

Yüksek Verimli ve Uzun Dönem Kararlı Perovskit Güneş Hücrelerinin Üretimi için Arayüzeyin APMS Molekülleri ile Modifikasyonu

Yasemin TORLAK✉

Bitkisel ve Hayvansal Üretim Bölümü, Çal Meslek Yüksekokulu, Pamukkale Üniversitesi, Denizli, Türkiye

✉: yorlak@pau.edu.tr  [0000-0001-5964-2532](https://orcid.org/0000-0001-5964-2532)

Geliş (Received): 30.05.2025

Düzeltilme (Revision): 23.08.2025

Kabul (Accepted): 09.09.2025

ÖZ

Perovskit malzemesinin yüzey morfolojisi, yüksek nem hassasiyeti, yüksek verimli perovskit güneş hücreleri (PSC'ler) için kritik öneme sahiptir. Arayüzey tabakasının sınırları, hücre içine doğru meydana gelen iyon göçü ve film yüzeyindeki kusurlar, PSC'lerin verimliliğini ve kararlılığını olumsuz yönde etkileyen unsurlardır. Ayrıca bu filmlerin yüzeyinde ve tanecik sınırlarında bulunan kusurlar nedeniyle yük rekombinasyonu üzerinde de olumsuz bir etkiye sahiptir. Bu çalışmada, TiO₂ ve perovskit filminin kusurları pasifleştirmek için bir silan birleştirme maddesi olan küçük molekül olarak 3-aminopropiltrimetoksisilan (APMS) kullanıldığı hücrelerinin üretimi gerçekleştirilmiştir. Perovskit taneciklerinin kristallliği ve düzgünlüğünü iyileştirerek çözeltiyle işlenmiş düzlemsel heteroeklemlili güneş hücreleri için güç dönüşüm verimliliği, daha az histerezis ile %8,95'ten %9,77'ye çıkarıldı. Sonuç olarak APMS küçük moleküllerinin perovskit hücrelerin yüzey özelliklerini de iyileştirerek hücre performansını arttırdığı ve en önemli sorunlarından biri olan kararlılık probleminde çözüm sunma potansiyeli olduğu tespit edilmiştir.

Anahtar Kelimeler: Perovskit güneş hücreleri, Kararsızlık problemi, Arayüzey modifikasyonu, APMS, 3-aminopropiltrimetoksisilan

Modification of Interface with APMS Molecules for the Fabrication of Highly Efficient and Long-Term Stable Perovskite Solar Cells

ABSTRACT

The surface morphology of perovskite material is critical for high-efficiency perovskite solar cells (PSCs), due to its high sensitivity to humidity. The boundaries of the interface layer, ion migration into the cell, and defects on the film surface negatively affect the efficiency and stability of PSCs. Furthermore, defects on the surface and at the grain boundaries of these films also have a negative impact on charge recombination. In this study, the fabrication of cells using 3-aminopropyltrimethoxysilane (APMS), a silane coupling agent, as a small molecule to passivate defects in a TiO₂ and perovskite film was achieved. By improving the crystallinity and uniformity of perovskite grains, the power conversion efficiency for solution-treated planar heterojunction solar cells was increased from 8.95% to 9.77% with less hysteresis. In conclusion, it was determined that APMS small molecules improve the surface properties of perovskite cells, enhancing cell performance and offering a potential solution to one of their most significant problems: stability.

Keywords: Perovskite solar cells, Instability problem, Interface modification, APMS, 3-aminopropyltrimethoxysilane

GİRİŞ

Enerji tüketimi küresel olarak nüfusla birlikte giderek artmaktadır. Fosil yakıtlar gibi yenilenemeyen enerji kaynaklarının azalması, çevresel sorunlara neden olur ve bu da yenilenebilir enerjinin kullanımının ilerlemesine yol açar. Bu bağlamda, güneş enerjisi bol, temiz ve tükenmez olduğu için önemli bir yenilenebilir

enerji kaynağı olarak kabul edilir. Güneş hücresi, güneş enerjisini kullanarak elektrik üretebilen bir fotovoltaik cihazdır [1]. Son zamanlarda bilim insanları, uygun maliyetli ve çevre dostu yeni güneş pili malzemeleri aramaktadır. Şu ana kadar polikristalin silikon (mc-Si hücreleri) ve tek kristalin silikon güneş hücreleri (c-Si hücreleri) [2-3], CIGS güneş hücreleri [4], [5], CdTe tabanlı güneş hücreleri [6-7], kuantum nokta duyarlı

güneş hücreleri [8], organik fotovoltaikler [9] ve perovskit güneş hücreleri (PGH) [10] gibi farklı tipte güneş hücreleri bildirilmiştir. Genel olarak, PGH'nin fotovoltaik performansı, yüksek emilim katsayısı, ayarlanabilir bant aralığı [11], büyük taşıyıcı difüzyon uzunluğu [12], ambipolar taşıyıcı taşıma yeteneği [13] ve taşıyıcı hareketliliği [14] gibi içsel özelliklerine atfedilir. Özellikle, organik-inorganik hibrit-perovskit malzemeleri, verimli ve uygun maliyetli güneş hücreleri oluşturmak için uygun adaylardır. 2025 yılında Ulusal Yenilenebilir Enerji Laboratuvarı (NREL) tarafından sunulan sonuçlara göre PGH %27 verimliliklerine ulaşmıştır. Ayrıca, sıradan organik ve inorganik yarı iletkenlerle karşılaştırıldığında, organik-inorganik hibrit perovskitleri benzersiz optik ve elektriksel özellikler sergiler.

