve CdS içerisinde soğurulan ışıktan elde edilen akımın kayda değer olmadığı varsayılır.
5. Optiksel olarak tampon tabaka içerisinde foton soğurumundan kaçınılması gerekir. Bu nedenle tampon tabakası mümkün olduğunca ince olmalıdır veya geniş bant aralığına sahip bir malzeme kullanılmalıdır. Bununla birlikte CdS'in CdZnS, ZnS, ZnSe, SnO₂ ve diğer geniş bant aralığına sahip n tipi malzemelerle değiştirilmesi başarılı olmamıştır (Özden 2015).

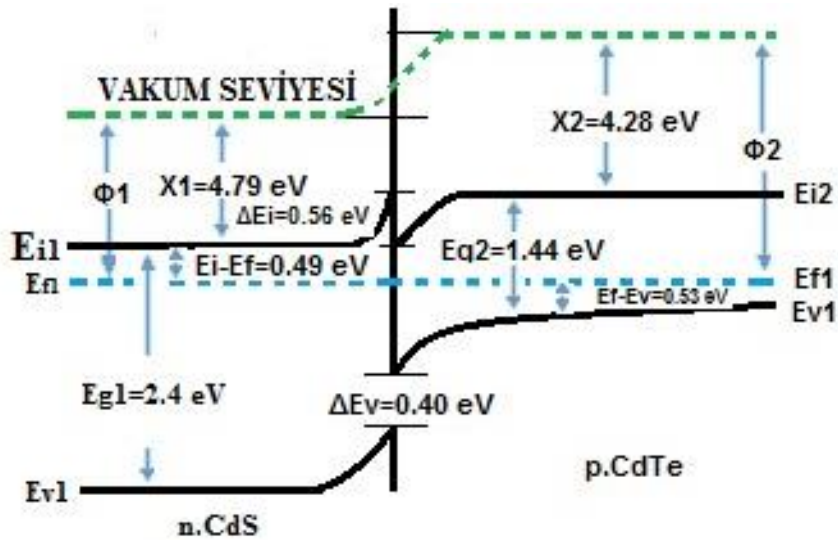
CdTe/CdS Güneş Hücresinin Çalışma Mekanizması

Güneş hücresi, PV etkiye dayalı olarak ışık enerjisini elektrik enerjisine dönüştüren bir cihazdır. PV etkisi 3 adımda açıklanabilir:

1. Işığın soğurulması,
2. Foto-üretilen yük taşıyıcılarının ayrılması,
3. Foto-üretilen yük taşıyıcılarının toplanması.

Bir güneş hücresi esas olarak bir p-n ekleminden oluşur. Yarıiletken malzemenin bant aralığından daha fazla enerjiye sahip fotonlar geldiğinde, valans elektronlarını uyarırlar ve elektron boşluk çifti oluştururlar. Bu taşıyıcılara foto-üretilen taşıyıcılar denir ve bu işleme ışık soğurması denir. Tükenme bölgesine yakın üretilen taşıyıcılar, dahili elektrik alanının etkisi altındadır ve alan yardımı ile ayrılırlar. Son olarak, ayrılmış taşıyıcılar, birleşme yerinin iki ucundaki metal elektrotlar ile toplanır (Evani 2017).

Geniş bant aralıklı n tipi yarıiletken, (CdS) ve dar bant aralıklı p tipi yarıiletken (CdTe) içeren heteroeklem Şekil 10'da gösterilmektedir. CdS pencere tabaka olarak adlandırılırken, dar bant aralığı yarıiletkeni emici tabaka olarak adlandırılır. E_{g1} 'den ($E_{h1} > h\nu$) daha az foton enerjisi n-CdS katmanından geçecek ve sadece CdS'ün bant aralığından daha fazla enerjiye sahip olan fotonlar emilecektir. $h\nu \geq E_{g2}$ ve E_{g1} 'den daha düşük enerjiye sahip fotonlar, p-tipi yarıiletken (CdTe) tarafından emilecektir. Üretilen taşıyıcılar eklem difüzyon uzunluğu içinde toplanır. Heteroeklemlili güneş hücreleri, kısa dalga boyu (λ) bölgesinde daha fazla toplanma nedeniyle homoeklemlere göre daha iyi verime sahiptir. Pencere tabakasının daha geniş bant aralığı, emici katmana daha fazla fotonun (daha kısa λ bölgesinden) girmesine izin verir. Bu durum daha fazla foton yardımı ile taşıyıcı oluşmasına olanak verir (Evani 2017).

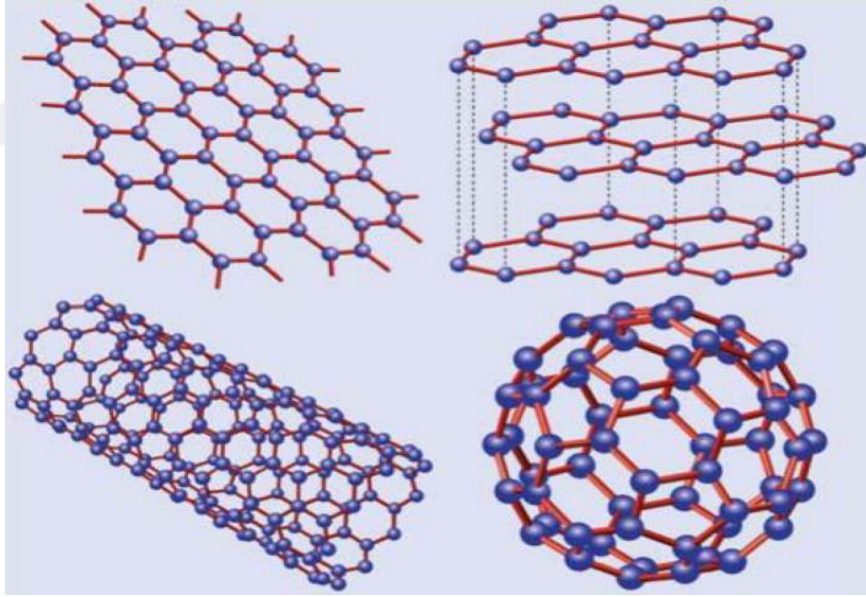


Şekil 10. CdS/ CdTe heteroeklemi

Optoelektronik Uygulamalarda Yeni Nesil Malzemelerin Kullanımı

Gelişen teknoloji ve elektronik ile birlikte araştırmacılar optoelektrik cihazlarda kullanmak ve bu cihazların performanslarını artırırken boyutlarını ve yapılarını küçültmek adına yeni malzeme arayışlarına girmişlerdir. Bu nedenle son on yıl içerisinde birçok önemli çalışma yapılmış ve önemli gelişmeler elde edilmiştir.

Bilinen malzemelerin iki boyutlu formlarının sentezlenmesi ve bu malzemelerin bulk yapılarındaki özelliklerden farklı özellikler sergilemesi araştırmacıları iki boyutlu malzemelere yönlendirmiştir. Bunlardan en çok bilineni ve son on yıl içerisinde en çok çalışılanı grafendir. Grafen, sp^2 -bağlı karbon atomlarının iki boyutlu (2D) balpeteği örgüsünde sıkı paketlenmesi ile bir atom kalınlığındaki tabakasına verilen isimdir ve diğer bütün boyutlu grafitli malzemeler için temel bir yapıtaşdır. Ayrıca gelecek nesil elektronik materyallerde kullanılmak için oldukça dikkat çekici bir malzemedir. Grafen, 0D (sıfır boyutlu) fullenere (her molekülü tamamen karbondan meydana gelmiş içi boş küre, elipsoid veya tüp), 1D (bir boyutlu) nanotüp şeklinde yuvarlanmış veya 3D (üç boyutlu) grafit şeklinde yığılmış olabilir (Şekil 11) (Geim *et al.* 2007; Chen *et al.* 2008).



Şekil 11. Grafen, grafit, karbon nano tüp (CNT) ve fullerene yapıları

Yapısal olarak grafen tek-tabaka, çift-tabaka ve az-tabaka (3'ten 10 tabakaya kadar) olabilir. 10 tabakadan daha fazla tabakaya sahip yapılar ilginç olmaktan çıkmaktadır. Çift ve az-tabakalı grafende karbon atomları hegzagonal, Bernal (Karbon atomların bir tabakada hegzagonal yapı meydana getirmek için atomların yarısının doğrudan bir tabakanın altında ve üstünde diğer yarısının ilk tabakanın üstündeki boşluklarda olacak şekilde istiflenmesi) veya rombohedral olarak yığılabirler. Grafen, hibride olmuş sp^2 bağlarına sahiptir. Düzlemde üç σ (sigma) bağ/atom vardır ve π (pi) orbitalleri düzleme diktir. Güçlü σ bağları hegzagonal yapının

omurgasını oluşturur. Düzlem dışı π bağları diğer grafen tabakaları ile etkileşimi kontrol eder (Hass *et al.* 2008).

Grafenin balistik taşıma, kimyasal kararlılığı, yüksek ısısal iletkenliği, optiksel iletimi ve nanometre ölçeğinde süper su geçirmez özellikleri vardır (Kuzmenko *et al.* 2008). Bununla birlikte grafenin alışlagelmişin dışında elektronik özellikleri de vardır. Grafenlerde yük taşıyıcılarının kütlesiz Dirac Fermionları gibi davranması (Novoselov *et al.* 2004) ve amipolar alan etkisi gibi yeni etkiler (Zhang *et al.* 2005), oda sıcaklığı Kuantum Hall etkisi (Pisana *et al.* 2007) ve Born-Oppenheimer yaklaşımının bozulması (Blake *et al.* 2008) gözlenmiştir. Grafenin üstün elektriksel özellikleri, balistik transistör, alan yayıcı, tümleşik devrelerin bileşenleri, saydam iletken elektrotlar ve sensörler gibi gelecekteki elektronik uygulamalar için oldukça dikkat çekicidir. Grafen yüksek elektron (veya hol) mobilitesini ve düşük Johnson gürültüsüne sahiptir (Elektronik gürültü, dengedeki bir elektriksel iletken içindeki yük taşıyıcılarının uygulanan gerilimden bağımsız olarak ısısal olarak uyarılması ile meydana gelir). Bu özellikler grafenin alan etkili transistör (FET) içinde kanal olarak kullanılmasına izin verir. Düşük gürültü ve çok iyi elektriksel özelliğin birleşimi grafeni harika bir sensör yapar. Grafenin iki boyutlu yapısı, absorbe edilen moleküllerin tespit edilmesinde oldukça faydalıdır. Yüksek elektriksel iletkenliği ve yüksek optik saydamlığı da grafeni, dokunmatik ekranlar, LCD ekranlar, organik fotovoltaik hücreler, LED'ler için gerekli olan saydam iletken elektrot için iyi bir aday yapar (Geim *et al.* 2007; Bonaccorso *et al.* 2010).

İlgi çekici uygulamaların pek çoğu tek tabaka grafenin uygun bir altlık üzerinde büyümesini gerektirir. Bu kontrolü güç bir süreçtir. Grafen sentezi üzerinde pek çok çalışma vardır. Bunların pek çoğu kimyasal buhar çöktürme ve grafitten veya ısısal grafittenmeden bir SiC yüzeyin üzerine mekanik olarak pul pul dökülme (exfoliation) tabanlıdır (Geim *et al.* 2007; Bonaccorso *et al.* 2010, Viculis *et al.* 2003).

Grafen sentez metotları arasında (Soldano *et al.* 2010), pul pul dökülme ve ayrılma (Novoselov *et al.* 2004; Viculis *et al.* 2003), ısısal kimyasal buhar çöktürme (CVD) (Somani *et al.* 2006), plazma geliştirilmiş kimyasal buhar çöktürme (PECVD) (Obraztsov *et al.* 2003), kimyasal metotlar (Horiuchi *et al.* 2004), SiC'in ısısal ayrışması (Wu *et al.* 2009; Rollings *et al.* 2006), diğer altlıklarda ısısal ayrışma (Vázquez de parga *et al.* 2008; Wintterlin *et al.* 2009), karbon nanotüpün (CNT) açılması (Cano-Márquez *et al.* 2009; Turchanin *et al.* 2009) sayılabilir.

Grafenin uygulama alanları içinde grafen alan yayılımı (FE), grafen tabanlı gaz ve biosensörler, alan etkili transistörle, bataryalar, saydam elektrotlar sayılabilir (Choi *et al.* 2010). Bunlar içinde saydam elektrotlar fotovoltaik uygulamalar için kullanılmaktadır. ITO (Indium

Tin Oxide) LCD'ler için saydam iletken kaplamalarda, düz panel ekranlarda, dokunmatik ekranlarda, güneş hücrelerinde ve elektromanyetik (EMI) kalkanlarında yaygın bir şekilde kullanılmaktadır. Bununla birlikte indiyumun yüksek maliyeti, kısıtlı sağlanabilirlik ve kırılkan yapısı altlık olarak kullanımını kısıtlamaktadır. Grafen gelecekteki optoelektronik araçlar için en çok aranan malzemelerden birisi olma yolundadır. Çünkü LCD'ler için güneş hücreleri için saydam elektrotlar içermektedir (Kim *et al.* 2009; Wang *et al.* 2008). Grafenin yüksek saydamlığı ve atomik tabaka kalınlığı olağanüstü ısısal, kimyasal ve mekanik özellikleri ile birleştiğinde grafeni saydam iletkenlik elektrotları için ideal bir aday yapmaktadır. Yüksek hol taşınım mobilitesi, büyük yüzey alanı, oksijen ve suya karşı kararlı oluşu grafeni fotovoltaiik uygulamalarda kullanmaya itmiştir.

Grafenden sonra iki boyutlu formu sentezlenen ve daha önceleri katı yağlama malzemesi olarak kullanılan geçiş-metal dikalkojenleri bu alanda kullanılmaya başlanmış ilgi çekici malzemelerden diğeridir. 2010 yılından sonra iki boyutlu formu sentezlenen Geçiş-Metal Dikalkojenleri (TMDC) MX_2 formülü ile ifade edilen bir materyal sınıfıdır. Burada M, periyodik tabloda IV. Grup elementlerinden Ti, Zr, Hf, vb., V. Grup elementlerinden V, Nb veya Ta, VI. Grup elementlerinden Mo, W, vb. olan bir elementi temsil etmektedir. X ise bir kalkojendir (S, Se veya Te). Bu yapılar X-M-X formunda tabakalı bir yapıda bulunurlar. Periyodik tablodaki TMDC'lerin dağılımına ilişkin görsel Şekil 12'de gösterilmiştir.

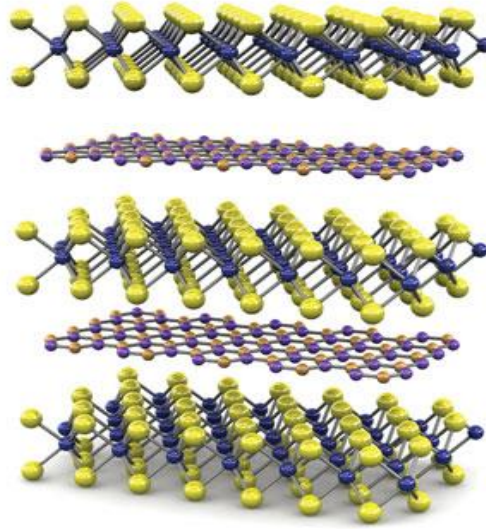
ELEMENTLERİN PERİYODİK TABLOSU

1 H Hydrogen 1.01																	18 He Helium 4.00
3 Li Lithium 6.94	4 Be Beryllium 9.01											13 B Boron 10.81	14 C Carbon 12.01	15 N Nitrogen 14.01	16 O Oxygen 16.00	17 F Fluorine 19.00	18 Ne Neon 20.18
11 Na Sodium 22.99	12 Mg Magnesium 24.31											13 Al Aluminum 26.98	14 Si Silicon 28.09	15 P Phosphorus 30.97	16 S Sulfur 32.06	17 Cl Chlorine 35.45	18 Ar Argon 39.95
19 K Potassium 39.10	20 Ca Calcium 40.08	21 Sc Scandium 44.96	22 Ti Titanium 47.88	23 V Vanadium 50.94	24 Cr Chromium 51.99	25 Mn Manganese 54.94	26 Fe Iron 55.85	27 Co Cobalt 58.93	28 Ni Nickel 58.69	29 Cu Copper 63.55	30 Zn Zinc 65.38	31 Ga Gallium 69.72	32 Ge Germanium 72.63	33 As Arsenic 74.92	34 Se Selenium 78.97	35 Br Bromine 79.90	36 Kr Krypton 84.80
37 Rb Rubidium 85.47	38 Sr Strontium 87.62	39 Y Yttrium 88.91	40 Zr Zirconium 91.22	41 Nb Niobium 92.91	42 Mo Molybdenum 95.95	43 Tc Technetium 98.91	44 Ru Ruthenium 101.07	45 Rh Rhodium 102.91	46 Pd Palladium 106.42	47 Ag Silver 107.87	48 Cd Cadmium 112.41	49 In Indium 114.82	50 Sn Tin 118.71	51 Sb Antimony 121.76	52 Te Tellurium 127.6	53 I Iodine 126.90	54 Xe Xenon 131.29
55 Cs Cesium 132.91	56 Ba Barium 137.33	57-71 Lanthanides	72 Hf Hafnium 178.49	73 Ta Tantalum 180.95	74 W Tungsten 183.85	75 Re Rhenium 186.21	76 Os Osmium 190.23	77 Ir Iridium 192.22	78 Pt Platinum 195.08	79 Au Gold 196.97	80 Hg Mercury 200.59	81 Tl Thallium 204.38	82 Pb Lead 207.20	83 Bi Bismuth 208.98	84 Po Polonium [209]	85 At Astatine 209.98	86 Rn Radon 222.02
87 Fr Francium 223.02	88 Ra Radium 226.03	89-103 Actinides	104 Rf Rutherfordium [261]	105 Db Dubnium [262]	106 Sg Seaborgium [266]	107 Bh Bohrium [264]	108 Hs Hassium [269]	109 Mt Meitnerium [278]	110 Ds Darmstadtium [281]	111 Rg Roentgenium [280]	112 Cn Copernicium [285]	113 Nh Nihonium [286]	114 Fl Flerovium [289]	115 Mc Moscovium [289]	116 Lv Livermorium [293]	117 Ts Tennessine [294]	118 Og Oganesson [294]
57 La Lanthanum 138.91	58 Ce Cerium 140.12	59 Pr Praseodymium 140.91	60 Nd Neodymium 144.24	61 Pm Promethium 144.91	62 Sm Samarium 150.36	63 Eu Europium 151.96	64 Gd Gadolinium 157.25	65 Tb Terbium 158.93	66 Dy Dysprosium 162.50	67 Ho Holmium 164.93	68 Er Erbium 167.26	69 Tm Thulium 168.93	70 Yb Ytterbium 173.06	71 Lu Lutetium 174.97			
89 Ac Actinium 227.03	90 Th Thorium 232.04	91 Pa Protactinium 231.04	92 U Uranium 238.03	93 Np Neptunium 237.05	94 Pu Plutonium 244.06	95 Am Americium 243.06	96 Cm Curium 247.07	97 Bk Berkelium 247.07	98 Cf Californium 251.08	99 Es Einsteinium [254]	100 Fm Fermium 257.10	101 Md Mendelevium 258.10	102 No Nobelium 259.10	103 Lr Lawrencium [262]			

Şekil 12. Geçiş-metal dikalkojenlerinin periyodik tablodaki dağılımı. Periyodik tabloda M ile tanımlanan ve pembe renk ile kısmen ve tam renklendirilmiş elementler TMDC'lere ait geçiş-metallerini gösterirken X ile gösterilen grupta yer alan sarı renk ile renklendirilmiş elementler kalkojenleri göstermektedir (Karataş 2020)

İki hegzagonal düzlemdeki kalkojen atomları metal atomlarının bir düzlemi tarafından ayrılmıştır. Bu durum Şekil 13'de gösterilmektedir. Komşu tabakalar bulk kristal içinde farklı

şekillerde zayıf bir şekilde bir arada bulunabilirler. TMDC'lerin genel simetrisi hegzagonal veya rombohedral olup, metal atomu oktahedral veya üçgen prizma koordinasyonuna sahiptir (Wang *et al.* 2012; Wilson *et al.* 1969).



Şekil 13. Geçiş-metal dikalkojenlerinin yapısı. Sarı atomlar kalkojen grubununu ve mavi atomlar geçiş metallerini temsil etmektedir

TMDC'lerin elektronik özellikleri metallerden yarıiletkenlere kadar genişler. Aynı zamanda TMDC'ler yük yoğunluk dalgası ve süperiletkenlik gibi egzotik davranışlar da sergiler. TMDC'lerin tabaka-bağımlı özellikleri son zamanlarda dikkatleri büyük ölçüde kendine çekmiştir. Örnek olarak birkaç yarıiletken TMDC'lerin bulk formundaki indirekt yasak bant aralığı tek tabaka formunda direkt yasak bant aralığı özelliği göstermiştir. Daha önceleri kayganlaştırıcı veya petrol rafinerisinde katalizör olarak kendine yer bulmuş olan MoS_2 'nin grafen gibi iki boyutlu bir formu yakın zaman içinde sentezlenmiştir. MoS_2 için bulk formunda indirekt yasak bant aralığı 1,2 eV iken tek tabaka formunda direkt bant aralığı 1,9 eV'a artmaktadır (Kuc *et al.* 2011). 1,9 eV değeri ve direkt bant aralığı bu malzemeyi optoelektronik açıdan çekici kılmaktadır. Aynı zamanda MoS_2 'nin elektronik yapısı, vadi polarizasyonunu mümkün kılar ki bu durum çift tabaka MoS_2 'lerde gözlenmez (Mak *et al.* 2012; Zeng *et al.* 2012).

Genel olarak iki boyutlu materyallerde pek çok ilgi çekici tabaka-bağımlı özellik vardır. Grafen ve TMDC'leri içeren iki boyutlu materyaller bulk formlarında sahip olduklarından çok daha değişik özellik göstermektedir. Grafen ve TMDC'ler on yıldır bilinmekte ve çalışılmaktadır. Ama atomik boyutta ince formunun özellikleri yani iki boyutlu formları oldukça yeni olup, nanoelektronik ve optoelektronikte büyük bir heyecan yaratmıştır. Bununla birlikte MoS_2 ile benzer kristal yapıya sahip iki boyutlu MoSe_2 (Coleman *et al.* 2011) ve WS_2 , WSe_2 'nin de tek tabaka halleri sentezlenmiştir.

Yarıiletkenlerin elektronik bant yapısı direkt olarak ışığı soğurma ve yayma yeteneğini etkiler. Direkt yasak bant aralığına sahip yarıiletkenler için yasak bant aralığından daha büyük enerjiye sahip fotonlar kolaylıkla soğrulur ve yayınlanır. İndirekt yasak bant aralığında momentumdaki farklılığı gidermek için ilave bir fonon soğrulmalı veya yayılmalıdır. Bu tür yapılarda foton soğrulma ve yayılma daha az verime sahiptir. Bu açıdan bakıldığında iki boyutlu TMDC'ler yeni nesil optoelektronik araçlar için ilgi çekici hale gelmektedir.

İki Boyutlu Malzemelerin Güneş Hücrelerinde Kullanılması

Üstün mekanik, elektrik ve optik özellikleri grafeni elektronik cihazlar için çekici hale getirmiştir. Fotonik ve optoelektronik uygulamalarda grafenin yükselişi son zamanlarda güneş hücrelerinden, ışık yayan cihazlara, dokunmatik ekranlara, fotodedektörlere ve ultrahızlı lazerlere kadar pek çok alanda elde edilen sonuçlarda kendini göstermektedir (Coleman *et al.* 2011). Grafen, yüksek iletkenliğe sahip olması, tek atom kalınlığında 2 boyutlu olması, neredeyse tamamen saydam olması (saydamlığı 97-98 %) nedeniyle dokunmatik ekranları, LCD'leri, LED'leri ve güneş hücrelerini içeren optoelektronik araçlar için esnek şeffaf elektrotlar ve iletkenler yapmak için oldukça esnektir. Ancak tek tabaka grafenin sahip olduğu sıfır yasak bant aralığı direkt olarak optik özelliklerine tesir etmektedir. Aynı zamanda grafenin sahip olduğu bu özellik transistör uygulamalarında anahtarlama etkisini de olumsuz olarak etkilemektedir.

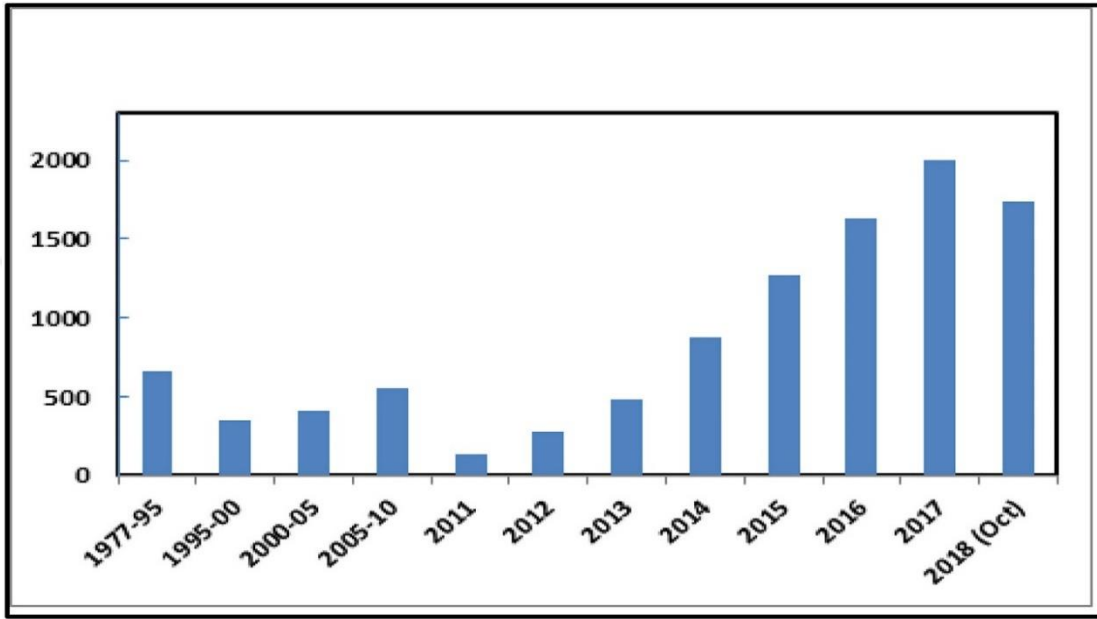
MoS₂'nin indirekt bant aralığı (bulk formu için 1,2 eV) direkt bant aralığına (tek tabaka için 1,9 eV) sahip olduğu tabaka sayısına göre değişebilmektedir. Tabaka kalınlığı azaldıkça bant aralığı artmakta ve valans bant kıyısı ile iletkenlik bant kıyısı momentum uzayında aynı hizaya gelmektedir (Gopalakrishnan *et al.* 2014). MoS₂ için indirekten direkt yasak bant aralığına değişim ve yasak bant aralığındaki enerji artışı fotoiletkenlik, absorpsiyon spektrumu ve fotoluminesans değişim olarak gözlenir (Kuc *et al.* 2011; Mak *et al.* 2010; Splendiani *et al.* 2010). Bu değişim sonucunda tek tabaka MoS₂'de fotoluminesans kuantum verimi bulk haldeki MoS₂'den 10⁴ kat daha fazla olabilir. Ama MoS₂'nin şimdiye kadar ölçülen kuantum verimi 10⁻⁵-10⁻⁶ civarında iken az tabaka ve tek tabaka örnekler için bu 4.10⁻³'ün üstünde olmuştur (Mak *et al.* 2010). Bu değerler direkt yasak bant aralığına sahip yarıiletkenlerinkinden önemli ölçüde düşüktür.

İş fonksiyonu (Fermi seviyesindeki bir elektronu vakum seviyesindeki bir enerji seviyesine taşımak için gerekli minimum enerji) ve bazı TMDC'lerin iletkenlik ve valans bant kıyıları, yaygın olarak kullanılan elektrot materyallerin iş fonksiyonları ile uyumludur (Beal *et al.* 1975; Shimada *et al.* 1994). Ayrıca yasak bant aralığı, metal iyonları ve organik moleküllerle düzenlenebilir olması fotovoltaik uygulamalar için optiksel soğurucu olarak ayarlanabilir. WS₂

ve MoS₂'nin ince filmleri fotoduyarlıdır. Tek tabaka MoS₂'den yapılan bir fototransistör, fotodedektör özellik gösterebilir (Yin *et al.*2012). Bu araçlarda fotoakım gelen ışığın şiddetine bağlıdır. Işık seviyesindeki değişimlere 50 ms gibi bir sürede tepki verebilir.

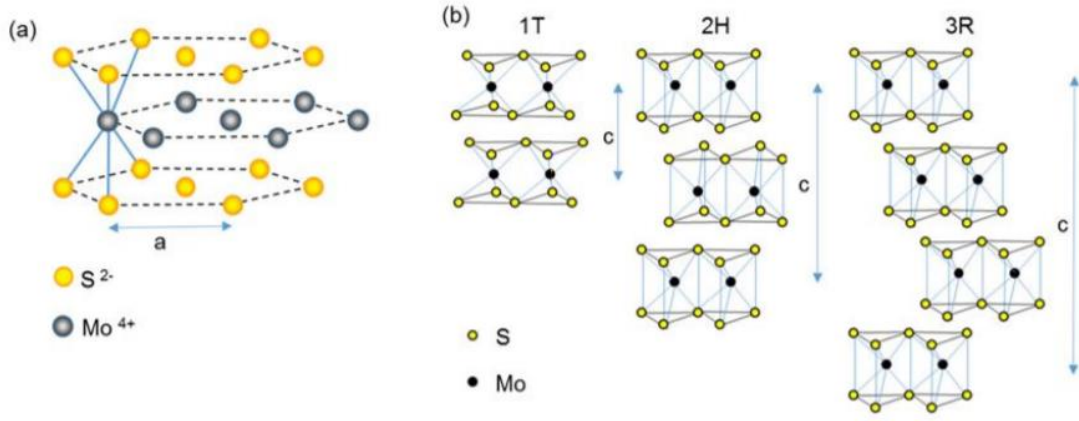
MoS₂ Malzemesinin Yapısı ve Özellikleri

MoS₂ çok araştırılmış ve araştırılmaya devam edilen bir malzemedir. MoS₂'ye ile ilgili yayınlanan makale sayısı Şekil 14'de gösterilmektedir.



Şekil 14. Yıllara göre MoS₂ ile ilgili yapılan yayın sayısı (Krishnan *et al.* 2019)

MoS₂, komşu S – S katmanları arasındaki zayıf van der Waals (vdW) etkileşimleriyle bitişik katmanlara bağlanmış, kovalent bağlı S – Mo – S'nin katmanlı yapısına sahiptir. Şekil 15 (a)'da gösterildiği gibi, S ve Mo atom katmanları altıgen yapıdadır ve her Mo atomu altı S atomu tarafından oluşturulan bir trigonal prizmanın merkezinde bulunur. Böyle bir üç katmanlı sandviç yapı, MoS₂'nin bir tek tabakası olarak kabul edilir ve çok katmanlı MoS₂ oluşturmak için Şekil 15 (b)'de gösterildiği gibi zayıf vdW S – S bağları ile üç olası konfigürasyonda istiflenir.



Şekil 15. (a) S ve Mo tabakalarının altıgen yapısı; (b) Yan görünüm şeması

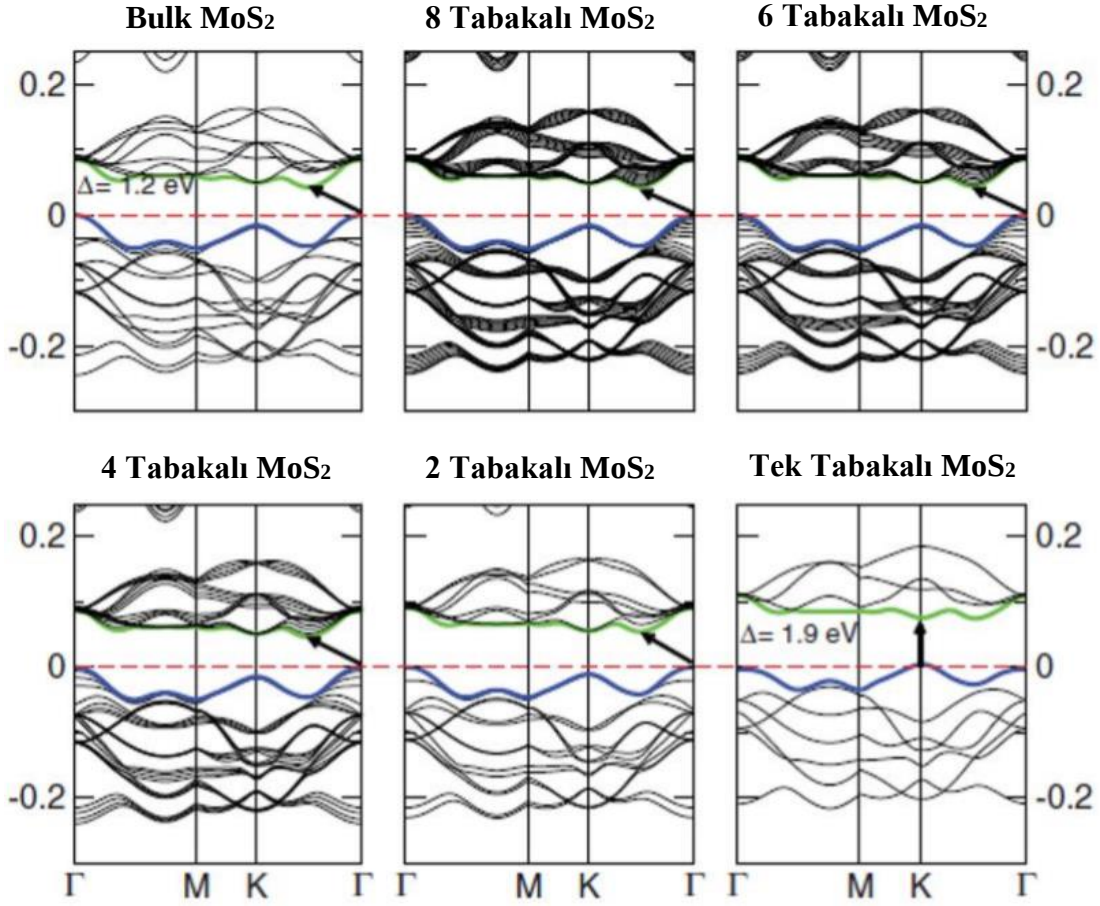
Bu vdW etkileşimleri, TMDC'lerin istifleme sırası ve atom koordinasyonuna göre değişen farklı politiplerin bir bulk kristalinin oluşturulmasını sağlar. Şekil 15 (b) 'de gösterildiği gibi, 1T, 2H ve 3R dahil olmak üzere bilinen üç MoS₂ yapısı vardır. Sayılar birim hücredeki katmanları temsil eder ve harfler kristal simetriyi temsil eder (trigonal için T, altıgen için H ve rhombohedral için R). 2H fazı, doğada ortaya çıkan ana yapı iken, 3R fazı, deneylerimizde de kanıtlanmış olan yüksek sıcaklık ve basınç sentezi sırasında sıklıkla mevcuttur (Towle *et al.* 1966; Zhang *et al.* 2017). Hem 2H hem de 3R fazlarında, geçiş metalleri, istifleme sırasından etkilenmeyen sandviçler içinde trigonal prizmatik koordinasyona sahiptir. 1T-TMDC'ler oktahedral koordinasyonu olan ve 1990'ların başında bulunan metastabil bir evredir (Wypych *et al.* 1992). 1T (D3h nokta grubu) ve 2H/3R (D3d nokta grubu) arasındaki farklar, farklı kristal simetrisi nedeniyle Raman spektrası ile belirlenebilir (Jiménez Sandoval *et al.* 1991). 1T-MoS₂ metastabildir ve 300 K üzerindeki sıcaklık uygulaması ile 2H-MoS₂ yapısına geçebilir (Enyashin *et al.* 2011). Tek katmanlı 1T-MoS₂'nin metalik olduğunu, 2H / 3R'nin ise yarıiletken olduğunu belirtmek de ilginçtir (Shirodkar *et al.* 2014).

MoS₂ için farklı bantların yörünge karakteri, değerlik ve iletim bantlarının Mo'nun d orbitalleri ve S atomlarının p orbitalleri ile hibritlendiği gösterilmiştir (Cappelluti *et al.* 2013). Bulk MoS₂, atomik orbital (ASW-LCAO) metodunun arttırılmış küresel dalga doğrusal kombinasyonu kullanılarak incelenmiştir (Coehoorn *et al.* 1987). Hesaplamaların sonuçları, ARPES (angle resolved photoelectron spectroscopy) ölçümü ile uyumlu bulunmuştur (Jin *et al.* 2013). Şekil 16'da gösterildiği gibi, bulk MoS₂, Γ ve K noktaları arasında Γ noktasında iletkenlik bandının alt kısmına yerleştirilen değerlik bandının tepesinden çıkan 1,2 eV bant boşluğuna sahip indirekt bant aralıklı bir yarıiletkenidir. Bulk MoS₂ K noktasında dolaylı bir bant aralığı olduğuna dikkat edilmelidir. Katmanların sayısı azaldıkça, kuantum sınırlama etkisi nedeniyle temel in-direkt bant aralığı (Γ noktasından Γ noktası ile K noktası arasında yarıya kadar) azalır. Tek tabakalı MoS₂ durumunda, K noktasında bulunan, bant sayısı azaldıkça 0,1

eV'den daha az deęiřen in-direk bant bořluęundan daha b y k olur. Tek katmanla sınırlı MoS₂, bir in-direkt bant yapısına sahip yarıiletken, 2D direkt bant yapısına sahip bir yarıiletkene d n ř r. Bulk MoS₂'nin (1,2 eV) indirekt bant aralıęına, tek tabakalı MoS₂ K noktasında direkt bant aralıęına (1,9 eV) sahiptir.

Atomik olarak ince MoS₂, kırılmadan  nce %25'e kadar elastik deformasyonlara dayanabilen g   l  bir yarıiletken malzemedir. MoS₂'nin b k lme mod l , b k lme hareketine direnen daha b y k terimler nedeniyle grafenden daha b y kt r.  rneęin S atomunun tek tabakası, 1,75 eV b k lme mod l n  temsil eder (Ye 2018).

Isı, aygıt geliřtirmede sınırlayıcı bir fakt r olduęundan elektronik aygıtların geliřtirilmesi ve uygulanması i in olduk a  nemlidir. Tek katmanlı TMDC'lerin kalınlıęının k   k olmasından dolayı, TMDC tabanlı elektroniklerde ısısal y netim daha zordur. Bir yandan kolayca ultra ince sınırlı bir kısımda olduk a lokalize Joule ısıtma (omik ısıtma) “sıcak noktalar” meydana getirirken dięer yandan yapılan teorik ve deneysel  alıřmalar tek katmanlı TMDC'lerin ısısal iletkenliklerinin grafeninkinden 2-3 mertebe daha d ř k olduęunu g stermiřtir. Bu iki sınırlama, TMDC tabanlı aygıtların verimli ısısal y netimi i in  nemli bir problem meydana getirmektedir. Ayrıca, bir aray zde elektron sa ılımına benzeyen, fonon sa ılması nano  l ekli aygıtlarda hayati  neme sahiptir. Bu nedenle, tek katmanlı TMDC'lerde d ř k ısısal iletkenlięi ve aray zdeki ısısal iletkenlik, TMDC tabanlı cihazların performansını ve g venilirlięini  nemli  l  de etkilemektedir. Son zamanlarda, tek katmanlı MoS₂'nin ısısal  zellikleri de kapsamlı bir řekilde  alıřılmaktadır,   nk  ısısal  zellikler tek katmanlı MoS₂'nin termoelektrik uygulamaları i in  nemli parametrelerdir. Tek katmanlı MoS₂'nin termoelektrik Seebeck katsayısı -4×10^2 ile -1×10^5 $\mu\text{V/K}$ arasında deęiřmektedir. Ayrıca grafene kıyasla iyi bir i  bant aralıęı ve b y k Seebeck katsayısına sahiptir. Tek tabakalı MoS₂'nin ısısal iletkenlięi, κ , Raman modunun lazer g c ne baęımlı olarak oda sıcaklıęında yaklaşık $34.5 \pm 4 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ 'dir. Bununla birlikte, molek ler dinamik (MD) sim lasyonları kullanılarak, tek katmanlı MoS₂'nin hesaplanan ısısal iletkenlięi κ , deneysel verilerden  ok daha d ř k olduęu ($1,35 \sim 6 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$) hesaplanmıřtır (Karatař 2020)



Şekil 16. MoS₂ band yapıları (Ye 2018)

MoS₂ Üretim Teknikleri

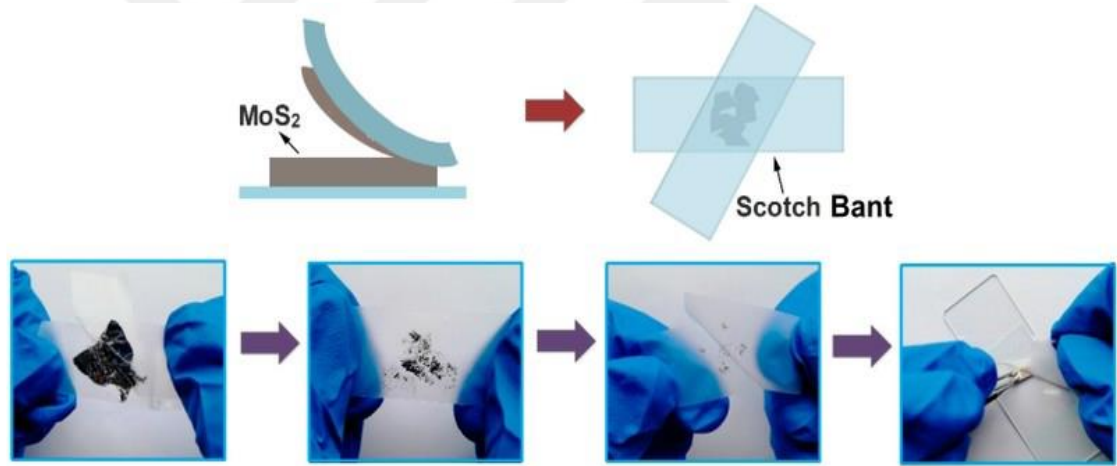
MoS₂ çok zengin yapı çeşitliliğine sahiptir ve bu çeşitlilik özelliklerini artırmaktadır. MoS₂ tabakalı bir malzemedir ve atomik tabakaları kolayca ayrılabilir ve bir tabakaya kadar indirilebilir. Son zamanlarda, birkaç tabakalı MoS₂'nin dikkat çekici elektriksel ve optik özelliklerinden dolayı, çeşitli uygulamalar için daha yaygın bir araştırma başlatılmıştır. Bu aynı zamanda sentez için yeni yaklaşımların geliştirilmesini ve yüksek kaliteli birkaç katmanlı örneklerinin hazırlanmasını sağlamıştır. MoS₂ üretimi için buhar biriktirme, kimyasal sentez, ultrasonikasyon, hidrotermal sentez, sol-jel işlemi, termal ayrışma gibi çeşitli yöntemler mevcuttur. Büyük ölçekli sentez, herhangi bir malzemenin başarısı için önemli bir özelliktir. Büyük ölçekli tek tabakalı kristaller, araya Li ekleme işlemiyle bulk MoS₂'nin eksfoliasyonu yoluyla üretilmiştir.

Bununla birlikte, geniş alanlı film üretimi, daha sonra plazma destekli sentezle ele alınan yüksek sentez sıcaklık (800°C ve üstü) gerekliliği büyük bir dezavantaj olmuştur. Çeşitli yöntemler, farklı şekil ve boyutlu yapılar sahip MoS₂ parçacıklarının elde edilmesine yardımcı olur (Krishnan *et al.* 2019). Bu yöntemler kısa kısa özetlenmiştir.

Mekanik eksfoliasyon

Eksfoliasyon teknikleri, bu tür katmanlı malzemelerin yüksek kaliteli ince filminin hazırlanması için yaygın bir yukarıdan aşağıya yaklaşımdır ve geniş çapta araştırılmıştır. Tipik haliyle sıvı ve mekanik eksfoliasyon içeren bu yaklaşımlar, birçok uygulama için malzemenin büyük ölçekli hazırlanması için güvenilir teknikler değildir.

Mekanik eksfoliasyon tipik olarak düşük verim, kalınlık ve boyutta homojenlik eksikliği gibi dezavantajlara sahiptir. Ancak bu, araştırmacılar tarafından, yaklaşık 10 μm arasında değişen MoS_2 kalınlık katmanlarını doğru bir şekilde ürettiği için tercih edilmektedir (Radisavljevic *et al.* 2011). Mekanik eksfoliasyonun aksine kimyasal eksfoliasyon homojendir. Fakat bol miktarda organik kontaminasyonla sonuçlanmaktadır. Bununla birlikte, doğal kristallerin yüksek kalitesi ve bu yaklaşımlardan elde edilen örneklerin üstün elektriksel ve optik performansı nedeniyle, süreci ve geliştirilmesinin yollarını anlamak önemlidir (Najmaei 2014). Şekil 17’de MoS_2 ’nin nano katmanların mekanik olarak mekanik eksfoliasyon yöntemi ile elde edilmesine ilişkin şematik diyagram ve resimler verilmiştir.

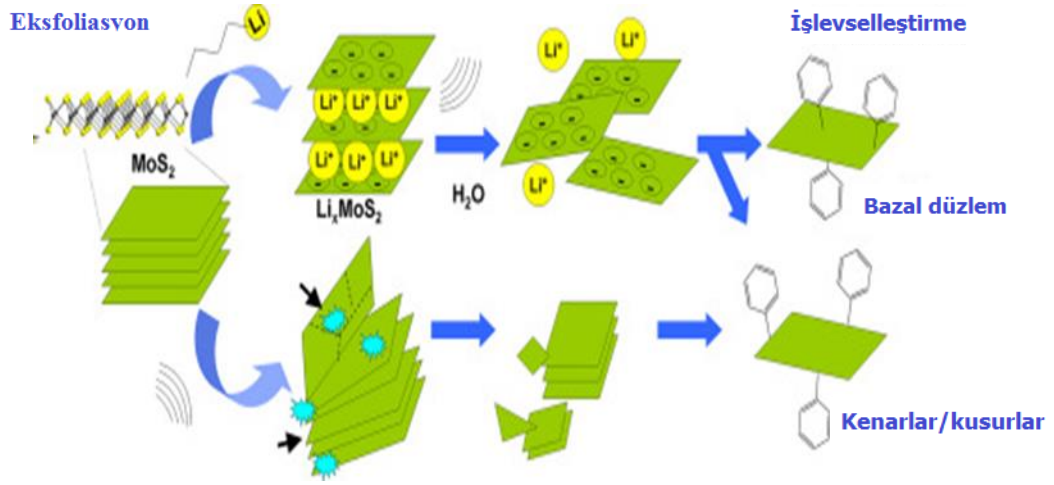


Şekil 17. MoS_2 ’nin nano katmanların mekanik olarak mekanik eksfoliasyon yöntemi ile elde edilmesine ilişkin şematik diyagram ve resimler (Karataş 2020)

Kimyasal eksfoliasyon

MoS_2 ’nin benzersiz özelliklerinin varlığı, bileşiği sentezlemek için yeni bir tür tekniğin araştırılmasını tetiklemiştir. En çarpıcı olanı, kimyasal eksfoliasyondur. Çünkü mekanik eksfoliasyondaki düşük verim sorununun üstesinden gelmiştir. Fizik ve malzeme teknolojisindeki ilerlemeler, büyük ilgi gören iki temel yaklaşımı ortaya koymuştur. Bunlardan ilki iyon araya ekleme, ikincisi çözelti tabanlı eksfoliasyondur. Joensen, Frindt, ve Morrison (1986), iyon interkalasyon yöntemini (Morrison yöntemi olarak da adlandırılır) ilk kullananlardır. Bu yöntem iki adımdan oluşur, ilk olarak MoS_2 katmanlarının boşluklarına lityum gibi küçük boyutlu iyonlar sokulur, genişletilir ve zayıflatılır. İkinci bir adım olarak, bu

araya sokulan tanecikler su ile reaksiyona tabi tutulur. Burada iyonlar hidrojen gazı salan su ile reaksiyona girer. Bu işlem, katmanları ayırır ve çözeltide asılı tek tabaka katmanların oluşmasını sağlar. Bu prosedürde, hafif ısıtma ile birlikte su yerine metanol, etanol ve izopropil alkol gibi çözücüler kullanılması daha iyi sonuçlar elde edilmesini sağlamaktadır. Elde edilen ürünlere yeniden biriktirilmiş MoS_2 denir. Bu prosedürün dezavantajlarından bazıları, reaksiyon süresinin uzaması (3 gün) ve araya ekleme işlemi sırasında kontrol eksikliğidir. Azalan interkalasyon işlemi düşük verime yol açar ve daha yüksek seviye MoS_2 'nin Li_2S 'ye ayrışmasına neden olur. Ek olarak, 2H'nin (yarıiletken) elektronik uygulamalar veya araştırmalar için tercih edilmeyen bir form olan 1T- MoS_2 'ye (oktahedral, metalik) dönüştürülmesine yol açabilir (Zeng *et al.* 2011). Bu nedenle, 1T'yi 2H MoS_2 'ye dönüştürmek için ek tavlama işlemi zorunludur. Hafif tavlama, kimyasal olarak eksfoliasyonlanmış MoS_2 kristallerinin yarıiletken fazını aşamalı olarak geri yükleyebilir. 300 °C'nin üzerindeki bir tavlamanın, bant aralığı fotoluminesansı sergilediği bildirilmektedir (Eda *et al.* 2011). Reaksiyon süresini azaltmak için mikrodalga destekli işlemler önerilmiştir (Benavente *et al.* 1997). Ek olarak, mikrodalga enerjisi de 2H MoS_2 nanosheets, nanokompozitlerin hazırlanması ve 1T'den 2H fazına verimli dönüşüm için bir strateji olarak kullanılır. Elektrokimyasal yöntem, interkalasyon için heksan içinde lityum yerine, bir katot olarak MoS_2 ve anot olarak lityum folyo kullanılarak bir voltaik hücrenin hazırlandığı bir başka modifiye edilmiş yöntemdir. Bu bir galvanik hücre gibi hareket ettiğinden, ölçülen voltaj miktarı ve deşarj, tam interkalasyon işlemi üzerinde daha iyi bir kontrol sunmuştur (Eda *et al.* 2011). Çözelti tabanlı Eksfoliasyon yöntemi olarak da bilinir (Coleman *et al.* 2011). Tabaka ayrılması için enerjinin azaltılması ilkesini, izopropil alkol, N-metilpirrolidon (NMP) gibi organik çözücülerde MoS_2 'nin bulk kristalinin karıştırılması ve sonikasyon ile takip eder. Bu, organik çözeltide asılı optik, titreşim ve biyo algılama uygulamaları için yararlı olan 2B MoS_2 tabakaları ile sonuçlanır. Bu yöntem aynı zamanda 2H MoS_2 kristal yapısını korumak için de kullanılır (Ganatra *et al.* 2014). Bu süspansiyonlar özellikle mikro akışkan sistemlerle uyumludur (Chrimes *et al.* 2013). Şekil 18'de kimyasal eksfoliasyon yöntemi diyagramı verilmiştir.