Perovskitler ile ilgili bir diğer önemli bulgu ise boyutundaki artışa bağlı olarak (2D-3D) yasak enerji aralığındaki azalmadır [15]. Bu durum perovskitleri güneş hücreleri uygulamalarında özellikle de dar enerji bant aralığına sahip çok tercih edilen bir malzeme olmasını sağlamıştır. Perovskit, kalsiyum titanattan oluşan bir kalsiyum titanyum oksit mineralidir. Adı aynı zamanda genel kimyasal formülü $A^{2+}B^{4+}(X^{2-})_3$ olan, perovskit yapısı olarak bilinen $CaTiO_3$ ile aynı tür kristal yapıya sahip bileşikler sınıfına da uygulanmaktadır [16-18]. Bu formül perovskitin stokiyometrik yapısını tanımlamak için kullanılan bir terimdir. Stokiyometrik yapıda, A tek değerlikli inorganik-organik katyonu, B iki değerlikli bir metal katyonunu ve X bir halojenür anyonunu temsil eder. A pozisyonunun organik veya metal katyonu olmasına bağlı olarak ABX_3 , organik-inorganik hibrit perovskit veya tamamen inorganik perovskit olarak kategorize edilebilir. Ayrıca, halojenler oksijen, azot ve karbon vb. ile değiştirilebilir. Örneğin, yük nötrlüğü için halojen yerine oksijen kullanıldığında, A ve B genellikle sırasıyla iki değerlikli ve dört değerlikli iyonlar olarak temsil edilir. Kübik perovskit yapısı, 12 katlı koordineli (küboktahedral) boşluklarda A yer katyonlarıyla 3 boyutlu bir ağ oluşturan köşe paylaşan BX_6 oktahedralardan oluşur ve yük nötrlüğünü sağlar [2-3]. İlk PGH denemesinde $CH_3NH_3PbX_3$ (X = Br, I) yapısındaki perovskit güneş hücresinde X yerine brom (X=Br) kullanıldığında %3,1, X yerine iyot (X=I) kullanıldığında %3,8 verimlilik değerine ulaşılmıştır [17].

Organik-inorganik halojenür PGH'ler, heyecan verici fotovoltaik performansları ve kolay cihaz üretim süreçleri nedeniyle en ilgi çekici güneş hücresi alanı olarak kabul edilmiştir [14;19-22]. Ancak, ticarileştirme için uzun vadeli kararlı ve yüksek verimli PGH'ler elde etmek hala büyük bir zorluktur [23-24]. Perovskit malzemelerin uzun taşıyıcı ömrü, yüksek emilim katsayısı ve ayarlanabilir bant aralığı [15] gibi birçok avantaj sağlayan özelliklere sahiptir [8]. Verimli ve kararlı PGH'ler elde etmek için yüksek kaliteli filmler gereklidir. Perovskit ışık emici katmanda, dengesiz taşıyıcı ve ciddi taşıyıcı rekombinasyonu gibi cihaz performansının daha da iyileştirilmesini engelleyen bazı kusurlar vardır [25]. Perovskit malzemeler oksijen, nem

ve ultraviyole (UV) ışığa maruz kaldığında kolayca bozulan oldukça hassas malzemelerdir [26-32]. Ek olarak, perovskit filmler çözücü işleme yöntemi ile hazırlanır ve bu da film yüzeyinde ve tane sınırlarında kusurlar oluşturmaya eğilimlidir. Bu kusurlar perovskitin bozulmasını daha da hızlandırır ve cihaz performansı üzerinde ciddi olumsuz bir etki yaratmak için radyasyon dışı yük rekombinasyon merkezleri olarak hizmet eder. Bu nedenle, yüksek performans ve kararlı PGH'ler elde etmek için etkili stratejiler geliştirmek oldukça takdir edilmektedir. Ayrıca, APMS pasifleştirme perovskit cihazının histerezisi azaltılır ve kararlılığı da iyileştirilir. Bu sonuçlar, APMS'nin yüksek performanslı kararlı PGH'ler için umut vadeden bir pasifleştirme malzemesi olduğunu gösterir. Bu basit strateji, yüksek performanslı PGH'lerin büyük ölçekli ticari gelişimini daha da teşvik edecektir [26-32].

Yarı iletken perovskit malzemeler, hibrit güneş hücrelerinde hem deliği hem de elektronu aynı anda taşımalarına olanak tanıyan ambipolar taşıma özellikleri sergiler [33]. Perovskit malzemelerin uzun yük taşıyıcı difüzyon uzunlukları ($CH_3NH_3PbI_{3-x}Cl_x$ 'te 1 μm ve $CH_3NH_3PbI_3$ 'te 100 nm) [14;33-34], düzlemsel heterojunksiyonlu (PHJ) perovskit güneş hücrelerinin kademeli gelişimini teşvik eder. Mezogözenekli metal oksit iskelelerine sızan perovskit malzemelerin aksine [20], PHJ yapısı çözelti işleme teknikleriyle uyumludur ve düşük sıcaklıktaki üretim süreçleri nedeniyle esnek cihaz uygulamasına olanak tanır [35]. PHJ perovskit güneş hücrelerinde karşılaşılan temel zorluklardan biri, film morfolojisinin nasıl optimize edileceğidir. PHJ mimarisinin sınırlı performansının, iğne deliği ve boşluk oluşumundan kaynaklanabileceği öne sürülmüştür [36]. Perovskit filminin yüzeyinde ve tane sınırlarında lokalize olan tuzak durumları, monomoleküler rekombinasyon modunu indükleyecektir [19;37]. Dahası, perovskitin eksik kaplanması, düşük dirençli alternatif yollarına ve güneş hücrelerinde ışık emiliminin kaybolmasına neden olur. Bu sorunu çözmek için, tane boyutunu artırmak ve boşlukları azaltmak için perovskit kristalinin kalitesini optimize ederek iki aşamalı iyodür biriktirme [38], iki kaynaklı termal buharlaştırma [39] ve buhar destekli çözelti işlemi [40] gibi birçok çaba sarf edilmiştir. Öte yandan, Huang ve diğerleri, tuzak durumlarının, film morfolojisi modifikasyonu ile cihaz verimliliğini artırmak için başka bir yön sağlayan perovskitlere fulleren döndürerek kaplanmasıyla pasifleştirilebileceğini bildirmiştir [41]. Son yıllarda perovskit çok popüler olmasına rağmen hala aşılması gereken bazı problemleri ve optimizasyonun yapılması gereken birçok parametre bulunmaktadır. Örneğin bahsedilen bu parametrelerden biri elektron transfer tabakasıdır (ETL) [42-43]. Hücre verimliliği için önemli bir rol oynayan ana konulardan biri olan bu tabaka hücre içerisinde ışığı soğuran perovskit katmanından elektronların ekstraksiyon verimliliğini artırılması ve boşluğu bloke etmek için perovskit katmanı ile elektron seçici bir temas oluşturması için kullanımı amaçlanmıştır. ETL'ler kullanılarak farklı ve teknolojik uygulama alanlarına yönelik üretim yöntemleriyle