Şekil 18. Kimyasal eksfoliasyon yöntemi (Grayfer *et al.* 2017)

Kimyasal buhar biriktirme / buhar fazı büyüme süreci (CVD)

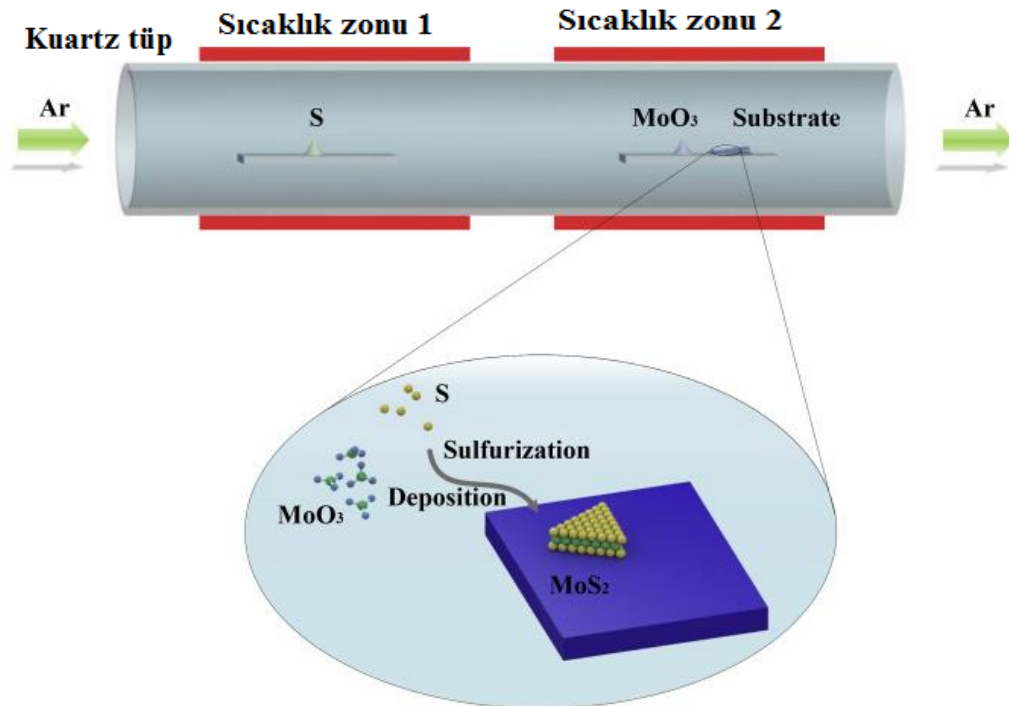
CVD sentez süreci morfoloji, kristallik ve kusurları kontrol etmek için aşağıdan yukarıya bir yaklaşımdır. Bu yöntem, kontrollü özelliklere sahip yüksek kaliteli, yüksek saflıkta 2-D nanomateriyal elde etmek için farklı işlem parametrelerinin kontrolünde çeşitlilik sağlamaktadır. Bu yöntem, çeşitli öncüleri farklı formlarda birleştirerek yeni tip 2-D nanosheets ve bunların hibritlerinin geliştirilmesini kolaylaştırmaktadır. CVD, buharların alttaş üzerine kimyasal reaksiyonu ile büyük ölçekli ince filmlerin üretimini sağlamaktadır. Şekil 19, bu yöntemin şematik diyagramını göstermektedir. Temel CVD yöntemi, buhar katı büyüme yöntemi olarak da adlandırılan doğrudan bir buharlaşmadır. Bir alttaş üzerinde tek bir tabaka olarak daha az miktarda ancak yüksek kalitede küçük flakeler oluşur. Bununla birlikte, süresiz 2D-MoS₂ filmlerin kullanışsızlığı, buhar fazı büyümesinin gelişmesine katkıda bulunmuştur. Burada, altlık üzerinde gerekli uzunlukta ince molibden tabakası oluşturulur ve bunun üzerine kükürt buharı akmaktadır (Krishnan, *et al.* 2019).

CVD yöntemleri üç farklı malzemeden birini kullanır. Birincisi amonyum tiyomolibdat çözeltisi [(NH₄)₂MoS₄] (K. K. Liu *et al.* 2012), ikincisi molibden trioksit tozu [MoO₃] (Lin *et al.* 2012; Najmaei *et al.* 2013) ve üçüncüsü elementel molibdendir. (Laskar *et al.* 2013; Zhan *et al.* 2012). Birinci tip malzeme kullanıldığında bileşik, MoS₂ filmi üretmek üzere çeşitli tavlama aşamaları sırasında ayrışması için yapılır. Kristal tane boyutları, MoS₂ filminin büyümesi için kullanılan alttaş tipine bağlıdır. Safir alttaş kullanılırken SiO₂'den daha büyük kristal boyutları oluşur. N tipi davranışa sahip FET'ler MoS₂ kullanılarak üretilir. 6 cm²/V'luk bir alan etkisi mobilitesine ve yaklaşık ~10⁵'lik bir açma / kapama oranına sahiptirler. Cu folyosu (Shi *et al.* 2012) üzerindeki grafen, bir argon gazı ortamında alttaş olarak kullanıldığını bildirmiştir. 2–5 nm tane MoS₂ büyüklüğü ile sonuçlanmıştır. Ek olarak, grafen yüzeyinde kırışıklıklar kadar

MoS₂ çekirdeklenmesi, altıgen MoS₂ oluşumuna yol açar. (NH₄)₂MoS₄, bir yalıtım altlık üzerine daldırıldığında (K. K. Liu *et al.* 2012), transfer edilebilir, yüksek kristalli üç katmanlı MoS₂ üretilmiş olur.

Balendhran ve arkadaşları, ikinci tip malzeme (MoO₃) kullanıldığında iki aşamalı işlemin kullanıldığı bir toplu sentez metodolojisi geliştirmişlerdir. MoO₃ ilk önce rastgele bir altaş üzerinde buharlaştırılır, ardından bir kuvars tüp içinde sülfidasyon işlemi yapılır. Bu iki aşamalı yöntem, daha yüksek elektron hareketliliği nedeniyle daha fazla tercih edilmektedir. Bu yöntemle üretilen n-tipi FET, 0,02 cm²/V alan etkili hareketliliği ile birlikte ~10⁴ açma / kapama oranı sergilemiştir. FET cihazlarına ve uygulamalarına göre elektronik aygıtı özelleştirmek için çeşitli sıcaklık ve basamak kombinasyonları denenmiştir (Balendhran *et al.* 2012). İşlem MoO₃ yerine toz MoS₂ kullanılarak gerçekleştirildiğinde, yüksek kristaliniteye sahip üçgen şekilli MoS₂ flakeleri oluştuğu bildirilmiştir (Wu *et al.* 2013). Mikrodan birkaç nanometreye kadar tane büyüklüğünde düzgün ve yüksek kaliteli tek ve iki tabakalı MoS₂ filmi üretmek için öncü olarak daha fazla MoCl₅ ve element kükürt kullanılmıştır (Yu *et al.* 2013).

Üçüncü tip malzeme kullanılırken, ince bir molibden film tabakası SiO₂ altaş üzerine yapılır ve inert atmosferde yüksek sıcaklıkta sülfürlenir (Laskar *et al.* 2013). Bunun sonucunda MoS₂'nin hem n-tipi hem de p-tipi davranış sergilediği bildirilmiştir. Bu işlem, üçgen şekilli tek kristallerin birleşmesiyle MoS₂ atomik katmanlarını etkili bir şekilde büyütür. Bu durum büyük ölçekli ve az katmanlı MoS₂'nin yüksek düzeyde kristallik sergilemesine neden olur.

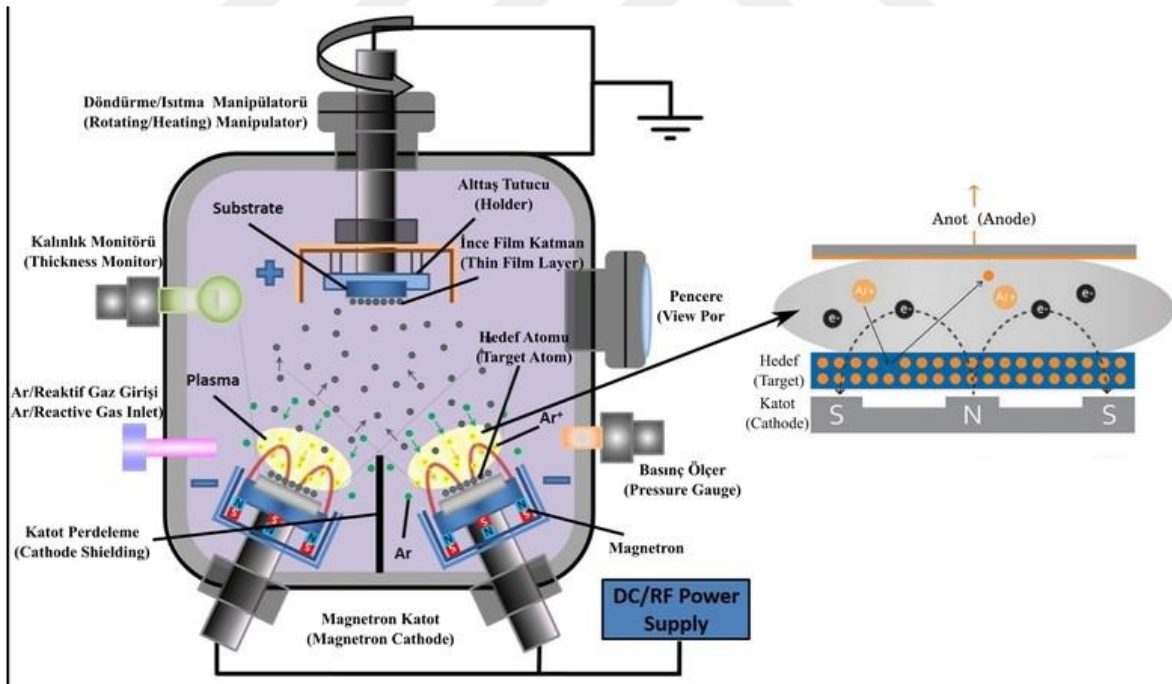


Şekil 19. CVD metodu (Y. Wang *et al.* 2020)

Manyetik alan sıçratma metodu

Son zamanlarda RF sıçratması yoluyla iki ve birkaç kat MoS₂ filmlerin sentezlenmesi için basit bir yaklaşım rapor edilmiştir. Biriktirilen MoS₂ filmleri tavlama işlemine tabi tutulmuştur. Çalışmalarında, MoS₂ filmleri, sıçratma sistemindeki bir MoS₂ hedef kullanılarak imal edilmiştir. Numunelerin kristal kalitesini artırmak için ince filmler, kükürt ve argon atmosferi altında 700 °C'de biriktirme sonrası tavlamaya tabi tutulmuştur. Araştırma, sürekli MoS₂ filminin büyümesini doğrulamıştır. İşlem, iki tabakalı büyümenin yanı sıra birkaç katman MoS₂ film büyümesinde reaksiyon parametresini kontrol ederek kolayca elde edilebilmiştir. Raman ve PL spektrumları, MoS₂ filmlerin kristal kalitesinin arttığını doğrulamıştır (Singh *et al.* 2018).

Karataş ve Yılmaz (2020) 400 °C'de magnetron sıçratma sistemi ile Si alttaş üzerine farklı kalınlıklarda MoO₃ büyüttmüşler ve ardından CVD fırınında 650 °C'de son sülfürizasyon işlemi yaparak çok katmanlı MoS₂ filmleri elde etmişlerdir. Elde edilen çok katmanlı MoS₂ filmlerinin tek katmanlı gibi geniş band aralığına sahip olduğu belirlenmiştir. Bu durumun yapıdaki MoO₂ fazından kaynaklandığına atıf yapılmıştır. Şekil 20'de manyetik alan sıçratma yönteminin şematik diyagramı verilmiştir.



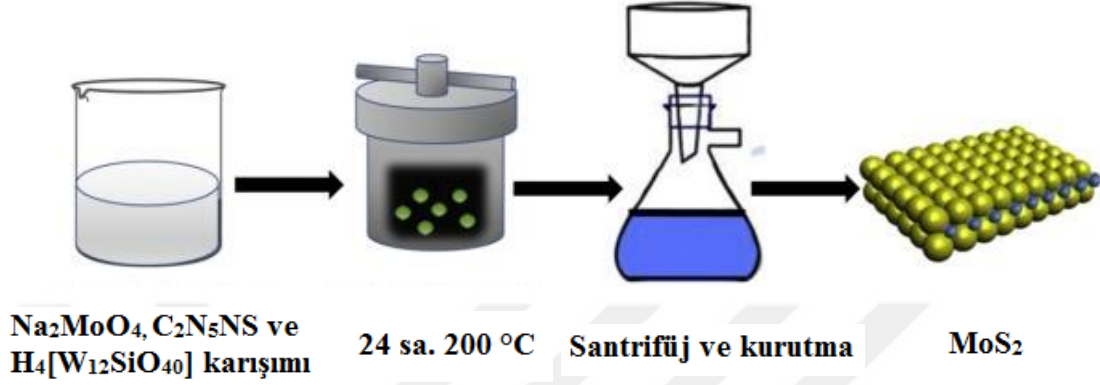
Şekil 20. Manyetik alan sıçratma metodu (Karataş, 2020)

Hidrotermal interkalasyon

Bu yöntemde LiOH, etilen glikol ve MoS₂ bulk kristalleri kullanılmaktadır. Sentez gözenekli poli-viniliden florür ile filtreleme ve 60 °C'de kurutma gerektirir. 4,68 nm'lik üniform büyük nanosheet üretilmektedir (Y. D. Liu *et al.* 2013).

Hidrotermal metod

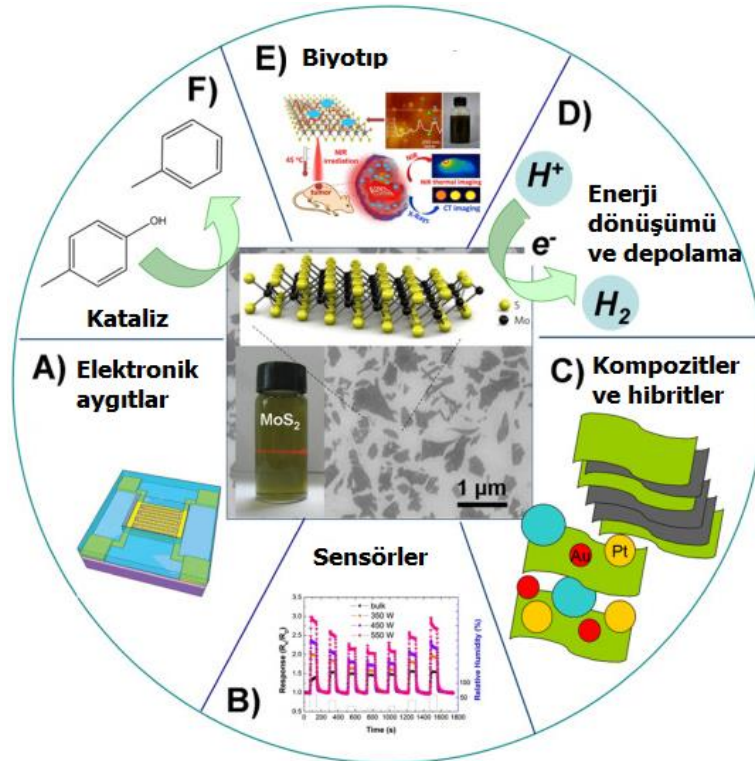
Bu yöntemde Sodyum molibdat tiyoasetamid ve deiyonize (DI) su kullanılmaktadır. 24 saat boyunca 200 °C'de otoklavda tutulduktan sonra 10 dakika 10000 rpm'de santrifüjlenir ve 60 °C'de 10 saat kurutma işlemine tabi tutulmuştur. Mezoporoz MoS₂ kristal kafes saçakları yaklaşık 0.64±0.05 nm bulunmuştur (Ramadoss *et al.* 2014). Şekil 21'de hidrotermal yöntemin şematik diyagramı verilmiştir.



Şekil 21. Hidrotermal metod (Chaudhary *et al.* 2018)

MoS₂ Uygulamaları

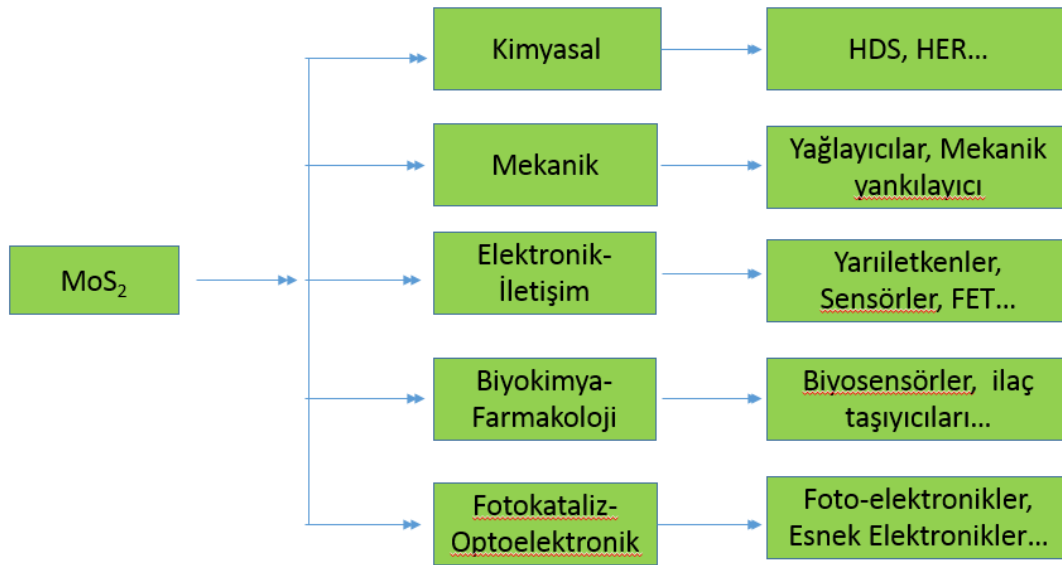
MoS₂, mekanik, elektronik ve fotoelektrik, elektromekanik ve biyokimyasal alanlar gibi tüm birincil alanlarda uygulamalar bulmuştur. Şekil 22'de, MoS₂'nin uygulama alanları gösterilmektedir.



Şekil 22. MoS₂ uygulamaları (Grayfer *et al.* 2017)

Mekanik

Yağlayıcı olarak petrokimya endüstrisine, uzay makinelerine ve mekanik rezonatlara kadar değişen endüstrilerde önemli bir rol öngörülmektedir. Katı yağlayıcılar, yüksek ve düşük sıcaklık, yüksek ve düşük basınç ve sıvıların ve yağların kullanılmadığı yüksek şaft hızına sahip olanlar da dahil olmak üzere aşırı ortamda yüzeyler arasındaki birçok sürtünmeyi azaltır. Bu, özellikle sıvıların donabileceği veya buharlaşabileceği yüksek veya düşük sıcaklıklı ortamlarda sürtünmeyi en aza indirmek ve tutukluğu ve saflaşmayı önlemek için sıvı yağlayıcılara bir alternatiftir. Molibden disülfidin, altıgen tabaka kafes yapısıyla külçe halinde bir yağlayıcı olarak uygulanması, birçok malzemeye düşük sürtünme ve mükemmel yapışması nedeniyle büyük bir başarı olmuştur. Ayrıca, katmanlı yapı biçiminde kafes yapısında büyük boşluklar, zayıf VDW bağlanması ve iyi bir termal olarak kararlı yağlayıcılar olarak başarı oranını arttırmıştır. MoS₂, sınır yağlama rejiminde MoS₂ gresi olarak metalden metale temasın olduğu yerlerde en iyi performansı göstermektedir. MoS₂'nin kullanıldığı başlıca sektörler ulaştırma endüstrisi, madencilik, inşaat, tarım ve askeri / havacılıktır (Krishnan *et al.* 2019). Şekil 23 MoS₂'nin performansta mükemmel olduğu alanları göstermektedir.



Şekil 23. MoS₂'nin performansta mükemmel olduğu alanları

Biyosensörler

MoS₂'nin yüksek yüzey/hacim oranı ile birlikte elektrik, optik ve titreşim karakteristikleri alanında tek tabakalı formdaki benzersiz özelliklerinin biyosensörlerin formülasyonu için avantajlı olduğu kanıtlanmıştır (Kalantar-zadeh *et al.* 2015; Pumera *et al.* 2014).

Gaz algılama

Alttaş ve MoS₂ tarafından oluşturulan eklem MoS₂ kullanarak algılama yapar. Elektrokimyasal (Krishnan *et al.* 2019) ve biyomoleküler sensörler dışındaki böyle bir algılama bileşeni gaz sensörleridir. MoS₂, NO₂, amonyak ve H₂ (Y. Liu *et al.* 2015) ve diğer birçok toksik ve toksik olmayan gazın algılanması için kullanılmaktadır. Aynı prensibe dayanarak pH seviyesi detektörleri de tasarlanmaktadır. Hedef malzemenin birleşme yerinin gaza maruz kalması elektriksel iletkenlikte değişikliklere yol açmaktadır.

Kimyasal uygulama

MoS₂, külçe ve nano aşamada aynı temel kimyasal özelliğe sahiptir. Enerji seviyelerindeki değişiklik ve nano formlardaki elektronların varlığı nedeniyle, MoS₂ hidrodesülfürizasyon, hidrojen üretim reaksiyonları ve ayrıca gaz sensörleri için iyi bir katalizördür.

Çevre koruma ve emisyon kontrol politikası, süper düşük kükürtlü benzin ve dizel yakıtları kaçınılmaz kılmıştır. Bu durum kükürt giderme için hidro-işlem kataliz sürecinin zorunlu bir faaliyet olmasına yol açmıştır ve metal sülfürler son on yılda kayda değer bir ilgi görmüşlerdir (Ma *et al.* 1994).

Katalitik aktivite

MoS₂'nin tekstil endüstrisinin boyalarının tanımlanmasında ve giderilmesinde kullanılan güçlü fotokatalist özelliklere sahip olduğu bildirilmiştir. Burada harici ışık kaynakları elektronları uyarır ve valans bandından iletim bandına ve daha sonra dönüşüm için hedef moleküle iletir. Metilen mavisinin bozulması uygun bir örnektir (Zhou *et al.* 2014). Daha iyi fotokatalitik davranış için çeşitli MoS₂ esaslı nanokompozitler de üretilmektedir (Honglin Li *et al.* 2015).

Optoelektronik cihazlar

Elektrolüminesans, ışık yayan cihazlar için önemli temel bir özelliktir. MoS₂ yarıiletkenlerindeki doğrudan bant aralığı nedeniyle bu özelliğe sahiptir. Bu cihazlarda elektrolüminesans, p-n eklemi oluşmadan eksitonlar kullanılarak oluşturulur.

2D-MoS₂, fotovoltaiik hücrede, Al, Si ve Ag gibi farklı altlıklara sahip hetto-bileşimli güneş pilinde aktif bir tabaka olarak bir uygulamaya sahiptir.

MoS₂ diğer malzemelerle birlikte hibrid fototransistör gibi yeni optoelektronik uygulamalar için kullanılmaktadır. İndiyum selenid (InSe) nano yapraklar ve 2D MoS₂'nin

kuantum noktaları hibridizasyonu, %3,03'lük fotovoltaiik verimlilik saęlayan fototransistör oluřturulmuřtur (Ulaganathan *et al.* 2019) .

Süperkapasitörler

MoS₂'nin gözenekli morfolojisi, aktif iyonlar ve hızlı iyon/elektron transferi ile elektrolit arasındaki geniş temas alanı nedeniyle elektrokimyasal performansı artırır. MoS₂ nanoyapı tabanlı kapasitörlerden yüksek hızlı řarj taşıma kapasitesi ve uzun çevrim ömrü gibi yüksek kalite beklenmektedir (Soon *et al.* 2007).



KURAMSAL TEMELLER

Bu bölümde, CdS/CdTe güneş hücreleri, MoS₂ malzemesinin üretimi ve güneş hücrelerindeki kullanımlarına yönelik yapılan araştırmalar incelenmiştir.

CdS /CdTe Güneş Hücreleri

Polikristal CdTe ince film güneş hücresi, düşük maliyetli ve yüksek güç dönüşüm verimliliği için en umut verici güneş teknolojilerden biridir. 2016 yılında, CdTe güneş hücresi için %22,1'lik en yüksek verim rapor edilmiştir (He *et al.* 2020).

Tamamen manyetik alan sıçratma sistemine dayanan güneş hücresi üretim süreci, endüstriyel uygulamalar için en uygun olarak kabul edilir. CdTe tabanlı güneş hücrelerinin genellikle CdCl₂ doymuş çözelti banyosu ve ardından yüksek sıcaklık tavlaması ile gerçekleştirilen aktivasyon muamelesine ihtiyacı vardır (He *et al.* 2020).

Camacho-Espinosa ve arkadaşları (2017) yaptıkları bir çalışmada, tüm manyetik alan sıçratma ile üretilen CdTe güneş pilleri için Ar-O₂-CHClF₂ ve hava-CHCl₂ ile kontrollü gazlı ortamlara dayanan alternatif aktivasyon işlemleri incelemişlerdir. Güneş hücreleri, CdCl₂ doymuş çözeltisi ile aktifleştirilen hücreler ile karşılaştırılmıştır. Tüm manyetik alan sıçratma ile üretilen (cam/ITO/ZnO/CdS/CdTe) yapıları, X-ışını kırınımı ve alan emisyonu taramalı elektron-mikroskopisi ile aktivasyon işlemlerinden önce ve sonra karakterize edilmiştir. Güneş hücreleri, harici kuantum verimliliği ve akım yoğunluk-voltaj eğrileri ile karakterize etmişlerdir. Ar-O₂-CHClF₂ gas karışımı ile aktive edilen polar hücre için V_{oc} = 0,797 V ve J_{sc} = 25,4 mA/cm² değerlerine ulaşan %11'lik bir verimlilik elde etmişlerdir. 580-830 nm aralığında kuantum verimi %90 hesaplamışlardır.

Paudel, Compaan, ve Yan (2013) yaptıkları çalışmada tüm manyetik alan sıçratma ile üretilen CdS/CdTe güneş hücrelerinin MoO_{3x}/Au arka kontakları için performansını incelemişlerdir. Hücreler, FTO üzerine yüksek dirençli şeffaf bir SnO₂ tampon tabakası ile üzerinde üretilmiştir. MoO_{3-x}/Au arka kontak katmanları termal buharlaştırma ile büyütülmüştür MoO_{3x} katmanının dahil edilmesinin açık devre voltajını (V_{OC}) geliştirdiği, ancak CdS/CdTe hücrelerinin FF azalttığı bulunmuştur. V_{OC}, MoO₃ tabakasının kalınlığına duyarlı olmadığı, FF'in ise çok hassas olduğu belirlenmiştir. MoO₃ tabakası için optimal kalınlığın 2-5 nm olduğu, bu da yaklaşık %12 verimlilik sağladığı tespit edilmiştir.

Guo, Zhu ve Li (2015) manyetik alan sıçratma ile ürettikleri FTO/CdS/CdTe/Cu/Au güneş hücrelerinde sırasıyla 370, 380 ve 390 °C'de CdCl₂ aktivasyon işlemi

gerçekleştirmişlerdir. Morfolojik çalışmalar CdS/CdTe arayüzünde CdCl₂ tavlama işleminden sonra deliklerin azaldığını belirtmişlerdir. Bu durumun p–n eklemine performansını arttırdığını rapor etmişlerdir. Ayrıca, CdTe güneş hücrelerinin ΔE_g değerinin artan tavlama sıcaklığı ile arttığı bulunmuştur. CdTe güneş hücrelerinin verimliliği, tavlama sıcaklığının bir fonksiyonu olarak %0,02'den %12,02'ye yükseldiği rapor edilmiştir.

Gupta, Parikh ve Compaan (2006) CdS/CdTe güneş hücrelerini, 0,5–1,28 μm aralığında ultra ince CdTe katmanları ile magnetron alan sıçratma tekniği kullanılarak üretmişlerdir. Ultra ince filmler ve hücreler, XRD, optik iletim, SEM, akım-voltaj ve kuantum verimlilik ölçümleri kullanılarak karakterize edilmiştir. Bu sonuçlar standart 2,3 μm kalınlığında CdTe hücrelerin sonuçlarıyla karşılaştırılmıştır. Ultra ince CdTe hücreleri, standart CdTe hücrelerine çok benzeyen CdCl₂ muamelesinden sonra kristalografik doku ve CdTe1 pxSx alaşım oluşumu göstermiştir. Biriktirme sonrası CdCl₂ işleminin optimizasyonu ve geri temas işlemi, standart 2,3 μm CdTe hücreleri ile elde edilen %13,0'a kıyasla 0,7 μm CdTe ile %11,2 verimlilikte hücreler rapor edilmiştir.

Paudel, Wieland ve Compaan (2012) FTO üzerine yüksek dirençli şeffaf bir SnO₂ tampon tabakası ile üzerinde 0,25 μm ila 2,1 μm CdTe kalınlığında ince film CdS/CdTe hücreleri hazırlamışlardır. Magnetron alan sıçratma koşulları, CdS ve Cu kalınlıkları, CdCl₂ aktivasyonu ve arka kontak difüzyon süreçlerinin dikkatli optimizasyonu ile sadece 0,25 μm CdTe ile %8 verimlilik ve 0,5 μm ile %11 verimlilik elde ettiklerini belirtmişlerdir. Sonuçlar, ultra ince CdTe için magnetron sıçramasının avantajlı olduğunu ve en ince cihazlar için bile hafif yakalama ve mükemmel taşıyıcı konsantrasyonunu doğrulamaktadır.

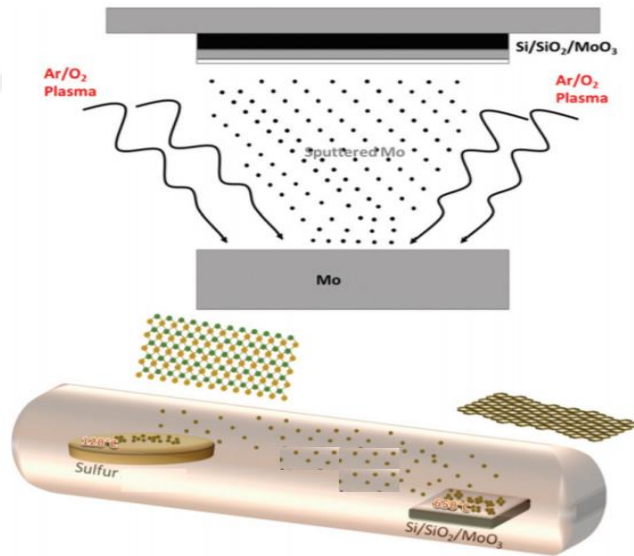
MoS₂ Malzemesinin Üretimi

Karataş ve Yılmaz (2020), magnetron sıçratma ile Mo-O yapısının oluşumu ve ardından ince filmin ek sülfürizasyonu ile iki aşamalı yöntemle MoS₂ filminin üretimini gerçekleştirmişlerdir. Yüksek kristallikte çok fazlı Mo-O filmin kalınlığını kontrol ederek MoS₂ ince film üretmişler ve çok fazlı Mo-O MoS₂'nin yapısal ve optik özelliklerini belirlemişlerdir. Elde edilen çok tabakalı MoS₂ filmlerinin tek tabakalı gibi geniş band aralığına sahip olduğu belirlenmiştir. Bu durumun yapıdaki MoO₂ fazından kaynaklandığına atıf yapılmıştır.

Pacley ve arkadaşları (2016), çalışmalarında MoO₃ ve Mo, magnetron sıçratma yöntemini kullanmışlar ve ardından sülfürizasyon işlemi ile MoS₂'nin yapısal özelliklerini karşılaştırmışlardır. Ek olarak, indirgenmiş grafen oksidin (rGO) MoS₂ yapısı üzerindeki etkilerini incelemişlerdir. Raporlar, rGO'nun MoS₂ tane büyümesini arttırdığını göstermektedir. Sonuç olarak sıçratılmış Mo ve MoO₃ öncüllerinin sülfürizasyonu sırasında rGO

kullanıldığında MoS₂ için bir tane büyüklüğü artışı rapor edilmiştir. Ayrıca, geçirimli elektron mikroskopi sonuçları MoO₃'ten üretilen filmlere kıyasla Mo'dan üretilen MoS₂ filmleri için daha düzgün ve sürekli bir film büyümesi gösterdiğini belirtmişlerdir. Atomik kuvvet mikroskopi görüntüleri ayrıca Mo öncüsü kullanıldığında bu düzgün ve sürekli film büyümesinin gerçekleştiğini doğrulamıştır. Son olarak, x-ışını fotoelektron spektroskopisi sonuçları, her iki öncü kullanılarak üretilen MoS₂ filmlerinin stokiyometrik olduğunu ve yaklaşık 7-8 tabaka kalınlığında olduğunu ve rGO kullanıldığında stokiyometride hafif bir iyileşme olduğunu göstermektedir.

Hussain *et al.* (2016), sülfürizasyon ile birleştirilmiş RF sıçratma ile bir SiO₂/Si substratı üzerinde tabaka kontrollü, sürekli ve geniş alan MoS₂ büyümesini rapor etmişlerdir. MoS₂ filmlerini sentezlemek için iki aşamalı bir işlem kullanmışlardır. Üretim şeması şekil 24'te gösterilmiştir. İlk aşamada, atomik olarak ince bir MoO₃ filmi, 300 °C'de RF magnetron sıçratma ile büyütülmüştür. Daha sonra MoO₃ filmi, 1 saat boyunca 650 °C'de tavlama sonrası ve sülfürizasyon işlemlerine tabi tutulmuştur. MoS₂ katmanlarının sayısının sıçratma süresi ayarlanarak kontrol edilebildiği gözlemlenmiştir. Katmanlı MoS₂'nin yüksek kristallliği, Raman, fotoluminesans ve transmisyon elektron mikroskopi analizi ile doğrulanmıştır.



Şekil 24. RF magnetron sıçratma ve CVD yöntemiyle üretilen MoS₂ üretim şeması

MoS₂ Malzemelerin Güneş Hücrelerinde Kullanılması

Son zamanlarda, iki boyutlu molibden disülfür, güçlü optik soğurma katsayısına ($\sim 5,10^5 \text{ cm}^{-1}$), yüksek taşıyıcı hareketliliğine ($200 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ - $350 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$), 1,8 eV'dan 1,2 eV'ta kadar ayarlanabilir enerji bant aralığına ve 3 boyutlu yarı iletken malzemelerle uyumlu olması gibi özelliklere sahip olmasından dolayı yeni optoelektronik ve fotovoltaik cihaz uygulamasında kapsamlı bir alternatif haline gelmiştir. Si, GaAs ve InP gibi yarıiletken

substratlar üzerinde büyütülen MoS₂ filmlerinin 2D/3D pn heteroeklemi mükemmel fotoelektrik performans göstermiştir. Özellikle MoS₂/p-Si güneş pillerinin verimliliğinin teorik maksimumu %27,11 olarak hesaplanmıştır ki bu Si tabanlı güneş pillerinin en yüksek sınırına çok yakındır (Zhang *et al.* 2020).

Tsai ve arkadaşları (2014) p tipi Si ile tek tabakalı MoS₂ heteroeklemi oluşturarak fotovoltaiik bir hücre elde etmişlerdir. MoS₂ ve Si arasında bir dahilielektrik alanı oluşmuştur. Böyle bir heteroeklemlili fotovoltaiik cihaz, %5,23'lük bir güç dönüşüm verimliliği sağlamıştır. Bu verim, tüm tek tabakalı geçiş metali dikhalgenjen tabanlı güneş hücresi arasında en yüksek verimdir.

Quy ve arkadaşları (2018) Molibden disülfür (MoS₂) filmleri, 20-60 dakika boyunca sabit bir -1 V'da (Ag/AgCl'ye karşı) potansiyostatik elektrodepozisyon (ED) FTO altlıkları üzerine sentezlemişlerdir. Ayrıca boyaya duyarlı güneş hücrelerinde karşı elektrot olarak kullanılmışlardır. Bunun sonucunda %3,69'luk bir enerji dönüşüm verimliliği elde etmişlerdir.

Gu ve arkadaşları (2014) MoS₂/CdS heteroeklemlili güneş hücrelerini, kimyasal banyo biriktirme ve kimyasal buhar biriktirme yöntemleriyle sentezlemişlerdir. MoS₂/CdS güneş hücresinin iyi IV özellikleri ve belirgin fotovoltaiik davranış gösterdiği gözlemlenmiştir. Açık devre gerilimi 0,66 V ve kısa devre akımı $0,227 \times 10^{-6} \text{ A cm}^{-2}$ olarak hesaplanmıştır.

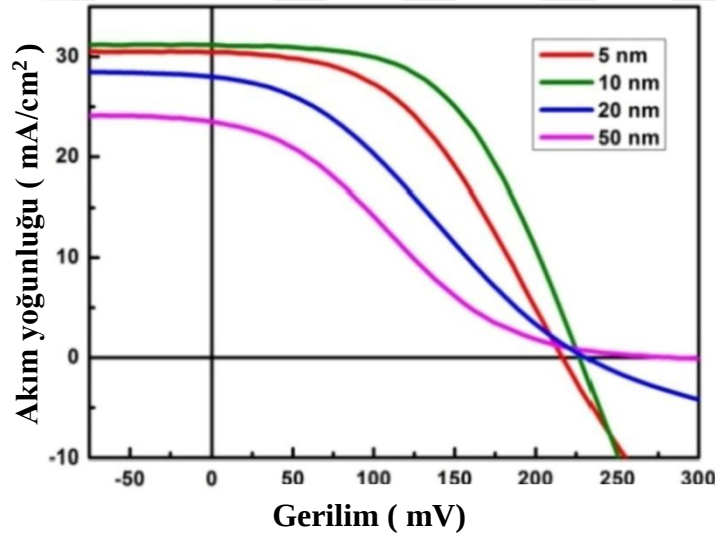
Bernardi ve arkadaşları (2013) çalışmalarında, üç tek tabakalı TMD MoS₂, MoSe₂ ve WS₂'nin 1 nm'den az bir kalınlıkta %5-10'a kadar güneş ışığını emebildiğini ve böylece GaAs ve Si'den 1 derece daha yüksek güneş ışığı emilimini sağlayabildiğini göstermişlerdir. Ayrıca, sadece iki tane tabakanın birleşmesine dayanan PV cihazlarını incelemişlerdir Bunlardan ilki MoS₂ ve grafen arasındaki bir Schottky engel güneş hücresi, ikicisi ise MoS₂/WS₂ çift tabakasına dayanan bir eksitonik güneş hücresidir. Bu tür 1 nm kalınlığındaki aktif tabakaların, mevcut en iyi ultra ince güneş pillerinden yaklaşık 1-3 kat daha yüksek güç yoğunluğuna karşılık gelen ~%1'e kadar güç dönüşüm verimliliklerine ulaşabileceğini göstermişlerdir.

Shanmugam ve arkadaşları (2012) molibden disülfür (MoS₂)/titanyum dioksit (TiO₂) nanokompozit (~15µm kalınlığında) ve poli 3-heksiltiyofen (P3HT) aktif tabakalarını kullanarak hibrid külçe heteroeklemlili (BHJ) fotovoltaiik güneş hücresini elde etmişlerdir. İndiyum kalay oksit/TiO₂/ MoS₂/P3HT/altın yapıllı güneş pili, 4,7 mA/cm² kısa devre akım yoğunluğu, 560 mV açık devre gerilimi ve %1,3 dönüşüm verimliliği göstermiştir.

Shanmugam *et al.* (2012) ITO-MoS₂-Au'nın basit bir yapıyla, ürettikleri güneş hücresi, 110 nm kalınlığa sahip MoS₂ için %0,7, 220 nm kalınlığa sahip MoS₂ için ise %1,8'lik bir fotovoltaiik dönüştürme verimliliği göstermiştir.

Zhang ve arkadaşlarının yaptığı çalışmada, çeşitli kalınlıklarda MoS₂ ince filmi magnetron püskürtme ile hazırlanmıştır. MoS₂/p-Si güneş hücrelerinin fotovoltaiik performansı üzerine MoS₂ ince filminin etkisini incelemiştir.

Bu çalışmadan elde edilen sonuçlar, kalınlık arttıkça MoS₂ filmlerinin mikroyapısının amorf tan mikrokristaliye dönüştüğünü ortaya koymaktadır. Düzlem içi E_{2g}¹ ve düzlem dışı A_{1g} raman modları ve paralel (002) büyüme yönelimi artmıştır. Filmlerin elektriksel iletkenliği, gelişen MoS₂ kristalliliği sayesinde önemli ölçüde artmıştır. Şekil 25'te farklı MoS₂ katman kalınlığına sahip MoS₂/p-Si güneş hücrelerinin aydınlık ortamda J-V eğrileri verilmiştir. Bu eğrilere göre, MoS₂/p-Si heteroekleminde, özellikle kısa dalga boyu aralığında foto-yanıtta önemli gelişme elde edilmiştir. Buna uygun olarak MoS₂/p-Si güneş pillerinin fotovoltaiik özellikleri (Voc, Jsc ve FF) artmıştır ve böylece şekil 25'te görüldüğü gibi, 10 nm MoS₂ tabaka kalınlığına sahip hücrelerin dönüşüm verimliliğinde artış sağlanmıştır (Zhang et al. 2020).

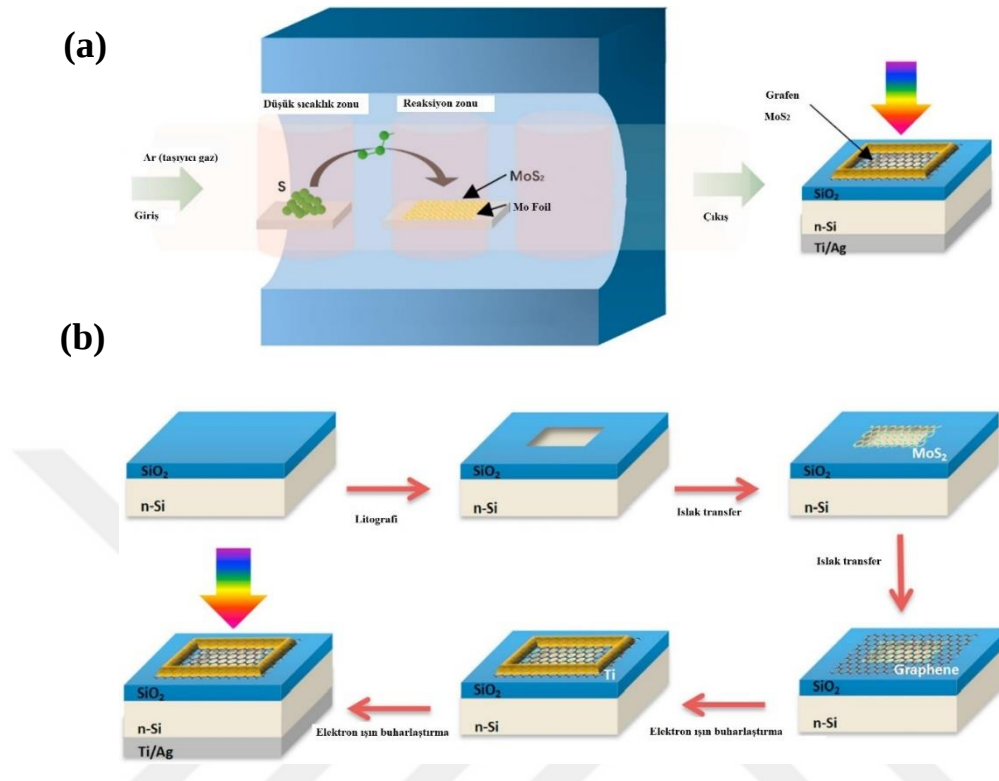


Şekil 25. Farklı MoS₂ katman kalınlığına sahip MoS₂/p-Si güneş hücrelerinin J-V eğrileri (Zhang et al. 2020)

Ma ve arkadaşları yüksek verimli grafen/MoS₂/Si shotky engelli güneş hücrelerinde Molibden disülfürün ara tabaka olarak kullanılmasının etkilerini çalışmışlardır. Çalışmalarında Şekil 26 (a)' da gösterildiği gibi, yüksek kristaliteye sahip tek tabaka MoS₂ malzemeleri, önceden tavllanmış Mo folyolarının doğrudan sülfürize edilmesiyle imal edilmiştir. Bu verimli yöntem ile atomik ölçekte katman sayısını kontrol ederken geniş alanlı MoS₂ tek katmanları üretmenin uygulanabilirliğini kanıtlamışlardır (Ma et al. 2018).

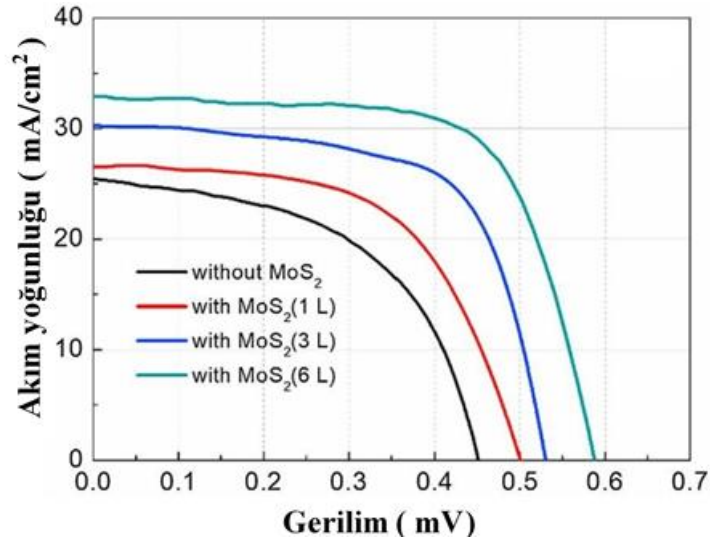
Ma ve arkadaşları bu çalışmalarında 285 nm kalınlığındaki bir SiO₂/n-Si alt tabaka üzerinde bir kare desenli foto-litografi işlemi uygulamışlardır. Daha önce elde edilen MoS₂ ve grafen yüzeye transfer edildikten sonra elektron demet buharlaştırma yöntemi ile Ag/Ti elektrotları arka kontak olarak oluşturulmuştur. Ve bu şekilde güneş hücresi tamamlanmıştır.

Grafen/MoS₂/Si Schottky bariyer güneş hücrelerinin ayrıntılı biriktirme işlemi Şekil 26 (b)' de verilmiştir (Ma *et al.* 2018).



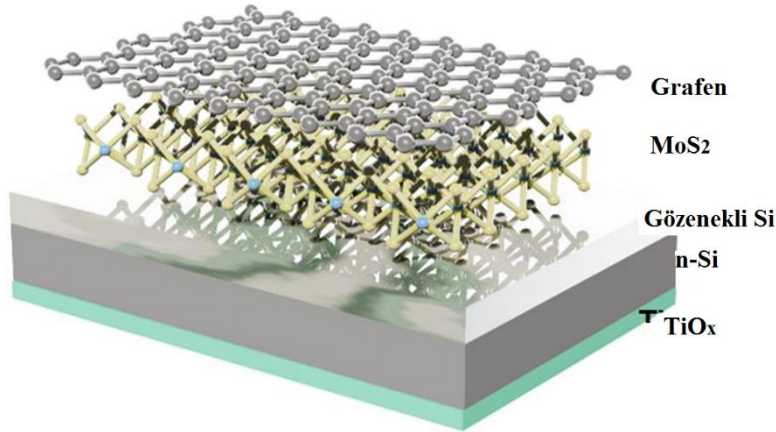
Şekil 26.(a) MoS₂'nin ayrıntılı üretim süreci ; (b) Grafen/MoS₂/Si Schottky bariyer güneş hücrelerinin ayrıntılı biriktirme işlemi (Ma *et al.* 2018)

Benzersiz bant yapısı sayesinde MoS₂ ara katmanı, elektron boşluk çiftlerinin ayrılmasını kolaylaştırmak için boşluk taşıma katmanı olarak ve grafen/silikon arayüzlerinde rekombinasyonu bastırmak için elektron engelleme katmanı görevi görmüştür. MoS₂ tek katman kalınlığını optimize ederek, Şekil 27'de grafen/MoS₂/Si güneş hücreleri için J-V eğrileri verilmiştir. Şekil 27'de de görüldüğü gibi katman sayısının artması ile sistematik bir şekilde hücre verimliliği de artmıştır. MoS₂ katmanlarının Mo folyolardan rastgele substratlara tahribatsız aktarımı, MoS₂ tek katmanlarının ultra ince heteroeklemlili güneş hücrelerinde daha fazla araştırılmasını ve uygulanmasını kolaylaştırmaktadır (Ma *et al.* 2018).



Şekil 27. Farklı MoS₂ katman kalınlığına sahip güneş hücrelerinin J-V eğrileri (Ma *et al.* 2018)

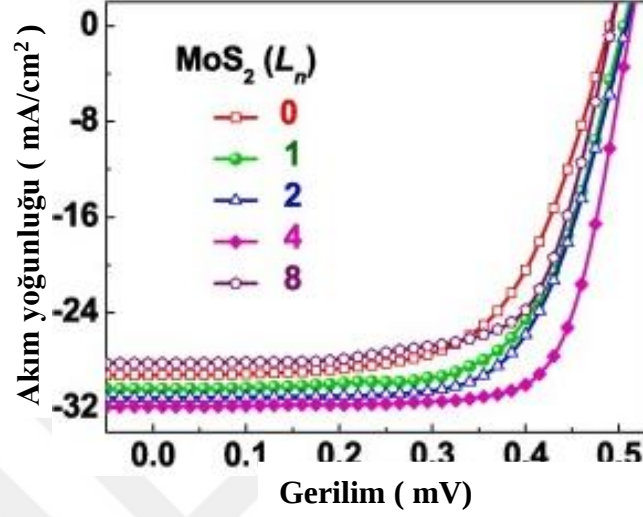
Jang ve arkadaşları yaptığı bir çalışmada, GR/PSi güneş hücrelerinde (triflorometansülfonil) -amid (TFSA) -doplu grafen (TFSA-GR) şeffaf iletken elektrot, MoS₂ ise ara katman olarak kullanmışlardır. Yapılan güneş hücresinin şematik gösterimi şekil 28’de verilmiştir (Jang *et al.* 2020).



Şekil 28. TFSA-GR / MoS₂ / PSi / Si / TiOx güneş hücresinin şematik gösterimi (Jang *et al.* 2020).