verimliliğin artırılması için yüzey modifikasyonu alanında üzerine birçok çalışma yapılmaktadır. Elektron taşıma malzemeleri olarak örneğin TiO_2 (titanium dioksit)[44], SnO_2 (kalay dioksit)[45-46], PCBM (fenil- C_{61} -bütiirik asit metil esteri)[47], PEDOT:PSS (Poli(3,4-etilendioksitiyofen) polistiren sülfonat) gibi farklı organik ve inorganik [48-49] malzemeler arasında TiO_2 , metal oksit malzeme [28] olarak en çok kullanılan ve tercih edilendir. Özellikle perovskit çalışmalarında karalı ve yüksek verimlilik sağlayan inorganik elektron transfer tabakasıdır [27-29]. Bu tabakanın minimum iletim bandı $MAPbI_3$ (metilamonyum kurşun iyodür, perovskit güneş hücrelerinde [50-54] kullanılan ilk perovskit malzemelerden biri)'den biraz daha yüksektir ve UV ışınlarına karşı daha hassastır [43-45]. Maliyet etkinliği ve sağlam uzun vadeli stabilite açısından, delik taşıyıcı malzeme (HTM) olarak poli(3-hekziltiofen) (P3HT) umut vadeden bir HTM olarak dikkat çekmektedir [55]. Ayrıca, P3HT'nin yüksek hareketlilik göstermesi boşluk taşıma performansını belirlemede önemli faktörlerden biridir [56-62]. Ancak, P3HT benimsendiğinde, perovskit dolgusunun P3HT'nin alkil yan zincirleriyle temas etmesi gerekir, bu da perovskit ve P3HT arasında zayıf bir arayüze yol açar. Bu durum rekombinasyona neden olur ve PGH'lerin performansını düşürür [63-64]. Bu problemi çözmek için, birkaç araştırmacı perovskit ile P3HT arasındaki arayüze moleküller yerleştirmiştir. Ayrıca, farklı küçük moleküllerle P3HT'yi katkılamak da verimliliği artırmak için tercih edilen bir stratejidir [65-68].

Bu çalışmada, ucuz bir silan birleştirme maddesi ve küçük molekül olan APMS perovskit yüzey pasivasyonu için seçilmiştir. APMS'nin TiO_2 /perovskit/P3HT tek basamak konseptinde çok fazla çalışma bulunmamaktadır. APMS hidrofobik bir karbon zinciri içerdiğinden, suyun perovskit içerisine girmesini önleyebilir [37;69;70]. APMS'nin eklenmesi kristallliği artırır ve perovskit filmin tane boyutunu büyütür. Elde edilen filmlerin optik ve morfolojik analizleri yapılmıştır. Sonuç olarak, PGH yapısında histerezi azaldığı için PCE %8.95'ten %9.77'ye yükselmiştir. Dahası, verimli ve daha kararlı PGH'lere ulaşmak için büyük önem taşıyan basit ve etkili bir strateji sunulmaktadır.

MATERYAL ve YÖNTEM

2.1. Materyal

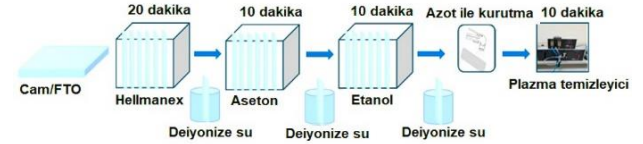
APMS, %99,5 Aladdin'den satın alınmıştır. TiO_2 Alfa Aesar'dan satın alınmıştır (%15 H_2O 'da). Flor katkı kalay oksit (FTO) ile kaplanmış ve $9-15 \Omega \text{ sq}^{-1}$ tabaka direncine sahip cam alttaşlar Şişecam, Türkiye firmasından temin edilmiştir. Metilamonyum iyodür (CH_3NH_3I , 1.54 M), dimetil sülfoksit (DMSO, %99,9), izopropil alkol (IPA) Merck'ten temin edilmiştir γ -bütirolakton (GBL, ≥ 99), N,N-dimetilformamid (DMF, %99,8), kurşun iyodür (PbI_2 , 1.3 M, %99), toluen, klorobenzen, aseton, %100 titanyum (IV) izopropoksit, asetil aseton, mutlak etanol (EtOH) Sigma-Aldrich'ten satın alınmıştır. P3HT ve Ag Lumtec firmasından (Luminescence Technology Corp.) temin edilmiştir. Tüm

kimyasallar ve malzemeler herhangi bir saflaştırma prosedürüne tabi tutulmadan kullanılmıştır. Hellmanex II'nin ticari sulu çözeltileri sırasıyla Hellma ve Heraeus Group'tan satın alınmıştır. Hellma firmasından temin edilen Hellmanex® III temizleme solüsyonu, kullanımdan önce deiyonize (DI) su ile 1:50 oranında seyreltilmiştir.

2.2.Yöntem

2.2.1 Perovskit güneş hücresi üretimi

Hücre üretiminde alttaş temizliği önemli bir role sahiptir. Bu çalışmada, alttaş olarak $25\text{mm} \times 25\text{mm}$ boyutlarında $\sim 8 \Omega/\text{sq}$ dirence sahip FTO alttaşlar kullanılmadan önce temizleme işlemi yapılmıştır. Temizleme işleminde alttaşa zarar vermemek ve kalıntı bırakmamak için öncelikle %2 Hellmanex (deterjan) ile sonikasyon işlemi 20 dakika yapılmıştır. Ardından saf su ile durulama işlemi yapılmıştır. Daha sonra sırasıyla etanol ve aseton içerisinde 15'ar dakika ultrasonikasyonda işlem yapılmıştır. Yıkama işlemi sonrası saf su ile durularak azot ile kurutma işlemi yapılmıştır. Kalıntıların tamamen temizlenmesi için 15 dakika boyunca plazma temizleyici cihazı kullanılarak UV ozon uygulanmıştır. Tüm temizlik aşamaları Şekil 1'de gösterilmiştir. Temizlenen alttaşlar elektron taşıma katmanı için hazır halde inert ortamda bekletilmiştir.



Şekil 1. Kaplama işleminde kullanılan alttaşların temizleme aşamaları

Daha sonra TiO_2 solüsyonu 1:5 oranında su ile karıştırılmıştır, ardından FTO alt tabakasına 3000 rpm'de 30 saniye boyunca spin-kaplama uygulanmıştır ve 150°C 'de 30 dakika boyunca tavlama yapılmıştır. APMS (0,2 mg/mL), 10 saniye boyunca 1000 rpm ve 30 saniye boyunca 5000 rpm'lik iki aşamalı bir prosedürle TiO_2 üzerinde döndürülerek kaplandı ve hemen 100°C 'de 45 dakika tavlama yapılmıştır.

Perovskit çözeltisini hazırlamak için, PbI_2 ve CH_3NH_3I , 2,5 mL γ -bütirolaktonda çözülmüştür ve 24 saat boyunca 50°C 'de manyetik karıştırıcı ile karıştırılmıştır. Çözelti, kaplamadan önce $0,45 \mu\text{m}$ PTFE ile filtrelenmiştir. Perovskit çözeltisi, 40 saniye boyunca 5000 rpm'de biriktirilmiştir. Toluene (antiçözücü, $80 \mu\text{L}$), son 10 saniyede döndürülerek kaplama sırasında döndürülen alt tabakanın üzerine damlatılmıştır. Filmler 20 dakika boyunca 100°C 'de tavlama yapılmıştır. Daha sonra, ETL tabakasına hazırlık olarak P3HT çözeltisi 20mg mL^{-1} olarak klorobenzen içinde çözülmüştür. Perovskit tabakasının üstüne 1500 rpm'de 17 saniye, 2000 rpm'de 2 saniye ve 4000 rpm'de 2 saniye döndürülerek kaplanmıştır ve ardından 90°C 'de 1 dakika

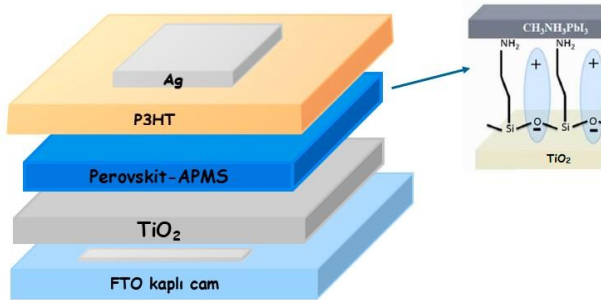
tavlama yapılmıştır. Son olarak, fiziksel buhar biriktirme sistemi kullanılarak 100 nm gümüş (Ag) elektrot buharlaştırılmıştır. Cihazın etkin aktif alanını ($0,023 \text{ cm}^2$) tanımlamak için bir maske aracılığıyla termal olarak biriktirilmiştir [37;71].

2.3. Karakterizasyon

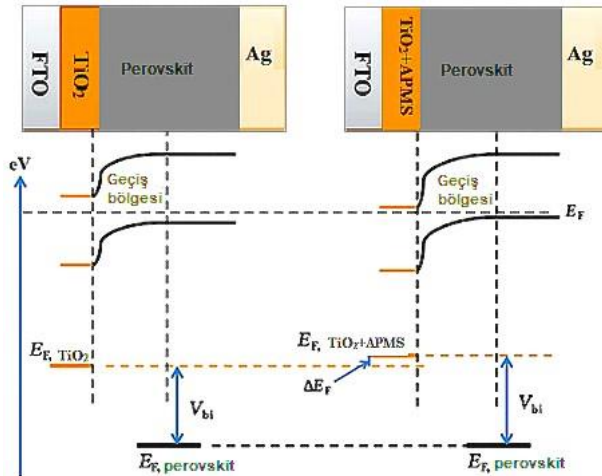
Filmlerin yüzey morfolojisi taramalı elektron mikroskobu (SEM, Almanya ZEISS EV0MA15) ile test edilmiştir. PGH'lerin akım-voltaj (I-V), kararlılık ölçümleri kapalı azot ortamında ATLAS (AM 1.5G filtre, 100 mW/cm^2) güneş simülatörü altında bir Keithley 2400 kaynak ölçer kullanılarak karakterize edilmiştir. Güneş hücrelerinin fotoaktif alanı bir maske ile $0,023 \text{ cm}^2$ olarak tanımlanmıştır. PGH'lerin kararlılık ölçümleri için tüm güneş hücreleri kapalı azot ortamında saklanmıştır.

Şekil 2(a)'da perovskit filminin hazırlanma süreci gösterilmektedir. Perovskit film tek adımlı bir döndürerek kaplama yöntemi ile hazırlanmıştır. Perovskit çözeltisine APMS ($0,2 \text{ mg/mL}$) eklenmiştir. İlk basamak olarak, TiO_2 substrat üzerine döndürerek kaplama yöntemiyle kaplanmıştır, ardından hızla klorobenzen (CB) antisolvent çözeltisi damlatılmıştır ve ardından 100°C 'de 45 dakika tavlammıştır.

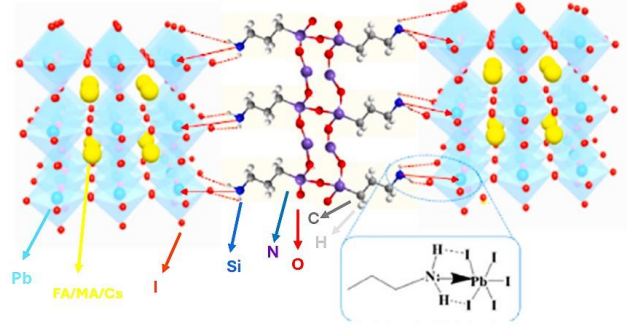
(a)



(b)



(c)



Şekil 2. APMS modifiyeli TiO_2 ETL kullanan PGH'nin (a) şematik gösterimi (b) enerji diyagramı (c) APMS ve perovskit arasındaki reaksiyon mekanizma modelinin gösterimi [22]