Şekil 29’da farklı MoS₂ katman sayısına (L_n) göre TFSA-GR/MoS₂/PSi/Si güneş hücrelerinin J-V eğrileri verilmiştir. Buna göre hücrenin fotovoltajik parametreleri, büyük ölçüde TFSA-GR'nin katkı konsantrasyonuna (n_d) ve MoS₂'nin katman sayısına bağlı olduğu belirlenmiştir. Özellikle MoS₂ ara katmanının, TFSA-GR ve PSi arasındaki bant hizalamasını iyi bir şekilde ayarladığı, böylece taşıyıcıların ayrılmasını/toplanmasını kolaylaştırarak fotovoltajik parametrelerin geliştirilmesine yardımcı olduğu tespit edilmiştir. Bu çalışmada TiOx pasivasyonu ve arka yüzeydeki rekombinasyon kaybını azaltmak için kullanılmıştır.

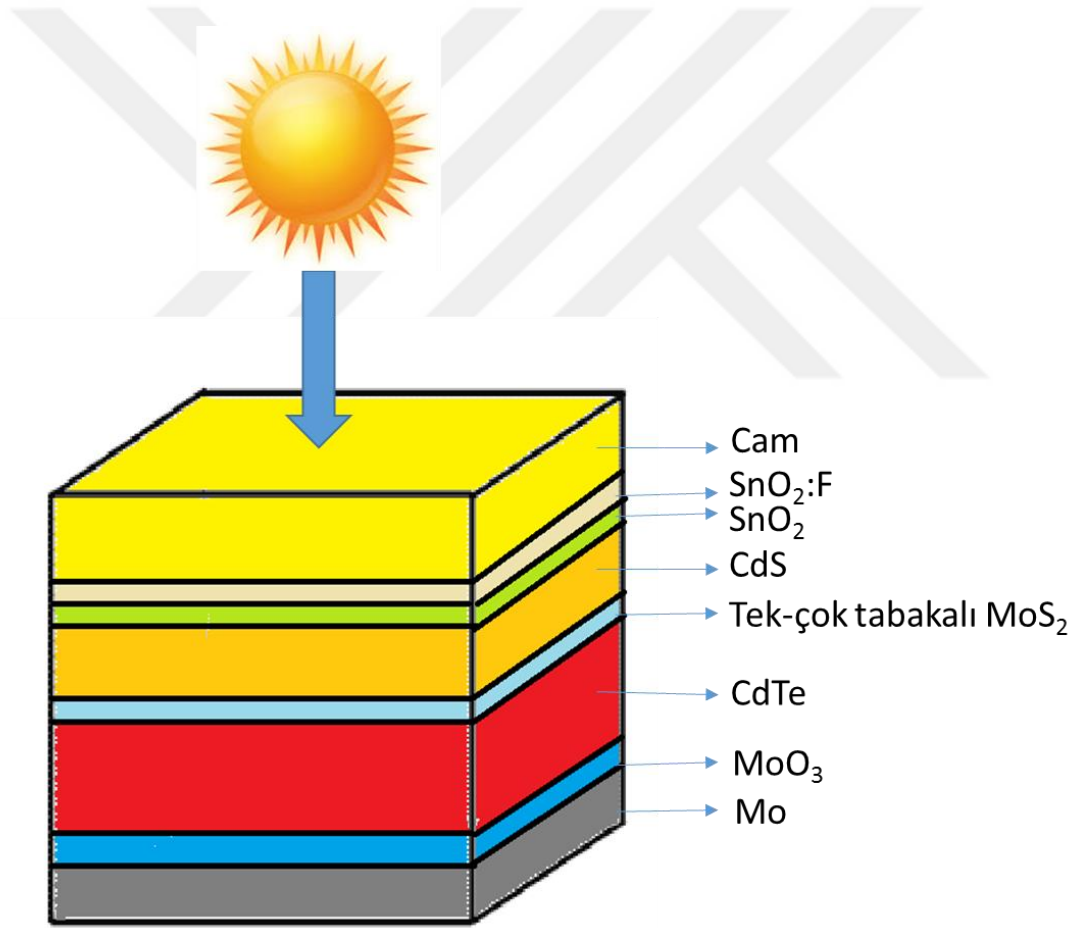
TFSA-GR / MoS₂ / PSi / Si / TiO_x güneş hücresi, $n_d = 20$ mM ve $L_n = 4$ 'te maksimum %13,18 güç dönüştürme verimliliği göstermiştir. PCE, 20–22 ° C ve %40 nem altında 30 gün boyunca izlenirken, yalnızca %15'lik bir kayıp belirlenmiştir buda mükemmel uzun vadeli kararlılığı göstermektedir (jang *et al.* 2020).



Şekil 29. Farklı L_n için TFSA-GR/MoS₂/PSi/Si güneş hücrelerinin J-V eğrileri (jang *et al.* 2020).

Giriş

Bu bölüm de, FTO/CdS/MoS₂/CdTe/MoO₃/Mo güneş hücresinin yapımında kullanılan malzemeler, her bir ince film tabakasının yapım prosedürü ve karakterizasyon çalışmaları, son olarak ta güneş hücresinin üretimi ve karakterizasyonları ile ilgili bilgiler verilmektedir. Bu çalışmada öncelikle tasarlanan yapıda kullanılacak her bir ince film tabakasının üretimi ve karakterizasyonu yapılmış ve güneş hücresinde kullanılacak her bir tabakanın optimum şartları belirlenmiştir. Sonrasında ise uygun şartlardaki tabakalar bir araya getirilerek güneş hücresi fabrikasyonu sağlanmış ve karakterizasyon işlemleri yapılmıştır. Böylece çalışma iki aşamada tamamlanmıştır. Şekil 30'da güneş hücresinin şematik gösterimi verilmiştir.



Şekil 30. Bu çalışmada tasarlanan güneş hücresinin şematik gösterimi

Tez Çalışmasında Kullanılan Malzemeler ve Cihazlar

Öncelikle flor katkılı kalay oksit (FTO) kaplı cam alttaş temizliği yapmak için aseton (CH_3COCH_3), IPA (isopropilalkol ($(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$)) ve de-iyonize su kullanılmıştır. Kurutma işlemleri için N_2 gazı kullanılmıştır. Sıçratma sisteminde ince film tabakalarının büyütülmesinde SnO_2 , CdS , MoO_3 , CdTe ve Mo hedef malzemeleri ve Ar , O_2 gazları kullanılmıştır. CVD cihazında sülfürleme işlemi için sülfür tozu kullanılmıştır.

Tez çalışmasında kullanılan cihazlar ise şunlardır:

- ✓ RF Magnetron sputtering
- ✓ CVD sistemi
- ✓ Yapay güneş ışığı cihazı (Solar simülatör) (ABET A.M. 1.5)
- ✓ I-V karakterizasyon sistemi (KEITHLEY 2450 multimetre)

İnce Filmlerinin Üretimi

Tez çalışmasında kullanılması planlanan ince filmler Vaksis Mitas 3M1T (Şekil 31) sistemi kullanılarak büyütülmüşlerdir. 3 inch çap, 0,25 inch kalınlığa ve %99,99 saflığa sahip SnO_2 , CdS , CdTe ve Mo (Plasmatech) hedefleri iki farklı RF ve bir DC güç kaynağına sahip magnetron üzerine yerleştirilmişlerdir. Alttaş olarak ise optimizasyon işlemleri için SLG (Soda Lime Glass) kullanılmışken, asıl aygıt tasarımında ise FTO alttaş kullanılmıştır. SLG'ler ve FTO'lar alttaş tutucuya yerleştirilmişlerdir. Vakum sistemi içine yerleştirildikten sonra vakum alınarak basıncın $2,10^{-7}$ torra düşmesi için beklenilmiştir. Basınç istenen seviyeye indikten sonra 10 dk 50 sccm Ar gazı altında plazma ile alttaş temizliği yapılmıştır. Ardından istenilen sıcaklığa kadar kademeli olarak ısıtılmıştır. İstenilen sıcaklığa ulaştıktan sonra 30 dakika beklenmiş ve sıçratma işlemine geçilmiştir.

Her bir ince film tabakanın sıçratma işlemi için vakum kazanı içine farklı tür gaz ve gaz oranı kullanılmıştır. Bütün ince film tabakaları 5.10^{-3} torr kazan vakum basıncında büyütülmüştür.



Şekil 31. Magnetron sıçratma sistemi

İnce filmlerin üretim parametreleri aşağıdaki Tablo 1’de verilmiştir.

Tablo 1. İnce filmlerin üretim parametreleri

	Kazan vakum basıncı	Uygulanan Güç	Kullanılan gaz	Büyütme sıcaklığı		Büyütme zamanı	
				Optimizasyon	Aygıt	Optimizasyon	Aygıt
SnO ₂	5.10 ⁻³ Torr	150 W	Ar/O ₂ (49/1 sccm)	400 °C	400 °C	60 dk	2.5 dk
CdS	5.10 ⁻³ Torr	200W	Ar (50 sccm)	RT-500 °C	400 °C	60 dk	10 dk
MoO ₃	5.10 ⁻³ Torr	137 W	Ar/O ₂ (37,5/12,5 sccm)	400 °C	400 °C	60 dk-1.5 dk- 3 dk-	90-180 sn- 5 dk
CdTe	5.10 ⁻³ Torr	150 W	Ar (50 sccm)	RT-500 °C	RT °C	60 dk	4 sa
Mo	5.10 ⁻³ Torr	137 W	Ar (50 sccm)	200 °C	200 °C	15 dk	5 dk

Tasarlanan aygıt yapımından önce tasarlanan yapıda kullanılacak ince filmlerin uygun şartları belirlenmiştir. Bu optimisasyonlar şu şekildedir;

- SnO₂ ince filmlerinin kalınlığa bağlı optimisasyonu
- CdS ince filmlerinin sıcaklığa bağlı optimizasyonu
- MoS₂ ince filminin MoO₃ kalınlığına bağlı optimizasyonu
- CdTe ince filminin sıcaklığa bağlı optimizasyonu

Alttařların hazırlanması ve temizlenmesi

Öncelikle üzerine ince film büyütülecek alttařların temizlięi ařaęıdaki işlemler kullanılarak yapılmıřtır.

-SLG/ FTO alttařların temizlenmesi: Camlar sabunlu su ile yıkandıktan sonra organik kalıntılardan kurtulmak için cam bir petri kabı içinde 15 dakika boyunca ultrasonik temizleyicide bekletilmiřtir. DI su ile yıkandıktan sonra yine bir cam petri kabına konulan IPA içinde 15 dakika boyunca ultrasonik temizleyicide bekletilmiřtir. N₂ gazı ile kurutulan **/FTO alttařlar** önce deterjanlı su ile yıkanıp DI sudan geçirildikten sonra, deterjan kalıntılarını temizlemek için 10 dk aseton içerisinde bekletilmiřtir. Hemen ardından, organik kirlilikleri gidermek amacıyla ultrasonik banyoda 5'er dakika sırasıyla, DI ve IPA içerisinde temizleme işlemine maruz bırakılmıřtır. Bu işlemlerden sonra, FTO alttařlar DI su ile durulanıp azot gazı ile kurutulmuřtur. Deneysel süreçlerde kullanılan FTO alttařların hepsine aynı temizleme prosedürü uygulanmıřtır.

FTO üzerine SnO₂ üretimi

Sıçratma sisteminde basınç istenen seviyeye indikten sonra alttař 400 °C'ye kadar kademeli ısıtılmıřtır. İstenilen sıcaklıęa ulařtıktan sonra 30 dakika beklenmiř ve sıçratma işlemine geçilmiřtir. 150 W güç altında 49/1 oranında Ar-O₂ gazı ortama verilerek 5, 10 ve 60 dk olarak SLG ve FTO alttařlar üzerine 3 farklı büyütme yapılmıřtır. 5 ve 10 dk'lık büyütme kalınlık optimizasyonu için kullanılırken 60 dk'lık örnek XRD ve Raman ölçümlerinde kullanılmıřtır.

Güneř hücresi yapımında FTO üzerine 400 °C'de 2,5 dk'lık bir büyütme uygun bulunmuřtur.

CdS ve CdTe Üretimi

CdS ince filmleri 5.10⁻³ torr çalışma basıncında 50 sccm Ar atmosferi altında 200 W güç uygulanarak (RT-500) farklı sıcaklıklarda 60 dk boyunca büyütme yapılmıřtır. CdTe ince filmleri ise 5.10⁻³ Torr çalışma basıncında 50 Sscm Ar atmosferi altında 150 W güç uygulanarak (RT-500) farklı sıcaklıklarda 60 dk boyunca büyütme yapılmıřtır. Büyütme işlemi bittikten sonra örnekler kendilięinden soęumaya bırakılmıřtır. Bu durum *in-situ* tavlama olarak adlandırılmıřtır.

Ardından sıçratma sistemi ile üretilen RT örnekleri farklı ex-situ tavlama kořulları için 3 inç çapında yatay boru řeklindeki kuvars tüpe sahip iki bölgele bir fırının ortasına yerleřtirilmiřtir ve vakuma alınmıřtır. Basınç 100 mTorr'un altına düřtüęünde 60 dakika

boyunca 50 sccm Ar akışında 100 °C, 200 °C, 300 °C, 400 °C ve 500 °C sıcaklıklarında tavlama işlemi yapılmıştır.

Üretilen tüm numunelerin yapısal, optiksel ve elektriksel karakterizasyon çalışmaları yapılmıştır.

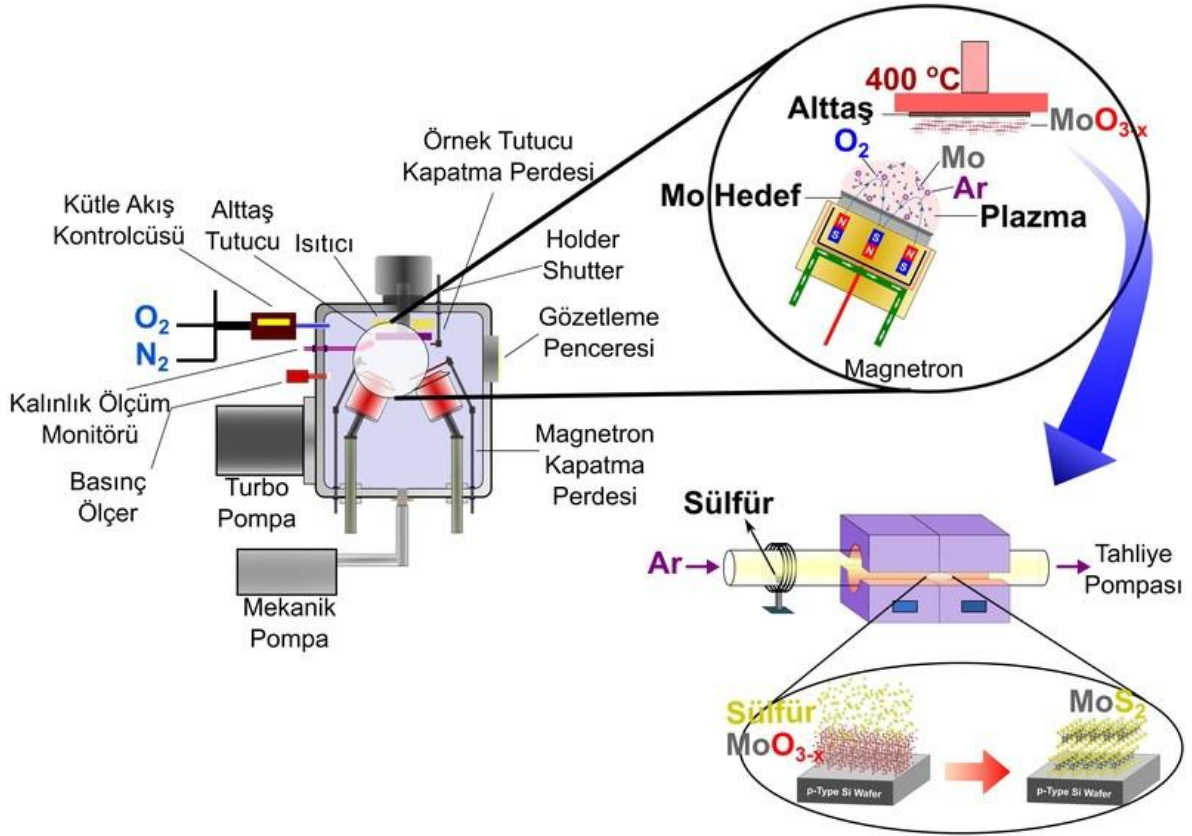
CdS ince filmi, güneş hücresi yapımında SnO₂ ince filmi üzerine 400 °C 'de 10 dk'lık bir büyütme uygun bulunmuştur. CdTe ince filmi ise güneş hücresi uygulamasında oda sıcaklığında 4 saat CdTe büyütme işlemi uygun bulunmuştur. Ardından ise CVD cihazında *ex-situ* 200 °C'de tavlama işlemi yapılmıştır.

MoS₂ üretimi

CVD fırının dışındaki ısıtma bandı bölgesine Alümina potadaki sülfür (0,5 g) yerleştirilmiştir. Ardından öncesinde oluşturulan CdS/MoO₃ yapısı MTI-OTF 1200 CVD sistemine yerleştirilmiş ve vakuma alınmıştır. CVD bölgesinden yüksek saflıkta Ar gazı (akış hızı 100 sccm) geçirilmiştir. Bu akış hızı tüm süreç boyunca sabit tutulmuştur. Fırın 45 dakikada 450 °C'ye ısıtılmış ve 450 °C'ye ulaştığında, ısıtma bandı 22 dakikada 115 °C'ye kadar ısıtılmıştır. Sülfür eridikten sonra CVD fırınının soğumasına izin verilmiştir. Ve böylelikle istenilen MoS₂ yapısı oluşturulmuştur. Güneş hücresi uygulamasında FTO/SnO₂/CdS yapısı üzerinde MoS₂ oluşturulmuştur. Şekil 32'de kullanılan CVD sistemi gösterilmiştir. Şekil 33'de ise MoS₂ üretim süreci şematize edilmiştir.



Şekil 32. CVD sistemi



Şekil 33. MoS₂ üretim şeması. (KARATAŞ 2020)

MoO₃ üretimi

SLG'ler alttaş tutucuya yerleştirildikten sonra vakum sistemi içine yerleştirilip vakuma alınmıştır. Kazan basıncının 2.10^{-7} Torr basınca düşmesi için beklenmiştir. Basınç istenen seviyeye indikten sonra alttaş 400 °C'ye kadar kademeli ısıtılmıştır. İstenilen sıcaklığa ulaşıldıktan sonra 30 dakika beklenmiş ve sıçratma işlemine geçilmiştir.

Sıçratma işlemi için vakum kazanı içine yüksek saflıkta (%99,99) Ar gazı 50 sccm akış oranında verilmeye başlanmış ve kazan vakumu basıncı 5.10^{-3} Torr seviyesine yükseltilmiştir. Daha sonra 3 W/cm^2 olacak şekilde magnetronlara güç verilerek plazma oluşturulmuştur. Plazma oluştuktan sonra içeriye 12,5 sccm yüksek saflıkta (%99,99) O₂ gazı verilmiş ve Ar gazının akış oranı 37,5 sccm değerine düşürülmüştür. Böylece O₂/(Ar+O₂) akış oranlarının $\frac{1}{4}$ olması sağlanmıştır. Bu oran bütün üretimlerde sabit tutulmuştur. Farklı kalınlıklarda (90 ve 180 sn) örnekler üretilmiş ve MoS₂ optimizasyonu için kullanılmıştır.

Aynı zamanda güneş hücresi uygulamasında CdTe üzerine 5 dk büyütülerek metal kontak ile CdTe arasında tampon tabaka olarak kullanılmıştır.

Mo kaplama

Sıçratma işlemi için vakum kazanı içine yüksek saflıkta (%99,99) Ar gazı 50 sccm akış oranında verilmeye başlanmış ve kazan basıncı 5.10^{-3} Torr seviyesine yükseltilmiştir. Daha

sonra 137 W olacak şekilde magnetronlara güç verilerek plazma oluşturulmuştur. Plazma oluştuktan sonra 15 dk boyunca MoO₃ tabakası üzerine büyütme yapılmıştır.

İnce Filmlerin Karakterizasyonları

GIXRD ölçümleri

Kristal yapıda periyodik düzlemlerden yansıyan X-ışınları ile kristal yapı hakkında detaylı bilgi elde etmek mümkündür. Bu teknikle kristal yapıdaki fazları, fazlardaki atomların pozisyonlarını hesaplamak mümkün olabilmektedir. Tez çalışmasında kullanılan ince filmlerde fazlarını tespit etmek amacıyla X-ışınları kırınım spektroskopisi kullanılmıştır. Bunun için SLG ve FTO üzerinde büyüyen ince filmler, GIXRD (Grazing Incidence X-Ray Diffraction) özelliği bulunan GNR marka ADP PRO 2000 modeli X-ışınları difraktometresinde, 2 θ açısı büyütülen ince filme uygun dereceler arasında seçilerek 0,01° adımlarla CuK α = 0,1541874 nm dalga boylu X-ışınına maruz bırakılmıştır. İnce film yüzeyine gelen X-ışını ile yüzey arasındaki açı (ω) 1° olarak sabitlenmiştir. Elde edilen kırınım desenleri incelenerek ince filmlerin kristal yapısı ve yapısal özellikleri hakkında bilgi edinilmiştir.

Elde edilen XRD dataları önce “Match! 3” programı ile analiz edilmiştir. Böylece elde edilen XRD desenlerinin hangi fazlara ait olduğu bulunmuştur.

Ayrıca Scherrer denklemi (Scherrer 1918; Langford ve Wilson 1978) ile ince filmlerin kristalite boyutu hesaplanmıştır. İlgili denklem 9’da gösterilmektedir.

$$D = (0.94\lambda) / (\beta \cos\theta) \quad (9)$$

Burada CuK α ’nın $\lambda = 1,5406$ Å, β radyan cinsinden XRD deseninde baskın pike ait maksimum şiddetin yarısındaki genişlik (FWHM) ve θ Bragg kırınım açısıdır (Scherrer 1918; Langford ve Wilson 1978).

Hazırlanan ince filmlerin dislokasyon yoğunluğu (δ_{hkl}) Williamson ve Smallman’ın eşitliğine göre, minimum dislokasyon yoğunluğunda kristalin birim hacmi başına dislokasyon çizgilerinin uzunluğu olarak tanımlanmıştır. Denklem 10’da gösterilmektedir.

$$\delta = 1, \delta = \frac{1}{D^2} \quad (10)$$

Mikro gerilim denklem 11’de kullanılarak elde edilmiştir (Shkir *et al.* 2019).

$$\varepsilon = \frac{\beta \cos\theta}{4}. \quad (11)$$

Raman spektrumlarının alınması

Raman spektroskopisinde molekül ile etkileşen ışığın dalga boyuna göre saçılan ışığın dalga boyunda oluşan farklar ölçülmektedir. Yani molekülün titreşim modları tespiti hakkında bilgi vermektedir. İnce filmlerdeki atomlar arası bağlar hakkında ve moleküler titreşim düzeyleri hakkında bilgi edinebilmek için, ince filmler Renishaw inVia Confocal Raman Spektrometresinde, 532 nm dalgaboylu 30 mW gücündeki lazer ile uyarılmıştır. Bu uyarım sonucunda ince filmlerden gelen Raman sinyalleri 100 – 1200 cm^{-1} dalga sayısı aralığında incelenmiştir.

MoS₂ numuneleri Raman eşlemelerinde, 200x150 veri noktalı 40x30 μm^2 alan (toplam 30000 veri noktası) 532 nm dalga boyunda, 3 mW lazer gücü ve 1 saniye entegrasyon süresi ile taranmıştır. Optik mikroskop görüntüleri 100x büyütmede Raman sistemindeki Leica mikroskobundan alınmıştır.

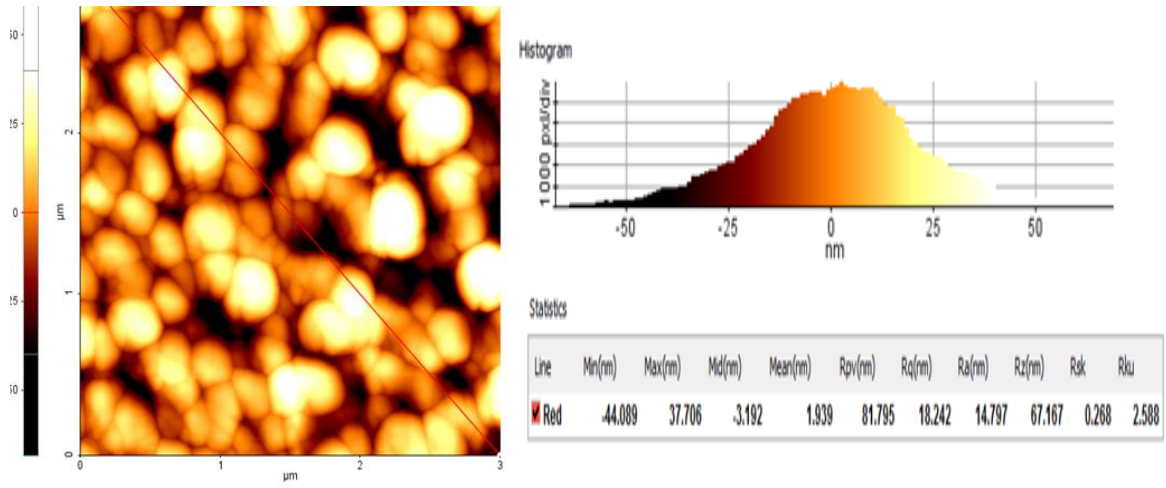
FE-SEM görüntülemeleri

Taramalı elektron mikroskobunda yüksek gerilim altında hızlandırılan elektronlar malzeme yüzeyine odaklanır ve taratılır. Malzeme atomları ile elektron demeti arasında meydana gelen çeşitli etkileşimler uygun algılayıcılar ile toplanır ve sayacın sinyallere çevrilerek görüntü elde edilir. Bu şekilde optik mikroskoplarının ayırma gücünün çok üstündeki çözünürlüklerde malzeme yüzeyi incelenebilmektedir. İnce filmler TESCAN marka ve MAIA3 XMU modellenli FE-SEM (Field Effect – Scanning Electron Microscope) cihazına konularak 50,000 ve 150,000 büyütme altında yüzeyleri incelenmiştir.

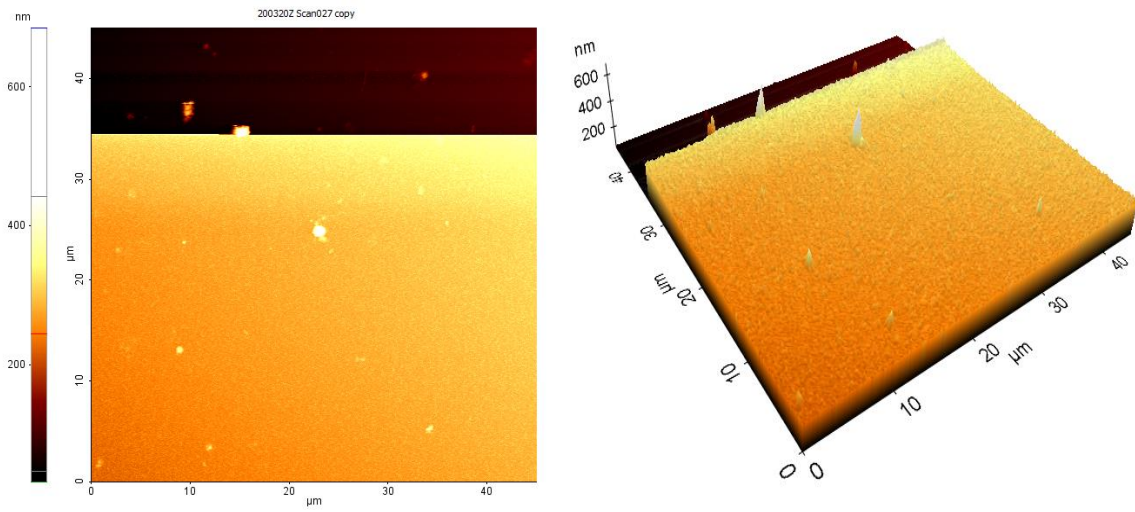
AFM ile yüzey topografilerinin belirlenmesi

İnce filmlerin yüzey morfolojisi ayrıca Park System marka ve XE6 model AFM (Atomic Force Microscope) cihazı ile analiz edilmiştir. Filmlerin yüzeyleri birçok avantajından dolayı Nanomagnetic Instrument marka bir cihazla “Tapping Mode” yöntemi ile 3x3 μm^2 kare boyutlu alanlarda ve 3 $\mu\text{m}/\text{sn}$ hızlarla taranmıştır. Çalışmada AFM’den elde edilen yüzey pürüzlülüğü (Ra), çapraz düzleme göre yüzey yüksekliğinin ortalama değeri olarak tanımlanmıştır. Bu durum Şekil 34’de örnek olarak gösterilmiştir.

Aynı zamanda AFM ile yüzeydeki tane sayısı da tespit edilmiştir ve bazı filmlerin kalınlık ölçümleri de AFM ile belirlenmiştir. Şekil 35’de bir ince filmin maske uygulanan keskin kenarından alınan AFM görüntüsü verilmiştir. Alttaş ve film arasındaki fark ile kalınlık değeri tespit edilmiştir.



Şekil 34. AFM ile yüzey pürüzlülüğü ölçümü.



Şekil 35. 400 °C’de büyütülen MoO₃ filminin kalınlık ölçümü, 2D ve 3D AFM görüntüleri

Fotoluminesans ölçümlerinin alınması

İnce filmlerin fotoluminesans ölçümleri PTI QM-40 marka spektrofotometre kullanılarak yapılmıştır.

2-boyutlu (MoS₂) yapılar için oldukça önemli olan PL spektrumları Renishaw inVia Confocal Raman Spektrometresinde alınmıştır. MoS₂ filmler 3 mW lazer gücü ile 10 saniye boyunca uyarılmıştır. Daha sonra 590–900 nm arasında, filmlerdeki fotoluminesans etki dedektörle tespit edilmiştir. Bu ölçüm 10 kez tekrar edilip verilerin biriktirilmesi ile PL spektrumu elde edilmiştir.

UV-VİS ölçümlerinin alınması ve bant aralıklarının hesaplanması

İnce filmlerin optik karakterizasyonları SHIMADZU marka ve UV – 1800 modelli UV (Ultra Violet) Spektrometresinde yapılmıştır. 250–1000 nm dalga boyu aralığında, ince filmlerin soğurma ve geçirme spektrumları alınmıştır. UV spektrumları ince filmlerin optik

davranışları hakkında değerli bilgiler sunmaktadır. Bir yarıiletkende gönderilen ışının enerjisinin soğurma katsayısına etkisi ölçülerek yasak bant aralığı hesabı yapılabilir. Gönderilen ışının sahip olduğu enerji, malzemenin yasak bant aralığı enerjisinden büyükse ışın soğrulur, küçük ise soğrulmadan geçer. t kalınlığındaki bir filme gönderilen ışığın şiddeti I_0 ve dalga boyu λ olarak tanımlanırsa, geçen ışığın şiddeti gelen fotonun dalga boyuna ve filmin kalınlığına bağlı olarak değişir.

$$I_t = I_0 \cdot e^{-\alpha t} \quad (12)$$

Bu denklemde α , soğurma katsayısı olarak isimlendirilir. Buradan hareketle soğurma ölçümlerinden faydalanarak α soğurma katsayısı;

$$\alpha = \frac{1}{d} \ln\left(\frac{1}{T}\right) \quad (13)$$

denklemleri ile hesaplanır. Bu denklemde d film kalınlığı, T geçen ışığın geçirgenlik yüzdesidir. Soğurma bölgesinde yasak enerji bant aralığı Tauc denklemi ile hesaplanmaktadır (Tauc 1970).

$$\alpha = \frac{B(h\nu - E_g)^x}{h\nu} \quad (14)$$

Bu eşitlikte $h\nu$ foton enerjisi ve α soğurma katsayısı, B bağımsız bir enerji sabiti olup, E_g yarıiletkenin optik bant aralığı, h Planck sabiti ve doğrudan izin verilen geçişler için $x = 1/2$, yasak direkt geçişler için $x=3/2$ ve indirekt geçişler için ise $x=2$ 'dir (Shkir *et al.* 2020). $(\alpha h\nu)^2$ 'nin $h\nu$ 'ye karşı grafiğinde oluşan eğrinin üst kısmından $h\nu$ eksenine çizilen doğrunun eksenini kestiği nokta E_g bant aralığı değeri olarak alınmaktadır.

Kompleks kırılma indisi $N(\omega) = n + iK$ olarak tanımlanmaktadır, burada n kırılma indisi ve K sönümlenme katsayısıdır. $K = \frac{\alpha\lambda}{4\pi}$, burada λ gelen ışığın dalga boyudur. Sönümlenme katsayısına ve yansıtma oranına (R) göre kırılma indisi $n = \frac{1+R}{1-R} + \sqrt{\frac{4R}{(1-R)^2} - K^2}$ eşitliği ile belirlenmektedir (Feldmeier *et al.* 2011).

Yarıiletken malzemeler için karmaşık dielektrik sabiti $\epsilon^* = \epsilon_1 + i\epsilon_2$ ve kırılma indisi $n^* = n + ik$, bir dielektrik malzemenin dipol hareketi nedeniyle bir elektrik alanından enerjiyi nasıl soğurduğu ve bir malzemedeki ışık hızının ne kadar yavaşlayacağı hakkında bilgi sağlamaktadır (Abdel-Galil *et al.* 2014). İnce filmlerin dielektrik sabitinin sanal ve gerçel kısımları (Samavati *et al.* 2017), $\epsilon_1 = n^2 - k^2$ ve $\epsilon_2 = 2nk$ denklemleri ile belirlenmektedir.

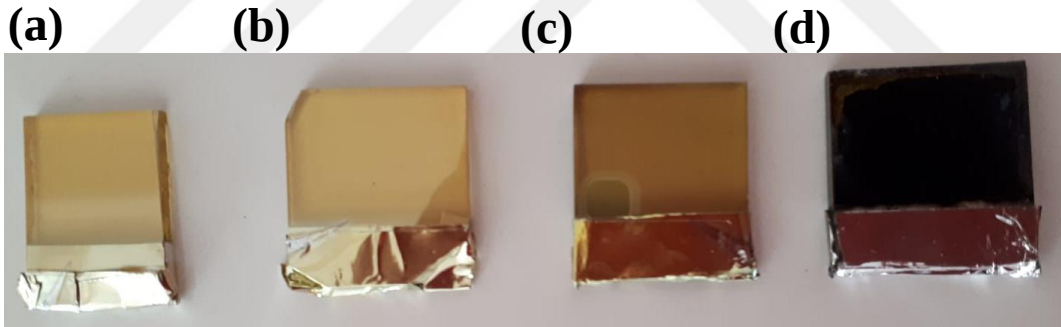
Çok Katmanlı Güneş Hücresinin Üretimi ve Karakterizasyonu

Çok katmanlı güneş hücresinin üretimi

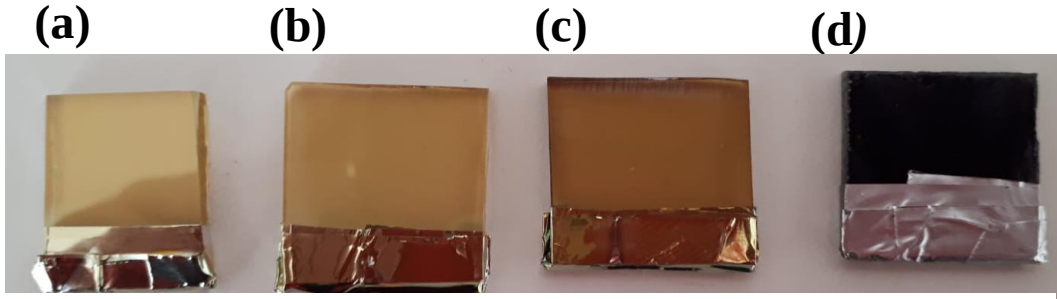
Şekil 36-37 tez çalışması sürecinde üretilen malzemeleri göstermektedir. Bütün malzemeler de FTO ön kontağın tamamen kaplanmasını önlemek için bir kısmı alüminyum folyo ile sarılmıştır. Ve bu şekilde ön kontak sağlıklı bir şekilde korunmuştur. Şekil 36 (a) FTO/SnO₂/CdS (b) FTO/SnO₂/CdS/90 sn MoO₃ (c) FTO/SnO₂/CdS/Çok Tabakalı MoS₂ (d) FTO/SnO₂/CdS/ Tek Tabakalı MoS₂/CdTe malzemelerine aittir. Şekik 37 (a) FTO/SnO₂/CdS (b) FTO/SnO₂/CdS/ 180 sn MoO₃ (c) FTO/SnO₂/CdS/ Çok Tabakalı MoS₂ (d) FTO/SnO₂/CdS/ Çok Tabakalı MoS₂/CdTe malzemelerine aittir

Güneş pili yapımını beş ana başlık altında özetleyebiliriz:

1. FTO/SnO₂/CdS ve FTO/SnO₂/CdS/MoO₃ yapısının oluşturulması
2. MoO₃ CVD cihazında sülfürizasyon işlemine tabi tutularak MoS₂ tabakasının oluşturulması
3. MoS₂ tabakası üzerine CdTe tabakasının büyütülmesi
4. MoO₃ ve Mo tabakasının büyütülmesi
5. Güneş hücresinin fotovoltak özelliklerinin araştırılması



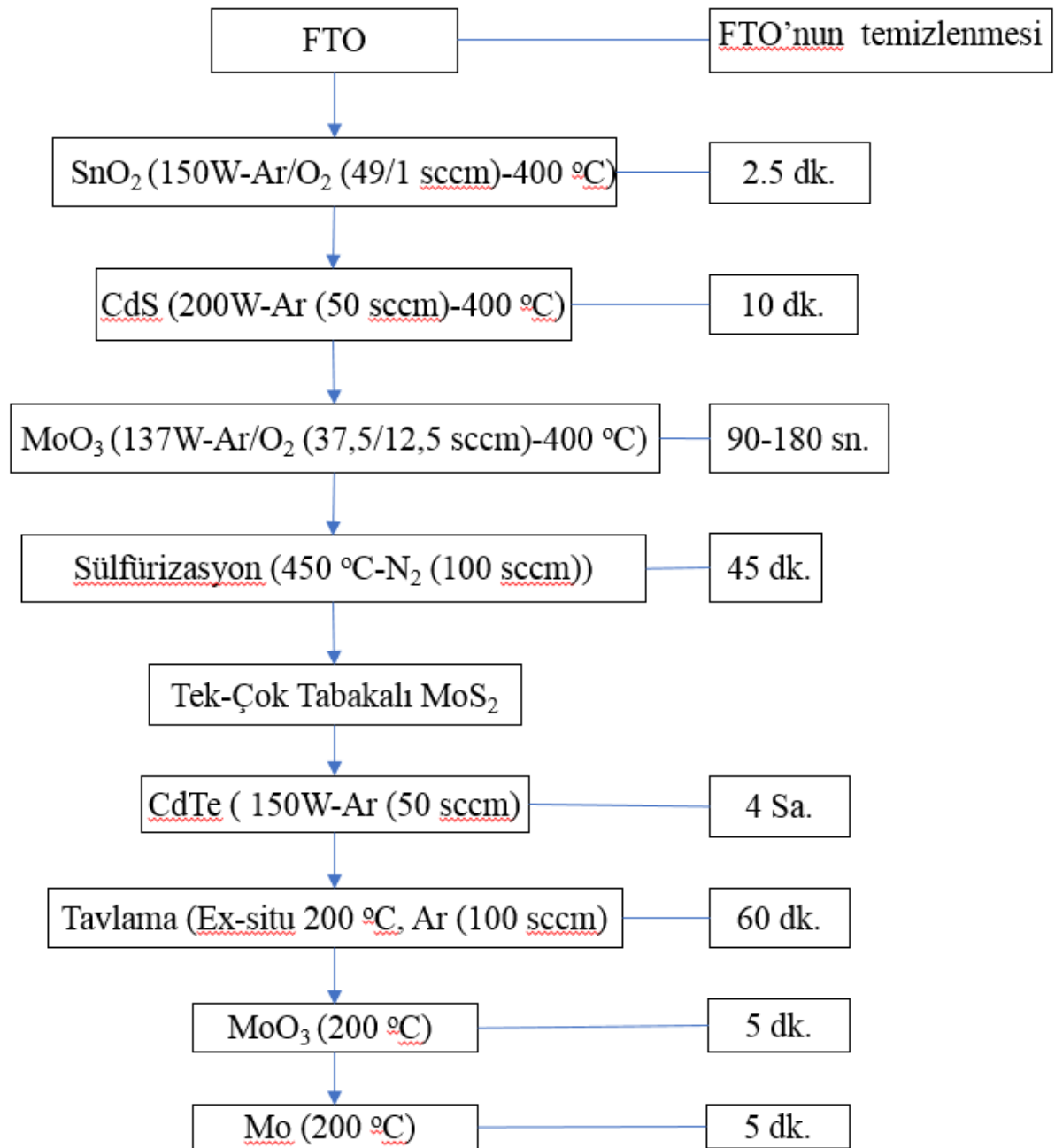
Şekil 36. (a) FTO/SnO₂/CdS (b) FTO/SnO₂/CdS/ 90 sn MoO₃ (c) FTO/SnO₂/CdS/ Tek Tabakalı MoS₂ (d) FTO/SnO₂/CdS/ Tek Tabakalı MoS₂/CdTe



Şekil 37. (a) FTO/SnO₂/CdS (b) FTO/SnO₂/CdS/180 sn MoO₃ (c) FTO/SnO₂/CdS/Çok Tabakalı MoS₂ (d) FTO/SnO₂/CdS/ Çok Tabakalı MoS₂/CdTe

Tasarlanan güneş hücresi yapısında her bir tabakada kullanılan ince filmlerin morfolojik, yapısal ve optiksel karakterizasyonlarını tamamladıktan sonra, güneş hücresinde kullanılarak her bir tabaka için uygun şartlar belirlenmiştir. Sıçratma cihazında öncelikle RF1 RF2 ve DC magnetronlarına sırasıyla SnO₂, CdS ve Mo targetları yerleştirilmiştir. Temizliği yapılan FTO alttaşlar alttaş tutucuya yerleştirildikten sonra sistem vakuma alınmıştır. Sistem istenilen basınca düştükten sonra 10 dk Ar plazma ile alttaş temizliği yapılmıştır. Ve alttaş sıcaklığı 20 dk aralıklarla 100'er derece artırılarak 400 °C getirilmiştir. 400 °C'de 20 dk bekledikten sonra 2,5 dk 49/1- Ar/O₂ gaz ortamında SnO₂ filmi büyütülmüştür. SnO₂ filmi büyütüldükten sonra kelebek vana açılarak ortamdaki O₂'lerin uzaklaşması sağlanmıştır. 5 dk sonra 50 sccm Ar gazı atmosferi altında 10 dk CdS ince filmi büyütülmüştür. Elde edilen bu iki tabakalı yapının referans güneş hücresinde kullanılması planlanmıştır. Ardından tasarlanan yapıyı oluşturmak için aynı şartlarda büyütülen SnO₂ ve CdS yapısı üzerine 3 dk boyunca 400 °C de 37,5/12,5- Ar/O₂ gaz ortamında MoO₃ filmi büyütülmüştür. FTO/SnO₂/CdS/MoO₃ yapısı MTI-OTF 1200 CVD sistemine yerleştirildi. CVD fırının dışındaki ısıtma bandı bölgesine alümina potadaki sülfür (0,5 g) yerleştirildi. Ardından öncesinde oluşturulan FTO/SnO₂/CdS/MoO₃ yapı CVD içerisine yerleştirilmiş ve vakum alınmıştır. CVD bölmesinden yüksek saflıkta Ar gazı (akış hızı 100 sccm) geçirilmiştir. Bu oran tüm süreç boyunca sabit tutulmuştur. Fırın 45 dakikada 450 °C'ye ısıtılmıştır. Fırın sıcaklığı 450 °C'ye ulaştığında, ısıtma bandı 22'da 115 °C'ye kadar ısıtılmıştır. Sülfür çözüldükten sonra CVD fırınının soğumasına izin verilmiştir. Büyüme mekanizmasının şematik gösterimleri Şekil 33'de gösterilmektedir. Böylece istenilen MoS₂ yapısı oluşturulmuştur. Elde edilen FTO/SnO₂/CdS ve FTO/SnO₂/CdS/MoS₂ yapıları alttaş tutucuya, RF1 magnetronuna CdTe hedef malzemesi yerleştirilip ve vakuma alınmıştır. Sistemde RT sıcaklığında 4 saat boyunca 50 Ar gazı altında büyüme yapılmıştır. Ardından CVD cihazında 200 °C'de *ex-situ* tavlama işlemi yapılmıştır. Elde edilen FTO/SnO₂/CdS/CdTe ve FTO/SnO₂/CdS/MoS₂/CdTe yapıları üzerine 200 °C de 5 dk MoO₃ ve 5 dk Mo büyütülmüştür.

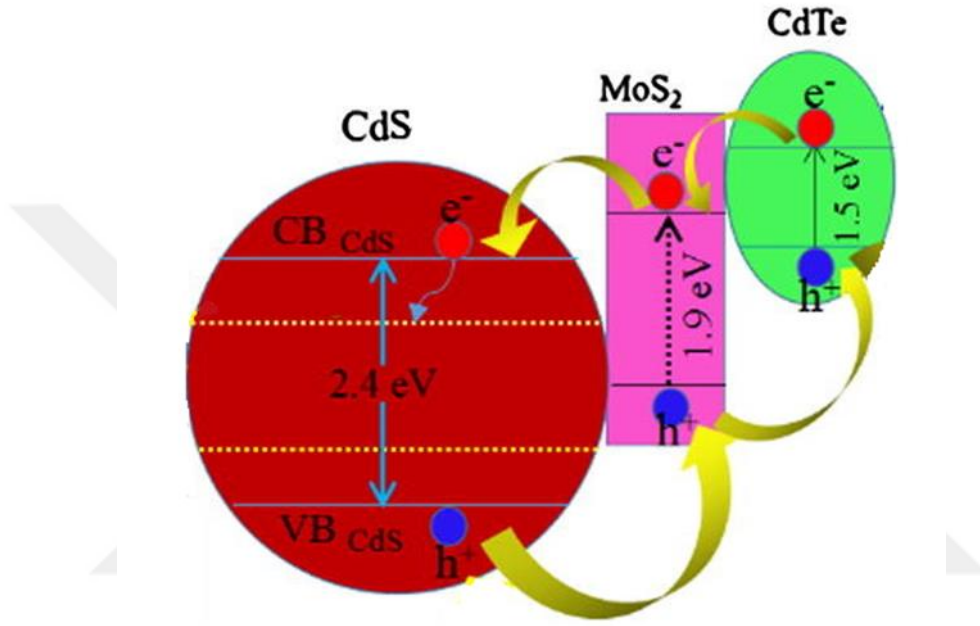
Güneş hücresi üretimin ayrıntılı parametreleri Şekil 38'de verilmiştir.



Şekil 38. Güneş hücresi üretim şeması.

Çok katmanlı güneş hücresinin karakterizasyonu

Üretilen güneş hücresinin I-V ölçümleri karanlık ve aydınlık ölçümleri yapılmıştır. Elde edilen güneş hücrelerinin I-V ölçümleri bilgisayar programı ile kontrol edilen Keithley 4200 ölçüm cihazı ve Albet marka yapay güneş ışığı cihazı yardımıyla yapılmıştır. Yapılan güneş hücrelerinin açık devre voltajı (V_{OC}), kısa devre akım yoğunluğu (J_{sc}), dolum faktörü (FF) ve güç dönüşüm verimi I-V ölçümlerinden hesaplanmıştır. Şekil 39’da güneş hücresine ait bant diyagramı verilmiştir.



Şekil 39. Güneş hücresi bant diyagramı.

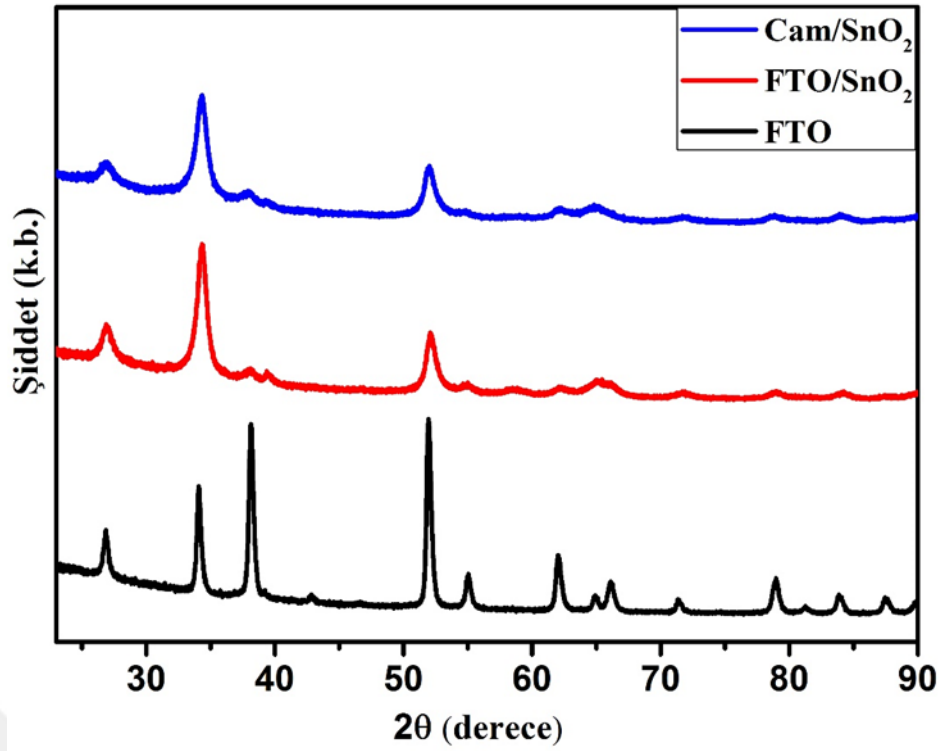
ARAŞTIRMA BULGULARI ve TARTIŞMA

Giriş

Bu bölümde, tasarlanan güneş hücresi yapısında kullanılan her bir ince film katmanı ayrı ayrı incelenmiştir. SnO_2 ve MoO_3 ince filmlerinin morfolojik ve yapısal karakterizasyonu ve değerlendirilmesi yapılmıştır. Büyütme için optimum süreler belirlenmiştir. CdS ve CdTe ince filmlerinin sıcaklığa bağlı morfolojik, yapısal ve optiksel karakterizasyonu ve değerlendirilmesi yapılmış, optimum süre ve sıcaklıklar belirlenmiştir. MoS_2 ince filminin MoO_3 kalınlığına bağlı morfolojik, yapısal ve optiksel karakterizasyonu ve değerlendirilmesi yapılmıştır. Son olarak ta, $\text{FTO}/\text{SnO}_2/\text{CdS}/\text{CdTe}/\text{MoO}_3/\text{Mo}$ ve $\text{FTO}/\text{SnO}_2/\text{CdS}/\text{MoS}_2/\text{CdTe}/\text{MoO}_3/\text{Mo}$ güneş hücresinin yapısı, fotovoltik performansı ve değerlendirilmesi yapılmıştır.