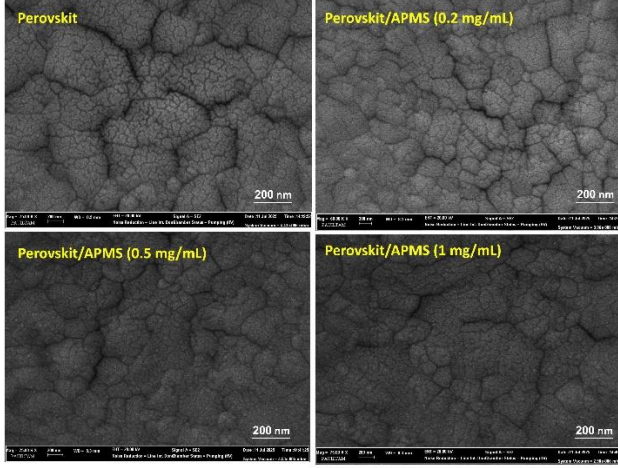
Yapılan PGH'nin içeriğinde kullanılan materyallerinin seçiminde enerji seviyeleri dikkate alınmıştır. Bu enerji seviyelerinin şematik gösterimi Şekil 2(b)'de verilmiştir. APMS bileşiği ile pasifleştirmenin yapılması perovskit kusurlarının mekanizmasını analiz etmemiz için fiziksel bir model oluşturmuştur [37;72]. Ek olarak, perovskit parçacıklarının yüzeyinde, $-\text{NH}_2$ kuyruğu bir alan boşluğunu işgal ettiği söylenebilir (Şekil 2(c)) [37;74-75]. Buna bağlı olarak, uygun bir hidrofobik karbon zincirinin perovskiti nem erozyonundan koruyacağı ve yüzey üzerinde oluşabilecek kusurları pasifleştirmede fayda sağlayacağı yorumu yapılabilir. Önceki literatür çalışmaları amino fonksiyonel grupları içeren Lewis bazlarının perovskit kusurlarını pasifleştirebileceğini bildirmiştir. Buna göre elde edilen sonuçlar literatürle uyumludur [37].

3. Bulgular ve Tartışma

Perovskit film üzerindeki APMS'nin mikro yapı değişimlerini incelemek amacıyla, Şekil 3'te gösterildiği gibi perovskit filminin yüzey morfolojisini gözlemlemek için SEM kullanılmıştır. Mükemmel ışık emilimi ve yük taşıma malzemesi olan APMS'nin küçük moleküllü, sıra dışı optik ve elektriksel özelliklere sahiptir ve kendisini fotovoltaiik ve yüksek yoğunluklu optik veri depolama aygıtları ve nano-teknolojik uygulamalar için potansiyel malzemeler haline getirmiştir [22;61]. APMS pasivasyonuna sahip perovskit film Şekil 3'te gösterilmiştir. Perovskit filmde bulunan boşluklar ve iğne delikleri APMS tarafından sızdırılmıştır ve film yüzeyi APMS çözeltisi ile kaplanmıştır. APMS pasivasyonu ile ve olmadan perovskit filmlerin morfolojisini incelemek için üstten görünüm SEM görüntüleri gerçekleştirilmiştir [37;75].

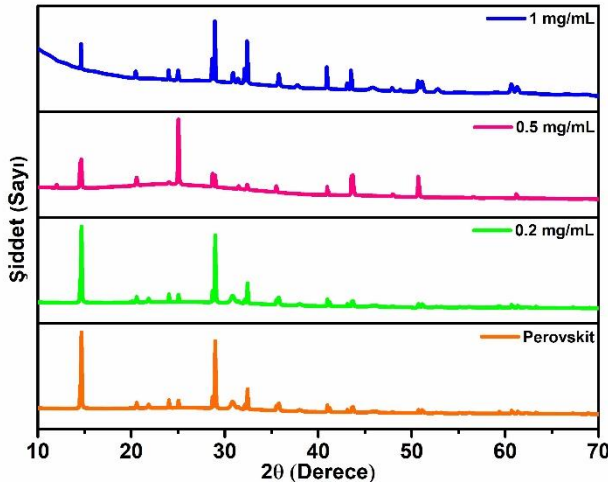
Şekil 3'te gösterildiği gibi, farklı konsantrasyonlara sahip APMS, referansla karşılaştırıldığında yüzey morfolojisinde belirgin bir değişiklik olmadan perovskit filme belirgin bir şekilde sızmıştır. Konsantrasyon artırıldığında, küçük molekül

perovskit yüzeyinde kümeler halinde birikmiştir ve bu da perovskit güneş hücrelerinin yük performansı üzerinde olumsuz bir etkiye sahiptir. SEM görüntüsü (Şekil 3), 0,2 mg ml⁻¹ APMS'nin herhangi bir molekül agregasyonu olmadan kontrastlı perovskit filme sızdığını göstermektedir.



Şekil 3. Kontrol (perovskit) ve 0.2 mg/mL, 0.5 mg/mL ve 1 mg/mL APMS modifiyeli (perovskit-APMS) perovskit filmin SEM görüntüleri

X-ışını difraktometresi (XRD) tekniği perovskit filminin kristalizasyonu üzerinde APMS'nin etkisini değerlendirmek için kullanılmıştır. Şekil 4'te görüldüğü gibi X-ışını kırınım desenleri ile APMS katkılı MAPbI₃ ince filmlerinin kristalinitesi üzerindeki etkileri araştırılmıştır. MAPbI₃ ortorombik kafesin 14,2°, 28,6°, 32,1° ve 40,7°de gözlenen kırınım tepeleri sırasıyla (110), (220), (310) ve (224) kristal düzlemlerine karşılık gelmektedir [23]. Bu piklerin kübik fazı doğrulayan standart veri dosyasıyla (PDF kart no: 54-0752) tutarlı olduğu bilinmektedir. Elde edilen XRD sonuçları literatür ile uyum içerisindedir [76]. Burada görülen perovskit filmleri, beklenen tetragonal uzay grubunda kristalleşmiş saf fazdır. Perovskit yapısının 14,2°de daha dar ve şiddetli pik vermesi daha büyük kristal boyutlarına ve yüksek kristaliniteye sahip olduğunu göstermektedir.