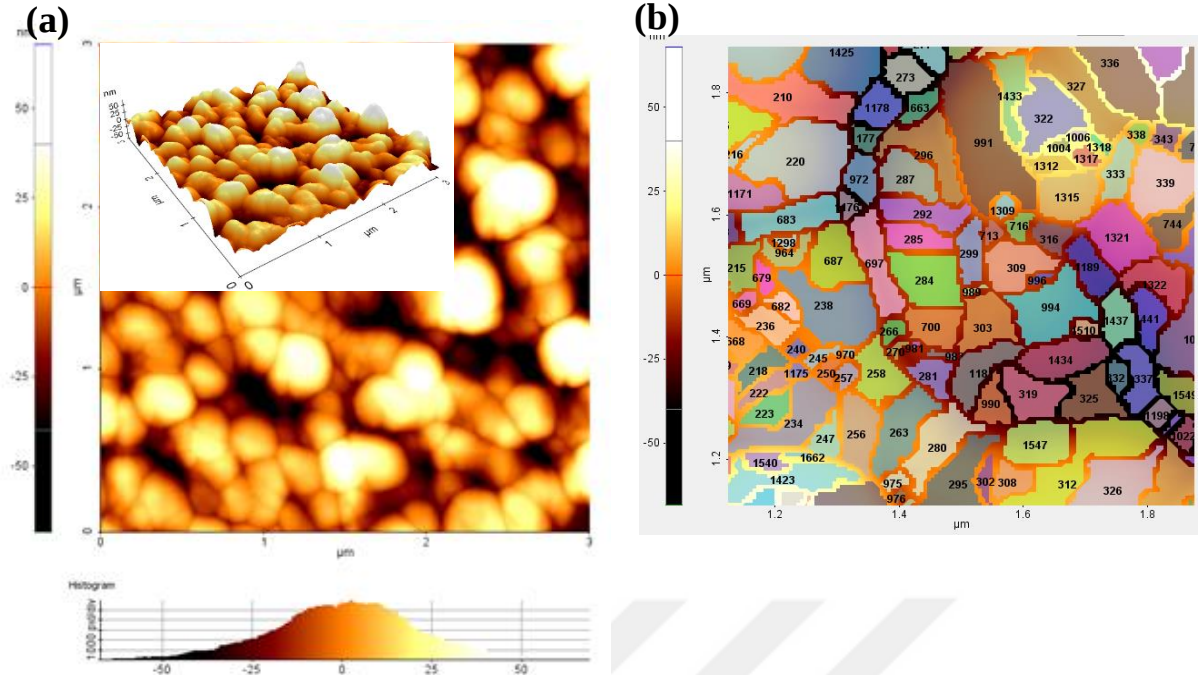
SnO_2 ince filmlerinin morfolojik ve yapısal karakterizasyonu ve değerlendirilmesi

Şekil 40'da FTO , Cam ve FTO üzerine bir saat boyunca SnO_2 büyütülen numunelere ait XRD grafikleri verilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi ticari FTO nun XRD pikleri daha keskin ve şiddetli iken cam ve FTO üzerine SnO_2 büyütülen numunelerin XRD piklerinin şiddetlerinin daha küçük olduğu gözlemlenmiştir. Cam ve FTO alttaş üzerine büyütülen iki numunenin de piklerinin aynı olduğu ve SnO_2 büyütülmesi ile bazı FTO pikleri ile örtüştüğünde tespit edilmiştir. Bu da SnO_2 ince filminin başarılı bir şekilde büyüttüğümüzü doğrulamıştır.

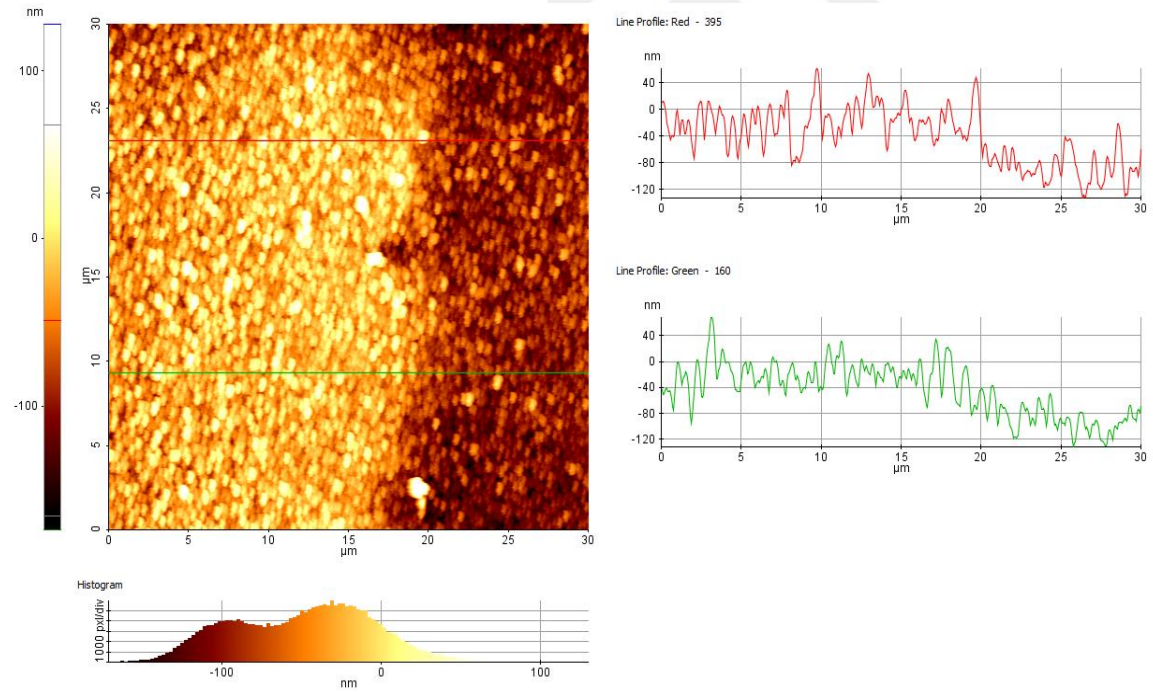


Şekil 40. FTO, FTO/SnO₂ ve Cam/SnO₂ ince filmlerine ait XRD grafiği

Şekil 41, 3x3 μm^2 'lik tarama alanına sahip 5 dk FTO üzerine büyütülen SnO₂ ince filmlerinin iki boyutlu (2D), üç boyutlu (3D), histogram ve tanecik dağılımını gösteren AFM görüntülerini göstermektedir. Açık renkli oval yapılar SnO₂ tanelerini gösterirken, siyah bölgeler taneler arasındaki boşlukları göstermektedir. SnO₂ filminin genel olarak düzenli ve boşluklu yapıda olduğu belirlenmiştir. Yüzey pürüzlülüğü 17,922 nm olarak hesaplanmıştır. Şekil 41 (b) için yüzeyde toplam 1715 tanecik olduğu hesaplanmıştır. Şekil 42'de gösterildiği gibi malzeme yüzeyinin uygun iki farklı noktasından AFM ile kalınlık ölçümü yapılmıştır. Elde edilen kalınlık ölçümüne göre 5 dk büyütülen SnO₂ filmi, ortalama 80 nm kalınlığında hesaplanmıştır.



Şekil 41. (a) FTO/SnO₂ ince filmine ait 2D, 3D ve histogram AFM görüntüsü, (b) tanecik boyutlarına ilişkin görsel



Şekil 42. SnO₂ ince filminin kalınlık ölçümü

CdS İnce Filmlerinin Tavlama Sıcaklığına Bağlı Olarak Yapısal, Optiksel ve Elektriksel Karakterizasyonu ve Değerlendirilmesi

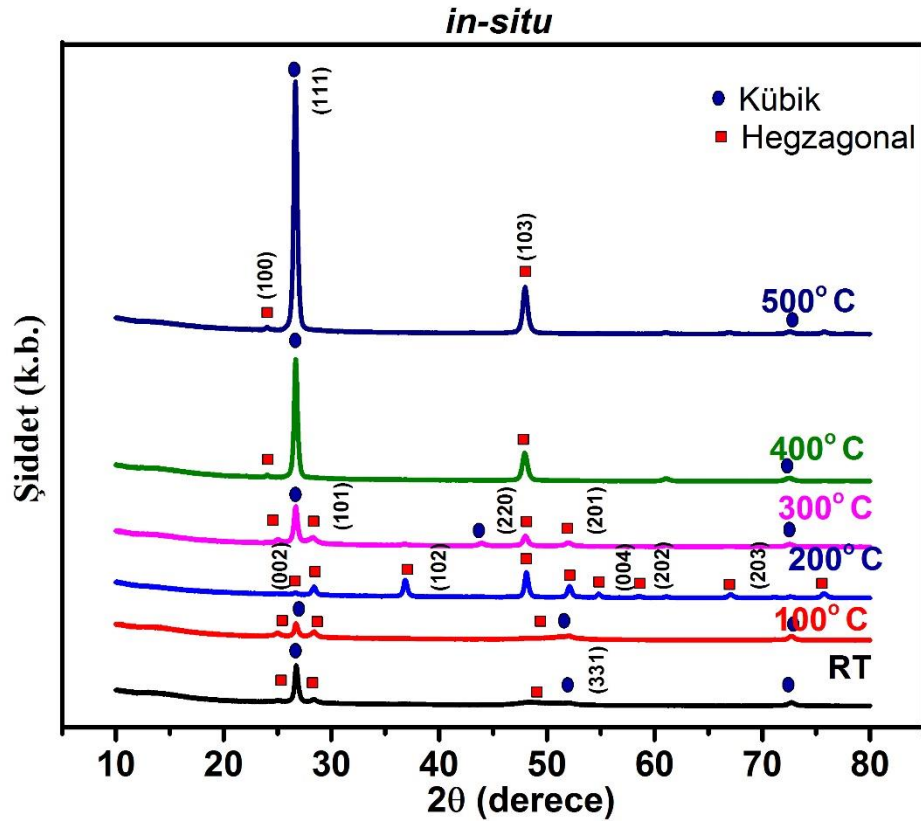
XRD cihazı yardımıyla analiz edilen filmler 10-80° aralığında 0,01° adımlarla $w = 1^\circ$ olacak şekilde X-ışınlarına maruz bırakılmıştır. Elde edilen XRD desenleri Şekil 43-44’de gösterilmektedir.

Farklı sıcaklıklarda (RT-500 °C) *in-situ* ve *ex-situ* tavlanan CdS ince filmlerine ait XRD grafikleri Şekil 43 ve 44'de verilmiştir. Gözlemlenen grafikler, match yazılımında JCPDS dosyaları tarafından sağlanan standart örneklerle analiz edilmiştir. Şekil 43'de görüldüğü gibi *in-situ* tavlanan numunelerde 200 °C tavlanan numune dışındaki tüm numunelerde yaklaşık $2\theta = 26,7^\circ$ 'da kübik faza ait (111) düzlemine karşılık gelen baskın bir pik gözlenmiştir (JCPDS: # 96-900-0068). *In-situ* tavlanan numunelerde RT'den 200 °C'ye kadar kübik (JCPDS # 96-900-0068) ve hegzagonal (JCPDS # 96-900-8863) fazın birlikte bulunduğu karışık faz gözlemlenmiştir. RT ve 100 °C' deki filmler için, (100 H), (111 C), (101 H), (103 H) and (331 C) 'e karşılık gelen $24,9^\circ$, $26,7^\circ$, $28,4^\circ$, $48,4^\circ$ ve $52,1^\circ$ 'da ana kırınım pikleri gözlenmiştir. Ancak 100 °C'de hegzagonal fazın pik yoğunluklarının arttığı ve kübik fazın pik yoğunluğunun ise azaldığı gözlenmiştir. 200 °C'de karışık faz yapısı saf bir hegzagonal faz yapısına dönüşmüştür. Bu numunenin XRD grafiklerinde $26,5^\circ$, $28,3^\circ$, $36,8^\circ$, $47,9^\circ$, $52,1^\circ$, $54,9^\circ$ ve $67,1^\circ$ 2θ değerlerinde gözlemlenen pikler, hegzagonal yapının sırasıyla (002), (101), (102), (103), (201), (004), (202) ve (203) kristal düzlemlerine karşılık gelmektedir. Z. Angel ve ark. CdS'nin kübik fazdan hegzagonal faza geçiş sıcaklığının 300 °C'de olduğunu bildirmiştir (Zelaya-Angel *et al.* 1994). Çalışmada bu sıcaklığın 200 °C olduğu bulunmuştur. Bu, yüksek vakum altında farklı yöntemlerin kullanımına atfedilebilir. 300 °C'de, kübik fazın pikleri tekrar görünmeye başlamıştır. Kübik fazın pik yoğunluğu, artan sıcaklıkla önemli ölçüde artmış, hegzagonal fazın pikleri önemli ölçüde azalmış ve kaybolmuştur. 300 °C'de tavlanan numune için (100 H), (111 C), (101 H), (102 H), (220 C), (103 H) ve (201 H) kristal yönelimine karşılık gelen $24,8^\circ$, $26,7^\circ$, $28,4^\circ$, $36,9^\circ$, $44,1^\circ$, $47,9^\circ$ ve $52,1^\circ$ 'de ana kırınım pikleri gözlemlenmiştir. Sıcaklığın 300 °C'den daha fazla artması ile yapının karışık fazdan kübik faza geçtiği gözlemlenmiştir. 400 ve 500 °C tavlanan numunelerde (111 C) and (103 H) kristal düzlemlere karşılık gelen $26,7^\circ$ ve $47,9^\circ$ 'da iki güçlü ana kırınım piki gözlemlenmiştir. Kübik fazın pik yoğunluğu, hegzagonal fazın pik yoğunluğundan önemli ölçüde daha yüksek bulunmuştur. Dolayısıyla bu filmlerin (111) düzlemi boyunca tercihli bir yönelim ile kübik bir yapıya sahip oldukları sonucuna varabiliriz (Zelaya-Angel *et al.*, 1994). Şekil 43'de tavlama sıcaklığının arttırılmasıyla hazırlanan ince filmlerin yüksek kristalliliğine vurgu yapmaktadır.

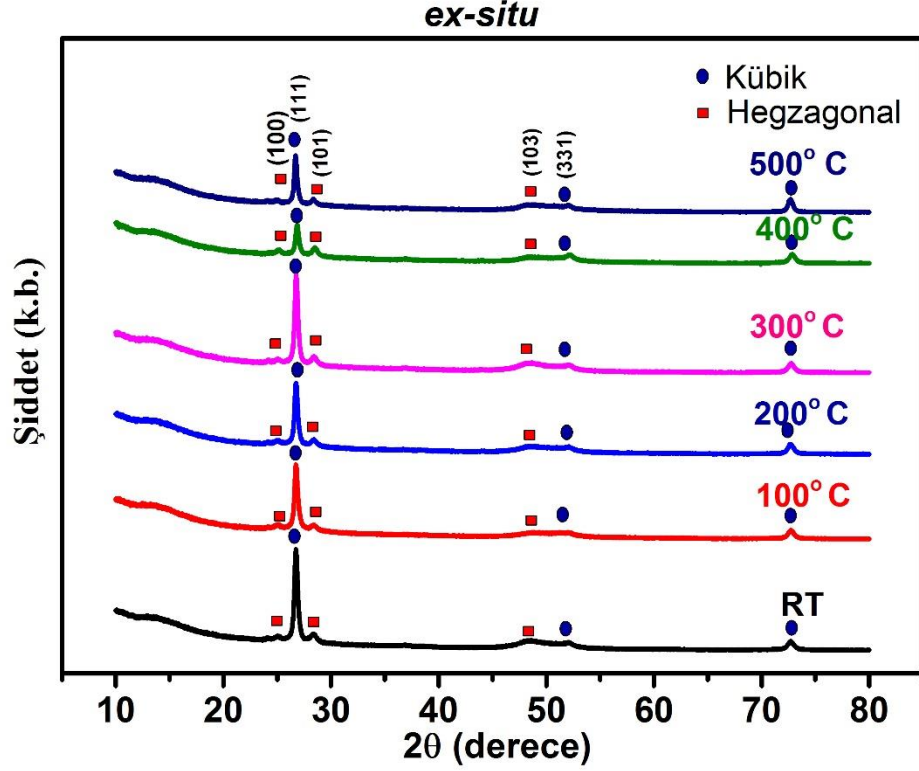
Şekil 44'da görüldüğü gibi, *ex-situ* tavllanmış filmler için (100, 200, 300, 400 ve 500 °C'de) (100H), (111C), (101H), (103H) ve (331C) kristal yönelimlere karşılık gelen $24,9^\circ$, $26,6^\circ$, $28,4^\circ$, $48,2^\circ$ ve $55,2^\circ$ 'de ana kırınım pikleri gözlenmiştir. XRD deseninde gösterildiği gibi (Şekil 39) hegzagonal ve kübik fazın birlikte bulunduğu karışık faz bulunmaktadır. Bu pikler hegzagonal (# 96-900-8863) ve kübik (# 96-900-0068) JCPDS veri dosyaları ile uyumludur. 200 °C'ye kadar sıcaklık artışı ile ana pikinin yoğunluğu azalmışken, 300 °C'de pik yoğunluğu artmıştır. Ancak sıcaklık artışı devam ettikçe, pik yoğunluğunun tekrar azaldığı görülmüştür.

Pik yoğunluğu en düşük 400 °C'de gözlemlenmiştir. C. Subhash ve arkadaşları termal tavlama sonra elektron demeti buharlaştırması ile büyütülen polikristal kadmiyum sülfür (CdS) filmlerinin yapısal ve optoelektronik özelliklerini araştırmışlardır (Chander *et al.* 2017). Bu çalışma ile uyumsuz olan sonuçlar ise üretim şeklinin farklılığına atfedilebilir.

In-situ tavlama yapılan numunelerde sıcaklık artışı ile genellikle pik yoğunluğunda artış gözlemlenirken, *ex-situ* tavlama yapılan numunelerde genellikle pik yoğunluğunda azalma gözlemlenmiştir. Şekil 43 ve 44'deki veriler, *in-situ* tavlamanın yüksek vakum durumu nedeniyle kafes içine oksijen difüzyonunun önlendiğini göstermektedir.



Şekil 43. *in-situ* tavllanmış CdS ince filmlerin XRD grafikleri.



Şekil 44. ex-situ tavllanmış CdS ince filmlerin XRD grafikleri.

Scherrer denklemi, $(D = (0.94\lambda) / (\beta \cos\theta))$ kristalin boyutunu hesaplamak için kullanılabilir. Burada $\text{CuK}\alpha$ 'nın $\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$, β baskın pike ait maksimum şiddetin yarısındaki genişlik olarak ifade edilen ve radyan cinsinden olan FWHM değeridir. θ ise Bragg kırınım açısıdır (Akdağ *et al.* 2016). Hesaplanan kristalin boyut değerleri Tablo 2'de özetlenmiştir. Tablo 2'den, kristal boyutunun, 200 °C sıcaklık değerinde tavlanan numune hariç *in-situ* tavllanmış numunelerde sıcaklık artışı ile genellikle arttığı gözlemlenmiştir. Kristal boyutunun sırasıyla 100 °C ve 200 °C'de en küçük ve en büyük değere sahip olduğu belirlenmiştir.

400 °C sıcaklık değerinde tavlanan numune hariç *ex-situ* tavllanmış tüm numunelerde kristal boyutu, sıcaklık artışı ile genellikle artmıştır. Kristal boyut sırasıyla 400 °C ve 500 °C'de minimum ve maksimum değeri almıştır. XRD'den elde edilen kristal boyutlarının Şekil 50'deki AFM analiz ölçümleri ile uyumlu olduğu bulunmuştur.

Farklı tavlama sıcaklıklarında hazırlanan filmlerin (FWHM), kristal boyutu (D), dislokasyon yoğunluğu (δ) ve mikro gerilim (ϵ) değerleri Tablo 2'de kaydedilmiştir. Mikro gerilim ve dislokasyon yoğunluğu değerlerinin maksimum ve minimum değerleri tane boyutuyla zıtlık oluşturmuştur. Kristal boyutu arttıkça δ ve ϵ azalmıştır. Kristal boyutundaki artış ve mikro gerilimdeki azalma, kafes kusurlarındaki azalmaya işaret etmektedir (Ali *et al.* 2020). Film ve alttaş arasındaki kafes sabitlerindeki ve termal genleşme katsayılarındaki farklılıklar mekanik gerilime neden olmaktadır. Bu nedenle filmlerde kararsızlık ve hatta

bozulmalar meydana gelmektedir (Rondiya *et al.* 2017). Bununla birlikte, incelenen büyütme süresi boyunca filmlerde herhangi bir bozulma gözlenmemiştir. Üretilen CdS filmler son derece kararlıdır. Aynı zamanda δ değerinin küçük değeri, filmlerin iyi kristallığe sahip olduğunu göstermektedir (Rondiya *et al.* 2017).

Tablo 2. Farklı tavlama şartlarında büyütülen CdS ince filminin XRD analizlerinden elde edilen yapısal parametreleri

	<i>in-situ</i> (°C)						<i>ex-situ</i> (°C)				
Numuneler	RT	100	200	300	400	500	100	200	300	400	500
FWHM (rad) ×10⁻³	0,4574	0,5866	0,4009	0,4913	0,4111	0,4173	0,5088	0,4643	0,4419	0,5632	0,4383
D	18,65	14,54	22,67	17,36	20,75	20,45	16,77	18,37	19,30	15,15	19,84
δ (1/nm)² ×10⁻³	0,0028	0,0047	0,0019	0,0033	0,0023	0,0023	0,0035	0,0029	0,0026	0,0043	0,0026
ε	0,1112	0,1426	0,0915	0,1195	0,1000	0,1015	0,1237	0,1129	0,1074	0,1369	0,1066

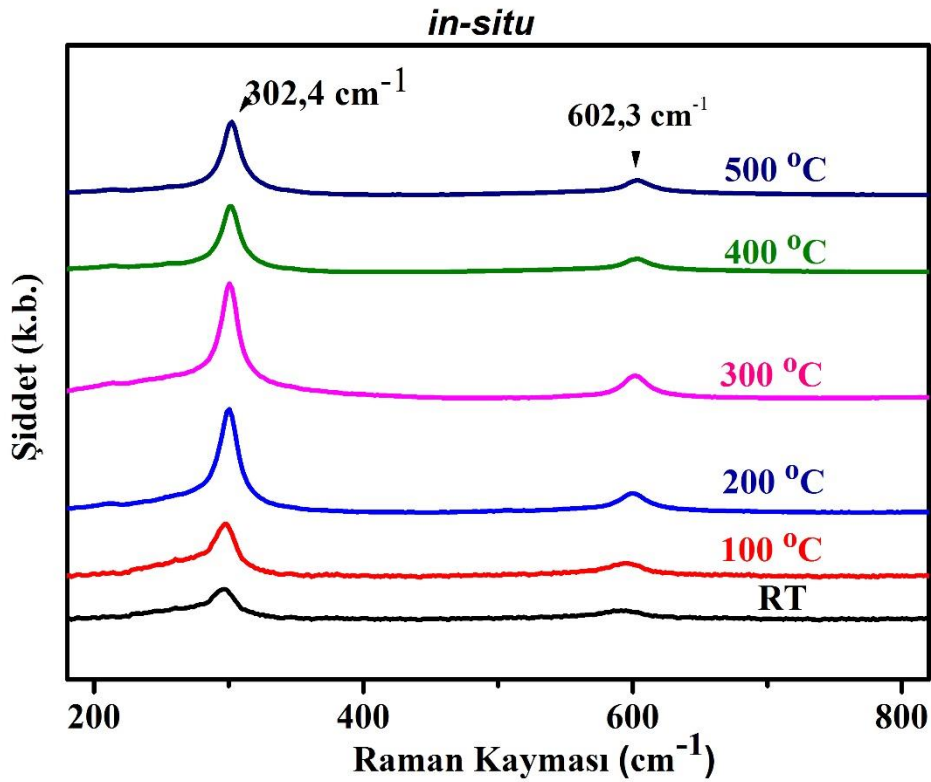
Raman spektroskopisi, lazer ışığının ince film ile etkileşimi ile moleküler titreşimi ve kimyasal yapıyı araştırmak için önemli bir karakterizasyon yöntemidir (Rondiya *et al.* 2017). Atomlar arasındaki bağları tespit etmek için kullanılan Raman spektroskopisi ile (200-800 cm^{-1}) farklı tavlama sıcaklığında hazırlanan CdS ince filmler incelenmiştir. Raman spektroskopisine ilişkin grafikler Şekil 45-46'da gösterilmektedir.

Farklı sıcaklıklarda *in-situ* tavlanan numunelerin Raman grafikleri Şekil 45'de verilmiştir. Şekil 45'de görüldüğü gibi, 302,4 cm^{-1} 'deki pik, birinci boyuna optik mod (1LO), 602,3 cm^{-1} 'deki pik ikinci boyuna optik (2LO) moda karşılık gelmektedir (Gilic *et al.* 2013). Bu piklerin yoğunluğu 400 °C'ye kadar artarken, sıcaklık artışının devam etmesiyle hafif bir düşüş gözlenmiştir.

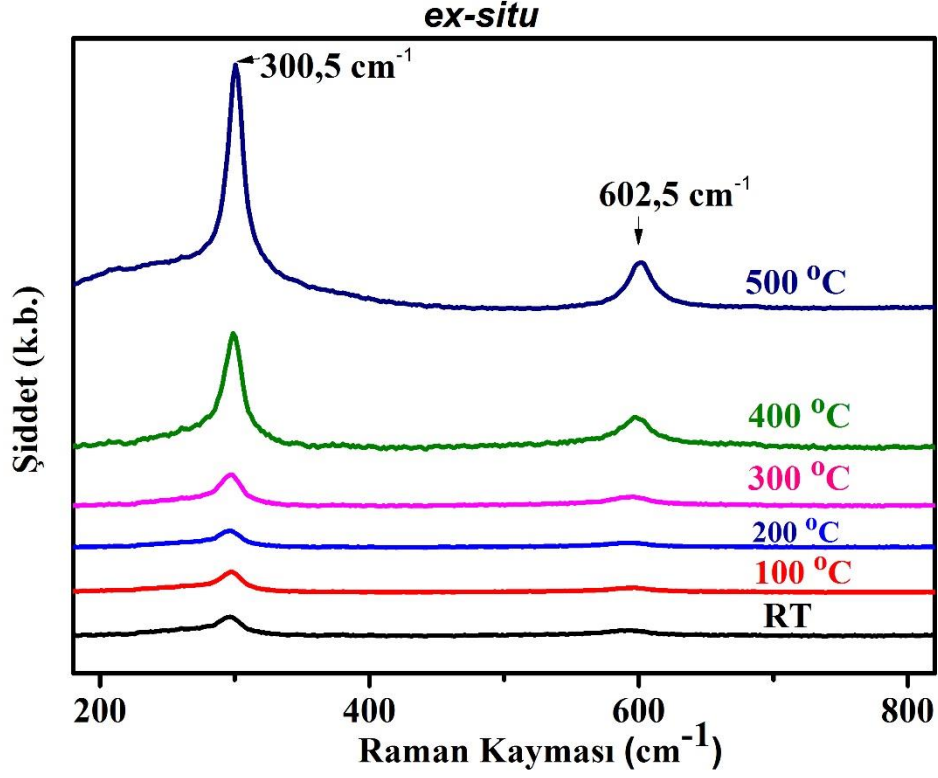
Ex-situ tavllanmış numuneler için, bu pikler 300,5 ve 602,5 cm^{-1} 'de ortaya çıkmıştır. Artan tavlama sıcaklığı ile bu iki pikin yoğunluğunda bir artış gözlenmiştir. Tablo 3, artan tavlama sıcaklığı ile filmlerin Raman pikinin (yaklaşık 300 cm^{-1}) FWHM arasındaki ilişkiyi göstermektedir. İnsitu tavlanan numunelerde FWHM değeri 300 °C'ye kadar düştüğü, 300 °C'de hafif bir artış olduğu, ancak sıcaklığın daha fazla artması ile azalmaya devam ettiği gözlemlenmiştir. *Ex-situ* tavllanmış numunelerde, bu değer 500 °C'ye kadar ki sıcaklıklarda artan sıcaklıkla düşerken, 500 °C'de hafif bir artış belirlenmiştir. FWHM değeri, farklı CdS kristal kafesine ve daha düşük 1LO pik yoğunluğuna sahip olmasından dolayı daha büyüktür. 1LO pik genişlemesinin, Cd interstisyel yoğunluğu ve kusur olarak S boşlukları ile ilişkisine atfedilebilmektedir. Bu durum nonsitokiyometrik CdS ince filmlerin üretildiği anlamına gelmektedir (Martínez-Landeros *et al.* 2019).

XRD sonuçlarının tartışılmasında görüldüğü gibi, FWHM azalması filmlerdeki gelişen kristalite ve kusur yokluğu ile doğrudan ilişkili olduğuna atfedilebilmektedir (Senthil *et al.* 2001).

İnsitu tavlanmış numunelerin 1 LO pik *ex-situ* tavlanmış numunelerin 1LO pikine kıyasla hafif sola kayma gözlemlenirken, 2LO pikinin konumunda önemli bir değişiklik olmamıştır. Titreşim modundaki bu değişim esas olarak filmlerin S/Cd stokiyometrik oranındaki değişikliklerden kaynaklanmaktadır (Martínez-Landeros *et al.* 2019).



Şekil 45. *in-situ* tavlanmış CdS ince filmlerin Raman grafikleri.



Şekil 46. *ex-situ* tavllanmış CdS ince filmlerin Raman grafikleri.

Tablo 3. CdS ince filmlerin Raman FWHM değerleri

	<i>in-situ</i> (°C)					
	RT	100	200	300	400	500
FWHM (cm ⁻¹)	36,30	30,13	21,7	27,07	19,9	19,8
	<i>ex-situ</i> (°C)					
	RT	100	200	300	400	500
FWHM (cm ⁻¹)	36,30	30,71	29,99	25,09	20,08	28,38

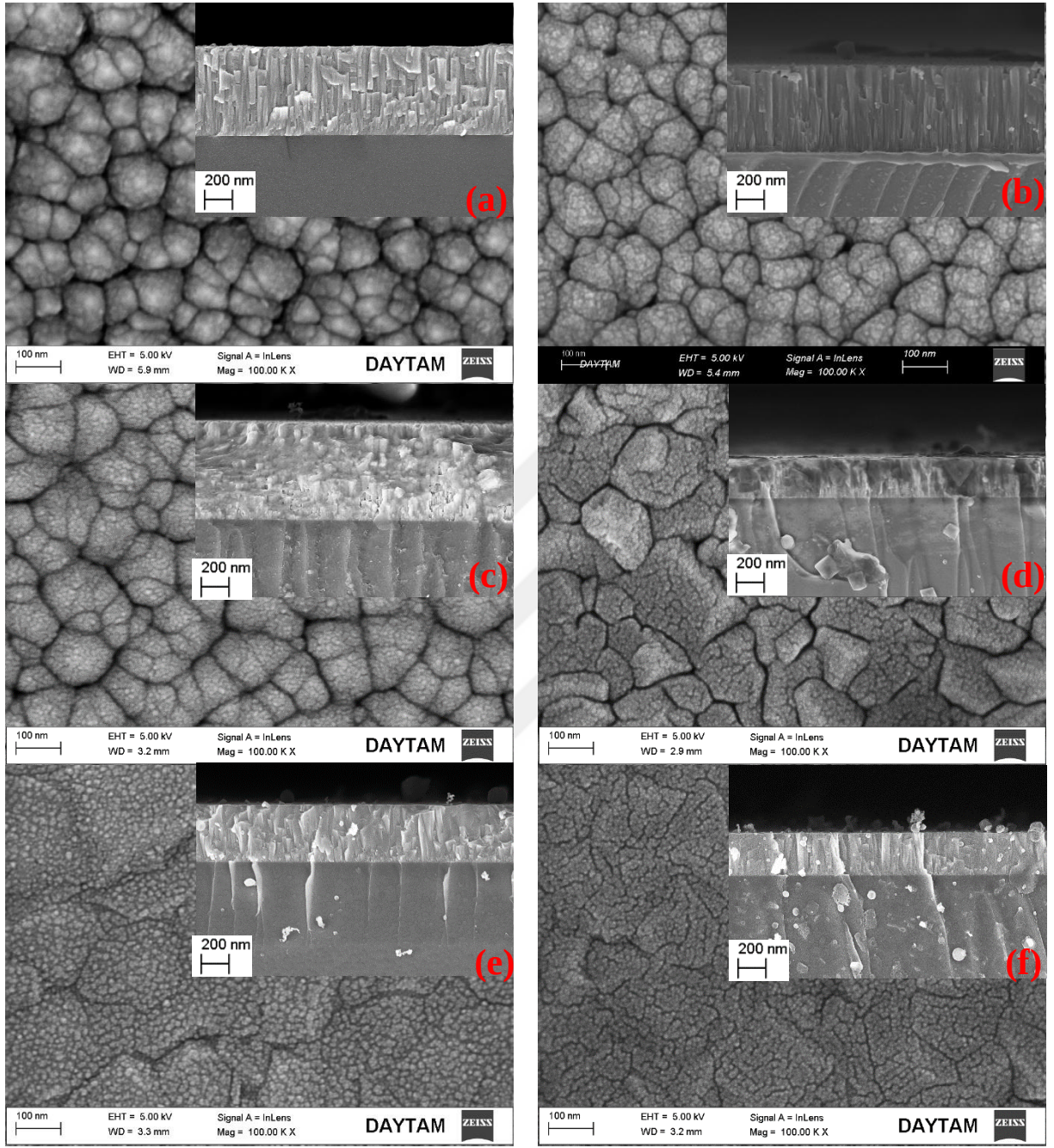
Şekil 47-48, cam alttaş üzerinde farklı tavlama sıcaklığında hazırlanan CdS ince filmlerin yüzey ve enine kesit FE-SEM görüntülerini göstermektedir. 100 °C'deki numune haricindeki, *in-situ* tavllanmış numunelerde, genellikle artan tavlama sıcaklıkları ile tane boyutunda artış belirlenmiştir. Aynı zamanda, tavlama sıcaklığının artışı ile numunelerde görülen boşluklar azalmış ve daha pürüzsüz bir yapı ortaya çıkmıştır.

Ex-situ tavllanmış numunelerde, 500 °C'ye kadar olan tavlama sıcaklıklarında taneler küreseldir ve büyüklükte önemli bir farklılık yoktur. Ancak 500 °C'de taneler elma dilimleri formundadır ve boyutları büyümüştür.

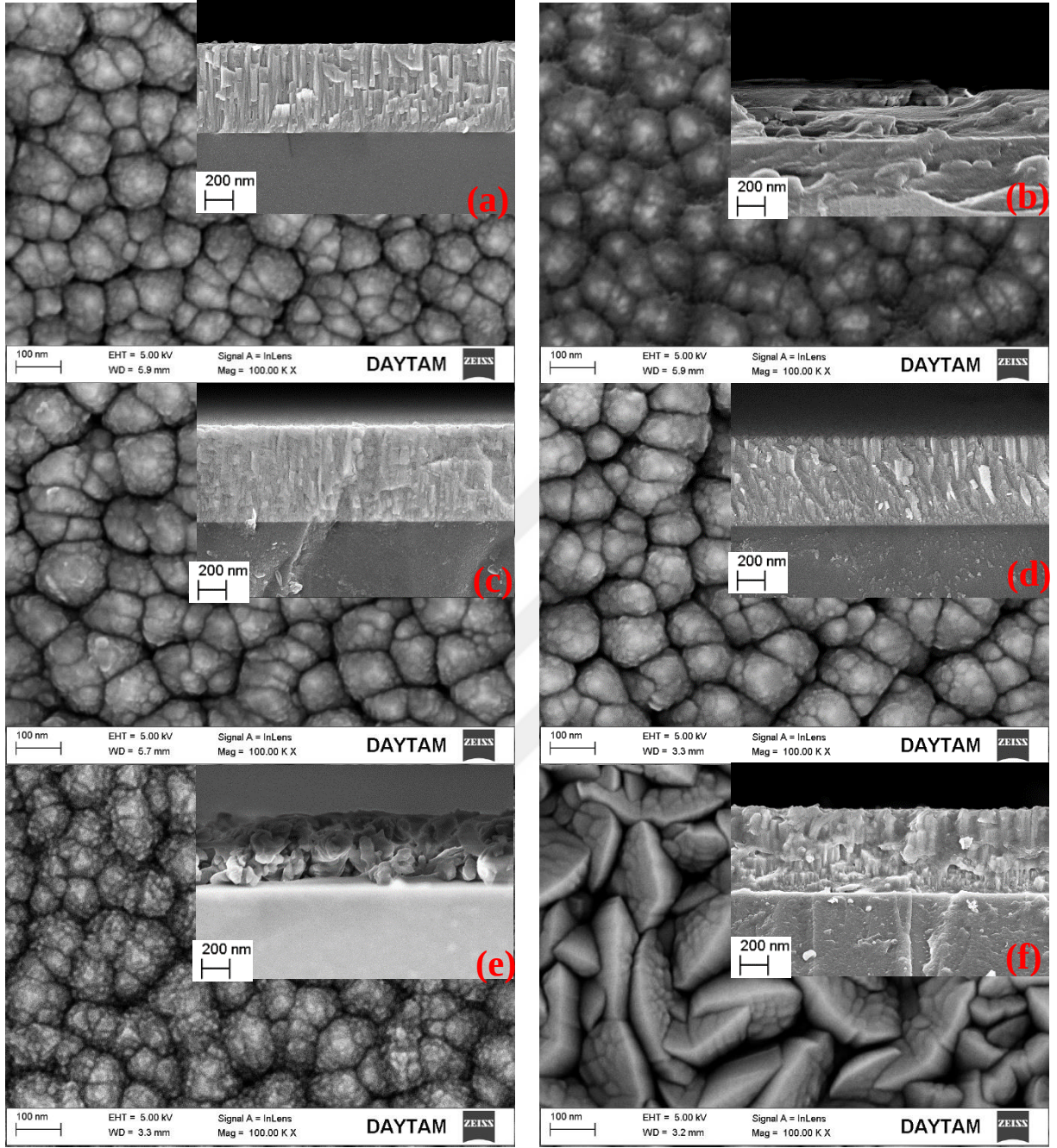
Kesit alanların SEM görüntüleri sıkı paketlenmiş yüksek kaliteli filmlerde baskın olan iyon-iyon (iki boyutlu) büyüme mekanizmasını ortaya koymaktadır. Küme küme (üç boyutlu) büyüme mekanizması ise, gözenekli CdS yapılarında görülmektedir. Ayrıca, kübik fazın varlığında (çinkoblende) iyon-iyon mekanizmasının baskın olduğu bunun tam aksine hegzagonal (wurtzit) fazın varlığında ise, küme-küme mekanizmasının baskın olduğu rapor edilmiştir (Slonopas *et al.* 2016).

In-situ RT ve 100 °C'de tavllanmış numunelerde, Şekil 47 'de görüldüğü gibi, iki boyutlu bir büyüme olurken, 200 °C'de üç boyutlu bir büyüme görülmektedir. 300 °C'de tekrar İki boyutlu büyüme oluşmaya başlarken, sıcaklığın daha fazla artmasıyla tamamen iki boyutlu büyüme mekanizması gözlemlenmiştir. Bu durum XRD'de tanımlanan yapıları doğrulamaktadır (Şekil 43-44).

Ex-situ tavlanan numunelerde ise iki boyutlu bir büyüme gözlemlenmiştir. Kesitsel SEM görüntülerinden film kalınlıkları bulunmuştur. Numunelerin kalınlık ölçüm sonuçları Tablo 4'te verilmiştir.



Şekil 47. (a-f) RT ve sırasıyla *in-situ*, 100, 200, 300, 400, ve 500 °C’de tavllanmış CdS ince filmlerinin FE-SEM görüntüleri



Şekil 48. (a-f) RT ve sırasıyla *ex-situ*, 100, 200, 300, 400, ve 500 °C’de tavlanmış CdS ince filmlerinin FE-SEM görüntüleri

Tablo 4. FESEM den elde edilen CdS filmlerinin kalınlıkları

<i>in-situ</i> (°C)						
	RT	100	200	300	400	500
Kalınlık (µm)	1,591	1,541	1,725	1,401	1,027	0,7648
<i>ex-situ</i> (°C)						
Kalınlık (µm)	1,591	1,590	1,580	1,582	1,540	1,507

Şekil 49-50, *in-situ* ve *ex-situ* farklı tavlama sıcaklıklarında [(a) RT b) 100 °C, (c) 200 °C, (d) 300 °C, (e) 400 °C ve (f) 500 °C] 3x3 µm²'lik tarama alanına sahip CdS ince filmlerin iki boyutlu ve üç boyutlu AFM görüntülerini göstermektedir. Siyah noktalar boşlukları temsil ederken, beyaz noktalar malzeme parçacıklarının varlığını temsil etmektedir. Tablo 5, numunelerin ortalama yüzey pürüzlülüğünü (Ra)'sını göstermektedir. Ra, çapraz düzleme göre yüzey yüksekliğinin ortalama değeri olarak tanımlanmıştır.

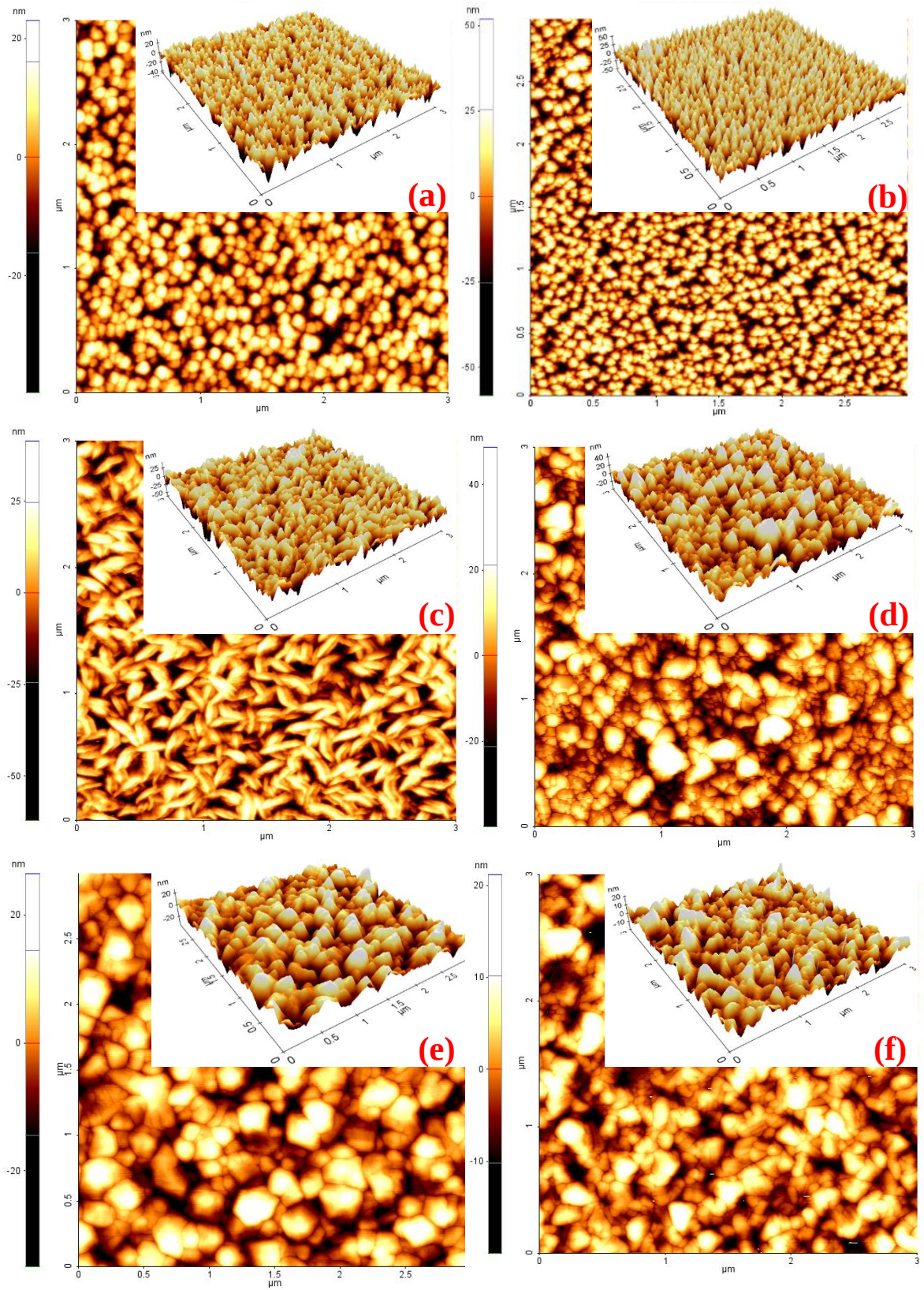
Tablo 5'te gösterildiği gibi, 100 °C ve 200 °C sıcaklıkta tavlanan numuneler haricindeki *in-situ* tavllanmış numunelerde sıcaklık artışı ile yüzey pürüzlülüğü azalmıştır. Bu durum sıcaklık artışı ile daha pürüzsüz bir yapı oluştuğunu kanıtlamaktadır. Şekil 49'da görüldüğü gibi 100 °C'deki yüzey pürüzlülüğündeki artış, daha keskin ve yoğun sütunların varlığına atfedilirken 200 °C'deki artış wrinkel nanosheets oluşumuna atfedilebilir. EK 1'de görüldüğü gibi 100 °C de RT ye kıyasla tane sayısında önemli bir artış gözlenirken tane boyutunda da azalma gözlenmiştir. Fakat daha fazla artan sıcaklıkla tane sayısında azalma, tane boyutunda ise artış gözlemlenmiştir.

RT, 100 °C ve 200 °C'de *ex-situ* tavllanmış numunelerin yüzey pürüzlülüğü hemen hemen aynı iken, 400 °C'de hafif bir azalma ve 500 °C'de önemli bir artış olmuştur. Çünkü 500 °C'de wrinkel nanosheets oluştuğu gözlemlenmiştir. EK 1' de gösterildiği gibi tane sayısında ve tane boyutunda önemli bir farklılık gözlemlenmemiştir.

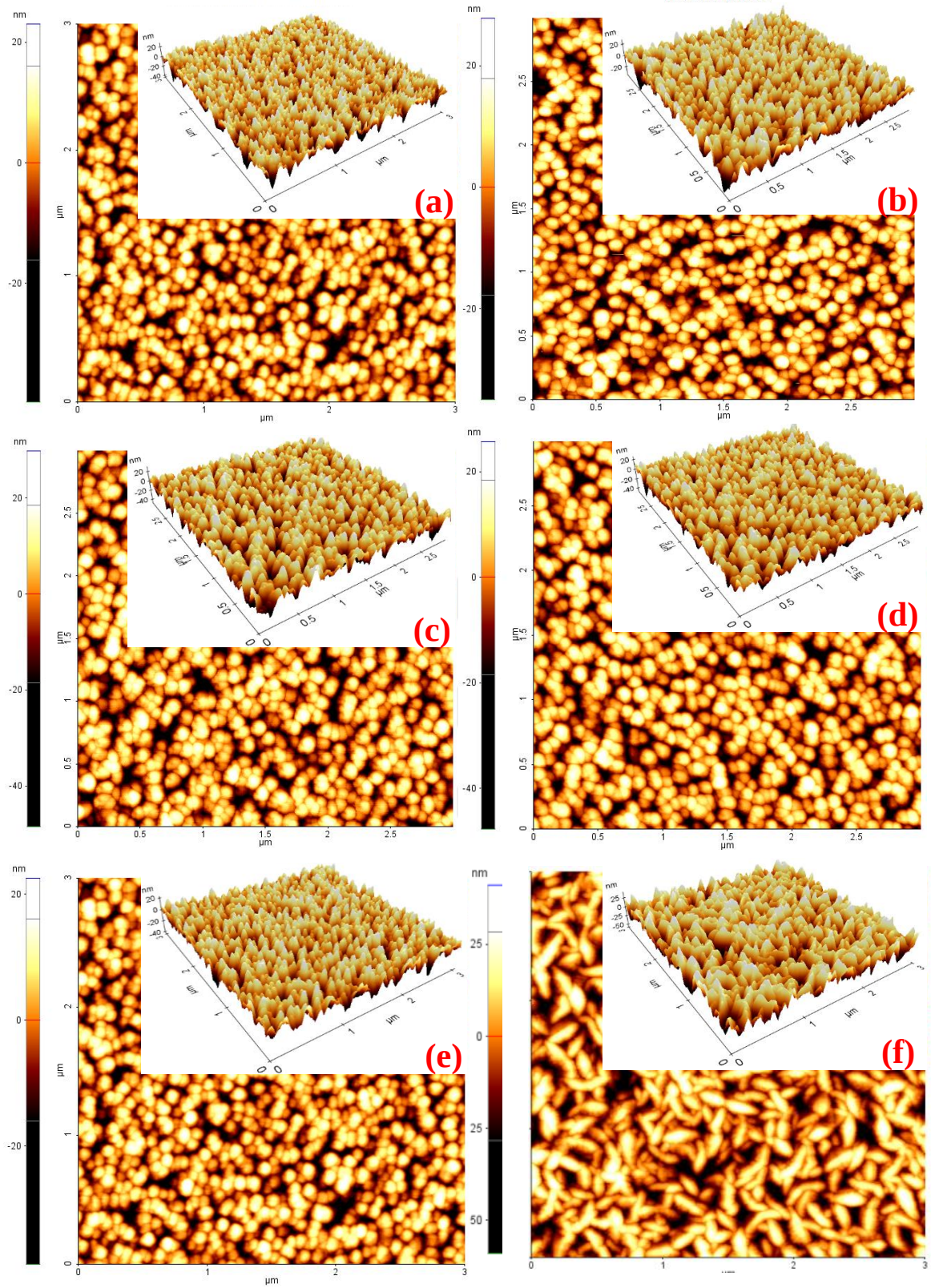
Sonuç olarak, tavlama sıcaklığının CdS filmleri yüzey pürüzlülüğünü, kristalitesini ve yoğunlaşmasını etkilediği belirlenmiştir. AFM analizi, *ex-situ* tavlanan numunelerde genellikle yüzey pürüzlülük parametresinin, artan sıcaklıkla artarken *in-situ* tavlanan numunelerde genel olarak azaldığını ortaya koymuştur. Aynı zamanda, *ex-situ* tavllanmış numunelerde, *in-situ* tavllanmış numunelere göre yüksek sıcaklık değerlerinde genellikle daha küçük taneler gözlemlenmiştir.

Tablo 5. CdS filmlerinin AFM ortalama yüzey pürüzlülüğü

<i>in-situ</i> (°C)						
	RT	100	200	300	400	500
R _a (nm)	7,442	9,885	9,871	7,412	6,0635	4,586
<i>ex-situ</i> (°C)						
R _a (nm)	7,442	7,488	7,502	7,981	6,3695	9,777



Şekil 49. (a-f) RT, *in-situ* sırasıyla 100, 200, 300, 400, and 500 °C’de tavlanmış CdS ince filmlerinin AFM görüntüleri.



Şekil 50. (a-f) RT, *ex-situ* sırasıyla 100, 200, 300, 400, and 500 °C’de tavlanmış CdS ince filmlerinin AFM görüntüleri.