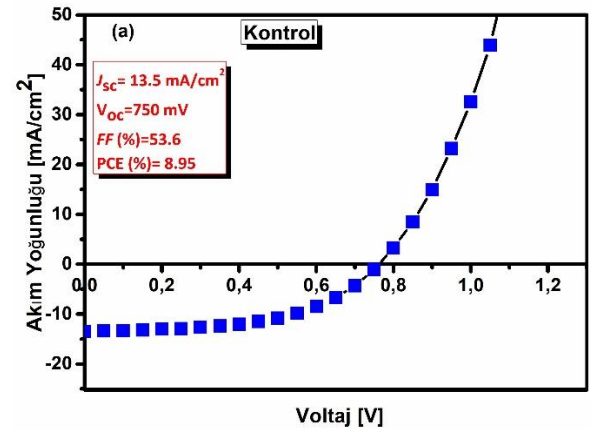


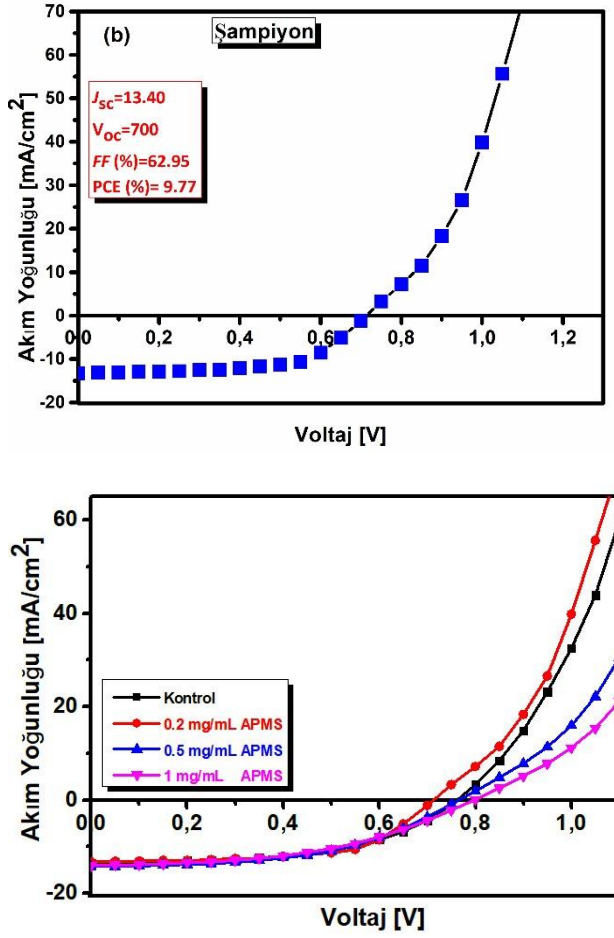
Şekil 4. Kontrol perovskit filmin ve APMS ile modifiye edilmiş perovskit filmin XRD desenleri

14,2° ve 28,6°de (0.5 mg/mL'de 26,1°) gözlenen kırınım tepeleri tetragonal perovskit yapısının oluştuğunu göstermektedir. 0.5 mg/mL'de ve 1 mg/mL'de farklı kırınım tepelerini varlığı yapının tamamen perovskite dönüşmediğini, etkileşime girmemiş PbI₂ fazı bulunduğunu göstermektedir. 0.2 mg/mL'de ise PbI₂ tamamen perovskite dönüşmüştür ve etkileşimin diğer oranlara göre daha iyi olduğu yorumu yapılabilir. Bu sonuçlar değerlendirildiğinde, perovskit ile APMS'nin etkileşimini doğrulanarak yüzeyin pasivasyonun gerçekleştiği söylenebilir. Bu etkileşim ve pasivasyon sayesinde cihazın ömrünün ve taşıyıcı difüzyon uzunluğunun artabileceği anlamına gelir. Bu da perovskit güneş hücrelerinin cihaz performansı için büyük bir fayda sağlamaktadır.

3.2. Fotovoltaik Performansının Değerlendirilmesi

APMS'nin cihaz performansı üzerindeki pasivasyon etkisi, APMS pasivasyonu olan ve olmayan PGH'lerinin J-V'si karşılaştırılarak incelenmiş ve Şekil 5'te gösterilmiştir. PGH performans parametreleri Tablo 1'de özetlenmiştir. Modifiye edilmiş cihazlarda cihaz performansında belirgin bir iyileşme gözlemlenmiştir. Perovskit taneleri tekdüze ve bütünlüktür, bu da elektron ve boşluk taşınımını teşvik eder. APMS modifiye perovskit ile hazırlanan cihazların daha yüksek V_{oc} (açık devre gerilimi), J_{sc} (kısa devre akımı) ve FF (dolum faktörü)'ye sahip olması PGH'lerin daha iyi arayüz temasına sahip olduğunu göstermektedir. APMS ilavesiyle PGH'lerin fotovoltaik performansı iyileştirilmiştir. Bunun nedeni, uygun APMS'nin perovskit filmin kristalliğini artırabilmesi ve yüzey tuzak durumunu azaltabilmesidir.





Şekil 5. Kontrol ve 0,2 mg/mL APMS ile modifiye edilen PGH'nin AM 1,5G foton akısı altında dalga boylarının bir fonksiyonu olarak elde edilen akım yoğunluğu-voltaj eğrileri

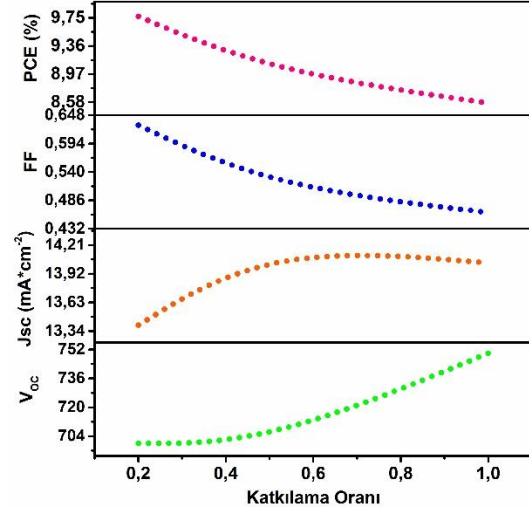
Optimum konsantrasyon ve kontrol PGH Şekil 5'te gösterildiği gibidir. 0,2 mg/mL APMS ile modifiye edilen PGH'nin maksimum güç dönüşüm verimliliği %9,77, akımı 13,4 mAcm^{-2} , V_{oc} 750 mV ve dolun faktörü değeri 0,629 ile en iyi performansla sahip olduğu ölçülmüştür. Buna karşılık, kontrol PGH maksimum güç dönüşüm verimliliği 8,950 akımı 13,4 mAcm^{-2} , V_{oc} 700 mV ve dolun faktörü değeri 0,536 ile %8,95 olarak ölçülmüştür. APMS konsantrasyonunun daha da artmasıyla perovskit cihazların dolun faktörü ve PCE(%) değerlerinde azalma olduğu söylenilebilir. Elde edilen sonuçlar Tablo 1'de gösterilmiştir. Çok fazla APMS fotovoltaj deliklerin perovskit katmanından geçmesini engelleyerek dolun faktörü değerinin azalmasına yol açtığı sonucuna ulaşılabilir.

Tablo 1. APMS olmadan ve APMS ile modifiye edilen AM 1.5 güneş simülatörü aydınlatması altında elde edilen PGH parametreleri

Cihaz	V_{oc} (mV)	J_{sc} ($\text{mA} \cdot \text{cm}^{-2}$)	FF	PCE (%)
Kontrol	750	13,50	0,536	8,950
0.2 mg/mL	700	13,40	0,629	9,770

0.5 mg/mL	700	14,21	0.512	9,010
1 mg/mL	750	14,03	0.463	8.570

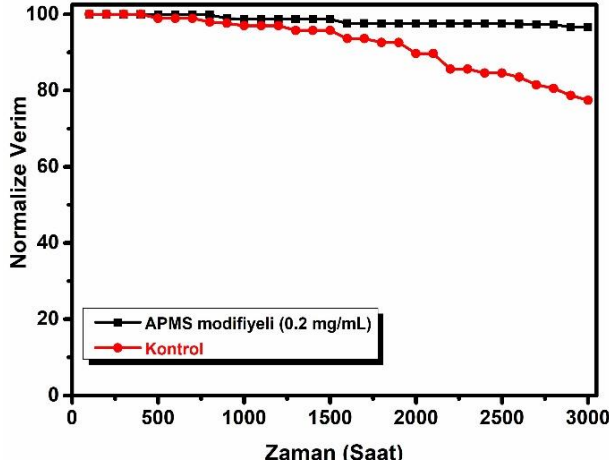
Hazırlanan perovskit hüresinin 0,2 mg/mL, 0,5 mg/mL ve 1 mg/mL katkılama oranlarındaki akım-voltaj grafiklerinden fotovoltaj parametreleri belirlenmiştir ve Şekil 6'da gösterilmiştir.



Şekil 6. Perovskit güneş hüresinin fotovoltaj parametrelerinin 0,2 mg/mL, 0,5 mg/mL ve 1 mg/mL katkılama oranlarındaki değişimi

Kusur pasivasyonu, yük rekombinasyonunu ve daha uzun taşıyıcı difüzyon uzunluğunu etkili bir şekilde bastırmaktadır, bu da gelişmiş hücre performansına, özellikle J_{sc} ve FF değerlerinin iyileşmesine katkıda bulunmaktadır. Kaçak akımı azaltmak için perovskit filmdeki boşluklara APMS moleküllerinin sızması FF ve V_{oc} değerlerinin iyileşmesine katkıda bulunmaktadır. APMS'nin yüksek konsantrasyonda kümeler halinde toplanması, perovskit tabakasından P3HT tabakasına elektron transferini engelleyerek cihaz performansının düşmesine neden olmaktadır.

Perovskit hücrelerin ticarileşmesinin önündeki engellerden biri uzun dönem kararlılık problemidir [77]. Şekil 7'de gösterildiği gibi bu çalışmada kullanılan APMS küçük molekülünün hücre kararlılığı üzerindeki etkisini incelemek amacıyla arayüzey içeren ve içermeyen hücrelerin operasyonel kararlılık testleri gerçekleştirilmiştir.



Şekil 7. Kontrol ve APMS ile modifiye edilmiş PGH'nin 3000 saat boyunca kapalı azot ortamında ölçülen PCE'si

Yaklaşık %40 nem içeren kapalı azot ortamında ve sürekli ışınım altında kapalı azot ortamında ATLAS (AM 1.5G filtre, 100 mW/cm²) güneş simülatörü altında bir Keithley 2400 kaynak ölçer kullanılarak gerçekleştirilen ölçüm sonuçları incelendiğinde APMS-modifiyeli arayüzey tabaka kullanılan hücrenin yaklaşık 3000 saat sonunda başlangıç verim değerinin yaklaşık olarak %90'ini koruduğu görülürken; APMS-modifiyeli arayüzey kullanılmayan hücrenin yaklaşık 3000 saat sonunda %76'nı koruduğu belirlenmiştir. Bu sonuçlar, APMS'nin perovskit kusurlarını etkili bir şekilde pasifleştirebileceğini ve cihaz performansını artırabileceğini başarıyla kanıtlamıştır.

4. SONUÇ

Sonuç olarak, bu çalışmada kusur pasivasyonu için silan grubu içeren APMS katkılama maddesi PGH üretiminde kullanılmıştır. Farklı katkılama oranlarında (0,2 mg/mL, 0,5 mg/mL ve 1 mg/mL) APMS ile modifiye edilen güneş hücreleri üretilmiş ve sonuçlar değerlendirilmiştir. Düşük maliyetli olmasının yanı sıra PGH'nin verimliliğini ve kararlılığını önemli ölçüde artırmıştır.

APMS küçük molekülü, arayüzey tabakasının tekli-kasyon perovskit tabaka yüzeyindeki ve tane sınırlarındaki rekombinasyon merkezlerini pasivize ederek rekombinasyon oranını düşürmüştür. Perovskit yüzeyinde ve bazı sınırlarında bir kusur pasivasyonu gerçekleştirmek için perovskit filmin boşluklarına sızarak taşıyıcı ömrünü arttırmış ve bu da cihaz verimliliğinin artmasına katkıda bulunmuştur. Böylece hücre verimini 700 mV V_{oc} ile %9,77'ye iyileştirmiştir. Ayrıca APMS ile modifiye edilen arayüzeyin hücre mimarisinde bariyer gibi davrandığı ve operasyonel şartlarda 3000 saat sonunda başlangıç veriminin %90'ını koruduğu buna bağlı olarak ta hücre kararlılığına da ciddi bir katkı sunduğu tespit edilmiştir. Bu nedenle, bu çalışma, silan birleştirme ajanlarının katkı maddesi olarak kullanılmasının verimlilik ve kararlı PGH'ler elde etmek için umut verici bir strateji olduğunu

kanıtlamaktadır. Sonuç olarak APMS küçük moleküllerinin perovskit hücrelerin yüzey özelliklerini de iyileştirerek hücre performansını arttırdığı ve en önemli sorunlarından biri olan kararlılık problemine çözüm sunma potansiyeli olduğu tespit edilmiştir. Ayrıca, APMS ile modifiye edilen perovskit cihazının histerezi azalttığı için kararlılığı da artırdığı tespit edilmiştir. Bu sonuçlar APMS'nin yüksek performanslı kararlı PGH'ler için umut verici bir pasivasyon malzemesi olduğunu göstermektedir. Bu çalışma, bir dizi optik ve optoelektronik cihaz için uygulanan perovskit filmlerin daha farklı optimizasyonlar için farklı konseptlerde üretim fikri oluşturabilir. Bu basit bir üretim ve strateji sayesinde, gelecekte yüksek performanslı PGH'lerin büyük ölçekli ticari gelişimini daha da teşvik edecektir.