500 – 1000 nm aralığında farklı sıcaklıkta *in-situ* ve *ex-situ* tavlanmış CdS ince filmlerin optik geçirgenlikleri (T) ve soğurma spektrumları (A) cam alt tabakanın etkileri elimine edilerek Şekil 51’de gösterilmiştir. İn-situ tavlanan filmler, temel soğurma bandı ($\lambda \sim 500\text{-}525$ nm) kenarında geçirgenlik keskin bir düşüş göstermiştir. Soğurma bandı kenarı RT

numunesinde gözlemlenmez iken, tavlama sıcaklığının artması ile hafif kırmızıya kaymıştır. Bu geçirkenlikteki bu keskin düşüş elektronun valans banttaki iletkenlik bandına uyarılmasına karşılık gelen optik band gap değeri ile ilişkilidir (Rondiya *et al.* 2017).

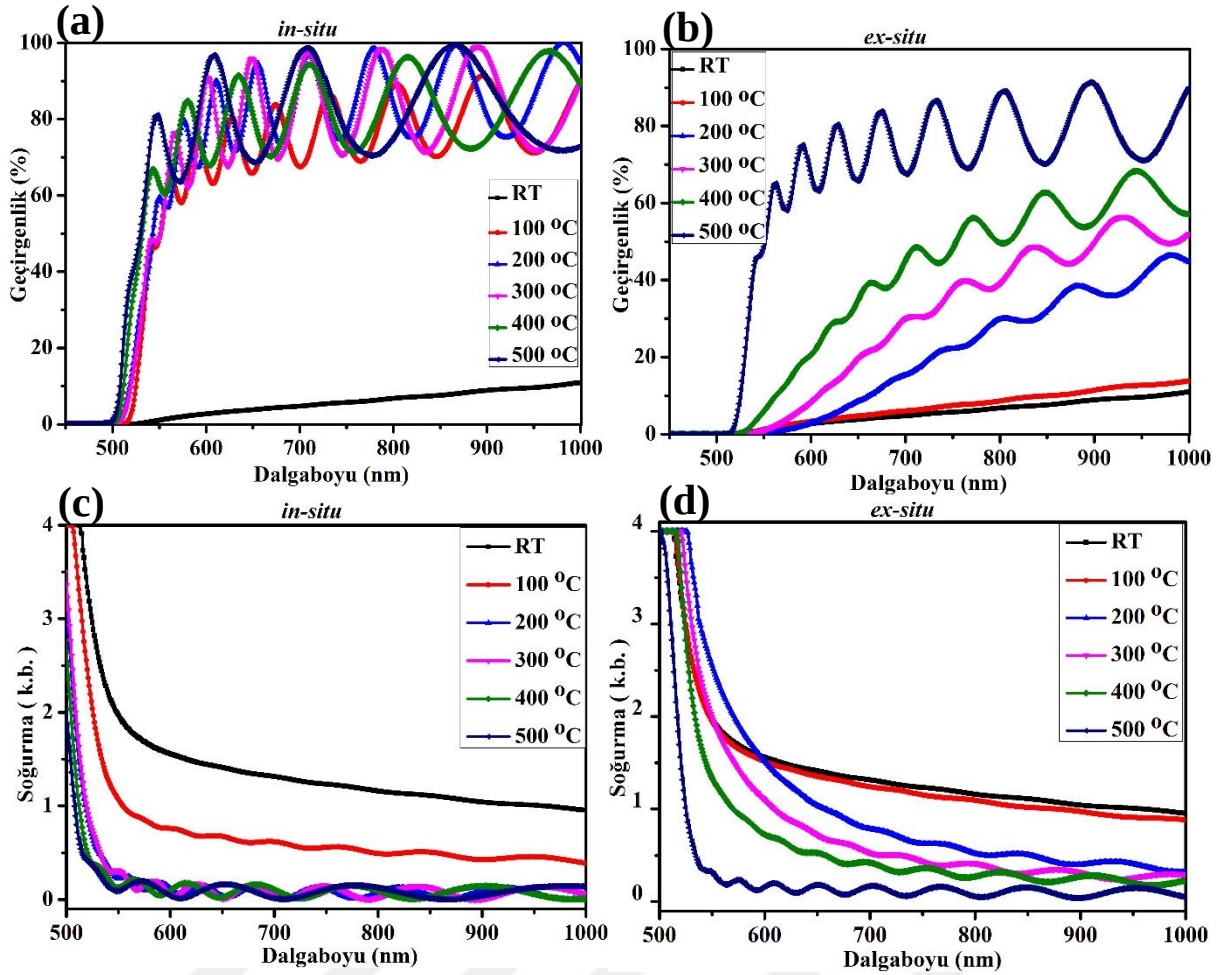
İnce filmlerin optik geçirgenliği, maksimum ~%100 değerine ulaşırken soğurma bandı kenarı yakınında ise azaldığı gözlemlenmiştir. Bu durum XRD sonuçlarından görüldüğü gibi hazırlanan CdS ince filmlerinin yüksek kristallik ve yapısal homojenliğine atfedilebilir (Şekil 43-44). Ayrıca, bant kenarı yakınındaki düşük yoğunluğuna da atfedilebilmektedir (Rondiya *et al.* 2017). Farklı dalga boylarındaki sürekli maksimum ve minimum salınım, ince filmlerin yüksek optik homojenliğini göstermektedir (Basyooni *et al.* 2017).

Ek olarak, *ex-situ* tavllanmış filmler, *in-situ* yerinde tavlanan numunelerin gösterdiği temel soğurma bandı kenarındaki keskin geçirgenlik düşüşünü göstermemiştir. Ancak 500 °C'de tavlanan film soğurma kenarını göstermeye başlamıştır. 500 °C'de ince filmlerin optik geçirgenliği görünür bölgede maksimum ~%90'a ulaşmıştır.

İncelenen aralıkta, filmlerin artan kristallik ve homojenliği ile tavlama sıcaklığının artması ile T'nin arttığı gözlenmektedir. Normalde CdS filmlerin T'sinin filmlerinin kalınlığı ve paketlenme yoğunluğu azalması ile arttığı rapor edilmiştir (Shaban *et al.* 2016).

Şekil 51 (c), *in-situ* tavllanmış CdS filmleri için absorpsiyon değerlerinin, artan tavlama sıcaklığı ile azaldığını ortaya koymaktadır. Numunelerin absorpsiyon değerleri 300 400 ve 500 °C'de hemen hemen aynıdır.

Şekil 51 (d), *ex-situ* tavllanmış numunelerin soğurma değeri, tavlama sıcaklığı arttıkça sistematik olarak azalmıştır. Bu durum kalınlığın azaldığını teyit etmektedir. Tavlama sıcaklığının artmasıyla, soğurma bandında bariz bir kırmızıya kayma görülmektedir. Bununla birlikte, *ex-situ* tavlama numuneleri için, absorpsiyon bandı 500 °C'de görünmeye başlarken 100-400 °C için iyi görünmemektedir [Şekil 51 (c-d)].



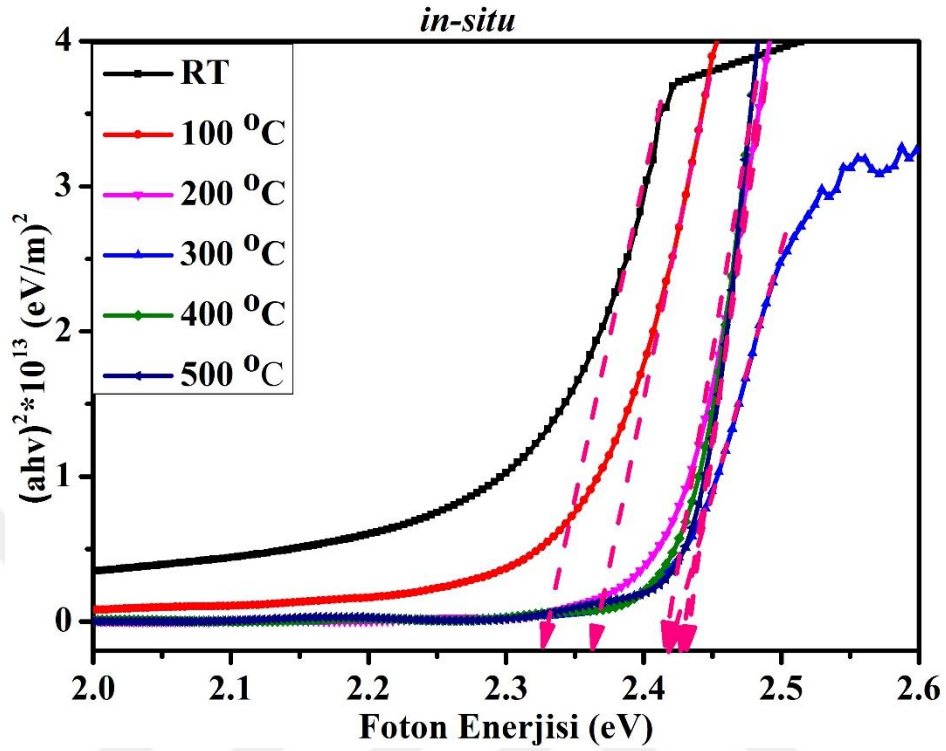
Şekil 51. (a), (b), (c) ve (d) sırasıyla *in-situ* ve *ex-situ* tavllanmış CdS ince filmlerinin geçirgenlik ve soğurma spektrumları.

Farklı sıcaklıkta tavlanan CdS ince filmlerinin E_g değerleri, Şekil 52-53'de gösterildiği gibi, $(\alpha h\nu)^2$ 'nin $h\nu$ 'ye karşı grafiğinde oluşan eğrinin üst kısmından $h\nu$ eksenine çizilen doğrunun eksenini kestiği nokta E_g bant aralığı değeri olarak alınmaktadır.

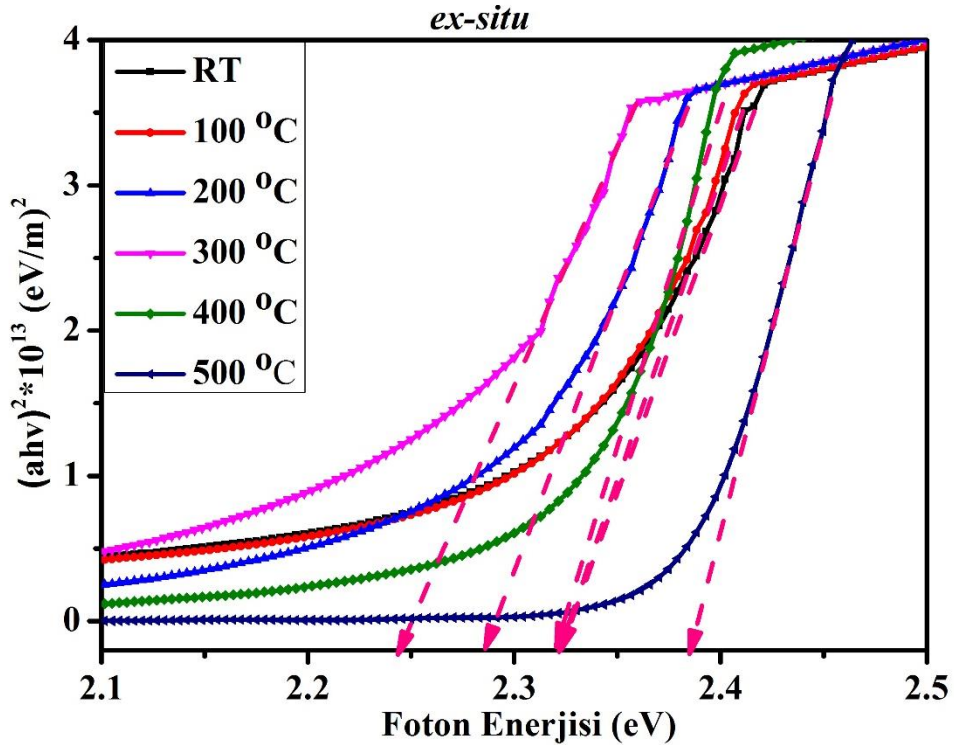
Şekil 52 'de gösterildiği gibi, *in-situ* tavlanan CdS filmlerinin optik bant aralığı (2,32 eV'den 2,42 eV'ye) sıcaklık artışı ile artmaktadır. Bant aralığındaki bu artış, tavlama sıcaklık artışı ile kalınlıktaki azalmaya atfedilebilmektedir. Benzer şekilde, kalınlık artışına bağlı olarak bant aralığında azalma da bildirilmiştir (Rondiya *et al.* 2017; Toma *et al.* 2016).

Öte yandan *ex-situ* tavllanmış numunelerde, optik bant aralığı 400 °C'ye kadarki tavlama sıcaklığı artışında 2,32'den 2,24 eV'ye düşmüştür. Sıcaklığın daha fazla artması ile ise bant aralığı 2,24'ten 2,38 eV'ye yükseldiği görülmüştür. CdS filmlerinin kristalite boyutu artmış ve bant aralığındaki bu azalmaya neden olmuştur (Metin *et al.* 2008). Çalışma ile benzer şekilde M. İslam ve arkadaşları 300 °C'de püskürtme yöntemi ile *in-situ* tavllanmış CdS ince filmleri büyütmüş ve bu numunelerin bant aralığını 1,42 eV olarak rapor etmişlerdir (İslam *et al.* 2013). Angel ve ark. CdS filmlerinin optik bant aralığının 300 °C'de düştüğünü ve bant aralığının artan tavlama sıcaklığı ile tekrar artmaya başladığını bildirmişlerdir. 300 °C'de en düşük bant aralığı

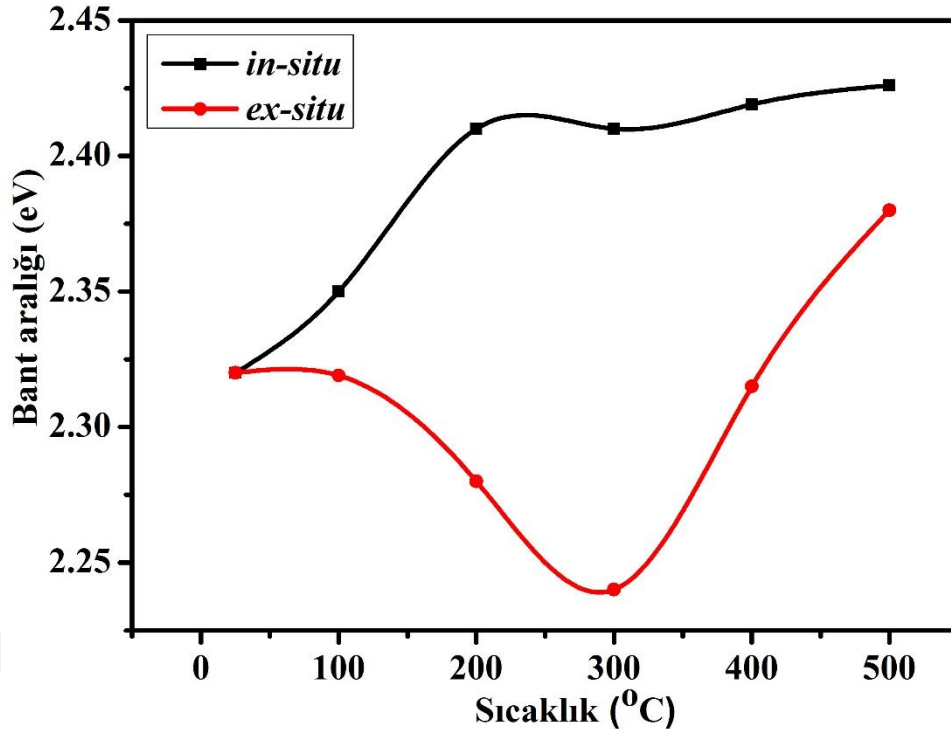
değerini gözlemlemişlerdir (Zelaya-Angel *et al.* 1994). Bu durum bu çalışmadaki *ex-situ* tavllanmış numunelerle uyumlu bulunmuştur.



Şekil 52. *in-situ* tavllanmış CdS ince filmlerinin $(\alpha h\nu)^2 - h\nu$ grafiklerinin tavlama sıcaklığına bağlı değişimleri.

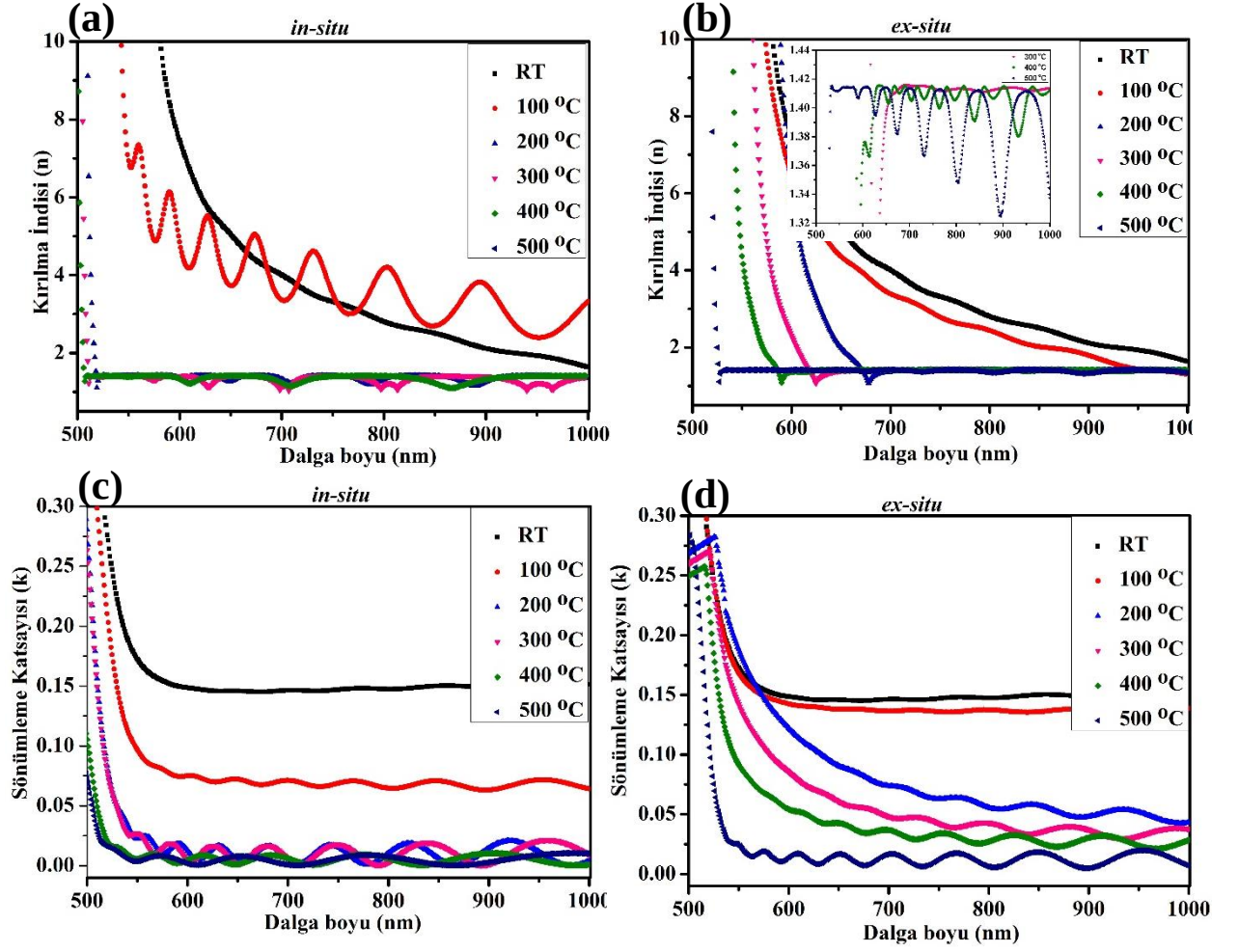


Şekil 53. *ex-situ* tavllanmış CdS ince filmlerinin $(\alpha h\nu)^2 - h\nu$ grafiklerinin tavlama sıcaklığına bağlı değişimleri.



Şekil 54. *in-situ* ve *ex-situ* tavllanmış CdS ince filmlerinin $(\alpha h\nu)^2$ - $h\nu$ grafiklerinin tavlama sıcaklığına bağlı değişimleri.

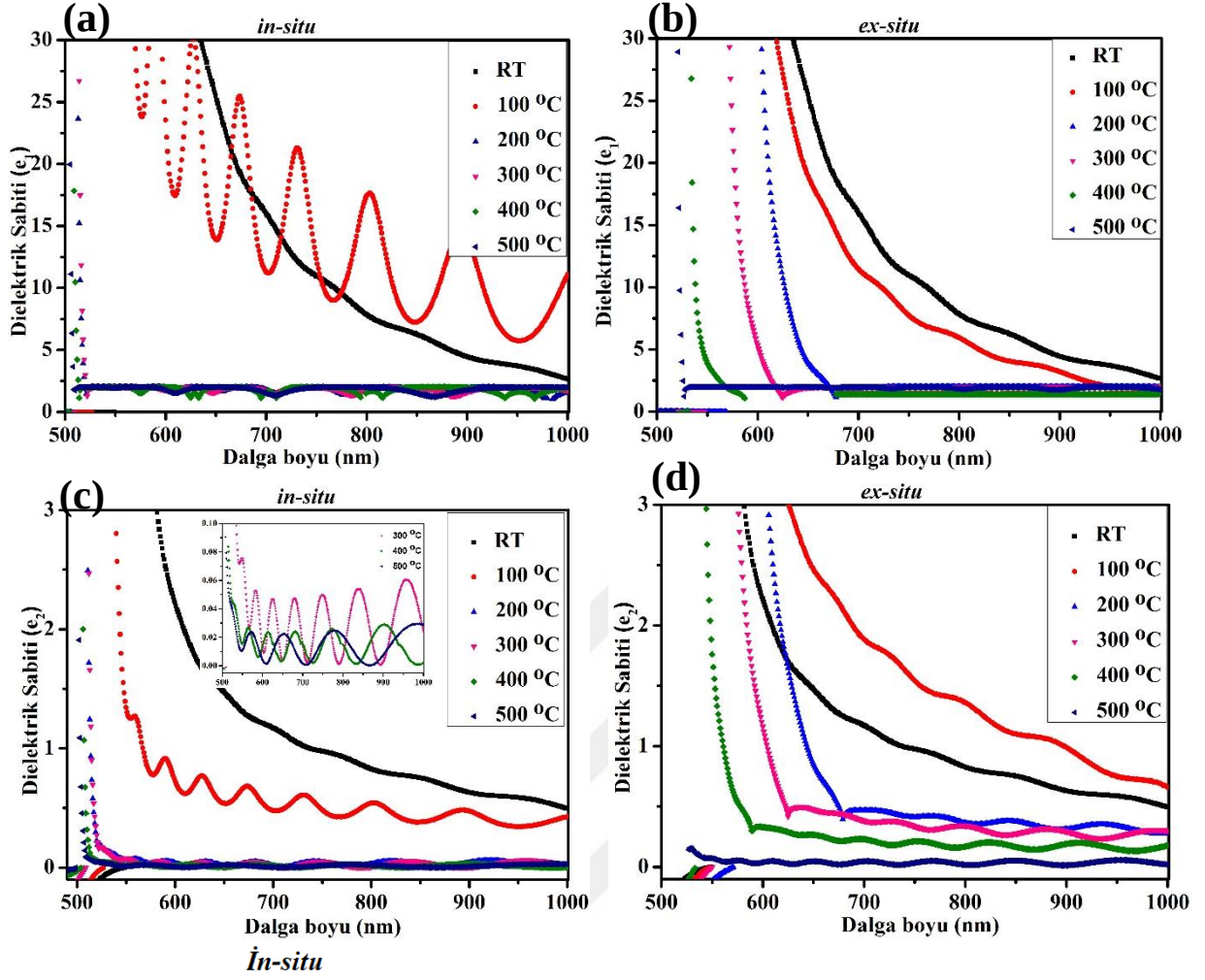
Şekil 55 (a-b) gösterildiği gibi, dalga boyunun bir fonksiyonu olarak kırılma indeksindeki (n) varyasyonları göstermektedir. Tavlama sıcaklığındaki artışla birlikte kırılma indeksinde belirgin bir azalma gözlemlenmiştir. Literatürde yapılan çalışmalarda tavlama sıcaklığı ile kırılma indeksinde düşüş olduğu rapor edilmiştir (Slonopas *et al.* 2016). Kırılma indeksinin değerleri, film yoğunluğunun kalınlıkla değişmesi nedeniyle artan film kalınlığı ile giderek artmaktadır (Aristizábal *et al.* 2016). Dalgaboyunun bir fonksiyonu olarak sönümlenme katsayısı varyasyonları Şekil 55 (c-d)'de gösterilmektedir. Tavlama sıcaklığının artmasıyla k 'da bir azalma gözlemlenmiştir. Sönümlenme katsayısındaki artış ve düşüş, doğrudan ışığın soğurulması ile bağlantılıdır. Çalışmadaki XRD örneği, artan tavlama sıcaklığı ile oluşturulan CdS ince filmlerinin polikristalin doğasının, tane sınırlarında fazladan bir ışık emiliminin olabileceğini göstermektedir (Sahay *et al.* 2007). Andre ve arkadaşları, yüksek sıcaklıklarda iyon-iyon mekanizmasının varlığından dolayı tavlama sıcaklığındaki artışla n ve k değerlerinde bir azalma olduğunu bildirmişlerdir (Slonopas *et al.* 2016).



Şekil 55. (a), (b), (c) ve (d) sırasıyla *in-situ* ve *ex-situ* tavllanmış CdS ince filmlerinin n ve k değerleri.

Yarıiletken malzemeler için karmaşık dielektrik sabiti $\epsilon^* = \epsilon_1 + i\epsilon_2$ ve kırılma indisi $n^* = n + ik$, bir dielektrik malzemenin dipol hareketi nedeniyle bir elektrik alanından enerjiyi nasıl emdiği ve bir malzemede ışık hızının ne kadar yavaşlayacağı hakkında bilgi sağlamaktadır (Abdel-Galil *et al.* 2014). İnce filmlerin dielektrik sabitinin hayali ve gerçek kısımları (Samavati *et al.* 2017), $\epsilon_1 = n^2 - k^2$ ve $\epsilon_2 = 2nk$ ile belirlenebilir. Şekil 56 (a-d) 'den görüldüğü gibi, CdS ince filmler için dielektrik sabit değerlerin gerçek ve hayali kısımlarının, dalga boyu ile azaldığı gözlenmektedir. Dielektrik sabitindeki varyasyonların, filmlerin tavlama sıcaklığına bağlı olarak doğada salınımlı olduğu bulunmuştur.

Filmlerin dielektrik sabitlerinin sönümlleme katsayıları ve kırılma indeksleri ile ilişkilendirilebileceği varsayılmaktadır (Samavati *et al.* 2017). Dalga boyundaki azalma (foton enerjisinin artması) ile ϵ_1 ve ϵ_2 'deki artış foton enerjisi ile kayıp faktörünün arttığını göstermektedir. Bu davranış daha önce bildirilenlerle uyumludur (Amroun *et al.* 2016).



Şekil 56. (a), (b), (c) and (d) *in-situ* ve *ex-situ* tavlanmış CdS ince filmlerinin (ϵ_1) ve (ϵ_2) grafikleri.

Farklı sıcaklıklarda *in-situ* ve *ex-situ* tavlanmış CdS ince filmlerinin PL spektrumları Şekil 57 (a-b)'de gösterilmektedir.

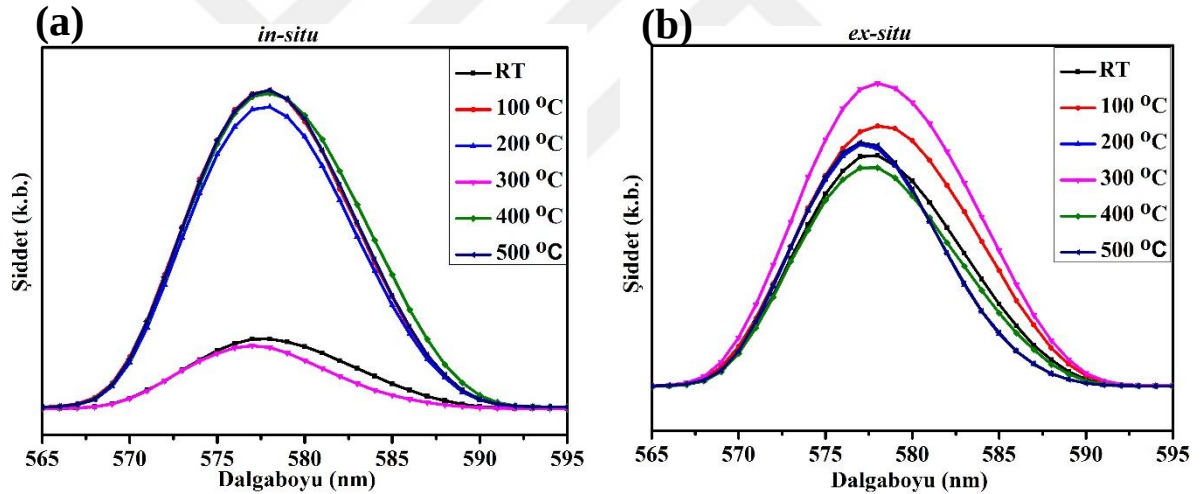
Tüm filmlerin yaklaşık 2,14 eV' da (578 nm) merkezlendiği bir pik ortaya çıkmıştır. Bu pik saf sarı banda karşılık gelmektedir. Tsai ve arkadaşları CdS PL spektrumlarında kırmızı, sarı ve yeşil olmak üzere üç bandın, gözlemlenebileceğini bildirmiştir (C. T. Tsai et al. 1996). Bunların oda sıcaklığında ~ 2,45 eV'deki zayıf yeşil bant, ~ 2,25 eV'deki sarı bant ve ~ 1,77 eV'dekinin ise kırmızı banta karşılık geldiğini bildirmişlerdir. Çalışmalarında sarı bant, Cd interstisyel donörlerin değerlik bandından iletkenlik bandına geçişine bağlamışlardır (Tsai et al. 1996). Bu nedenle, bu sonuçlar bu çalışmadaki numunelerin Cd açısından zengin olduğunu göstermektedir.

In-situ tavlanmış numunelerde, RT ve 300 °C'deki numunelerin sarı bant yoğunluğu birbirine çok yakinken, kalan örneklerin bant yoğunluğu birbirine çok yakındır. Bu sonuçlar,

XRD'den elde edilen tane boyutları arasındaki ilişki ile tutarlıdır. 100 °C'deki numunenin uyumsuzluğu yapıdaki kusurlara bağlanabilir.

Ex-situ tavllanmış numunelerde, en büyük sarı bant yoğunluğu 300 °C'de ve en küçük sarı bant yoğunluğu ise 400 °C'de gözlemlenmiştir. Bununla birlikte, hemen hemen tüm numunelerin bant yoğunluğu birbirine çok yakındır. Bu, Şekil 57 (b)'de görüldüğü gibi PL piklerindeki yoğunluk artışının XRD'den elde edilen tane büyüklüğü hesaplamaları ile benzer olduğunu, daha iyi kristallik ve film kalitesinin daha büyük tanelerin oluşmasını sağlamasına atfedilebilir (Kim *et al.* 2015).

İn-situ tavllanmış numunelerde sarı bant piklerinde herhangi bir kayma gözlenmezken, *ex-situ* tavllanmış numunelerde çok az maviye kayma gözlenmiştir. *İn-situ* tavlama durumunda, gözlemlenen PL pik noktası herhangi bir kusur veya boşlukla ilgili değildir. Bununla birlikte, *ex-situ* tavlama altında, gözlemlenen mavi kayma nedeniyle daha fazla kusur ve oksijen yayılımı söz konusudur (Zargouni *et al.* 2020). Ayrıca, *in-situ* PL yoğunluğu, *ex-situ* film ile karşılaştırıldığında yüksek değerler göstermektedir.

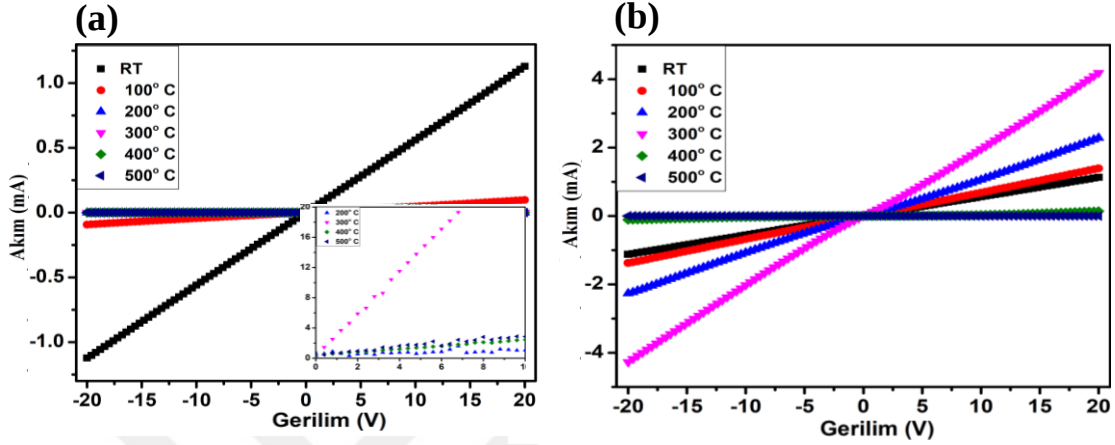


Şekil 57. (a) ve (b) *in-situ* ve *ex-situ* tavllanmış CdS ince filmlerinin PL grafikleri

Şekil 58 (a-b), oda sıcaklığında (20°C) -20 ile 20 V arasında *in situ* ve *ex-situ* tavllanmış ince filmlerin ileri ve geri I-V ölçümlerini göstermektedir. *İn-situ* tavllanmış filmler, Şekil 58 (a)'da gösterildiği gibi yüksek bir iletkenlik değeri göstermektedir. RT ince filmlerinin, yüksek $5,6 \cdot 10^{-5}$ iletkenlik değeri gösterdiği gözlemlenmiştir. Aynı zamanda filmlerin tavlama sıcaklığının artması ile iletkenlikte bir azalma görülmeye başlamıştır. Bunun sebebi, dalga hareketi şeklinde hareket eden elektronların artan sıcaklıkla titreşimleri artan atomlar arasındaki etkileşimdir.

Öte yandan, *ex-situ* filmlerde 100 °C'den 300 °C'ye kadar iletkenlikte bir artış görülürken, tavlama sıcaklığının daha fazla artması ile iletkenlikte azalma görülmüştür. *Ex-situ*

300 °C’de tavlanan filmlerde, Şekil 58 (b)’de görüldüğü gibi yüksek film kristallığı nedeniyle en yüksek iletkenlik değerini (0,20 $\mu\text{A/V}$) görmüştür. Bununla birlikte, 400 °C ve 500 °C’de tavlanan filmler, düşük kristallik piklerinden görüldüğü gibi, düşük iletkenlik göstermişlerdir. (sırasıyla 4,81 $\mu\text{A/V}$ ve 7,46 $\mu\text{A/V}$). Tablo 5’te gösterildiği gibi, *ex-situ* filmlerin iletkenlik değerleri, *in-situ* filmlerden daha yüksektir.



Şekil 58. (a) ve (b) *in-situ* ve *ex-situ* tavllanmış CdS ince filmlerinin I-V eğrileri.

Tablo 6. CdS ince filmlerinin A/V iletkenlik değerleri

<i>in-situ</i> (°C)						
	RT	100	200	300	400	500
İletkenlik (A/V)	$5,62 \cdot 10^{-5}$	$4,62 \cdot 10^{-6}$	$9,46 \cdot 10^{-11}$	$2,86 \cdot 10^{-9}$	$2,35 \cdot 10^{-10}$	$2,45 \cdot 10^{-10}$
<i>ex-situ</i> (°C)						
İletkenlik (A/V)	$5,62 \cdot 10^{-5}$	$6,87 \cdot 10^{-5}$	$1,11 \cdot 10^{-4}$	$2,06 \cdot 10^{-4}$	$4,82 \cdot 10^{-6}$	$7,47 \cdot 10^{-9}$

CdTe İnce Filmlerinin Tavlama Sıcaklığına Bağlı Yapısal ve Optiksel Karakterizasyonu ve Değerlendirilmesi

Farklı tavlama şartlarının, manyetik alan sıçratma metoduyla büyütülen CdTe ince filmlerinin yapısal ve kristalografik özellikleri üzerindeki etkisini belirlemek için XRD analizi yapılmıştır. Şekil 59-60’da XRD desenleri, 2θ 10° ile 50° aralığında $0,01^\circ$ ’lik bir adım büyüklüğü ile verilmiştir.

Tüm *in-situ* tavllanmış ve RT filmlerinde (111) düzlemi boyunca polikristal özellik gözlenmiştir. Tüm tavlama sıcaklıkları için kübik yapıyı doğrulayan XRD grafiğinde $2\theta = 24,03^\circ$ ’de bir tane pik (JCPDS: # 96-101-0540) belirlenmiştir.

XRD pik yoğunluğunu etkileyen birçok faktör vardır. Bu faktörlerden bazıları şunlardır:

- 1) birim hücrede atomların değiştirilmesi
- 2) kristal bileşenlerin saçılma yoğunluğundaki değişiklik

- 3) kafes düzenlemesi
- 4) kristalit boyut farklılıkları
- 5) film dokusunun süreksizliği
- 6) gözeneklilik ve boşluklar
- 7) alt tabaka pürüzlülüğü
- 8) film kalınlığı (Rahman *et al.* 2019).

Bu nedenle, (111) pikinin yoğunluğu tavlama sıcaklığına göre değişmektedir. (111) piklerinin yoğunluğu 330 °C'ye kadar artarken, artan tavlama sıcaklığı ile pik yoğunluğunda azalma gözlenmiştir.

Bütün *ex-situ* tavllanmış numunelerde, $2\theta = 24,03^\circ$ 'de (111) düzlemi boyunca baskın bir pik gözlenmiştir (JCPDS: # 96-101-0540). 200°C ve üzerindeki sıcaklıklarda $2\theta = 26,56^\circ$ 'de düşük yoğunluklu farklı bir pik belirlenmiştir (JCPDS: # 96-210-6554). Bu pikin Te_4O_9 fazına ait olduğu literatür araştırması ile tespit edilmiştir. Şekil 60'da, tavlama sıcaklığı arttıkça (111) pikinin yoğunluğu azalmıştır. Ancak Te_4O_9 pikinin yoğunluğu, tavlama sıcaklığının artmasıyla artmıştır.

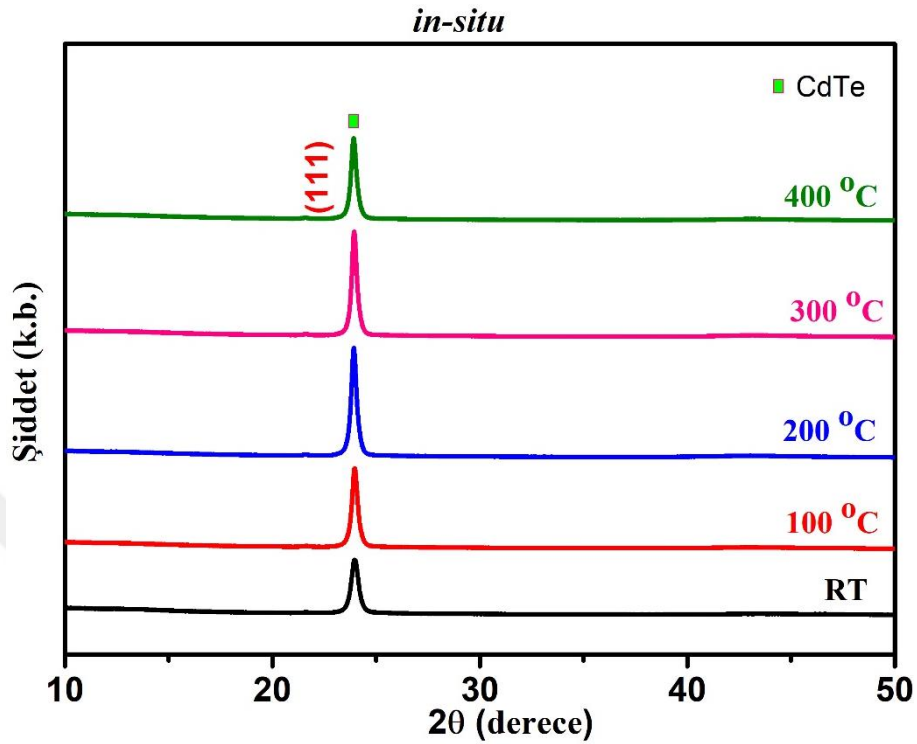
Farklı tavlama sıcaklıklarında hazırlanan filmlerin FWHM, kristal boyutu (D), dislokasyon yoğunluğu (δ) ve mikro gerilim (ϵ) değerleri Tablo 7'de gösterilmiştir.

FWHM değeri kristalite ile önemli ölçüde ilişkilidir. Daha yüksek bir FWHM değeri kristalite de azalmayı gösterirken, daha büyük kristal boyutları kristalitenin iyileştiğini göstermektedir. *İn-situ* tavllanmış numunelerde, FWHM değeri genellikle azalırken kristal boyutu artan sıcaklığı ile artmıştır (Islam *et al.* 2017). Bu, filmlerin yeniden kristalleştirilmesine atfedilmektedir. Mikro gerilme ve dislokasyon yoğunluğu genellikle hafifçe azalmıştır. En düşük mikro gerilme 300 °C'de 0,0724 olarak belirlenmiştir. Aynı sıcaklık için minimum dislokasyon yoğunluğu değeri 12.10^{-6} cm^2 olarak bulunmuştur.

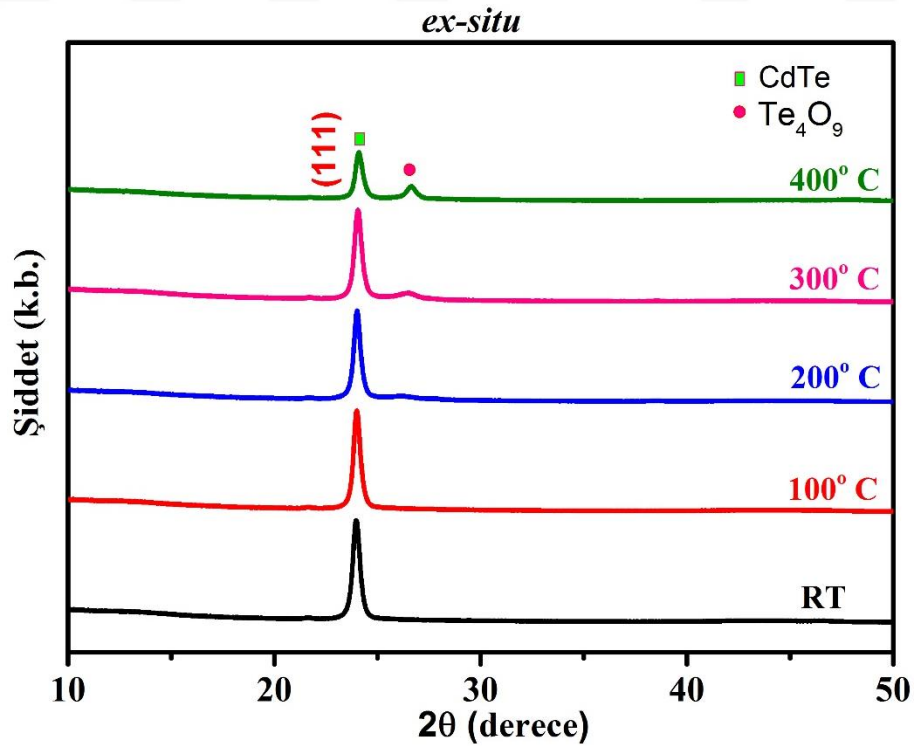
Ex-situ tavllanmış numunelerde FWHM değeri artarken kristal boyutu azalmıştır. Mikro gerilme ve dislokasyon yoğunluğu genellikle tavlama sıcaklığı arttıkça hafifçe artmıştır. En düşük mikro gerilme 300°C'de 0,0940 olarak belirlenmiştir. Aynı sıcaklık için minimum dislokasyon yoğunluğu 20.10^{-6} cm^2 bulunmuştur.

İn-situ tavllanmış numunelerde kristal boyutunun maksimum değeri, 300 °C'de (286,56 nm), *ex-situ* tavllanmış numunelerde ise 100 °C'de (220,60 nm) gözlenmiştir. Daha büyük kristalite boyutu, güneş hücrelerindeki soğurma tabakasında kullanılan filmlerde istenen bir özelliktir. Çünkü cihaz performansını geliştirir (Chander *et al.* 2018). *İn-situ* tavllanmış numunelerin kristal büyüklüğü, *ex-situ* tavllanmış numunelerinkinden daha büyüktür. Fakat

mikro gerilme ve dislokasyon yoğunluğu daha küçüktür. Bu, *in-situ* tavllanmış numunelerin daha iyi kristal kalitesine sahip olduğunu, kafes yapısının daha düzenli ve kusurların daha az olduğunu göstermektedir (Rahman *et al.* 2019).



Şekil 59. *in-situ* tavllanmış CdTe ince filmlerin XRD ölçümleri.



Şekil 60. *ex-situ* tavllanmış CdTe ince filmlerin XRD ölçümleri.

Tablo 7. Farklı tavlama şartlarında büyütülen CdTe ince filminin XRD den elde edilen yapısal parametreleri

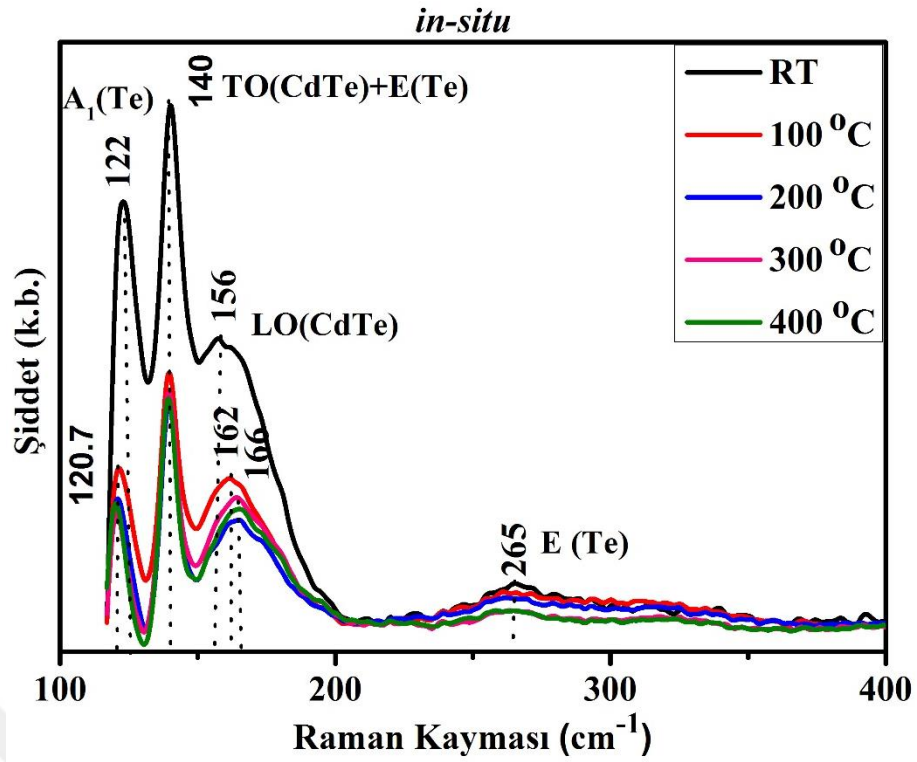
Numuneler	<i>in-situ</i>					<i>Ex-situ</i>			
	RT	100 °C	200 °C	300 °C	400 °C	100 °C	200 °C	300 °C	400 °C
2θ (°)	23,9	23,9	23,9	23,9	23,9	24	24	24	24
FWHM (rad)x10⁻³	0,3994	0,3281	0,3112	0,2961	0,3167	0,3847	0,3891	0,4140	0,4168
D(nm)	212,47	258,72	273,72	286,56	267,93	220,60	218,08	204,97	203,62
Δδ (1/nm)² x10⁻³	22.10 ⁻⁶	15.10 ⁻⁶	13.10 ⁻⁶	12.10 ⁻⁶	14.10 ⁻⁶	20.10 ⁻⁶	21.10 ⁻⁶	24.10 ⁻⁶	24.10 ⁻⁶
ε	0,0976	0,0802	0,0758	0,0724	0,0774	0,0940	0,0951	0,1012	0,1019

Şekil 61-62, RT, *in-situ* ve *ex-situ* tavllanmış numunelerin raman spektrumlarını göstermektedir. Yaklaşık 156 cm⁻¹'deki raman piki CdTe'nin 1LO (boyuna optik) moduna karşılık gelmektedir. Yaklaşık 140 cm⁻¹'deki pikler, CdTe'nin TO (enine optik) fonon modunun ve Te'nin E fonon modunun kombine etkisinden kaynaklanmaktadır ve önceki çalışmalarla tutarlıdır (Chi *et al.* 2017) . 122 cm⁻¹'deki ve 265 cm⁻¹'deki pikler ise sırasıyla Te'ün A₁ ve E fonon moduna atfedilmektedir.

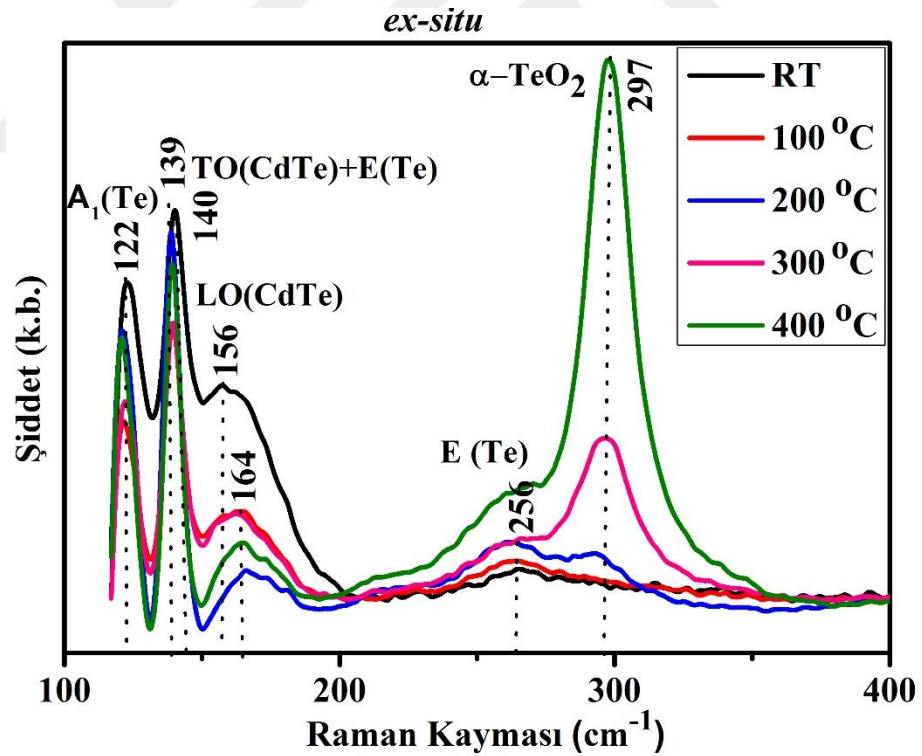
Şekil 61'de görüldüğü gibi, *in-situ* tavllanmış numunelerde, Raman pik şiddetleri genellikle azalmıştır. A₁ (Te) pikinin konumu hafifçe sola kayarken, LO (CdTe) piki artan tavlama sıcaklığı ile sağa doğru kaymıştır.

Ex-situ tavllanmış numunelerde, *in-situ* tavllanmış numunelerde tespit edilen karakteristik pikler tespit edilmiştir. Fakat 300 ve 400 °C'deki sıcaklıklarda yaklaşık 300 cm⁻¹'de diğer numunelerden farklı bir pik gözlemlenmiştir. Bu pikin a-TeO₂'ye ait olduğu belirlenmiştir ve 400 °C'de şiddeti çok fazla artmıştır (Smirnov *et al.*2018). Bu sonuç XRD 'den elde edilen bilgileri doğrulamaktadır. *Ex-situ* tavllanmış numunelerde, A₁ (Te) pikinin maksimum ve minimum değerleri sırasıyla 400 °C ve 100 °C'de gözlenmiştir. Pik pozisyonu, sıcaklık artışı ile hafifçe sola kaymıştır. TO (CdTe) + E (Te) piklerinin maksimum ve minimum değerleri sırasıyla 200 ve 100 °C'de bulunurken, LO (CdTe) pikinin maksimum ve minimum değerleri sırasıyla 100 ve 200 °C'de bulunmuştur. Bu pik sıcaklık artışı ile biraz sağa kaymıştır. E (Te) piki artan sıcaklıkla ciddi şekilde artarken önemli ölçüde sağa kaymıştır.

Ex-situ tavllanmış A₁ (Te), TO (CdTe) + E (Te) ve E (Te) numunelerinin pik yoğunluğu, *in-situ* tavllanmış numunelere kıyasla daha yüksektir. Bununla birlikte, *in-situ* tavllanmış numunelerde LO (CdTe) pik yoğunluğu daha yüksektir.



Şekil 61. *in-situ* tavllanmış CdTe ince filmlerin Raman grafikleri



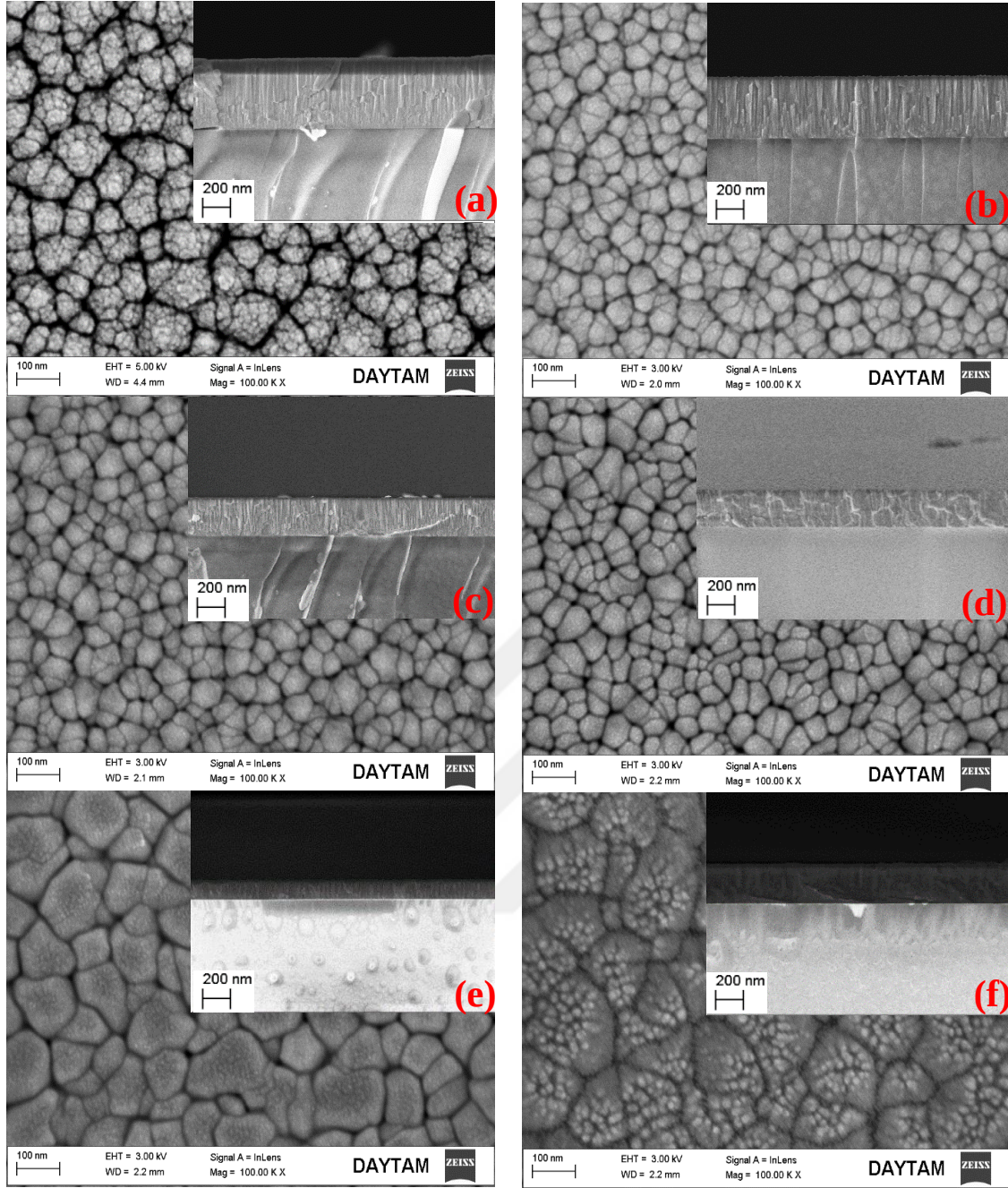
Şekil 62. *Ex-situ* tavllanmış CdTe ince filmlerin Raman grafikleri

Şekil 63-64, farklı şartlarda tavllanmış CdTe filmlerin FE-SEM görüntülerini göstermektedir. Elde edilen kalınlık sonuçları ise Tablo 8’de verilmiştir. Şekil 63’de gösterilen *in-situ* tavllanmış filmlerin FESEM görüntülerinde 300 °C’ye kadarki artan sıcaklıklarda tane boyutu artarken 300 °C’de hafif azalma belirlenmiştir. Fakat 300 °C’den sonraki artan

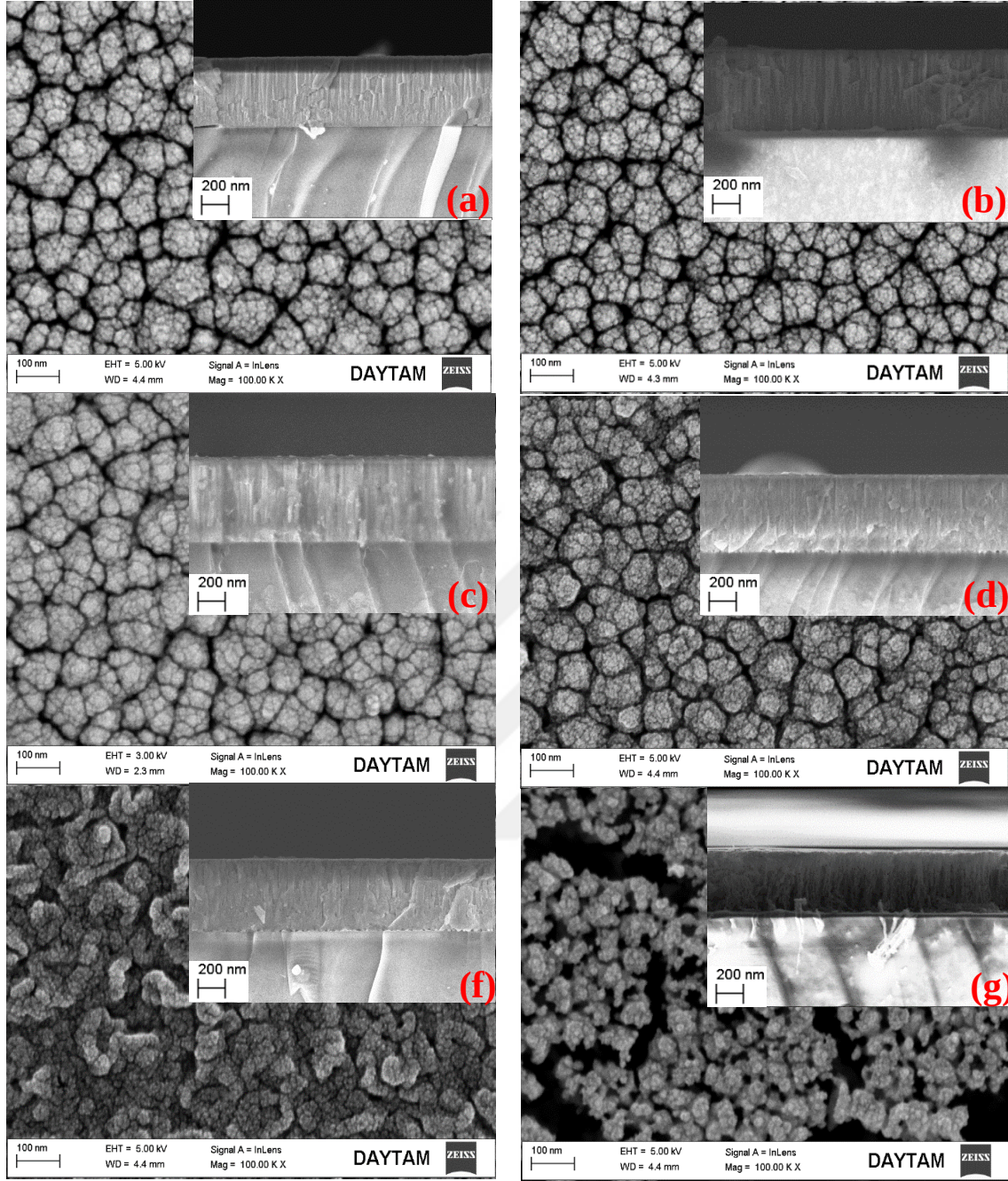
sıcaklıklarda tane boyutunun tekrar arttığı tespit edilmiştir. Genel olarak artan sıcaklıkla kalınlık azalmıştır.

Şekil 64’de gösterildiği gibi *ex-situ* tavllanmış numunelerde 400 °C’ye kadarki artan sıcaklıklarda çok büyük değişiklikler gözlemlenmez iken 400 °C’de tanelerin farklılaştığını ve büyüdüğünü görmekteyiz. 500 °C’de ise yapının bozulmaya başladığı tespit edilmiştir. CdTe yüksek sıcaklıklarda bozunmaktadır. Çünkü düşük sıcaklıklarda süblimleşme özelliğine sahiptir. Kalınlık ölçümü sonucunda, 200 °C’ye kadar artan sıcaklıkla artış olduğu belirlenirken, daha fazla sıcaklığın arttırılması ile kalınlıkta azalma belirlenmiştir.

İn-situ tavllanmış numunelerde taneler arası boşluk yok denecek kadar az iken *ex-situ* tavllanmış numunelerde taneler arası boşluklar önemli derecede artmıştır. İn- situ tavlama ile CdTe yapısı daha yüksek sıcaklıklara kadar bozunmaz iken, *ex-situ* tavlama da 300 °C’den sonra artan sıcaklıkla bozulmuştur. Bunun nedeni ise *in-situ* tavlama da yüksek vakum ortamına ve oksijen yokluğuna atfedilmektedir.



Şekil 63. (a-f) RT, sırasıyla *in-situ* 100, 200, 300, 400, and 500 °C’de tavllanmış CdTe ince filmlerinin FE-SEM görüntüleri



Şekil 64. (a-f) RT, sırasıyla *ex-situ* 100, 200, 300, 400, and 500 °C’de tavllanmış CdTe ince filmlerinin FE-SEM görüntüleri

Tablo 8. FE-SEM kalınlık ölçüm sonuçları

	<i>in-situ</i> (°C)					
	RT	100	200	300	400	500
Kalınlık (µm)	1,250	1,238	1,112	1080	1,007	0,602
	<i>ex-situ</i> (°C)					
Kalınlık (µm)	1,250	1,418	1,507	1,312	1,280	1,101

Farklı tavlama şartlarında elde edilen CdTe ince filmlerinin iki, üç boyutlu yüzey topografileri ve tane sayıları AFM ile elde edilmiştir. Görüntüler $3 \times 3 \mu\text{m}^2$ yüzey alanı taranarak çekilmiştir. Şekil 65-66'da AFM görüntülerinden elde edilen taneler ve özellikleri görüntü ve tablolarda sunulmaktadır. Görüntülerde küçük elips şeklinde dağılımlar göze çarpmaktadır.

İn-situ tavllanmış numunelerin tanelerin boyutunun tavlama sıcaklığına bağlı olarak genel olarak RT numunesine göre arttığı bulunmuştur. Fakat 300 °C'e kadar ki tavlama sıcaklığı artışlarında genel olarak artarken 300 °C'de tane boyutunun azaldığı 400 °C'de tekrar arttığı belirlenmiştir. Ortalama yüzey pürüzlülüğü (Ra) 300 °C'ye kadarki artan tavlama sıcaklıklarında azalırken 300 °C'den sonra artan tavlama sıcaklığı ile tekrar artmıştır.

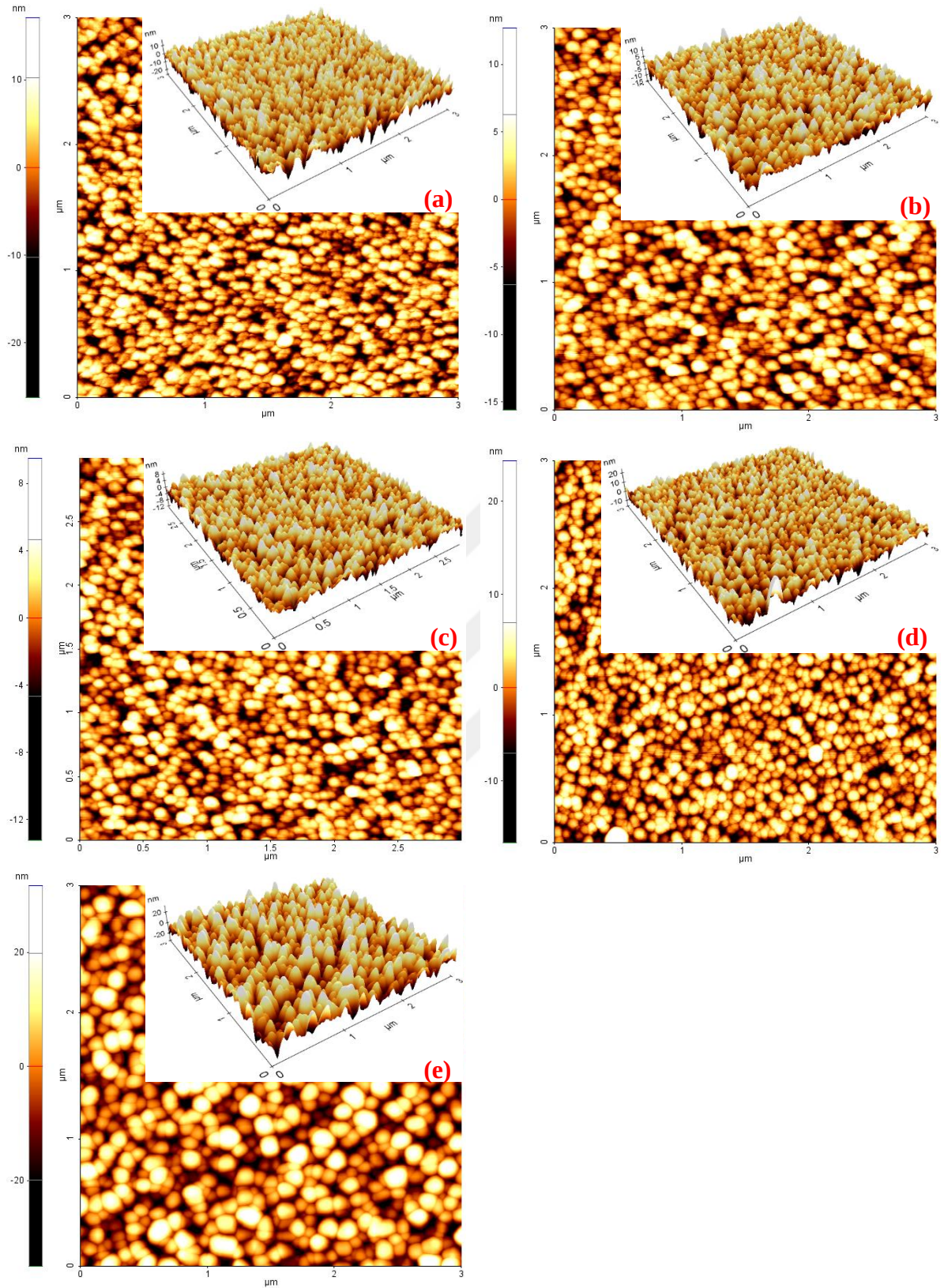
Ex-situ tavllanmış numunelerin tane boyutunun tavlama sıcaklığına bağlı olarak genel olarak RT numunesine göre azaldığı bulunmuştur. Ancak tavlama sıcaklığı artışı ile genel olarak tane boyutunun hafif bir şekilde arttığı tespit edilmiştir. Ra 300 °C'ye kadarki artan sıcaklıklarda artarken 300 °C'den sonra artan tavlama sıcaklığı ile tekrar azalmıştır.

Tablo 9. Farklı tavlama şartlarında büyütülen CdTe ince filminin AFM den elde edilen ortalama yüzey pürüzlülüğü değerleri

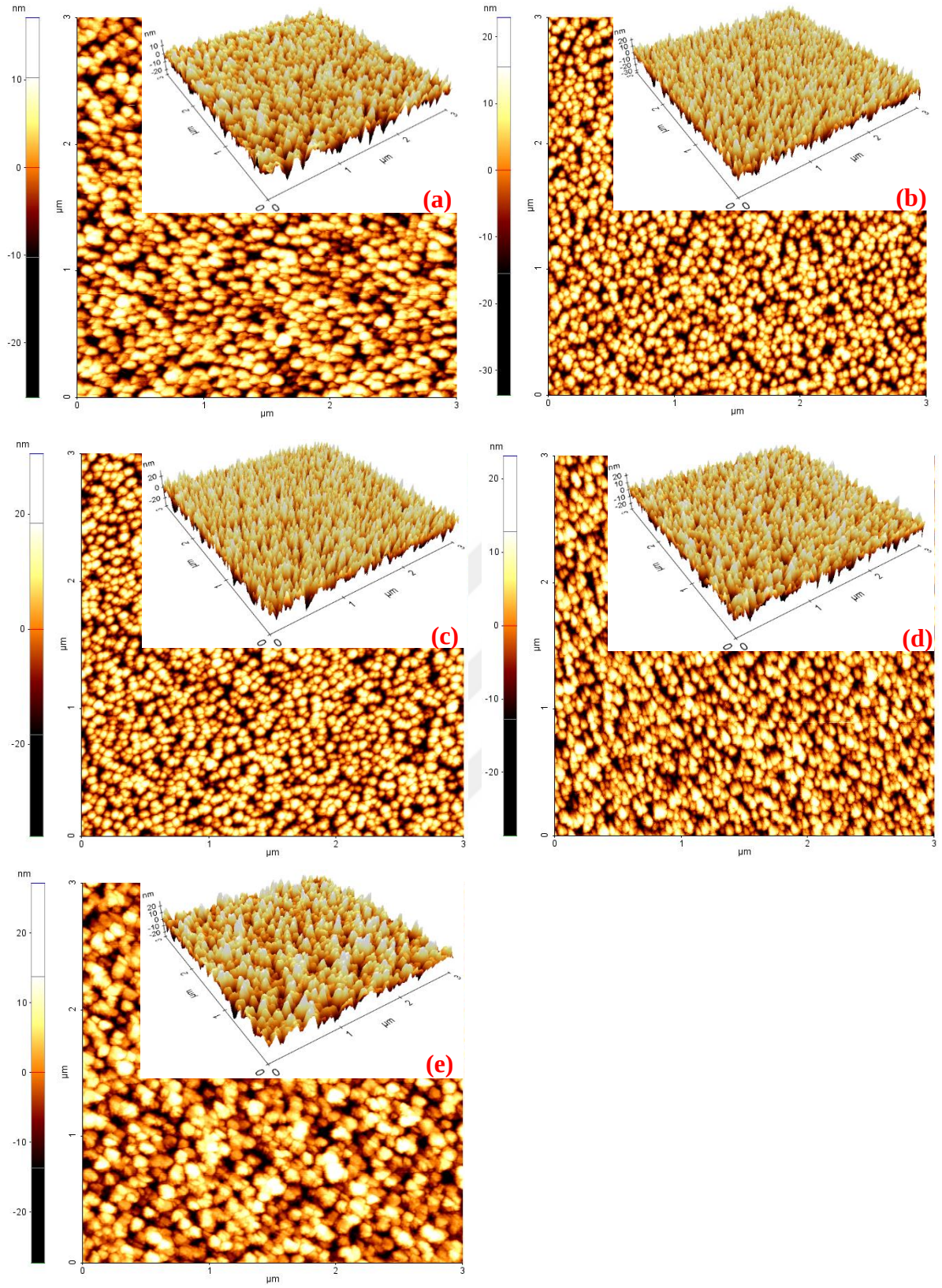
<i>in-situ</i>					
	RT	100 °C	200 °C	300 °C	400 °C
Ra (nm)	4,187	2,666	1,719	4,357	8,026
<i>ex-situ</i>					
Ra (nm)	4,187	6,174	7,023	5,351	4,357

Tablo 10. Farklı tavlama şartlarında büyütülen CdTe ince filminin AFM den elde edilen tane sayıları

<i>in-situ</i>					
	RT	100 °C	200 °C	300 °C	400 °C
Tane sayısı	3578	2733	2447	3279	2641
<i>ex-situ</i>					
Tane sayısı	3578	4892	4874	4354	3306



Şekil 65. (a-e) RT, sırasıyla *in-situ* 100, 200, 300 ve 400 °C’de tavlanmış CdTe ince filmlerinin AFM görüntüleri



Şekil 66. (a-e) RT, sırasıyla ex-situ 100, 200, 300 ve 400 °C’de tavlanmış CdTe ince filmlerinin AFM görüntüleri

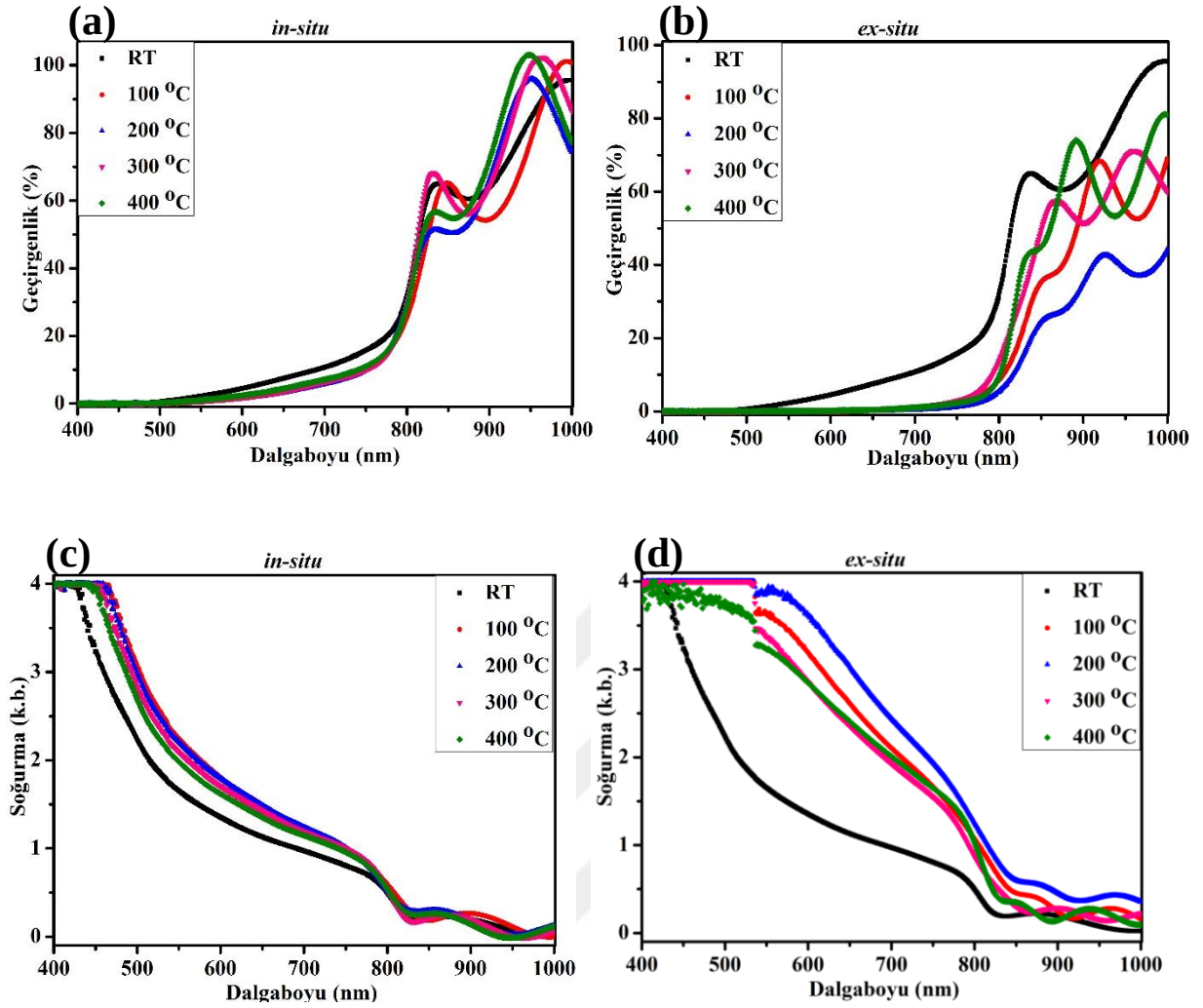
550–1000 nm ve 400-1000 aralığında farklı sıcaklıkta *in-situ* ve *ex-situ* tavlanmış CdTe ince filmlerin optik geçirgenlikleri (T) ve soğurma spektrumları (A) cam alt tabakanın etkileri elimine edilerek Şekil 67’de gösterilmiştir.

Şekil 67 (a)’da görüldüğü gibi, *in-situ* tavlanmış numunelerde görünür bölgedeki geçirgenlik çok düşük olmakla birlikte, yaklaşık 800 nm dalga boyu etrafında önemli ölçüde artmaya başlamıştır. Ayrıca artan dalga boyunda girişim saçakları oluşturmuştur. Bu durum, filmlerin homojen doğasına atfedilir (Punitha *et al.* 2015). Sıcaklıktaki artışla, absorpsiyon kenarları hafifçe yüksek dalga boylarına kaymıştır. Bu kenar, elektronun değerlik bandından iletim bandına uyarımının ve optik bantgapin doğası ve değeri ile ilgilidir (Shaban *et al.* 2016). İnce filmlerin optik geçirgenliği maksimum %100’ü aşar ve absorpsiyon kenarının yakınında azalır. Bu da XRD sonuçlarında görülen ince filmlerin iyi kristalliğini teyit etmektedir (Şekil 59).

Şekil 67 (b), *ex-situ* tavlanmış CdTe filmlerinin optik geçirgenlik spektrumlarını göstermektedir. *Ex-situ* tavlanmış numunelerde, absorpsiyon bandı kenarı sıcaklık artışı ile daha büyük dalga boyuna kaymıştır. En yüksek geçirgenlik 1000 nm’de (%84) 400 °C’de en düşük 100 °C’de (%48) bulunmuştur. Ortalama optik geçirgenlik en yüksek RT numunesine ait iken en düşük geçirgenlik ise 200 °C de büyütülen numuneye aittir. Optik geçirgenlikteki azalma genellikle istiflenme yoğunluğundaki ve kalınlığındaki azalmaya bağlanmıştır (Shaban *et al.* 2016) .

Şekil 67 (c)’de gösterildiği gibi, *in-situ* tavlanmış tüm numunelerde artan dalga boyu ile absorpsiyon değeri azalmıştır. Tavlama sıcaklığının artması ile soğurma değeri hafif bir şekilde azalmıştır. Soğurmadaki azalma ya da artma genellikle istiflenme yoğunluğuna ve kalınlığına atfedilmektedir (Shaban *et al.* 2016).

Ex-situ tavlanmış tüm numunelerde, Şekil 67 (d)’de gösterildiği gibi, soğurma değeri 400-1000 nm dalga boyu aralığında artan dalga boyu ile azalırken, absorpsiyon değeri en yüksek 200 °C’de büyütülen numuneye ait iken en düşük RT numunesine aittir. Sonuçların FE-SEM analizinden elde edilen kalınlık ölçümleriyle tutarlı olduğu bulunmuştur.



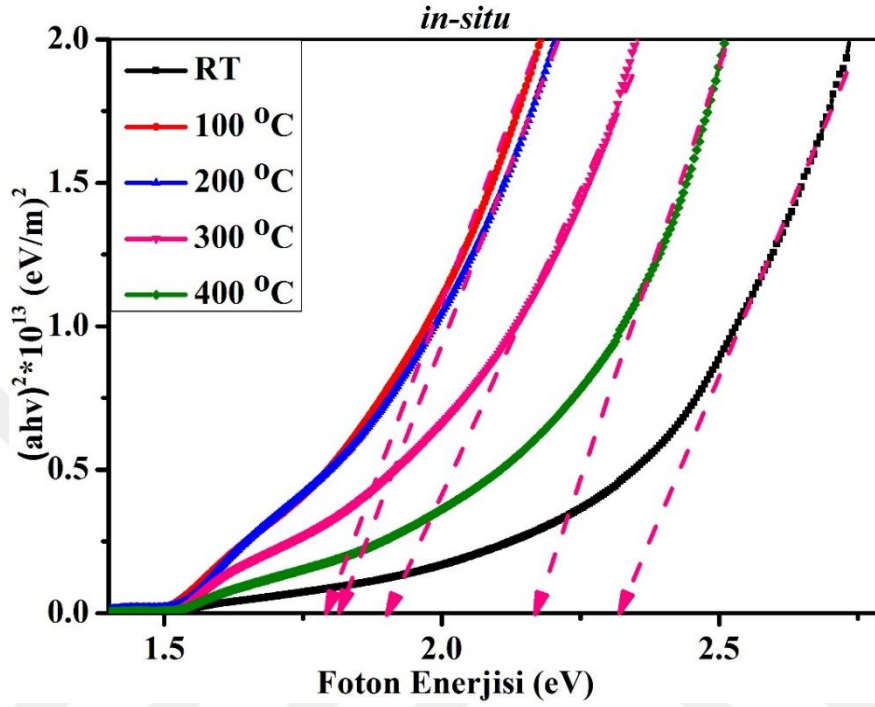
Şekil 67. (a), (b), (c) ve (d) İn-situ ve ex-situ tavllanmış CdTe ince filmlerinin geçirgenlik ve soğurma spektrumları

Elde edilen E_g değerleri Tablo 11'de listelenmiştir. RT numunesinin E_g değeri 2,31eV'dir. İn-situ tavlanan numuneler için, E_g değerlerinin 1,6-2,17 eV aralığında olduğu, burada filmlerin E_g değerinin artan tavlama sıcaklığı ile arttığı görülmektedir. Artan tavlama sıcaklığı ile E_g değerlerindeki bu mavi banda kayma, film kalınlığının arttırılması ile ilişkili olabilir.

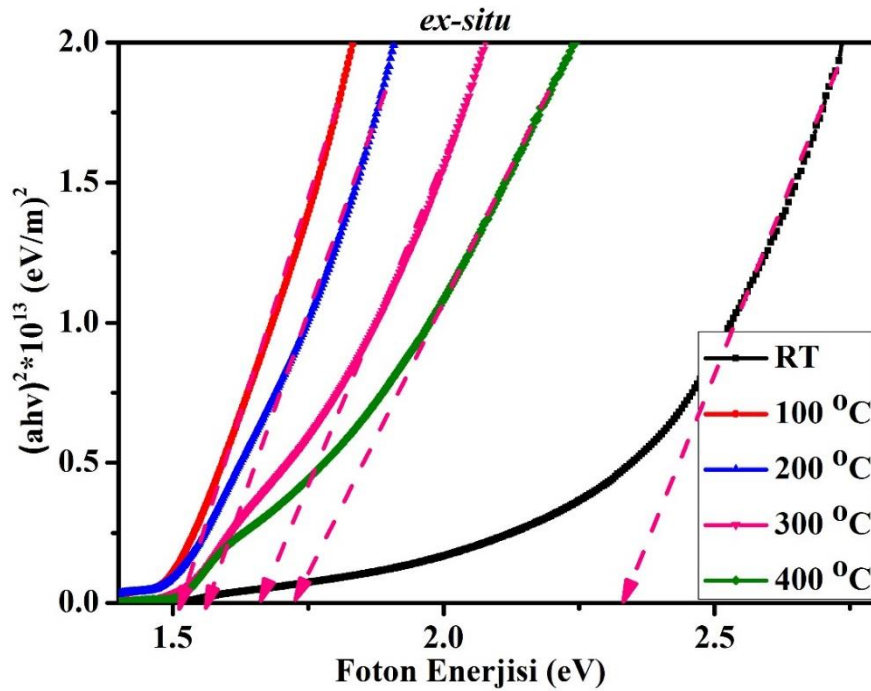
Ex-situ numunler için E_g değerlerinin 1,50-1,72 eV aralığında olduğu, burada filmlerin E_g değerinin, artan tavlama sıcaklığı ile arttığı görülmektedir. Artan tavlama sıcaklığı ile E_g değerlerindeki bu mavi banda kayma, film kalınlığının arttırılması ile ilişkili olabilir. (Mathew et al. 2000)

Tablo 11. Farklı tavlama şartlarında büyütülen CdTe ince filminin bant aralığı

<i>in-situ</i>					
	RT	100 °C	200 °C	300 °C	400 °C
E _g (eV)	2,31	1,6	1,61	1,9	2,17
<i>ex-situ</i>					
E _g (eV)	2,31	1,51	1,56	1,69	1,72

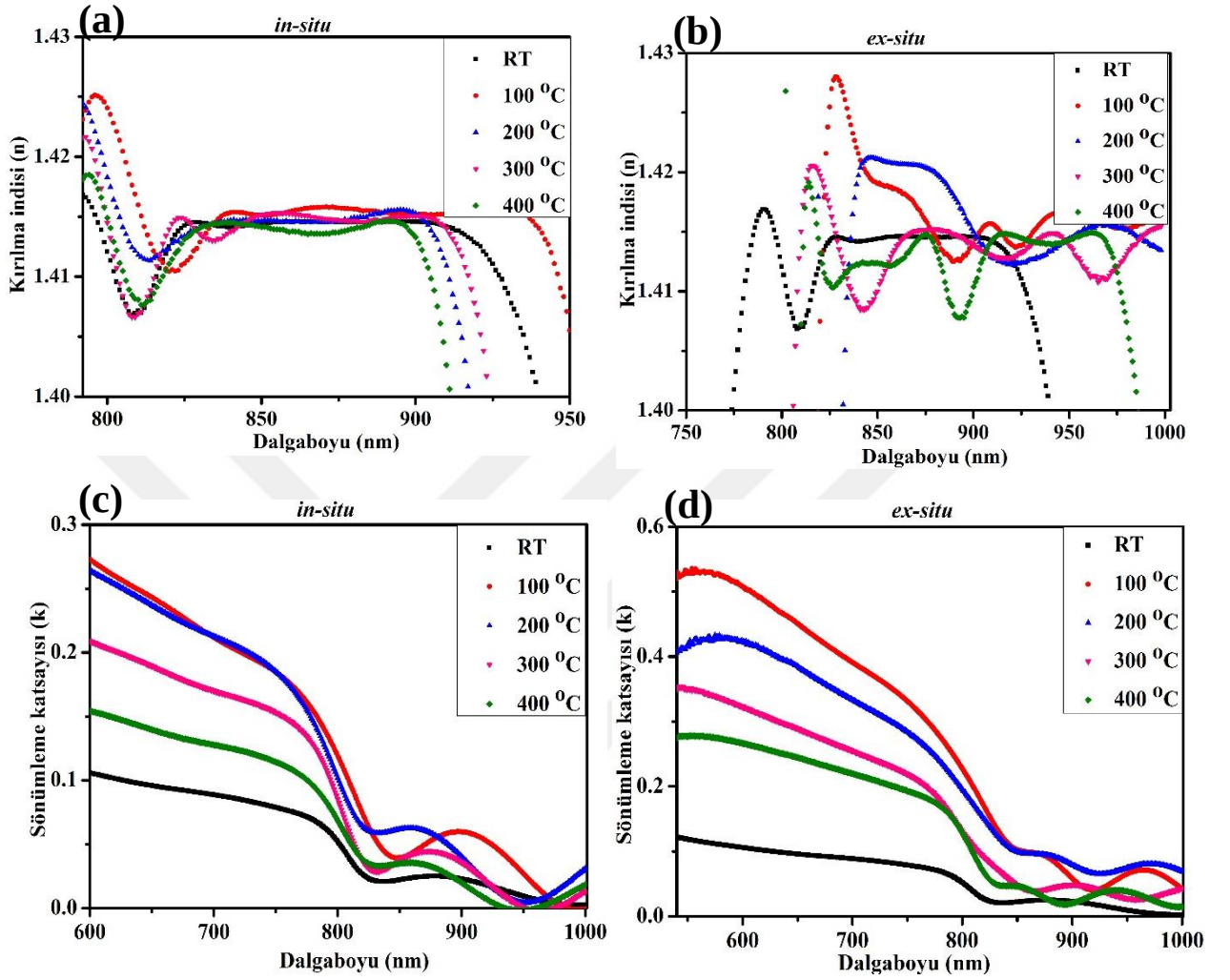


Şekil 68. *in-situ* tavllanmış CdTe ince filmlerinin $(\alpha h\nu)^2-h\nu$ grafiklerinin tavlama sıcaklığına bağlı değişimleri

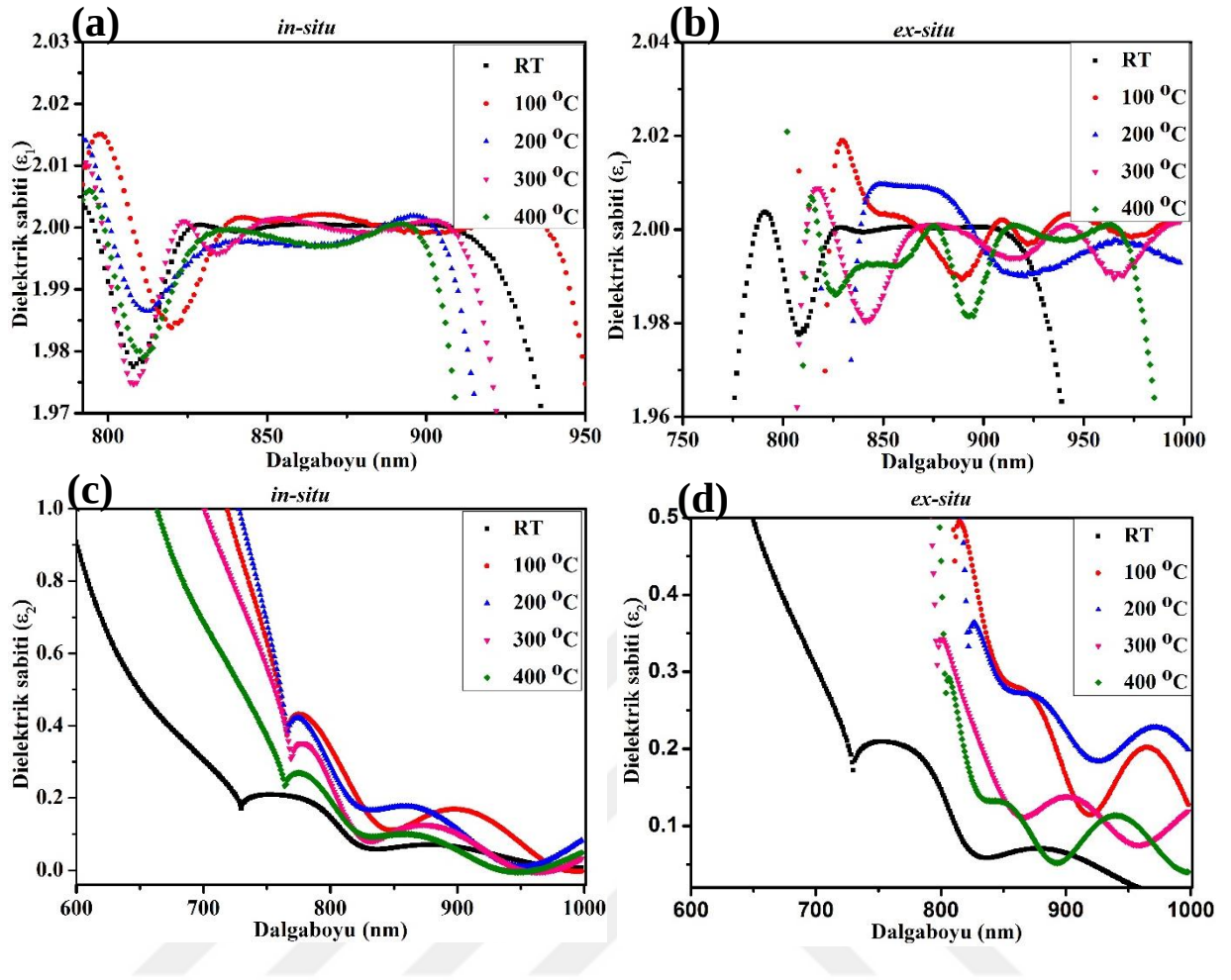


Şekil 69. *ex-situ* tavllanmış CdS ince filmlerinin $(\alpha h\nu)^2-h\nu$ grafiklerinin tavlama sıcaklığına bağlı değişimleri

İn-situ ve *Ex-situ* tavllanmış numunelerde, genel olarak kırılma indisi, sönmüleme katsayısı ve dielektrik sabitleri, Şekil 70-71'de görüldüğü gibi artan tavlama sıcaklığı ile azalmıştır. Bu durum malzemelerin soğurma fonksiyonu ile ilişkilendirilmektedir.



Şekil 70. (a), (b), (c) ve (d) sırasıyla *in-situ* ve *ex-situ* tavllanmış CdTe ince filmlerinin n,k grafikleri

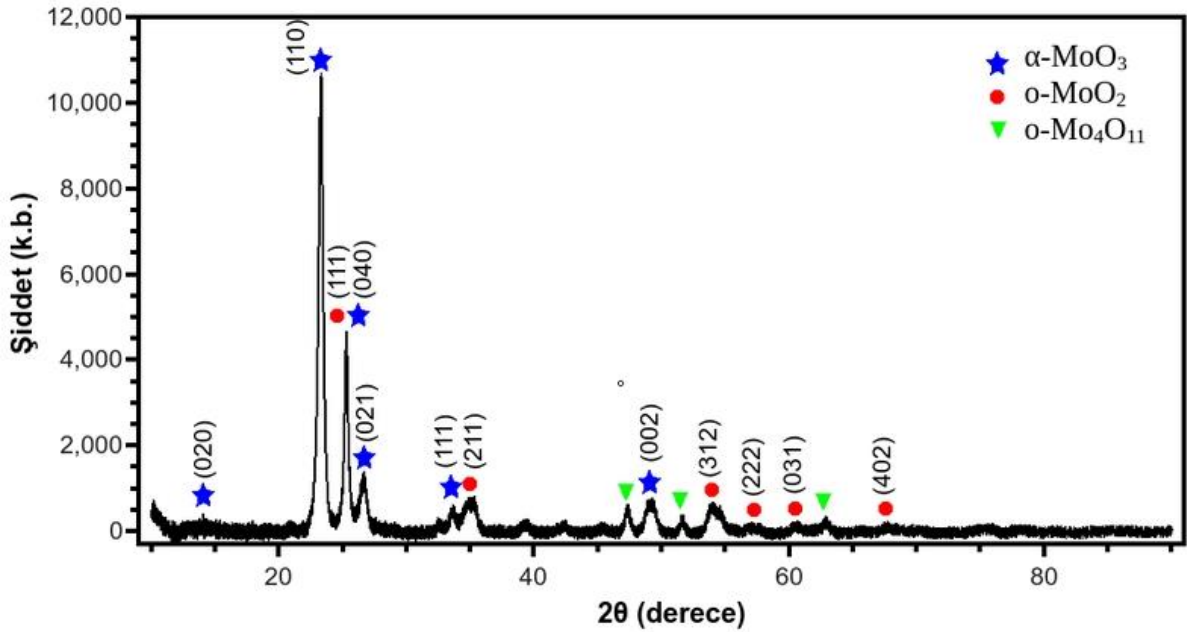


Şekil 71. (a), (b), (c) ve (d) sırasıyla *in-situ* ve *ex-situ* tavllanmış CdTe ince filmlerinin ϵ_1 ve ϵ_2 grafikleri.

MoO₃ Filminin Yapısal Karakterizasyonu ve Değerlendirilmesi

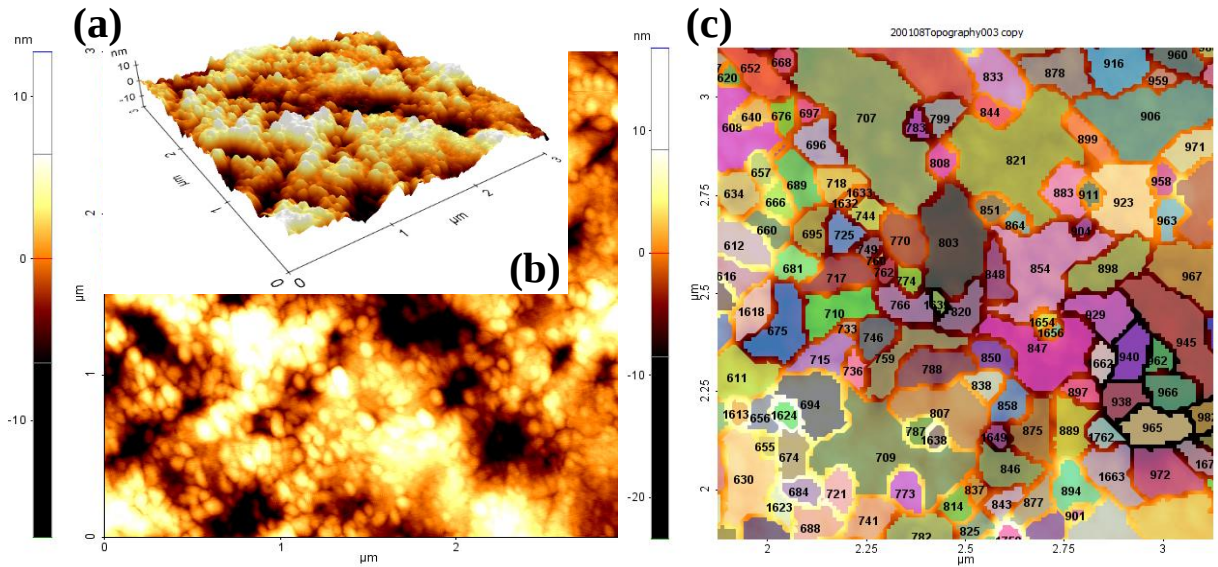
Şekil 72, Mo-O filminin XRD grafiğini göstermektedir. XRD grafikleri, filmin oldukça yüksek bir kristal yapıya sahip olduğunu göstermektedir. 350 °C'nin üzerindeki sıcaklıklarda, α -MoO₃ fazı (JPCDS 5-508) rapor edilmiştir (Epifani *et al.* 2004). Yapı, *Pnma* uzay grubuna sahip ortorombik bir yapıdır. Birim hücre parametreleri $a = 13,825 \text{ \AA}$, $b = 3,694$ ve $c = 3,954 \text{ \AA}$ 'dir. Eksenler arasındaki açılar $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ 'dir. Birim hücre, 1 molibden ve 3 oksijen içeren 4 atomdan oluşmaktadır. Bu faza ait pikler grafikte mor semboller ile gösterilmiştir. Bununla birlikte, 400 °C'de, birden fazla faz gözlenmiştir. α -MoO₃ fazının yanı sıra, MoO₂ fazı da mevcuttur. MoO₂ fazı (JPCDS 32-0671), *Pnma* uzay grubuna sahip ortorombik yapıya sahiptir. Ayrıca birim hücre parametreleri $a = 9,6921 \text{ \AA}$, $b = 8,4322 \text{ \AA}$ ve $c = 4,7188 \text{ \AA}$, eksenler arasındaki açılar $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ 'dir (Sen *et al.* 2014). α -MoO₃ ve MoO₂ fazlarına ait pikler dışındaki pikler, Mo-O yapısının fazlarından biri olan Mo₄O₁₁ fazına atfedilmektedir (Dang *et al.* 2014). Pek çok fazın gözlemlenmesinin altında yatan sebep, MoO₃ ince filmini oluşturmak

için seçilen sıcaklığın Mo-O yapısı için bir faz dönüşüm sıcaklığı olması olabilir (L. Wang *et al.* 2016).



Şekil 72. 400 °C’de büyütülen MoO₃ filminin XRD grafiği

Şekil 73’de 400 °C sıcaklıkta cam üzerine büyütülen MoO₃ filmi 2D ve 3D AFM görüntüleri verilmiştir. Yüzeyde kümelenmeler dikkat çekmektedir. 5 dk büyütülen MoO₃ filminin kalınlığı 80 nm olarak ölçülmüştür. Ortalama yüzey pürüzlülüğü 2,024 nm olarak bulunmuştur. AFM görüntülerinden elde edilen tanecik boyutlarına ilişkin görseller Şekil 73 (c)’de gösterilmiştir. Yüzeyde yaklaşık 1782 tane hesaplanmıştır.



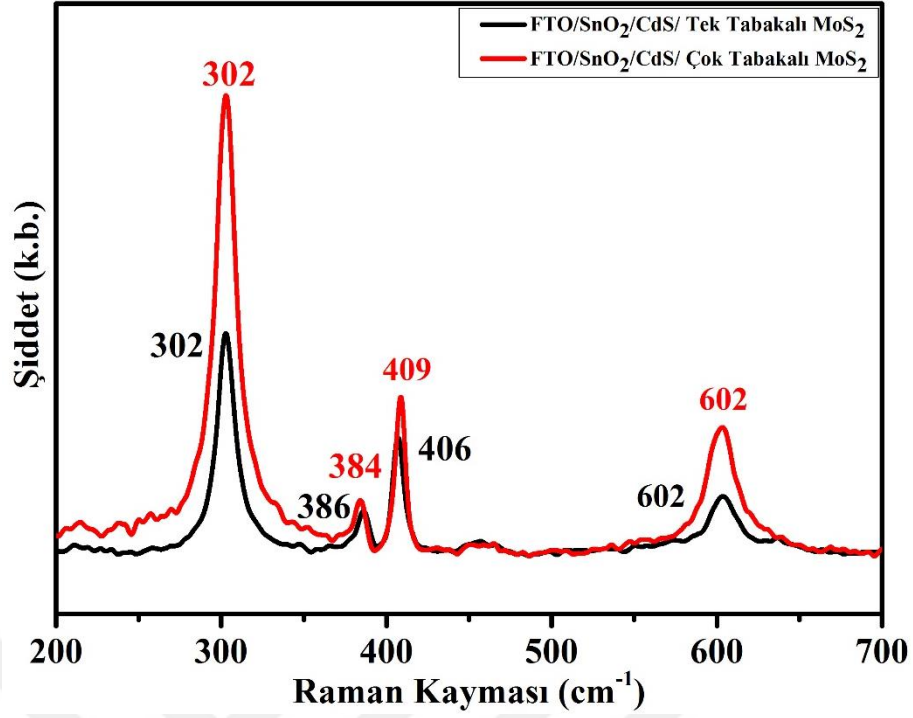
Şekil 73 (a), (b) Sırasıyla 400 °C’de büyütülen MoO₃ filminin 2D ve 3D AFM görüntüleri (c) tanecik boyutlarına ilişkin görseller

FTO/SnO₂/CdS/MoS₂ Yapısının, MoO₃ Kalınlığına Bağlı Yapısal ve Optiksel Karakterizasyonu ve Değerlendirilmesi

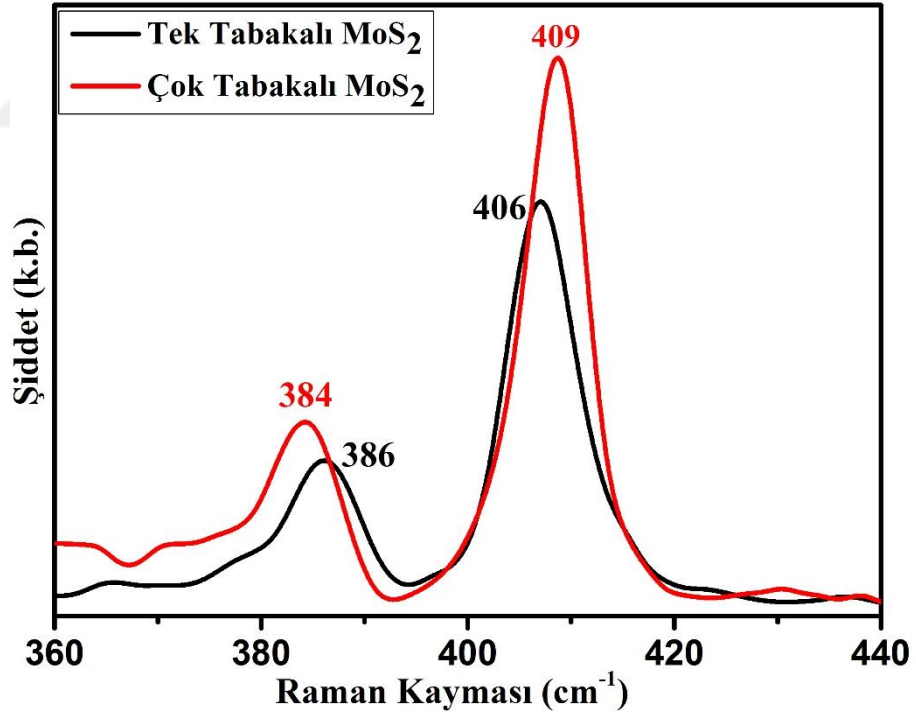
Raman ölçümü yapıdaki ince filmler ve MoS₂ tabakasının yapısı hakkında bilgi vermektedir. MoS₂ filmlerinin Raman spektrumları iki karakteristik tepe noktası göstermektedir. Mo-S atomları arasındaki iç düzlemsel yönde ($\sim 384\text{-}6\text{ cm}^{-1}$) titreşimini E_{2g}¹ modu gösterirken, S atomları arasındaki dikey düzlemsel yönde ($\sim 406\text{-}9\text{ cm}^{-1}$) titreşimini ise A_{1g} modu göstermektedir (Shanmugam, Durcan, *et al.* 2012). E_{2g}¹ modunun, molibden ara katman atomları arasındaki uzun menzilli Coulombic etkileşimi nedeniyle film kalınlığındaki artıştan güçlü bir şekilde etkilendiği varsayılmaktadır. Aynı zamanda şekil 74’de A_{1g} modunun da tabaka kalınlığından önemli ölçüde etkilendiği de görülmüştür (Chakraborty *et al.* 2013). MoS₂ yapılarında, film kalınlığına bağlı olarak Raman tepe noktaları da etkilenmektedir. İki pikin yoğunluğu, artan film kalınlığı ile önemli ölçüde artmıştır. Ayrıca kalınlıktaki artışla birlikte A_{1g} modunda maviye kayma ve E_{2g}¹ modunda ise kırmızıya kayma gözlenmiştir. İki karakteristik pik arasındaki mesafe, tek tabakalı MoS₂ için $19\text{-}20\text{ cm}^{-1}$ olarak bildirilmiştir (Hong Li *et al.* 2012; Sundaram *et al.* 2013).

Şekil 74, FTO/SnO₂/CdS/MoS₂ yapısının toplu Raman saçılma spektrumunu göstermektedir. Yaklaşık $302\text{ ve }602\text{ cm}^{-1}$ ’de konumlanan pik CdS filmine, yaklaşık $384\text{-}6\text{ ve }406\text{-}9\text{ cm}^{-1}$ ’de konumlanan pikler MoS₂ filmine ve 458 cm^{-1} ’de konumlanan küçük pik ise MoO₃ filmine ait olduğu belirlenmiştir.

Şekil 75, $360\text{ ve }440\text{ cm}^{-1}$ arasındaki tek tabakalı ve çok tabakalı MoS₂ filmlerinin Raman saçılma spektrumlarını göstermektedir. Spektrumlar açıkça MoS₂’nin iki karakteristik zirvesini göstermektedir. Tek tabakalı MoS₂ filmi için E_{2g}¹ modu $\sim 386\text{ cm}^{-1}$ ’de, A_{1g} modu $\sim 406\text{ cm}^{-1}$ ’de gözlenirken, çok tabakalı filmlerin E_{2g}¹ modu $\sim 384\text{ cm}^{-1}$ ’de, A_{1g} modu $\sim 409\text{ cm}^{-1}$ ’de gözlemlenmiştir. İki karakteristik tepe arasındaki mesafe tek tabakalı numunelerde 20 cm^{-1} iken çok tabakalı numunelerde 25 cm^{-1} olarak bulunur. Bu pikler arasındaki mesafe 90 saniye MoO₃ büyütülen MoS₂ filmlerinin tek tabakalı 180 saniye büyütülen filmlerin ise çok tabakalı olduğunu göstermiştir. Pik zirvelerinin kayması ise modlardan birinin enerjisinin artarken diğ erinin enerjisinin azalması ile açıklanabilir.



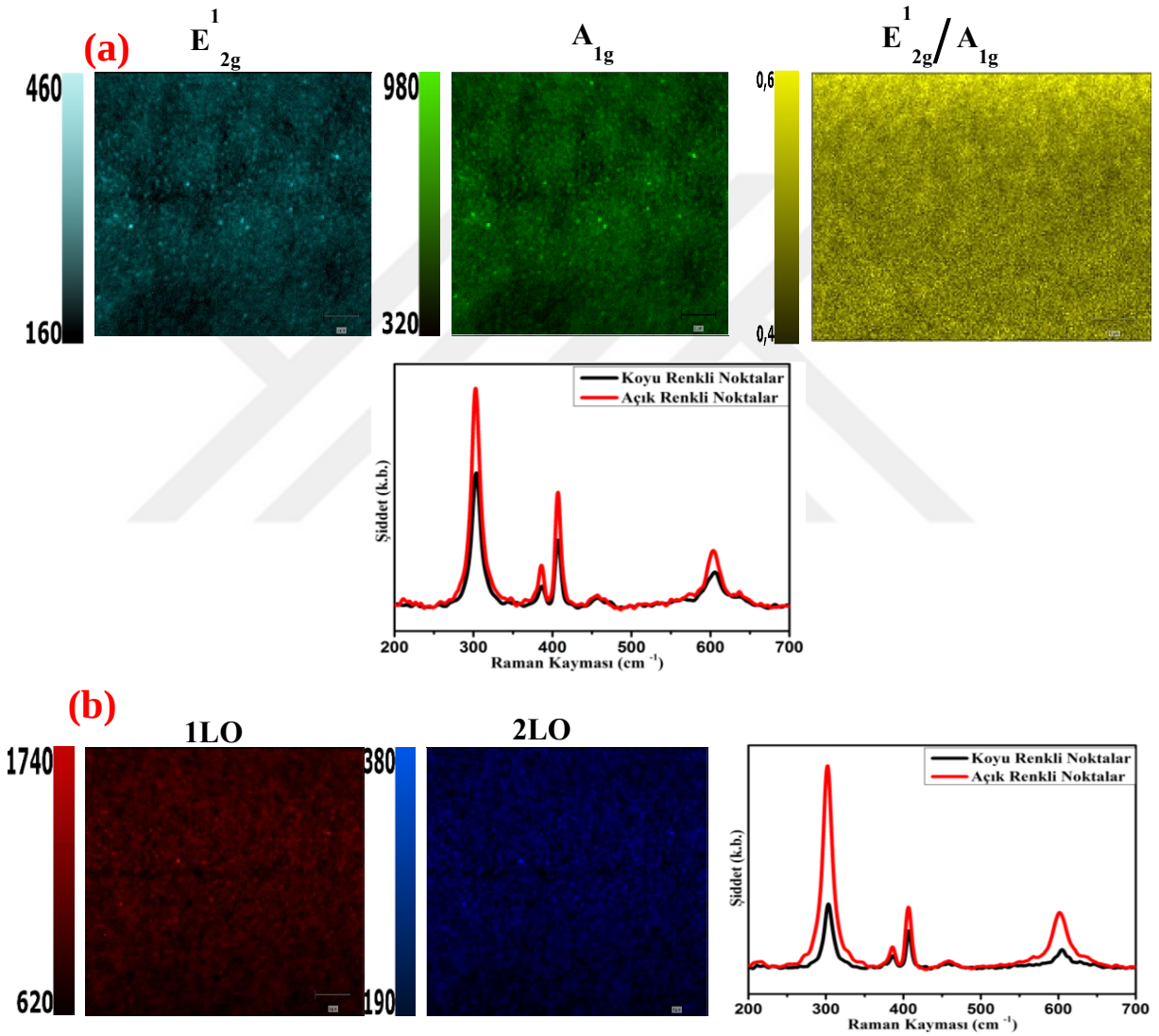
Şekil 74. FTO/SnO₂/CdS/tek tabakalı- FTO/SnO₂/CdS/çok tabakalı MoS₂ Raman grafikleri



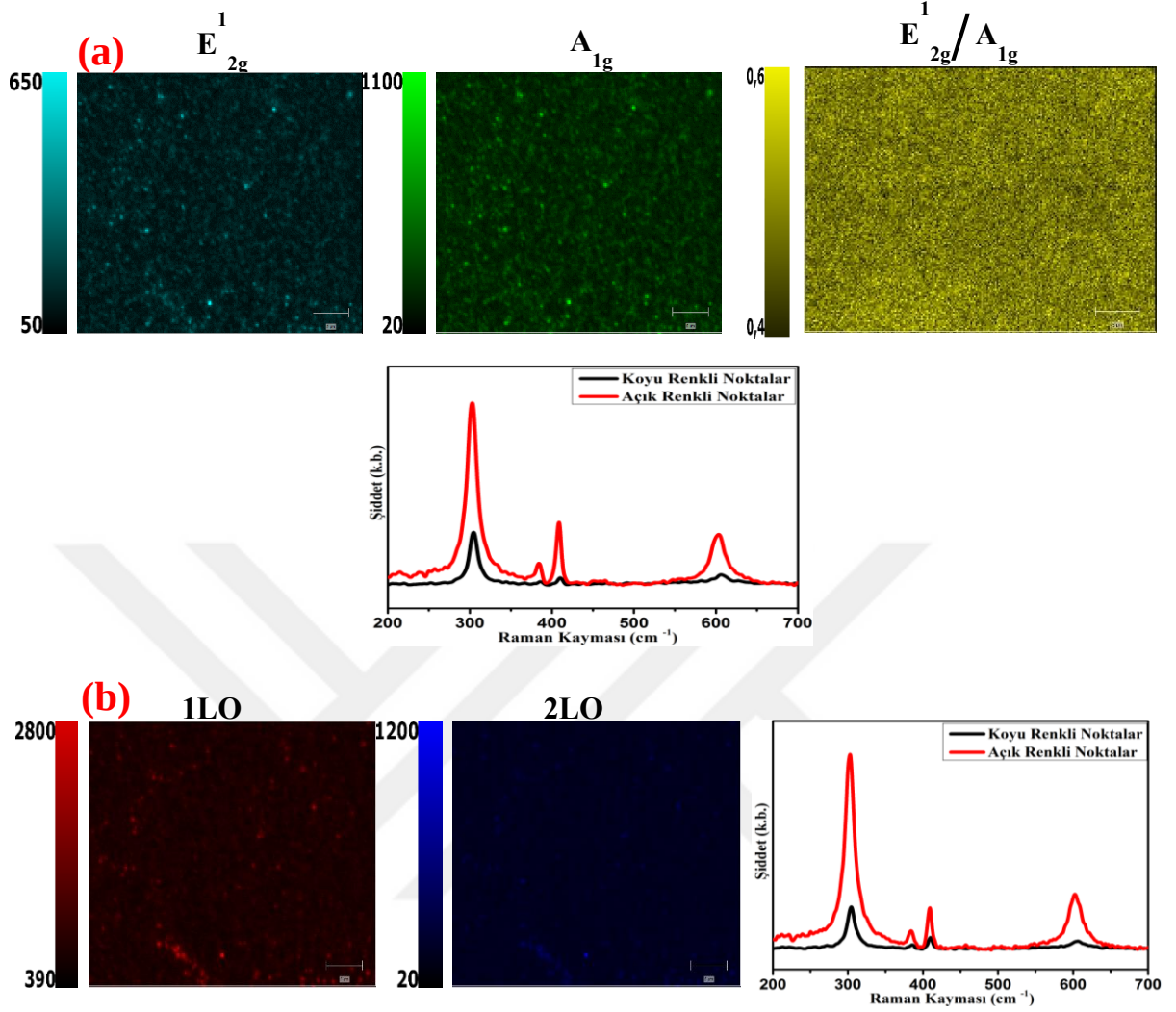
Şekil 75. Tek tabakalı MoS₂ ve çok tabakalı MoS₂ Raman grafikleri

Şekil 76 ve Şekil 77 tek tabaka ve çok tabakalı MoS₂ nin Raman haritalama ölçümüne ait verileri göstermektedir. Raman haritalamasında, CdS ve MoS₂ yapısının karakteristik piklerine referansla renklendirme yapılmıştır. MoS₂' ye ait olan, yaklaşık 384-6' da konumlanan E_{12g} piki için cyan rengi, yaklaşık 406-9'da konumlanan A_{1g} piki için ise yeşil rengi

kullanılmıştır. CdS ye ait olan, 302’de konumlanan 1LO piki için kırmızı, 602’de konumlanan 2LO piki için ise lacivert rengi kullanılmıştır. Tek tabakalı MoS₂ numune için hafif bir küme oluşumu gözlenirken çok tabakalı numunede gözlemlenmemiştir. Bu durum genel olarak MoS₂ dağılımının homojen olduğunu göstermektedir. Bütün Raman haritalamalarında açık renkli bölgelerin koyu renkli bölgelere kıyasla Raman pik şiddetlerinin önemli derecede arttığı belirlenmiştir. E_{2g}¹ pikinin şiddetinin A_{1g} pikinin şiddetine oranına dağılımını gösteren haritalama sarı renkle gösterilmiştir. Bu renklenmenin tersi, iki karakteristik pik arasındaki mesafe olarak da yorumlanabilir (Karataş 2020).

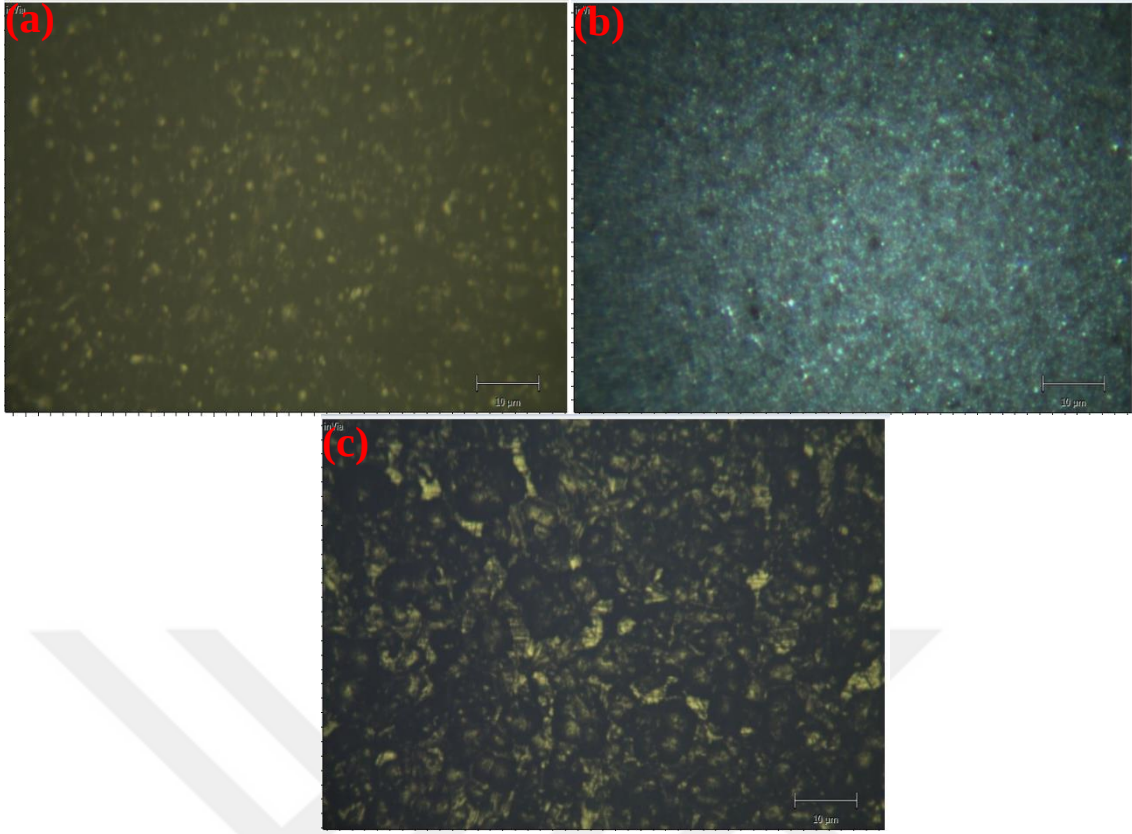


Şekil 76. FTO/SnO₂/CdS/tek tabakalı MoS₂ Raman haritalama



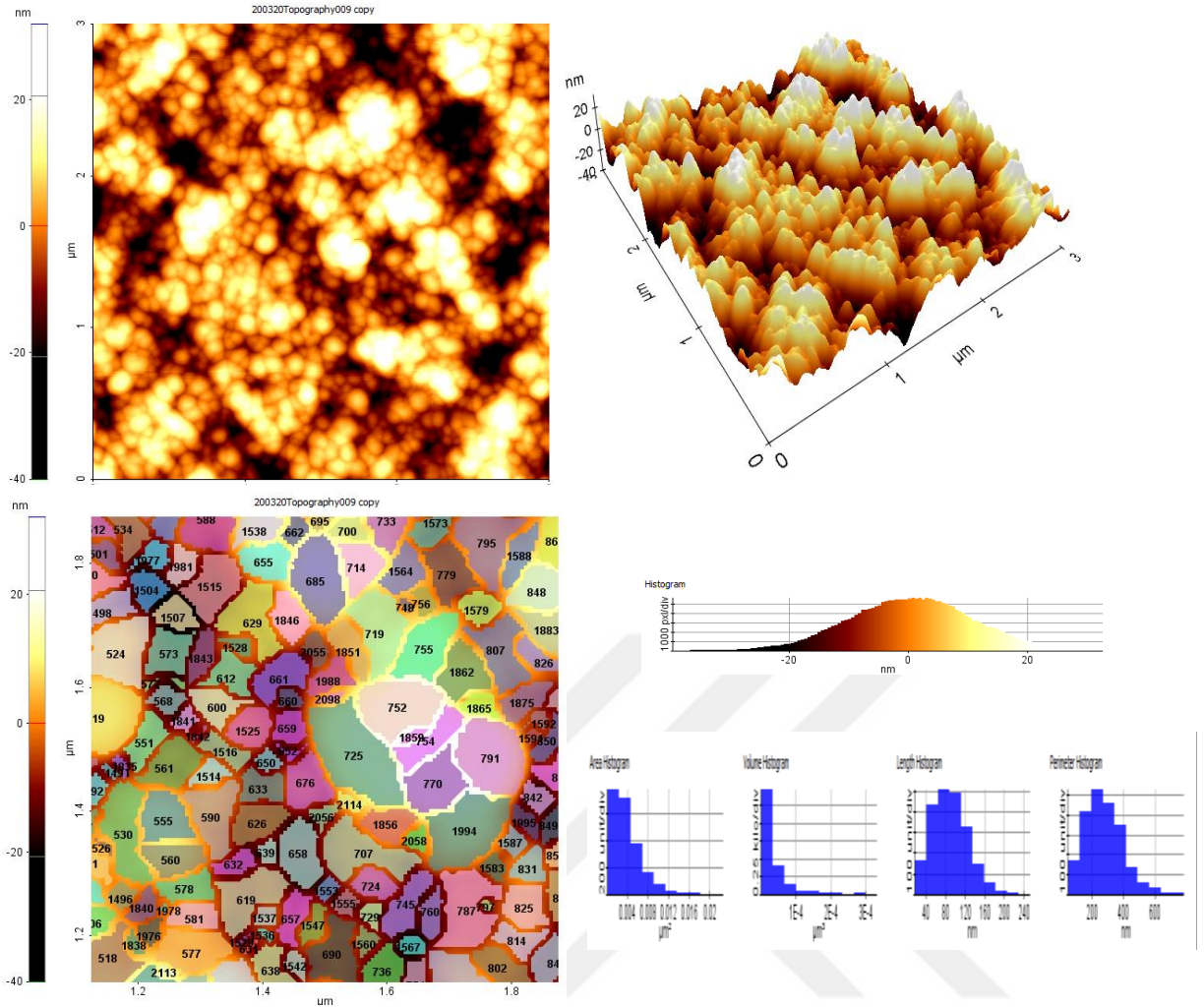
Şekil 77. FTO/SnO₂/CdS/çok tabakalı MoS₂ Raman haritalama

Şekil 78’de CdS üzerine büyütülen farklı büyüme sürelerine sahip Mo-O ince filmlerin sülfürizasyonu ile elde edilen MoS₂’li ve MoS₂’siz numunelere ait optik mikroskop görüntüleri verilmiştir. Materyal ve metod bölümünde belirtildiği gibi Mo-O filminin farklı büyüme süreleri 90 ve 180 saniyedir. MoS₂’siz numunelerin yüzeylerinde hafif koyu renkli tomurcuk benzeri yapılar tespit edilmiştir. Tek tabakalı MoS₂’li numunelerde daha homojen ve mavimsi bir görüntü görülürken çok tabakalı MoS₂’li numunelerde daha kümelenmiş ve sarımtırak bir görüntü görülmektedir. Çok tabakalı MoS₂ filmlerde daha koyu renkli oluşumların varlığında dikkat çekmektedir.

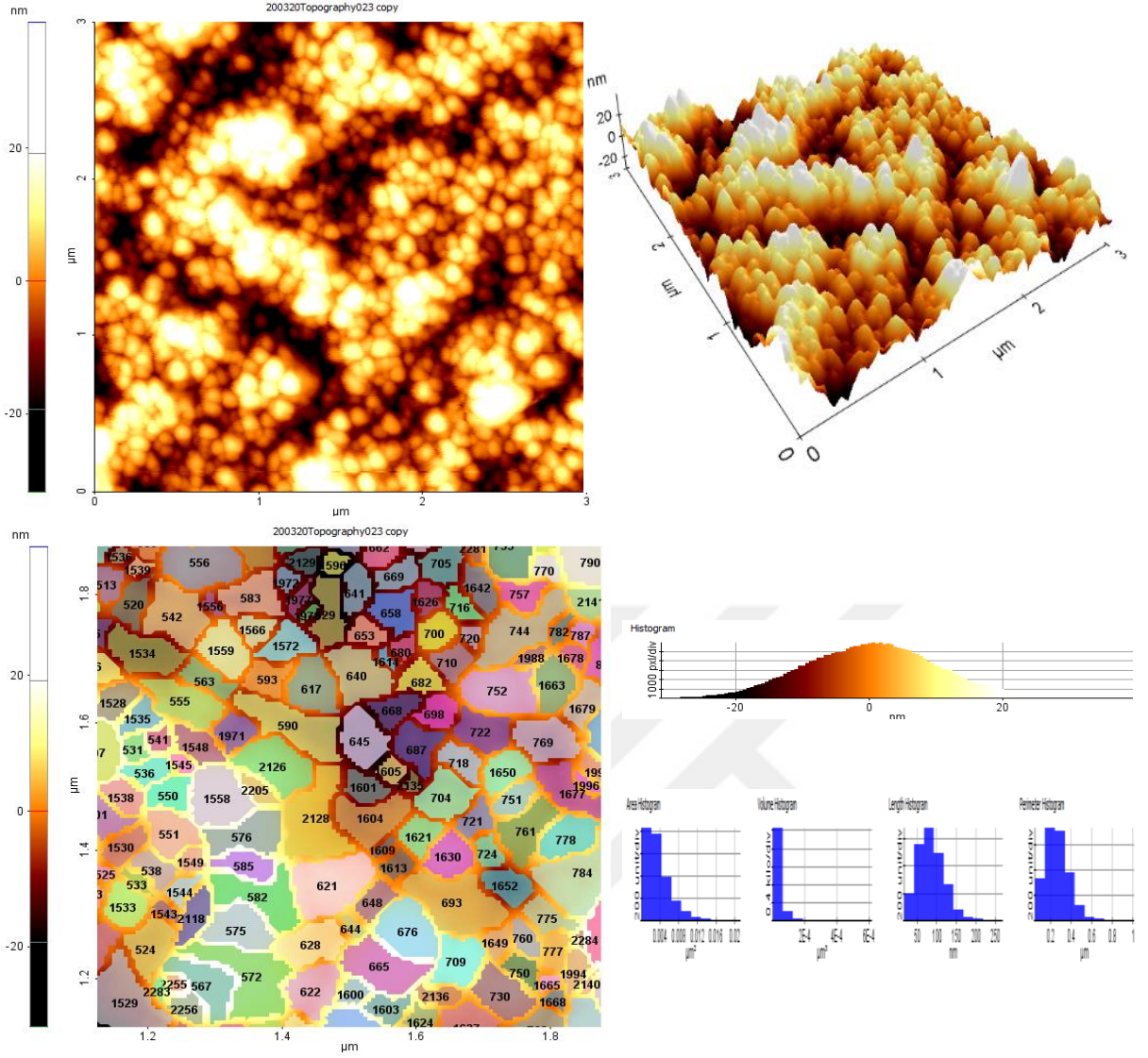


Şekil 78.(a) MoS₂'siz (b) Tek tabakalı MoS₂ (c) Çok tabakalı MoS₂ optik mikroskop görüntüsü

MoS₂ ince filmlerinin iki ve üç boyutlu yüzey topografileri AFM ile elde edilmiştir. Görüntüler 3x3 μm^2 yüzey alanı taranarak alınmıştır. Şekil 79 ve Şekil 80'de AFM görüntülerinden elde edilen taneler ve özellikleri hem görsel hem de histogramlarda sunulmaktadır. Tanelerin boyutunun Mo-O filminin büyüme süresine bağlı olarak azaldığı bulunurken tane sayısının ise arttığı belirlenmiştir. Şekil 79, Şekil 80'deki görüntüler, farklı zamanlarda üretilen Mo-O filmlerinden elde edilen MoS₂ ince filmlerinin hem optik hem de Raman haritalama görüntüleri ile uyumludur. Ortalama yüzey pürüzlülüğü (Ra) görüntüdeki çapraz çizgi ile elde edilmiştir. Şekil 79'da, tek tabakalı MoS₂ numunelerinde küçük dağılımlar göze çarpmaktadır. Ra, 7,106 nm olarak ölçülmüştür. Çok tabakalı numunelerde Ra 7,913 nm olarak ölçülmüştür. Çok tabakalı MoS₂ numunelerinde daha fazla kümelenme olduğu görülmektedir. Genel olarak MoS₂ tabakasının artması ile yüzey pürüzlülüğü artmıştır.

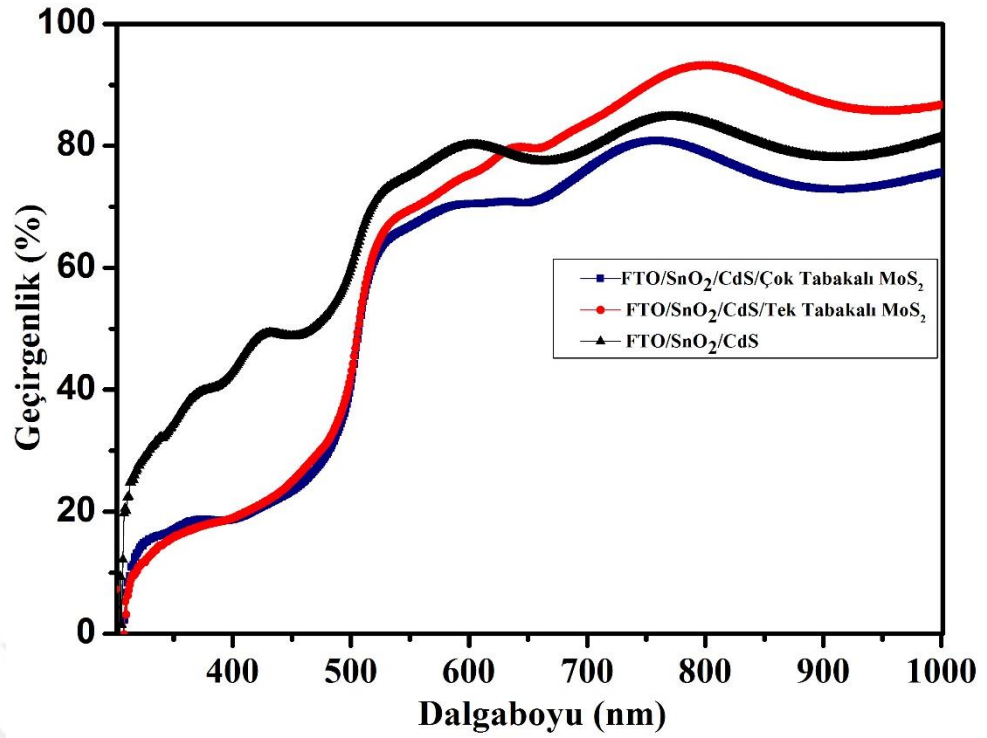


Şekil 79. FTO/SnO₂/CdS/tek tabakalı MoS₂ 2D, 3D, histogram AFM görüntüleri ve tanecik boyutlarına ilişkin görseller



Şekil 80. FTO/SnO₂/CdS/çok tabakalı MoS₂ 2D, 3D, histogram AFM görüntüleri ve tanecik boyutlarına ilişkin görseller

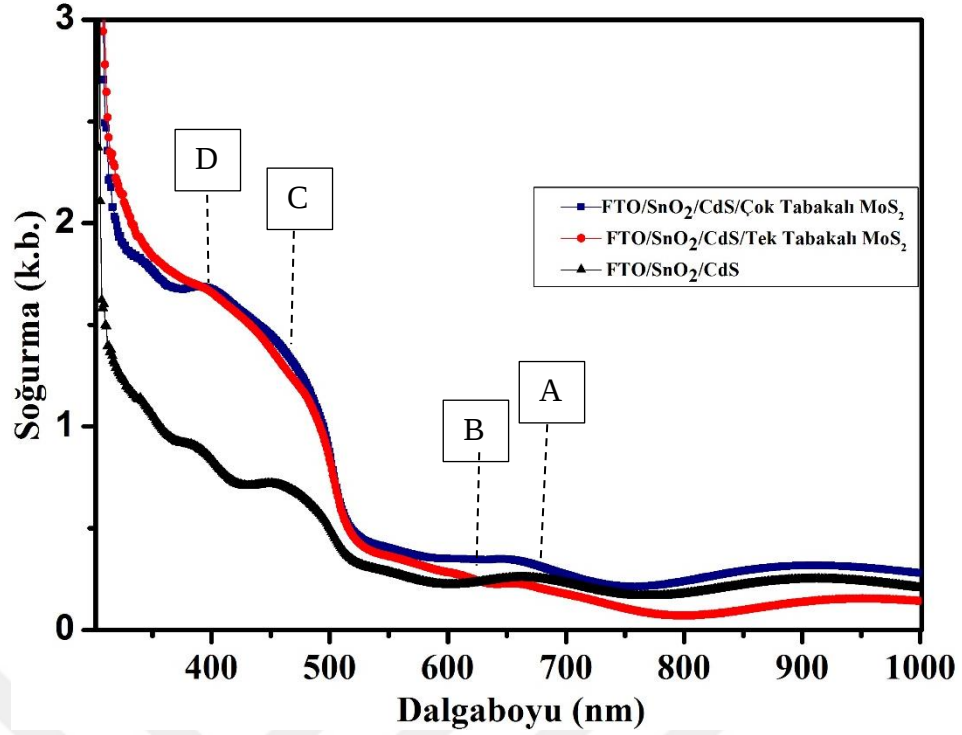
Şekil 81-82, CdS üzerinde farklı zamanlarda büyütülmüş Mo-O filmlerinin sülfürizasyonu ile elde edilen tek tabakalı ve çok tabakalı MoS₂ ince filmlerinin geçirgenlik ve soğurma spektrumunu göstermektedir. Görünür bölgedeki pikler (400-800 nm), MoS₂'nin sınırlayıcı olmayan durumları olan d-orbitalleri arasındaki optik geçişlerle ilişkilidir (Karataş 2020) Tüm numunelerin artan dalga boyu ile geçirgenliği artmıştır. 500 nm dalga boyuna kadar en iyi geçirgenlik SnO₂/CdS numunesinde belirlenmiştir. Yaklaşık 800 nm'de en yüksek geçirgenlik belirlenmiştir. Tek tabakalı MoS₂ numunesinin %95, çok tabakalı MoS₂ numunesinin %82 ve referans numunesinin geçirgenliği ise %88 olarak belirlenmiştir. Genel olarak en iyi geçirgenlik ise referans numunesine aittir.



Şekil 81. FTO/SnO₂/CdS, FTO/SnO₂/CdS/tek tabakalı MoS₂ ve FTO/SnO₂/CdS/çok tabakalı MoS₂ geçirgenlik spektrumları

2D malzemeler için UV-Vis spektroskopisinde, morötesi ve görünür bölgelerde soğurulmanın olduğu dalga boyları bant geçişlerinin olduğu yerler olup elektronik özellikleri belirlemede önemli bilgiler sunmaktadır. MoS₂ malzemesi için görünür bölgedeki pikler 400-800 nm arasındadır. Bu pikler, MoS₂'nin sınırlayıcı olmayan durumları olan d-orbitalleri arasındaki optik geçişlere atfedilmektedir (Mattheiss 1973). A/B pikleri, Brillouin bölgesinin K ve K' noktalarındaki bant kenarı uyarımlarına atfedilirken, C/D pikleri ise işgal edilen dz² orbitali ile boş dxy, x²-y² ve dxz, yz orbitalleri arasındaki bantlar arası geçişlere atfedilmektedir (Ahn *et al.* 2015; Coehoorn *et al.* 1987; King *et al.* 2013).

Tüm numunelerin artan dalga boyu ile soğurmasının azaldığı görülmüştür. En düşük soğurma referans numunesinde gözlemlenirken en iyi soğurma ise çok tabakalı MoS₂ numunesinde gözlemlenmiştir. Bu durum kalınlık artışı ile açıklanabilir.

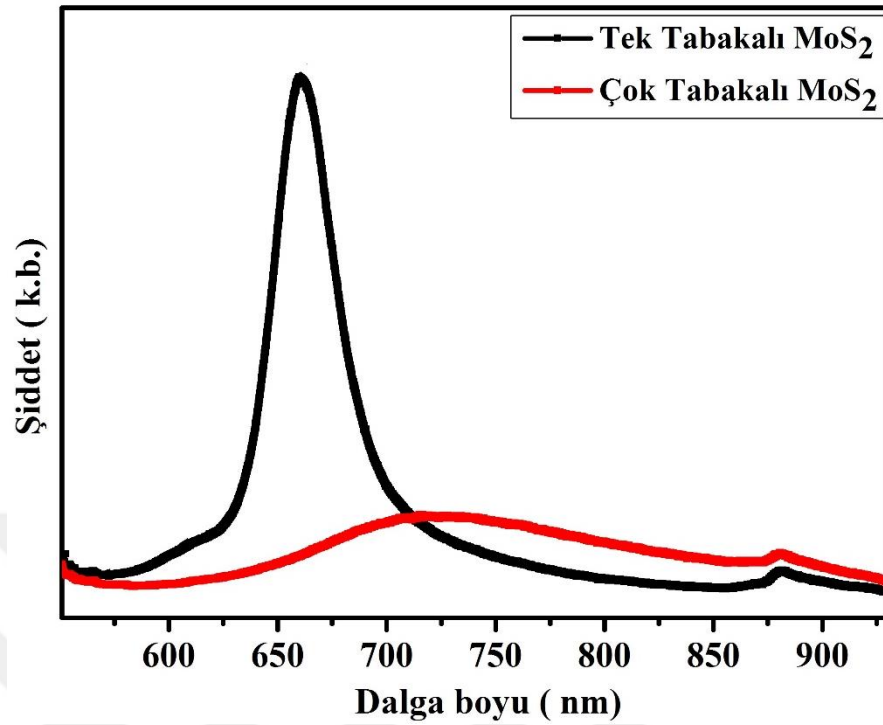


Şekil 82. FTO/SnO₂/CdS, FTO/SnO₂/CdS/çok tabakalı MoS₂ ve FTO/SnO₂/CdS/çok tabakalı MoS₂ soğurma spektrumları

PL ölçümleriyle, ince filmler hakkında doğrudan veya dolaylı elektronik bant geçişini gözlemleyerek daha fazla bilgi elde etmek mümkündür. MoS₂'nin optik özellikleri, katman sayısına büyük ölçüde bağlıdır. Tek tabakalı MoS₂'de, doğrudan eksitonik geçiş enerjileri nedeniyle güçlü bir PL etkisi gözlenir. Ancak bu, artan katman sayısı ile azalır ve bulk formunda PL etkisi gözlenmez. Bunun nedeni, MoS₂'nin bulk formda dolaylı bir bant aralığına ve tek katmanlı bir formda doğrudan bir bant aralığına sahip olmasıdır. Tek katmanlı MoS₂'nin PL spektrumunda ~670 ve ~620 nm'de iki pik gözlenmektedir. Bu pikler Brillouin bölgesinin K noktasındaki doğrudan eksitonik geçişlerle ilişkilidir ve sırasıyla MoS₂'nin A uyarımı ve B uyarımı ile ilişkilendirilmektedirler (Splendiani *et al.* 2010). Ayrıca, ~670 nm'deki baskın pik, fotojenere elektron boşluk çiftinin rekombinasyonuna atfedilirken, ~620 nm'de gözlemlenen daha zayıf pik, MoS₂'nin güçlü spin-yörünge kuplajı nedeniyle valance bant bölünmesine atfedilmektedir (Zhu *et al.* 2011). Öte yandan, negatif (bir boşluk iki elektron) ve pozitif (bir elektron iki boşluk) lokalize kuasipartiküller olan ~680 nm'de gözlenen trion ile ilişkili PL pikleri vardır. Bununla birlikte, PL yoğunluğu, artan sayıda MoS₂ tabakası ile azalmaktadır. Bunun nedeni optik bant aralığının doğrudandan dolaylıya geçişi olarak ifade edilmektedir (Mak *et al.* 2010). A uyarımı, B uyarımı ve Atrionun tepe merkezlerinin, MoS₂ puluna odaklanma yerine göre değiştiğini bildirmiştir.

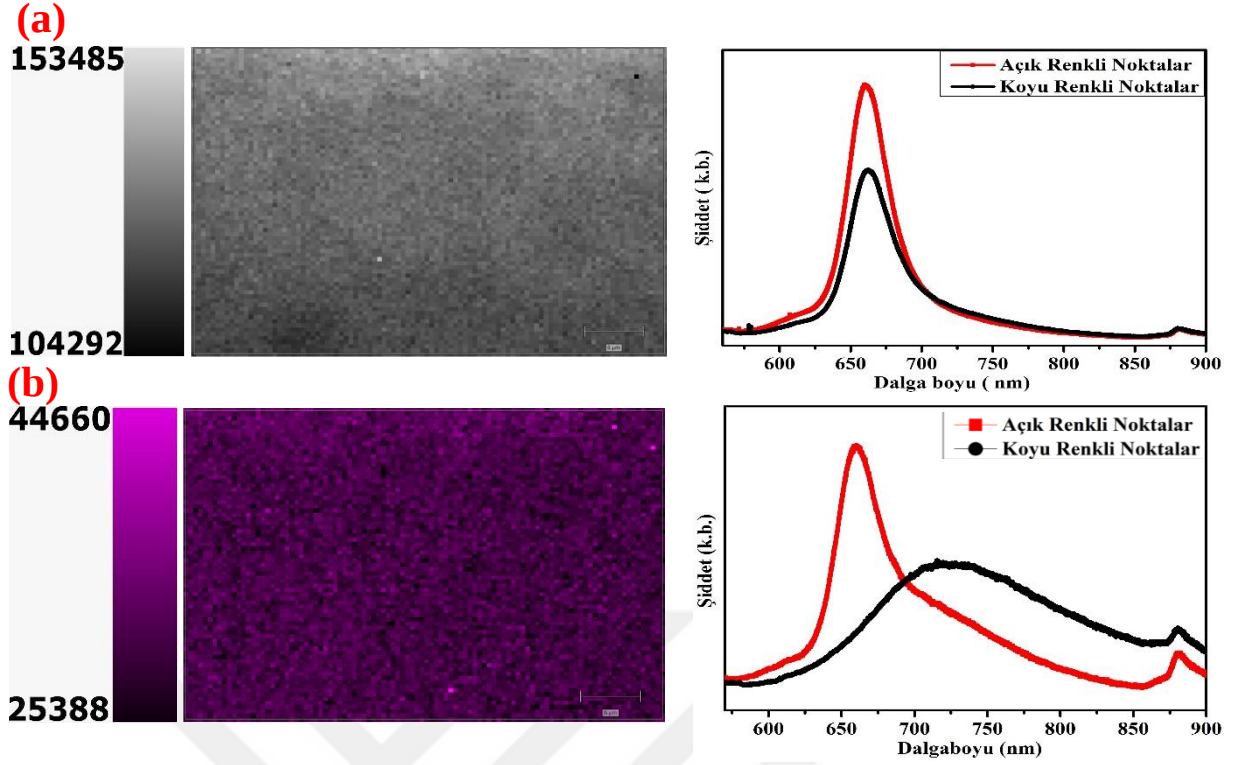
Şekil 83, CdS ince film üzerindeki MoS₂ ince filmlerinin PL piklerini göstermektedir. Tek tabakalı MoS₂ filminin 662 nm'de şiddetli ve baskın bir pik belirlenmiştir. Çok tabakalı

MoS₂ filminde ise 662 nm'deki pikin şiddetinin azaldığı görülmüştür. Bu sonuç çok tabakalı MoS₂ filminin çok katmanlı yapıya sahip olduğuna atfedilebilir.



Şekil 83. Tek tabakalı MoS₂ ve çok tabakalı MoS₂ PL

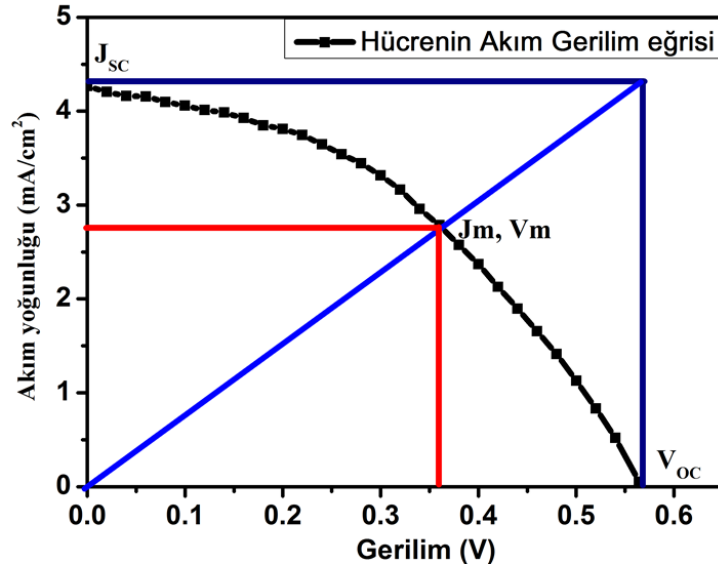
Şekil 84 tek tabaka ve çok tabakalı MoS₂ nin PL haritama ölçümüne ait verileri göstermektedir. PL haritalamasında, MoS₂ yapısının karakteristik piklerine referansla renklendirme yapılmıştır. Tek tabakalı MoS₂ filminin 662 nm'de şiddetli bir PL piki belirlenmiş gri rengi kullanılmıştır. Koyu bölgelerde pik şiddetinde hafif bir düşme belirlenmiştir. Çok tabakalı MoS₂ filminde ise 662-735 nm'de pikler görülmüş mor renk ile renklendirilme yapılmıştır. Çok katmanlı MoS₂'nin pik şiddetinin düşük olduğu belirlenmiştir. Aynı zaman da koyu bölgelerde pik merkezinin sağa kaydığı gözlemlenmiştir. Bu durum siyah bölgelerin katman sayısının daha fazla olmasına atfedilmektedir.



Şekil 84. (a) FTO/SnO₂/CdS/Tek tabakalı MoS₂ (b) FTO/SnO₂/CdS/Çok tabakalı MoS₂ Raman Haritalama

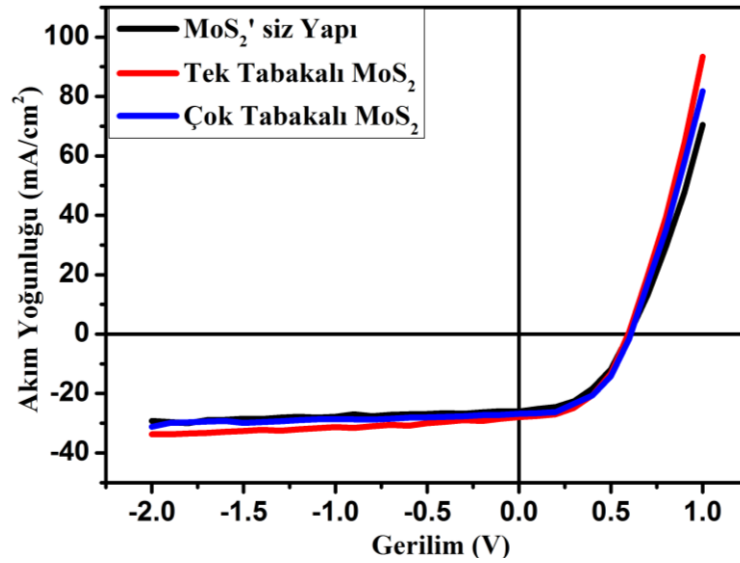
FTO/ SnO₂/ CdS/ CdTe/MoO₃/Mo ve FTO/ SnO₂/ CdS/ MoS₂/ CdTe /MoO₃/ Mo Güneş Hücrelerinin Yapısı ve Fotovoltaik Performansı ve Değerlendirilmesi

Üretilen çok eklemlı güneş hücresinin fotovoltaik performansını değerlendirmek için J-V eğrileri (Şekil 85) ölçülmüştür. J-V eğrilerinden elde edilen fotovoltaik parametreler Tablo 12’de verilmiştir. Gerilimin sıfır olduğu ve y eksenini kesen nokta kısa devre akım yoğunluğu (J_{sc}) değerini verirken, akım yoğunluğunun sıfır olduğu ve x eksenini kesen nokta ise açık devre gerilim (V_{oc}) değerini verir. J_m ve V_m belirlenerek dönüşüm verimliliği (η) denklem (7) yardımı ile hesaplanmıştır. Diğer taraftan, dolum faktörü (FF) belirlenen parametrelerle denklem (6) kullanılarak hesaplanır.



Şekil 85. Fotovoltaik bir güneş hücresinin J-V eğrisi

Tablodan da anlaşılacağı üzere, J_{sc} değerinde tek tabakalı MoS_2 nin ara tabakada kullanılması ile hafif bir artış gözlemlenmiştir. Ancak çok tabakalı MoS_2 nin kullanılması ile J_{sc} değerinde tek tabakalı numuneye göre hafif bir düşüş belirlenmiştir. Tüm numunelerde açık devre gerilimi aynıdır. Doluluk oranı en düşük referans güneş hücresinde hesaplanırken, en büyük ise çok tabakalı MoS_2 kullanılan güneş hücresinde hesaplanmıştır. Şekil 86’da görüldüğü gibi tek tabaka ve çok tabakalı MoS_2 kullanımı dönüşüm verimini hafif bir şekilde arttırmıştır. MoS_2 yani CdS/CdTe arasına birkaç nanometre kalınlığında atılan sülfürlü bir tabakanın (ki bu tabakanın yasak bant aralığı CdS ile CdTe arasında) verimi bir miktar artırdığını söylemek mümkündür ancak değerleri birbirlerine çok yakındır.



Şekil 86. MoS_2 ’siz ve MoS_2 ’li güneş hücrelerinin fotovoltaik dönüşüm verimliliği

Tablo 12. MoS₂'siz ve MoS₂'li fotovoltaik güneş hücresine ait parametreler

	MoS ₂ 'siz Yapı	Tek Tabakalı MoS ₂	Çok Tabakalı MoS ₂
J_{sc} (mA/cm²)	26,3	27,9	26,8
V_{oc} (V)	0,6	0,6	0,6
FF	0,47	0,5	0,5
Verim (%)	7,8	8,2	8,3

SONUÇLAR ve ÖNERİLER

Sonuçlar

Varolan tez çalışmasında;

1) SnO₂ ince filmleri magnetron saçtırma işlemi optimize edilerek FTO üzerine biriktirilmiştir. Büyütülen SnO₂ filmler, Raman, XRD ve AFM analizleri ile karakterize edilmiştir. Elde edilen sonuçlar, SnO₂ filmin 400 °C’de oksitlenmediğini ve 5 dk’lık büyütme ile yaklaşık 80 nm büyüdüğünü göstermiştir.

2) CdS ince filmleri cam üzerine farklı tavlama şartları kullanılarak büyütülmüştür. Büyütülen bu filmlerin güneş hücrelerinde kullanılması için optimum film şartları belirlenmiştir. Elde edilen filmlerin, XRD, Raman, UV-Vis spektroskopileri, SEM, AFM analizleri yapılmıştır. XRD ve Raman, sonuçlarından, CdS’nin başarılı bir şekilde büyütüldüğü doğrulanırken, SEM, AFM, Uv analizlerinden, optimum tavlama sıcaklığının *in-situ* tavlama ile 400 °C ‘de olduğu belirlenmiştir. Artan tavlama sıcaklığının yapısal ve optiksel özellikleri iyileştirdiği de tespit edilmiştir.

3) CdTe ince filmleri cam üzerine farklı tavlama şartları kullanılarak büyütülmüştür. Büyütülen bu filmlerin güneş hücrelerinde kullanılması için optimum film şartları belirlenmiştir. Elde edilen filmlerin, XRD, Raman, UV-Vis spektroskopileri, SEM ve AFM analizleri yapılmıştır. XRD ve Raman, sonuçlarından, CdTe başarılı bir şekilde büyütüldüğü doğrulanırken, SEM, AFM, Uv analizlerinden, optimum tavlama sıcaklığının *ex-situ* tavlama ile 200 °C’de olduğu belirlenmiştir. Artan *in-situ* tavlama sıcaklığının yapısal ve optiksel özellikleri iyileştirdiği de tespit edilmiştir. Ancak artan *ex-situ* tavlama sıcaklıklarında 300 °C’den daha yüksek sıcaklıklarda CdTe’nin yüzeye tutunmasının problemleri olduğu görülmüştür. *Ex-situ* tavlama şartlarında artan tavlama sıcaklıklarında CdTe’nin oksitlendiği de belirlenmiştir.

4) MoO₃ ince filmleri magnetron saçtırma işlemi optimize edilerek FTO üzerine biriktirilmiştir. Büyütülen MoO₃ filmler, Raman, XRD ve AFM analizleri ile karakterize edilmiştir. Elde edilen sonuçlar, MoO₃ filmin 400 °C’ de birden fazla fazın görüldüğü belirlenmiştir. Pek çok fazın gözlemlenmesinin altında yatan bir sebep, MoO₃ ince filmini oluşturmak için seçilen tavlama sıcaklığının Mo-O yapısı için bir faz dönüşüm sıcaklığı olması olabilir. AFM analizlerinden 5 dk’da yaklaşık 80 nm kalınlığında filmler olduğu tespit edilmiştir.

5) MoO_3 ince filmine post sülfürizasyon işlemi yapılarak MoS_2 elde edilmiştir. MoS_2 ince filmi Mo-O filminin 90 ve 180 saniye farklı büyüme süreleri kullanılarak büyütülmüştür. 90 sn'ye MoO_3 büyütülen MoS_2 filmi tek tabakalı, daha homojen ve mavimsi bir görüntüsü görülürken 180 sn MoO_3 büyütülen MoS_2 filmi çok tabakalı daha kümelenmiş ve sarımtırak bir görüntüsü görülmektedir. 180 sn'lik filmlerde daha koyu renkli oluşumların varlığı da dikkat çekmektedir. Tek tabakalı MoS_2 filminin geçirgenliği daha iyi olduğu belirlenirken, çok tabakalı MoS_2 filminin soğurmasının daha iyi olduğu belirlenmiştir. PL ölçümleriyle, 90 saniyelik MoS_2 filminin 662 nm'de şiddetli ve baskın bir pik belirlenmiştir. 180 saniyelik MoS_2 filminde ise 662'deki pikin şiddetinin azaldığı ve pikin merkezinin 735'lere kadar kaydığı belirlenmiştir. Bu sonuç 180 sn'lik MoS_2 filminin çok katmanlı yapıya sahip olduğuna atfedilmiştir.

6) J_{sc} değerinde tek tabakalı MoS_2 nin ara tabakada kullanılması ile hafif bir artış gözlemlenmiştir. Ancak çok tabakalı MoS_2 nin kullanılması ile J_{sc} değerinde tek tabakalı numuneye göre hafif bir düşüş belirlenmiştir. Tüm numunelerde açık devre gerilimi aynıdır. Doluluk oranı en düşük referans güneş hücresinde hesaplanırken, en büyük ise çok tabakalı MoS_2 kullanılan güneş hücresinde hesaplanmıştır. Tek tabaka ve çok tabakalı MoS_2 kullanımı dönüşüm verimini hafif bir şekilde arttırmıştır. MoS_2 yani CdS/CdTe arasına birkaç nanometre kalınlığında atılan sülfürlü bir tabakanın (ki bu tabakanın yasak bant aralığı CdS ile CdTe arasında) verimi bir miktar artırdığını söylemek mümkündür ancak değerleri birbirlerine çok yakındır.

Öneriler

CdS/CdTe yapısı 1950'li yıllardan günümüze kadar güneş hücrelerinde çalışılmakta olup pek çok türevi sentezlenmiş bir yapıdır. Bu yapılar ışığında var olan güneş hücrelerinin performanslarını geliştirmek ve güneş ışığının büyük bir kısmını absorblamak için birden çok katmana sahip malzemeler kullanılmıştır ve kullanılmaya devam etmektedir. İki boyutlu yapılar ve nanokristaller bu tür yapıların oluşturulmasında yoğun olarak kullanılmaktadır. Bu tez çalışmasında, CdS/CdTe güneş hücrelerinde MoS_2 ince filmlerin ara tabaka olarak kullanılmasının hücre verimine etkisi incelenmiştir. MoS_2 ince filminin kullanılması ile hücre veriminde hafif bir artış gözlemlenmiştir. Verimin daha fazla artırılması için hücrede uygun başka kontak (Au, Cu-Au vb.) çalışmasının yapılması önerilebilir. Aynı zamanda CdS/CdTe güneş hücrelerinde ara tabaka olarak farklı iki boyutlu malzeme kullanılarak hücre davranışının araştırılması da önerilebilir.

KAYNAKLAR

- Abdel-Galil, A., Balboul, M. R., Atta, A., Yahia, I. S. and Sharaf, A., 2014. Preparation, structural and optical characterization of nanocrystalline CdS thin film. *Physica B: Condensed Matter*, 447, 35–41.
- Akdağ, A., Budak, H. F., Yilmaz, M., Efe, A., Büyükaydin, M., Can, M., Turgut, G., Sönmez, E., 2016. Structural and Morphological Properties of Al doped ZnO Nanoparticles. *Journal of Physics: Conference Series*, 707(1), 34-39.
- Ali, S. M., AlGarawi, M. S., Farooq, W. A., Atif, M., Hanif, A., AlMutairi, M. A., Shar, M. A., 2020. Gamma dose dependent structural, optical and current-voltage characteristics of CdS/p-Si heterojunction. *Materials Chemistry and Physics*, 240.
- Amroun, M. N., Khadraoui, M., Miloua, R., Kebbab, Z., and Sahraoui, K., 2016. Investigation on the Structural , Optical and Electrical Properties of Mixed SnS₂ / CdS Thin films. *Optik - International Journal for Light and Electron Optics*, 131(March 2019), 152–164.
- Aristizábal, A. J., & Mikan, M. A., 2016. Optical Properties of CDS Films by Analysis of Spectral Transmittance. *IOSR Journal of Applied Physics*, 08(04), 24–31.
- Aydın, S., 2013, *Elektrokimyasal Yolla CdS / CdTe Güneş Gözesinin Elde Edilmesi*, Doktora Tezi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Erzurum, Türkiye.
- Balendhran, S., Ou, J. Z., Bhaskaran, M., Sriram, S., Ippolito, S., Vasic, Z., Kats, E., Bhargava, S., Zhuiykov, S., and Kalantar-Zadeh, K., 2012. Atomically thin layers of MoS₂ via a two step thermal evaporation-exfoliation method. *Nanoscale*, 4(2), 461–466.
- Basyooni, M. A., Shaban, M., and El Sayed, A. M., 2017. Enhanced Gas Sensing Properties of Spin-coated Na-doped ZnO Nanostructured Films. *Scientific Reports*, 7.
- Benavente, E., & González-Moraga, G., 1997. Microwave activated lithium intercalation in transition metal sulfides. *Materials Research Bulletin*, 32(6), 709–717.
- Bernardi, M., Palummo, M. and Grossman, J. C., 2013. Extraordinary sunlight absorption and one nanometer thick photovoltaics using two-dimensional monolayer materials. *Nano Letters*, 13(8), 3664–3670.
- Birkmire, R. W. and McCandless, B. E., 2010. CdTe thin film technology: Leading thin film PV into the future. In *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 14(6), 139–142.
- Blake, P. Brimicombe, P.D., Nair, R.R., Booth, T.J., Jiang, D., Schedin, F., Ponomarenko, L.A., Morozov, S.V., Gleeson, H.F., Hill, E.W., Geim, A.K., 2008. Graphene-Based Liquid Crystal Device. *ACS Nano*, 365, 1704–1708.
- Bonaccorso, F., Sun, Z., Hasan, T., Ferrari, A.C. 2010. Graphene photonics and optoelectronics. *Nature Photonics* 4, 611-622.
- Bolotin, K.I, Sikes, K.J., Jiang, Z., Klima, M., Fudenberg, G., Hone, J., Kim, P., Stormer, H.L. 2008. Ultrahigh electron mobility in suspend graphene. *Solid State Commun.* 146, 351-355.
- Berger, C., Song, Z., Li, T., Li, X., Ogbazghi, A.Y., Feng, R., Dai, Z., Marchenkov, A.N., Conrad, E.H., First, P.N., de Heer W.A. 2004. Ultrathin epitaxial graphite: 2D electron gas properties and a route toward graphene-based nanoelectronics. *J. Phys. Chem.*, 108 (52), 19912.
- Böer, K.W. 2011. Cadmium sulfide enhances solar cell efficiency. *Energy Conversion and Management*, 52, 1 426-430.
- Blake, P. Brimicombe, P.D., Nair, R.R., Booth, T.J., Jiang, D., Schedin, F., Ponomarenko, L.A., Morozov, S.V., Gleeson, H.F., Hill, E.W., Geim, A.K., 215.
- Beal, A. R., Hughes, H. P., Liang, W. Y. 1975. The reflectivity spectra of some group VA transition metal dichalcogenides. *J. Phys. C* 8, 4236.

- Chandra, S., Singh, D. P., Srivastava, P. C., Sahu, S. N. 1984. Electrodeposited semiconducting molybdenum selenide films. II. Optical, electrical, Electrochemical and photoelectrochemical solar cell studies. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 17, 2125.
- Camacho-Espinosa, E., Rejón, V., Hernández-Rodríguez, E., Mis-Fernández, R., Oliva, A. I., Rosendo, E., Rimmaudo, I., & Peña, J. L., 2017. CHClF₂ gas mixtures to activate all-sputtered CdS/CdTe solar cells. *Solar Energy*, 144, 729–734.
- Cappelluti, E., Roldán, R., Silva-Guillén, J. A., Ordejón, P., & Guinea, F., 2013. Tight-binding model and direct-gap/indirect-gap transition in single-layer and multilayer MoS₂. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 88(7), 65-75.
- Chakraborty, B., Matte, H. S. S. R., Sood, A. K., & Rao, C. N. R., 2013. Layer-dependent resonant Raman scattering of a few layer MoS₂. *Journal of Raman Spectroscopy*, 44(1), 92–96.
- Chander, S., & Dhaka, M. S., 2017. Optical and structural constants of CdS thin films grown by electron beam vacuum evaporation for solar cells. *Thin Solid Films*, 638, 179–188.
- Chander, S., & Dhaka, M. S., 2018. Enhancement in microstructural and optoelectrical properties of thermally evaporated CdTe films for solar cells. *Results in Physics*, 8, 1131–1135.
- Chaudhary, N., Khanuja, M., and Islam, S. S., 2018. Hydrothermal synthesis of MoS₂ nanosheets for multiple wavelength optical sensing applications. *Sensors and Actuators, A: Physical*, 277, 190–198.
- Chi, K., Li, Q., Meng, X., Liu, L. and Yang, H., 2017. Materials Morphology-controlled synthesis and characterization of CdTe micro- / nanoscale structures by electrodeposition method. *Journal of Materials Science*, 52(17), 10431–10438.
- Chrimes, A. F., Khoshmanesh, K., Stoddart, P. R., Mitchell, A. and Kalantar-Zadeh, K., 2013. Microfluidics and raman microscopy: Current applications and future challenges. *Chemical Society Reviews*, 42(13), 5880–5906.
- Coehoorn, R., Haas, C. And De Groot, R. A., 1987. Electronic structure of MoSe₂, MoS₂, and WSe₂. II. The nature of the optical band gaps. *Physical Review B*, 35(12), 6203–6206.
- Coleman, J. N., Lotya, M., O'Neill, A., Bergin, S. D., King, P. J., Khan, U., Young, K., Gaucher, A., De, S., Smith, R. J., Shvets, I. V., Arora, S. K., Stanton, G., Kim, H. Y., Lee, K., Kim, G. T., Duesberg, G. S., Hallam, T., Boland, J. J., Nicolosi, V., 2011. Two-dimensional nanosheets produced by liquid exfoliation of layered materials. *Science*, 331(6017), 568–571.
- Dang, J., Zhang, G. H., & Chen, J.H., Jang, C., Xiao, S., Ishigami, M., Fuhrer, M.S. 2008. Intrinsic and extrinsic performance limits of graphene devices on SiO₂. *Nature Nanotech*, 3, 206.
- Coşar, M.B., 2019. Tuning The Electron Beam Evaporation Parameters For The Production Of Hole And Electron Transport Layers For Perovskite Solar Cells. Doctora thesis, in Metallurgical and Materials Engineering Department, Middle East Technical University, Ankara, Turkey.
- Chen, J.H., Jang, C., Xiao, S., Ishigami, M., Fuhrer, M.S. 2008. Intrinsic and extrinsic performance limits of graphene devices on SiO₂. *Nature Nanotech*, 3, 206.
- Cano-Márquez, A.G., Rodríguez-Macías, F.J., Campos-Delgado, J., Espinosa-González, C.G., Tristán-López, F., Ramírez-González, D., Cullen, D.A., Smith, D.J., Terrones, M., Vega-Cantú, Y.I. 2009. Ex-MWNTs: graphene sheets and ribbons produced by lithium intercalation and exfoliation of carbon nanotubes. *Nano Lett.*, 9, 1527.
- Choi, W., Lahiri, I., Seelaboyina, R., Kang, Y.S. 2010. Synthesis of graphene and its applications: A review. *Critical Reviews in Solid State and Materials Science*, 35:52-71.
- Chandra, S., Singh, D. P., Srivastava, P. C., Sahu, S. N. 1984. Electrodeposited semiconducting molybdenum selenide films. II. Optical, electrical, Electrochemical and photoelectrochemical solar cell studies. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 17, 2125.

- Chuang, C.H., Doane, T.L., Lo, S.S. et al. 2011. Measuring electron and hole transfer in core/shell nanoheterostructures, *ACS Nano* 5, 6016–6024.
- Chen, Z., Cummins, D., Reinecke, B.N. et al. 2011. Core–shell MoO₃-MoS₂ nanowires for hydrogen evolution: a functional design for electrocatalytic materials, *Nano Lett.* 11, 4168–4175.
- Eda, G., Yamaguchi, H., Voiry, D., Fujita, T., Chen, M., & Chhowalla, M., 2011. Photoluminescence from chemically exfoliated MoS₂. *Nano Letters*, 11(12), 5111–5116.
- Evani, V.K., 2017. Improving Doping and Minority Carrier Lifetime of CdTe/CdS Solar Cells by in-situ Control of CdTe Stoichiometry. Doctora Thesis, Department of Electrical Engineering College of Engineering, University of South Florida, Florida.
- Enyashin, A. N., Yadgarov, L., Houben, L., Popov, I., Weidenbach, M., Tenne, R., Bar-Sadan, M., & Seifert, G., 2011. New route for stabilization of 1T-WS₂ and MoS₂ phases. *Journal of Physical Chemistry C*, 115(50), 24586–24591.
- Epifani, M., Imperatori, P., Mirengi, L., Schioppa, M., & Siciliano, P., 2004. Synthesis and characterization of MoO₃ thin films and powders from a molybdenum chloromethoxide. *Chemistry of Materials*, 16(25), 5495–5501.
- Feldmeier, E. M., Fuchs, A., Schaffner, J., Schimper, H. J., Klein, A., & Jaegermann, W., 2011. Comparison between the structural, morphological and optical properties of CdS layers prepared by close space Sublimation and RF magnetron sputtering for CdTe solar cells. *Thin Solid Films*, 519(21), 7596–7599.
- Ganatra, R. and Zhang, Q., 2014. Few-layer MoS₂: A promising layered semiconductor. In *ACS Nano*, 8(5), 4074–4099.
- Gilic, M., Trajic, J., Romcevic, N., Romcevic, M., Timotijevic, D. V., Stanisic, G., & Yahia, I. S., 2013. Optical properties of CdS thin films. *Optical Materials*, 9, 25–29.
- Grayfer, E. D., Kozlova, M. N., & Fedorov, V. E., 2017. Colloidal 2D nanosheets of MoS₂ and other transition metal dichalcogenides through liquid-phase exfoliation. In *Advances in Colloid and Interface Science* 245, 40–61.
- Gu, W., Yang, F., Wu, C., Zhang, Y., Shi, M. and Ma, X., 2014. Fabrication and investigation of the optoelectrical properties of MoS₂/CdS heterojunction solar cells. *Nanoscale Research Letters*, 9(1), 51–59.
- Guo, M., Zhu, X. and Li, H., 2015. Properties of sputtered CdS and CdTe films and performance of CdTe solar cells as a function of annealing temperature. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 40, 917–924.
- Gupta, A., Parikh, V. and Compaan, A. D., 2006. High efficiency ultra-thin sputtered CdTe solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 90(15), 2263–2271.
- Ghorannevis, Z., Akbarnejad, E., Ghorannevis, M. 2016. Effects of various deposition times and RF powers on CdTe thin film growth using magnetron sputtering. *Journal of Theoretical and Applied Physics* 10, 3 225–231.
- Geim, A.K. and Novoselov, K.S. 2007. The rise of graphene. *Nature Materials*, Vol 6, 183–191
- Gopalakrishnan, D., Damien, D., Shaijumon, M.M., 2014. MoS₂ quantum dot-Interspersed exfoliated MoS₂ nanosheets. *ACS Nano* 8, 5297–5303.
- Gross, D., Susha, A.S., Klar, T.A., et al., 2008. Charge separation in type II tunneling structures of close-packed CdTe and CdSe nanocrystals. *Nano Lett.* 8, 1482–1485.
- Hass, J., De Heer, W.A., Conrad, E.H. 2008. The growth and morphology of epitaxial multilayer graphene. *J. Phys. Cond. Matter*, 20, 323202.
- Horiuchi, S., Gotou, T., Fujiwara, M., Asaka, T., Yokosawa, T., Matsui, Y. 2004. Single graphene sheet detected in a carbon nanofilm. *Appl. Phys. Lett.*, 84, 2403.
- Hatamvand, M., Kamrani, E., Lira-Cantú, M., Madsen, M., Patil, B. R., Vivo, P., Mehmood, M. S., Numan, A., Ahmed, I. and Zhan, Y., 2020. Recent advances in fiber-shaped and planar-shaped textile solar cells. In *Nano Energy* 71, 104609 .

- He, F., Yin, X., Li, J., Lin, S., Wu, L., Hao, X., Zhang, J. and Feng, L., 2020. Characterization of sputtered MoO_x thin films with different oxygen content and their application as back contact in CdTe solar cells. *Vacuum*, 176, 109337.
- Huang, J. H., Chen, H. H., Liu, P. S., Lu, L. S., Wu, C. T., Chou, C. T., Lee, Y. J., Li, L. J., Chang, W. H., Hou, T. H., 2016. Large-area few-layer MoS₂ deposited by sputtering. *Materials Research Express*, 3(6), 56–61.
- Hu, X., Zhu, Q. and Wang, X. 2015. Nonmetal-metal-semiconductor-promoted P/Ag/Ag₂O/Ag₃PO₄/TiO₂ photocatalyst with superior photocatalytic activity and stability, *J. Mater. Chem. A* 3, 17858–17865.
- Hussain, S., Shehzad, M. A., Vikraman, D., Khan, M. F., Singh, J., Choi, D. C., Seo, Y., Eom, J., Lee, W. G., Jung, J., 2016. Synthesis and characterization of large-area and continuous MoS₂ atomic layers by RF magnetron sputtering. *Nanoscale*, 8(7), 4340–4347.
- Islam, M. A., Hossain, M. S., Aliyu, M. M., Chelvanathan, P., Huda, Q., Karim, M. R., Sopian, K., Amin, N., 2013. Comparison of structural and optical properties of CdS thin films grown by CSVT, CBD and sputtering techniques. *Energy Procedia*, 33, 203–213.
- Islam, M. A., Rahman, K. S., Sobayel, K., Enam, T., Ali, A. M., Zaman, M., Akhtaruzzaman, M., Amin, N., 2017. Fabrication of high efficiency sputtered CdS:O/CdTe thin film solar cells from window/absorber layer growth optimization in magnetron sputtering. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 172, 384–393.
- Jang, C. W., Shin, D. H., Ko, J. S., Choi, S. H. 2020. Performance enhancement of graphene/porous Si solar cells by employing layer-controlled MoS₂. *Applied Surface Science*, 532, 147460.
- Jiménez Sandoval, S., Yang, D., Frindt, R. F., Irwin, J. C., 1991. Raman study and lattice dynamics of single molecular layers of MoS₂. *Physical Review B*, 44(8), 3955–3962.
- Jin, W., Yeh, P. C., Zaki, N., Zhang, D., Sadowski, J. T., Al-Mahboob, A., Van Der Zande, A. M., Chenet, D. A., Dadap, J. I., Herman, I. P., Sutter, P., Hone, J., Osgood, R. M., 2013. Direct measurement of the thickness-dependent electronic band structure of MoS₂ using angle-resolved photoemission spectroscopy. *Physical Review Letters*, 111(10), 106801.
- Jahangir I., 2011. Study of MoS₂ and graphene-based heterojunctions for electronic and sensing applications. Master of Science, Bangladesh University of Engineering and Technology, University of South Carolina
- Joensen, P., Frindt, R. F., Morrison, S. R., 1986. Single-layer MoS₂. *Materials Research Bulletin*, 21(4), 457–461.
- Kalantar-zadeh, K., Ou, J. Z., Daeneke, T., Strano, M. S., Pumera, M., Gras, S. L., 2015. Two-Dimensional Transition Metal Dichalcogenides in Biosystems. *Advanced Functional Materials*, 25(32), 5086–5099.
- Karataş, A. And Yılmaz, M., 2020. Molybdenum disulfide thin films fabrication from multi-phase molybdenum oxide using magnetron sputtering and CVD systems together. *Superlattices and Microstructures*, 143, 106555.
- Kim, D., Park, Y., Kim, M., Choi, Y., Park, Y. S., Lee, J., 2015. Optical and structural properties of sputtered CdS films for thin film solar cell applications. *Materials Research Bulletin*, 69, 78–83.
- Krishnan, U., Kaur, M., Singh, K., Kaur, G., Singh, P., Kumar, M., Kumar, A., 2019. MoS₂ /Ag nanocomposites for electrochemical sensing and photocatalytic degradation of textile pollutant. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 30(4), 3711–3721.
- Krishnan, U., Kaur, M., Singh, K., Kumar, M., Kumar, A., 2019. A synoptic review of MoS₂ : Synthesis to applications. *Superlattices and Microstructures*, 128, 274–297.
- Kuzmenko, A.B., Heumen, E.V., Carbone, F., Marel, D.V.D. 2008. Universal optical conductance of graphite. *Phys. Rev. Lett.*, 100, 117401.

- Karataş, A., 2020. MoS₂ tabanlı ince film fotodetektörler. Yüksek Lisans Tezi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Konya, Türkiye.
- Kim, K.S., Zhao, Y., Jang, H., Lee, S.Y., Kim, J.M., Kim, K.S., Ahn, J-H., Kim, P., Choi, J-Y., Hong, B.H. 2009. Large-scale pattern growth of graphene films for stretchable transparent electrodes. *Nature*, 457, 706.
- Kuc, A., Zibouche, N., Heine, T. 2011. Influence of quantum confinement on the electronic structure of the transition metal sulfide TS₂. *Phys. Rev. B* 83, 245213.
- Kim, C.-D., Min, B.-K., Jung, W.-S. 2009. Preparation of graphene sheets by the reduction of carbon monoxide. *Carbon*, 47, 1610.
- Laskar, M. R., Ma, L., Kannappan, S., Sung Park, P., Krishnamoorthy, S., Nath, D. N., Lu, W., Wu, Y. and Rajan, S., 2013. Large area single crystal (0001) oriented MoS₂. *Applied Physics Letters*, 102(25), 252108.
- Lee, T. D. And Ebong, A. U., 2017. A review of thin film solar cell technologies and challenges. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 70(November 2016), 1286–1297.
- Li, Hong, Zhang, Q., Yap, C. C. R., Tay, B. K., Edwin, T. H. T., Olivier, A., & Baillargeat, D. 2012. From bulk to monolayer MoS₂: Evolution of Raman scattering. *Advanced Functional Materials*, 22(7), 1385–1390.
- Li, Honglin, Yu, K., Lei, X., Guo, B., Fu, H. and Zhu, Z., 2015. Hydrothermal Synthesis of Novel MoS₂/BiVO₄ Hetero-Nanoflowers with Enhanced Photocatalytic Activity and a Mechanism Investigation. *Journal of Physical Chemistry C*, 119(39), 22681–22689.
- Lin, Y. C., Zhang, W., Huang, J. K., Liu, K. K., Lee, Y. H., Liang, C. Te, Chu, C. W. and Li, L. J., 2012. Wafer-scale MoS₂ thin layers prepared by MoO₃ sulfurization. *Nanoscale*, 4(20), 6637–6641.
- Liu, K. K., Zhang, W., Lee, Y. H., Lin, Y. C., Chang, M. T., Su, C. Y., Chang, C. S., Li, H., Shi, Y., Zhang, H., Lai, C. S. and Li, L. J., 2012. Growth of large-area and highly crystalline MoS₂ thin layers on insulating substrates. *Nano Letters*, 12(3), 1538–1544.
- Liu, Y. D., Ren, L., Qi, X., Yang, L. W., Hao, G. L., Li, J., Wei, X. L. and Zhong, J. X., 2013. Preparation, characterization and photoelectrochemical property of ultrathin MoS₂ nanosheets via hydrothermal intercalation and exfoliation route. *Journal of Alloys and Compounds*, 571, 37–42.
- Liu, Y., Hao, L., Gao, W., Wu, Z., Lin, Y., Li, G., Guo, W., Yu, L., Zeng, H., Zhu, J. And Zhang, W., 2015. Hydrogen gas sensing properties of MoS₂/Si heterojunction. *Sensors and Actuators, B: Chemical*, 211, 537–543.
- Ludin, N. A., Mustafa, N. I., Hanafiah, M. M., Ibrahim, M. A., Asri Mat Teridi, M., Sepeai, S., Zaharim, A. and Sopian, K., 2018. Prospects of life cycle assessment of renewable energy from solar photovoltaic technologies: A review. In *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 96, 11–28.
- Lee, H.J., Bang, J., Park, J. 2010. Multilayered semiconductor (CdS/CdSe/ZnS)-sensitized TiO₂ mesoporous solar cells: all prepared by successive ionic layer adsorption and reaction processes, *Chem. Mater.* 22, 5636–5643.
- Pisana, S. Lazzeri, M., Casiraghi, C., Novoselov, K.S., Geim, A.K., Ferrari, A.C., Mauri, F. 2007. Breakdown of the adiabatic Born-Oppenheimer approximation in graphene. *Nature Matter*. 6, 198-201.
- Ma, J., Bai, H., Zhao, W., Yuan, Y. and Zhang, K. 2018. High efficiency graphene/MoS₂/Si Schottky barrier solar cells using layer-controlled MoS₂ films. *Solar Energy*, 160, 76–84.
- Ma, X., Sakanishi, K. and Mochida, I., 1994. Hydrodesulfurization Reactivities of Various Sulfur Compounds in Diesel Fuel. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 33(2), 218–222.
- Mak, K. F., Lee, C., Hone, J., Shan, J. and Heinz, T. F., 2010. Atomically thin MoS₂: A new direct-gap semiconductor. *Physical Review Letters*, 105(13).

- Morozov, S.V., Novoselov, K.S., Katsnelson, M.I., Schedin, F., Elias, D.C. Jaszczak, J.A., Geim, A.K. 2008. Giant intrinsic carrier mobilities in graphene and its bilayer. *Phys. Rev. Lett.* 1, 016602.
- Mak, K. F., He, K., Shan, J., Heinz, T. F. 2012. Control of valley polarization in monolayer MoS₂ by optical helicity. *Nature Nanotech.* 7, 494–498.
- Martínez-Landeros, V. H., Hernandez-Como, N., Gutierrez-Heredia, G., Quevedo-Lopez, M. A. And Aguirre-Tostado, F. S., 2019. Structural, chemical and electrical properties of CdS thin films fabricated by pulsed laser deposition using varying background gas pressure. *Thin Solid Films.*12,20-28.
- Metin, H., Sat, F., Erat, S. and Ari, M., 2008. Cadmium sulphide thin films grown by CBD: The effect of thermal annealing on the structural, electrical and optical properties. *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*, 10(10), 2622–2630.
- Najmaei, S., Liu, Z., Zhou, W., Zou, X., Shi, G., Lei, S., Yakobson, B. I., Idrobo, J. C., Ajayan, P. M. and Lou, J., 2013. Vapour phase growth and grain boundary structure of molybdenum disulphide atomic layers. *Nature Materials*, 12(8), 754–759.
- Novoselov, K.S., Geim, A.K., Morozov, S.V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S.V., Grigorieva, IV., Firsov, A.A. 2004. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 306, 666.
- Nagashima, A., Nuka K., Itoh, H., Ichinokawa, T., Oshima, C., Otani, S. 1993. Electronic states of monolayer graphite formed on TiC(111) surface. *Surface Sci.*, 291, 93.
- Pacley, S., Hu, J., Jespersen, M., Hilton, A., Waite, A., Brausch, J., Beck-Millerton, E. and Voevodin, A. A., 2016. Impact of reduced graphene oxide on MoS₂ grown by sulfurization of sputtered MoO₃ and Mo precursor films. *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, 34(4), 041505.
- Paudel, N. R., Compaan, A. D. and Yan, Y., 2013. Sputtered CdS/CdTe solar cells with MoO₃-x/Au back contacts. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 113, 26–30.
- Paudel, N. R., Wieland, K. A. and Compaan, A. D., 2012. Ultrathin CdS/CdTe solar cells by sputtering. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 105, 109–112.
- Pumera, M. and Loo, A. H., 2014. Layered transition-metal dichalcogenides (MoS₂ and WS₂) for sensing and biosensing. In *TrAC - Trends in Analytical Chemistry* , 61,49–53.
- Punitha, K., Sivakumar, R., Sanjeeviraja, C. And Ganesan, V., 2015. Influence of post-deposition heat treatment on optical properties derived from UV-vis of cadmium telluride (CdTe) thin films deposited on amorphous substrate. *Applied Surface Science*, 344, 89–100.
- Quy, V. H. V., Vijayakumar, E., Ho, P., Park, J. H., Rajesh, J. A., Kwon, J. M., Chae, J., Kim, J. H., Kang, S. H. and Ahn, K. S.,2018. Electrodeposited MoS₂ as electrocatalytic counter electrode for quantum dot- and dye-sensitized solar cells. *Electrochimica Acta*, 260, 716–725.
- Obraztsov, A.N., Zolotukhin, A.A., Ustinov, A.O., Volkov, A.V., Svirko, Y., Jefimovs, K. 2003. DC discharge plasma studies for nanostructured carbon CVD. *Diamond Related Mater.*, 12, 917.
- Özden, Ş.,2015. Farklı Sürelerle CdCl₂ Ortamında Isıl İşlem Görmüş İnce Film Cdte/Cds Güneş Pillerinin Elektriksel Karakterizasyon Yöntemleriyle İncelenmesi. Doktora Tezi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Muğla, Türkiye.
- Radisavljevic, B., Radenovic, A., Brivio, J., Giacometti, V. and Kis, A., 2011. Single-layer MoS₂ transistors. *Nature Nanotechnology*, 6(3), 147–150.
- Rahman, K. S., Harif, M. N., Rosly, H. N., Kamaruzzaman, M. I. Bin, Akhtaruzzaman, M., Alghoul, M., Misran, H. and Amin, N., 2019. Influence of deposition time in CdTe thin film properties grown by Close-Spaced Sublimation (CSS) for photovoltaic application. *Results in Physics*, 14, 102371.

- Ramadoss, A., Kim, T., Kim, G. S. and Kim, S. J., 2014. Enhanced activity of a hydrothermally synthesized mesoporous MoS₂ nanostructure for high performance supercapacitor applications. *New Journal of Chemistry*, 38(6), 2379–2385.
- Rondiya, S., Rokade, A., Funde, A., Kartha, M., Pathan, H. And Jadkar, S., 2017. Synthesis of CdS thin films at room temperature by RF-magnetron sputtering and study of its structural, electrical, optical and morphology properties. *Thin Solid Films*, 631(April), 41–49.
- Roy, P., Kumar Sinha, N., Tiwari, S. and Khare, A., 2020. A review on perovskite solar cells: Evolution of architecture, fabrication techniques, commercialization issues and status. *In Solar Energy*, 198, 665–688.
- Rollings, E., Gweon, G.H., Zhou, S.Y., Mun, B.S., McChesney, J.L., Hussain, B.S., Federov, A.V., First, P.N., de Heer, W.A., Lanzara, A. 2006. Synthesis and characterization of atomically-thin graphite films on silicon carbide substrate. *J. Phys. Chem. Solids*, 67, 2172.
- Turchanin, A., Beyer, A., Nottbohm, C.T., Zhang, X., Stosch, R., Sologubenko, A., Mayer, J., Hinze, P., Weimann, T., Götzhäuser, A. 2009. One nanometer thin carbon nanosheets with tunable conductivity and stiffness. *Adv. Mater.*, 21, 1233.
- Sahay, P. P., Nath, R. K. and Tewari, S., 2007. Optical properties of thermally evaporated CdS thin films. *Crystal Research and Technology*, 42(3), 275–280.
- Samavati, A., Samavati, Z., Ismail, A. F., Othman, M. H. D., Rahman, M. A., Zulhairun, A. K. And Amiri, I. S., 2017. Structural, optical and electrical evolution of Al and Ga co-doped ZnO/SiO₂/glass thin film: Role of laser power density. *RSC Advances*, 7(57), 35858–35868.
- Sen, U. K., and Mitra, S., 2014. Synthesis of molybdenum oxides and their electrochemical properties against li. *Energy Procedia*, 54, 740–747.
- Senthil, K., Mangalaraj, D. and Narayandass, S. K., 2001. Structural and optical properties of CdS thin ® lms. *Applied Surface Science*, 170, 1999–2002.
- Shaban, M., Mustafa, M., & El Sayed, A. M., 2016. Structural, optical, and photocatalytic properties of the spray deposited nanoporous CdS thin films; influence of copper doping, annealing, and deposition parameters. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 56, 329–343.
- Shanmugam, M., Bansal, T., Durcan, C. A., & Yu, B., 2012. Molybdenum disulphide/titanium dioxide nanocomposite-poly 3-hexylthiophene bulk heterojunction solar cell. *Applied Physics Letters*, 100(15), 153901.
- Shanmugam, M., Durcan, C. A., & Yu, B., 2012. Layered semiconductor molybdenum disulfide nanomembrane based Schottky-barrier solar cells. *Nanoscale*, 4(23), 7399–7405.
- Shi, Y., Zhou, W., Lu, A. Y., Fang, W., Lee, Y. H., Hsu, A. L., Kim, S. M., Kim, K. K., Yang, H. Y., Li, L. J., Idrobo, J. C., & Kong, J., 2012. Van der Waals epitaxy of MoS₂ layers using graphene as growth templates. *Nano Letters*, 12(6), 2784–2791.
- Shirodkar, S. N., & Waghmare, U. V., 2014. Emergence of ferroelectricity at a metal-semiconductor transition in a 1T monolayer of MoS₂. *Physical Review Letters*, 112(15), 157601.
- Shkir, M., Ashraf, I. M., AlFaify, S., El-Toni, A. M., Ahmed, M., & Khan, A., 2019. A noticeable effect of Pr doping on key optoelectrical properties of CdS thin films prepared using spray pyrolysis technique for high-performance photodetector applications. *Ceramics International*. 5,32-39.
- Shkir, M., Ashraf, I. M., Chandekar, K. V., Yahia, I. S., Khan, A., Algarni, H., & AlFaify, S., 2020. A significant enhancement in visible-light photodetection properties of chemical spray pyrolysis fabricated CdS thin films by novel Eu doping concentrations. *Sensors and Actuators A: Physical*, 301, 111749.

- Singh, A. K., Kumar, P., Late, D. J., Kumar, A., Patel, S., & Singh, J., 2018. 2D layered transition metal dichalcogenides (MoS₂): Synthesis, applications and theoretical aspects. In *Applied Materials Today*.13, 242–270.
- Slonopas, A., Ryan, H., Foley, B., Sun, Z., Sun, K., Globus, T., & Norris, P., 2016. Growth mechanisms and their effects on the opto-electrical properties of CdS thin films prepared by chemical bath deposition. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 52, 24–31.
- Smirnov, M., Kuznetsov, V., Roginskii, E., Cornette, J., Dutreilh-Colas, M., Noguera, O., Masson, O., & Thomas, P., 2018. Raman spectra and structural peculiarities of TeO₂-TeO₃ mixed oxides. *Journal of Physics Condensed Matter*, 30(47).
- Soon, J. M. and Loh, K. P., 2007. Electrochemical double-layer capacitance of MoS₂ nanowall films. *Electrochemical and Solid-State Letters*, 10(11), 250–254.
- Splendiani, A., Sun, L., Zhang, Y., Li, T., Kim, J., Chim, C. Y., Galli, G., & Wang, F., 2010. Emerging photoluminescence in monolayer MoS₂. *Nano Letters*, 10(4), 1271–1275.
- Sundaram, R. S., Engel, M., Lombardo, A., Krupke, R., Ferrari, A. C., Avouris, P., & Steiner, M., 2013. Electroluminescence in single layer MoS₂. *Nano Letters*, 13(4), 1416–1421.
- Shockley, W. And Queisser H.J. 1961. Detailed balance limit of efficiency of p-n junction solar cells. *Journal of Applied Physics*, Vol 32, 510-519.
- Somani, P.R., Somani, S.P., Umeno, M. 2006. Planer nanographenes from camphor by CVD. *Chemical Physics Letters*, 430, 56.
- Splendiani, A., Sun, L., Zhang, Y., Li, T., Kim, J., Chim, C-Y., Galli, G., Wang, F. 2010. Emerging photoluminescence in monolayer MoS₂. *Nano Lett.* 10,1271– 1275.
- Shimada, T. Ouchi, F.S., Parkinson, B.A. 1994. Work function and photothreshold of layered metal dichalcogenides. *Jpn. J. Appl. Phys.* 33, 2696.
- Soldano, C., Mahmood, A., Dujardin, E. 2010. Production, properties and potetial of graphene. *Carbon* 48, 2127-2150.
- Toma, O., Ion, L., Iftimie, S., Radu, A., & Antohe, S., 2016. Structural, morphological and optical properties of rf - Sputtered CdS thin films. *Materials and Design*, 100, 198–203.
- Towle, L. C., Oberbeck, V., Brown, B. E., & Stajdohar, R. E., 1966. Molybdenum diselenide: Rhombohedral high pressure-high temperature polymorph. *Science*, 154(3751), 895–896.
- Tsai, C. T., Chuu, D. S., Chen, G. L., & Yang, S. L., 1996. Studies of grain size effects in rf sputtered CdS thin films. *Journal of Applied Physics*, 79(12), 9105–9109.
- Tsai, M. L., Su, S. H., Chang, J. K., Tsai, D. S., Chen, C. H., Wu, C. I., Li, L. J., Chen, L. J., He, J. H., 2014. Monolayer MoS₂ heterojunction solar cells. *ACS Nano*, 8(8), 8317–8322.
- Ulaganathan, R. K., Yadav, K., Sankar, R., Chou, F. C., Chen, Y. T., 2019. Hybrid InSe Nanosheets and MoS₂ Quantum Dots for High-Performance Broadband Photodetectors and Photovoltaic Cells. *Advanced Materials Interfaces*, 6(2), 1801336.
- Wang, L., Zhang, G. H. and Chou, K. C., 2016. Study on oxidation mechanism and kinetics of MoO₂ to MoO₃ in air atmosphere. *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, 57, 115–124.
- Wang, Y., Zhang, L., Xiao, H., Su, C., Lv, S., Zhang, F., Sui, Q., Jia, L. and Jiang, M., 2020. Coverage-dependent differential reflectance spectra of MoS₂ atomic films synthesized by CVD using a large-diameter quartz tube. *Solid State Communications*, 318, 113976.
- Wu, S., Huang, C., Aivazian, G., Ross, J. S., Cobden, D. H., & Xu, X., 2013. Vapor-solid growth of high optical quality MoS₂ monolayers with near-unity valley polarization. *ACS Nano*, 7(3), 2768–2772.
- Wypych, F. and Schöllhorn, R., 1992. 1T-MoS₂, a new metallic modification of molybdenum disulfide. *Journal of the Chemical Society, Chemical Communications*, 19, 1386–1388.
- Wu, Z., Ren, W., Gao, L., Liu, B., Jiang, C., Cheng, H. 2009. Synthesis of high-quality graphene with a pre-determined number of layers. *Carbon*, 47, 493

- Winterlin, J. and Bocquet, M.-L. 2009. Graphene on metal surfaces. *Surface Sci.*, 603, 1841.
- Jiao, L., Zhang, L., Wang, X., Diankov, G., Dai, H. 2009. Narrow graphene nanoribbons from carbon nanotubes. *Nature*, 458, 877.
- Wu, J., Becerril, H.A., Bao, Z., Liu, Z., Chen, Y., Peumans, P. 2008. Organic solar cells with solution-processed graphene transparent electrodes. *Appl. Phys. Lett.*, 92, 263302.
- Wang, X., Zhi L., Mullen, K. 2008. Transparent, conductive graphene electrodes for dye-sensitized solar cells. *Nanoletters*, 8, 323.
- Wang, Q.H., Kalantar-zadeh K., Kis, A., Coleman, J.N., Strano, M. 2012 Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides, *Nature Nanotechnology*, 193.
- Wilson, J. A. and Yoffe, A. D. 1969. Transition metal dichalcogenides: discussion and interpretation of observed optical, electrical and structural properties. *Adv. Phys.* 18, 193–335.
- Wu, Z., Ren, W., Gao, L., Liu, B., Jiang, C., Cheng, H. 2009. Synthesis of high-quality graphene with a pre-determined number of layers. *Carbon*, 47, 493.
- Winterlin, J. and Bocquet, M.-L. 2009. Graphene on metal surfaces. *Surface Sci.*, 603, 1841
- Jiao, L., Zhang, L., Wang, X., Diankov, G., Dai, H. 2009. Narrow graphene nanoribbons from carbon nanotubes. *Nature*, 458, 877.
- Wu, J., Becerril, H.A., Bao, Z., Liu, Z., Chen, Y., Peumans, P. 2008. Organic solar cells with solution-processed graphene transparent electrodes. *Appl. Phys. Lett.*, 92, 263302.
- Wang, X., Zhi L., Mullen, K. 2008. Transparent, conductive graphene electrodes for dye-sensitized solar cells. *Nanoletters*, 8, 323.
- Wang, Q.H., Kalantar-zadeh K., Kis, A., Coleman, J.N., Strano, M. 2012 Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides, *Nature Nanotechnology*, 193.
- Wilson, J. A. and Yoffe, A. D. 1969. Transition metal dichalcogenides: discussion and interpretation of observed optical, electrical and structural properties. *Adv. Phys.* 18, 193–335.
- Xu, S., Li, D., Wu, P. 2015. One-pot, facile, and versatile synthesis of monolayer MoS₂/WS₂ quantum dots as bioimaging probes and efficient electrocatalysts for hydrogen evolution reaction, *Adv. Funct. Mater.* 25, 1127–1136.
- Xu, X., Hu, L., Gao, N. 2015. Controlled growth from ZnS nanoparticles to ZnS-CdS nanoparticle hybrids with enhanced photoactivity, *Adv. Funct. Mater.* 25, 445–454.
- Viculis, L.M., Mack, J.J., Kaner, R.B. 2003. A chemical route to carbon nanoscrolls. *Science*, 299, 1361.
- Vázquez de parga, A.L., Calleja, F., Borca, B., Passeggi Jr., M.C.G., Hinarejos, J.J., Guinea, F., Miranda, R. 2008. Periodically rippled graphene: growth and spatially resolved electronic structure. *Phys. Rev. Lett.*, 100, 056807.
- Yin, Z., Lih, H., Lih, H., Jiang, L., Shi, Y., Sun, Y., Lu, G. Zhang, Q., Chen, X., Zhang H. 2012. Single-layer MoS₂ phototransistors. *ACS Nano* 6, 74–80.
- Voselov, K.S. 2008. Graphene based liquid crystal device. *Nano. Lett.* 8, 1704-1708
- Yu, Y., Li, C., Liu, Y., Su, L., Zhang, Y., & Cao, L., 2013. Controlled scalable synthesis of uniform, high-quality monolayer and few-layer MoS₂ films. *Scientific Reports*, 3(1), 1–6.
- Ye, M. 2018. Synthesis, Characterization, And Application Of 2d Transition Metal Dichalcogenides, *Doktora Tesis*, In Physics Michigan Technological University.
- Zargouni, S., Whibi, S. El, Tessarolo, E., Rigon, M., Martucci, A., & Ezzaouia, H., 2020. Structural properties and defect related luminescence of Yb-doped NiO sol-gel thin films. *Superlattices and Microstructures*, 106361.

- Zelaya-Angel, O., Alvarado-Gil, J. J., Lozada-Morales, R., Vargas, H., & Ferreira Da Silva, A., 1994. Band-gap shift in CdS semiconductor by photoacoustic spectroscopy: Evidence of a cubic to hexagonal lattice transition. *Applied Physics Letters*, 64(3), 291–293.
- Zeng, Z., Yin, Z., Huang, X., Li, H., He, Q., Lu, G., Boey, F., & Zhang, H., 2011. Single-Layer Semiconducting Nanosheets: High-Yield Preparation and Device Fabrication. *Angewandte Chemie*, 123(47), 11289–11293.
- Zhan, Y., Liu, Z., Najmaei, S., Ajayan, P. M. and Lou, J., 2012. Large-area vapor-phase growth and characterization of MoS₂ atomic layers on a SiO₂ substrate. *Small*, 8(7), 966–971.
- Zhang, J., Ye, M., Bhandari, S., Muqri, A. K. M., Long, F., Bigham, S., Yap, Y. K. and Suh, J. Y., 2017. Enhanced second and third harmonic generations of vertical and planar spiral MoS₂ nanosheets. *Nanotechnology*, 28(29), 21–29.
- Zhang, Y., Zhuang, Y., Liu, L., Qiu, P., Su, L., Teng, X., Yu, W. 2020. The microstructure evolution during MoS₂ films growth and its influence on the MoS₂ optical-electrical properties in MoS₂/p-Si heterojunction solar cells. *Superlattices and Microstructures*, 137.
- Zhang, Y.B., Tan, Y.W., Stormer, H.L., Kim, P. 2005. Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene. *Nature* 438, 201–204.
- Zhou, Z., Lin, Y., Zhang, P., Ashalley, E., Shafa, M., Li, H., Wu, J. And Wang, Z., 2014. Hydrothermal fabrication of porous MoS₂ and its visible light photocatalytic properties. *Materials Letters*, 131, 122–124.
- Zhu, Z. Y., Cheng, Y. C. and Schwingenschlögl, U., 2011. Giant spin-orbit-induced spin splitting in two-dimensional transition-metal dichalcogenide semiconductors. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 84(15), 153402.
- Zhou, W., Yin, Z., Du, Y. 2013. Synthesis of few-layer MoS₂ nanosheet-coated TiO₂ nanobelt heterostructures for enhanced photocatalytic activities, *Small* 9, 140–147.
- Zhou, W., Liu, H., Wang, J. 2010. Ag₂O/TiO₂ nanobelts heterostructure with enhanced ultraviolet and visible photocatalytic activity, *ACS Appl. Mater. Interf.* 2, 2385–2392.
- Zhang, J., Yu, J., Zhang, Y. 2011. Visible light photocatalytic H₂ -production activity of CuS/ZnS porous nanosheets based on photoinduced interfacial charge transfer, *Nano Lett.* 11, 4774–4779.
- Zong, X., Yan, H., Wu, G. 2008. Enhancement of photocatalytic H₂ evolution on CdS by loading MoS₂ as cocatalyst under visible light irradiation, *J. Am. Chem. Soc.* 130, 7176–7177.
- Zhang, Y., Small, J. P., Pontius, W. V., Kim, P. 2005. Fabrication and electric-field-dependent transport measurements of mesoscopic graphite devices. *Appl. Phys. Lett.*, 86, 073104.
- Zeng, H., Dai, J., Yao, W., Xiao, D., Cui, X. 2012. Valley polarization in MoS₂ monolayers by optical pumping. *Nature Nanotech.* 7, 490–493.
- Zhou, W., Yin, Z., Du, Y. 2013. Synthesis of few-layer MoS₂ nanosheet-coated TiO₂ nanobelt heterostructures for enhanced photocatalytic activities, *Small*, 9, 140–147.
- Zhou, W., Liu, H. And Wang, J. 2010. Ag₂O/TiO₂ nanobelts heterostructure with enhanced ultraviolet and visible photocatalytic activity, *ACS Appl. Mater. Interf.* 2, 2385–2392.

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler
Adı Soyadı: N Arife EFE GÖRMEZ Doğum tarihi: 26.04.1990 Doğum Yeri: Tokat/Mekez Uyruğu: T.C. Adres: Cemalettin Mah. Çok Sular Sok. No:101 Tel: 05425800641 E-mail: arifefe_90@hotmail.
Eğitim
Lise: Atatürk Lisesi, 2008, TOKAT /MERKEZ Lisans: Kazım Karabekir Eğitim Fakültesi, Fizik, Atatürk Üniversitesi, 2012, ERZURUM Yüksek lisans: Nano Bilim ve Nano Mühendislik Anabilim Dalı, Nano Malzeme Bölümü, Atatürk Üniversitesi, 2015, ERZURUM Doktora: Nano Bilim ve Nano Mühendislik Anabilim Dalı, Nano Malzeme Bölümü, Atatürk Üniversitesi, 2020, ERZURUM
Yabancı Dil Bilgisi
İngilizce: Orta
Üye Olunan Mesleki Kuruluşlar
Tezden Üretilmiş Yayınlar
1. AE Görmez, MA Basyooni, SE Zaki, YR Eker, E Sönmez, M Yılmaz, Effect of in-/ex-situ annealing temperture on the optical, structural and gas sensing dynamics of CdS nanostructured thin films, Superlattices and Microstructures, 2020, 106536.