KAYNAKÇA

- [1] N. Suresh Kumar and K. Chandra Babu Naidu, "A review on perovskite solar cells (PSCs), materials and applications," *J. Mater.*, vol. 7, no. 5, pp. 940–956, 2021, doi: 10.1016/j.jmat.2021.04.002.
- [2] C. Battaglia, A. Cuevas, and S. De Wolf, "High-efficiency crystalline silicon solar cells: Status and perspectives," *Energy Environ. Sci.*, vol. 9, no. 5, pp. 1552–1576, 2016, doi: 10.1039/c5ee03380b.
- [3] J. Yu, Y. Zheng, and J. Huang, "Towards high performance organic photovoltaic cells: A review of recent development in organic photovoltaics," *Polymers (Basel)*, vol. 6, no. 9, pp. 2473–2509, 2014, doi: 10.3390/polym6092473.
- [4] J. Ramanujam and U. P. Singh, "Copper indium gallium selenide based solar cells - A review," *Energy Environ. Sci.*, vol. 10, no. 6, pp. 1306–1319, 2017, doi: 10.1039/c7ee00826k.
- [5] D. A. R. Barkhouse, O. Gunawan, T. Gokmen, T. K. Todorov, and D. B. Mitzi, "Yield predictions for photovoltaic power plants: empirical validation, recent advances and remaining uncertainties," *Prog. Photovoltaics Res. Appl.*, vol. 20, no. 1, pp. 6–11, 2015, doi: 10.1002/pp.
- [6] B. M. Başol and B. Mccandless, "Brief review of cadmium telluride-based photovoltaic technologies," *SPIE Sel. 50 Years Sol. Energy Res.*, no. July, pp. 117–127, 2024, doi: 10.1117/1.JPE.4.040996.
- [7] J. Major, "Grain boundaries in CdTe thin film solar cells: a review." p. Semicond. Sci. Technol. 31 093001 (19pp), 2016.
- [8] G. H. Carey, A. L. Abdelhady, Z. Ning, S. M. Thon, O. M. Bakr, and E. H. Sargent, "Colloidal Quantum Dot Solar Cells," *Chem. Rev.*, vol. 115, no. 23, pp. 12732–12763, 2015, doi: 10.1021/acs.chemrev.5b00063.
- [9] Zhu, M., Miao, J., Hu, Z., Chen, Y., Liu, M., Murtaza, I., & Meng, H., "A novel A-D-A small molecule with 1,8-naphthalimide as a potential non-fullerene acceptor for solution processable solar cells," *Dye. Pigment.*, vol. 142, pp. 39–50, 2017, doi: 10.1016/j.dyepig.2017.03.015.
- [10] B. Saparov and D. B. Mitzi, "Organic-Inorganic Perovskites: Structural Versatility for Functional

- Materials Design,” *Chem. Rev.*, vol. 116, no. 7, pp. 4558–4596, 2016, doi: 10.1021/acs.chemrev.5b00715.
- [11] De Wolf, S., Holovsky, J., Moon, S. J., Löper, P., Niesen, B., Ledinsky, M., Ballif, C. “Organometallic halide perovskites: Sharp optical absorption edge and its relation to photovoltaic performance,” *J. Phys. Chem. Lett.*, vol. 5, no. 6, pp. 1035–1039, 2014, doi: 10.1021/jz500279b.
- [12] Q. Dong, “Electron-hole diffusion lengths > 175 μ m in solution-grown CH₃NH₃PbI₃ single crystals,” *Science (80-.)*, vol. 347, no. 6225, pp. 967–970, 2015.
- [13] H. J. Snaith, “Perovskites: The emergence of a new era for low-cost, high-efficiency solar cells,” *J. Phys. Chem. Lett.*, vol. 4, no. 21, pp. 3623–3630, 2013, doi: 10.1021/jz4020162.
- [14] Stranks, S. D., Eperon, G. E., Grancini, G., Menelaou, C., Alcocer, M. J., Leijtens, T., Snaith, H. J. “Electron-hole diffusion lengths exceeding 1 micrometer in an organometal trihalide perovskite absorber,” *Science (80-.)*, vol. 342, no. 6156, pp. 341–344, 2013, doi: 10.1126/science.1243982.
- [15] D. B. Mitzi, C. A. Feild, W. T. A. Harrison, and A. M. Guloy, “Conducting tin halides with a layered organic-based perovskite structure,” *Nature*, vol. 369, no. 6480, pp. 467–469, 1994, doi: 10.1038/369467a0.
- [16] E. B. Kim, M. S. Akhtar, H. S. Shin, S. Ameen, and M. K. Nazeeruddin, “A review on two-dimensional (2D) and 2D-3D multidimensional perovskite solar cells: Perovskites structures, stability, and photovoltaic performances,” *J. Photochem. Photobiol. C Photochem. Rev.*, vol. 48, no. June 2020, p. 100405, 2021, doi: 10.1016/j.jphotochemrev.2021.100405.
- [17] Xu, Z., De Rosia, T., Weeks, K., Photoluminescence-voltage (PL-V) hysteresis of perovskite solar cells. *Journal of Physical Chemistry C*, 121(39), 2017, doi: 10.1021/acs.jpcc.7b06711.
- [18] M. H. Miah, M. U. Khandaker, M. B. Rahman, M. Nur-E-Alam, and M. A. Islam, “Band gap tuning of perovskite solar cells for enhancing the efficiency and stability: issues and prospects,” *RSC Adv.*, vol. 14, no. 23, pp. 15876–15906, 2024, doi: 10.1039/d4ra01640h.
- [19] Burschka, J., Pellet, N., Moon, S. J., Humphry-Baker, R., Gao, P., Nazeeruddin, M. K., & Grätzel, M., “Sequential deposition as a route to high-performance perovskite-sensitized solar cells,” *Nature*, vol. 499, no. 7458, pp. 316–319, 2013, doi: 10.1038/nature12340.
- [20] X. Ding *et al.*, “Passivation functionalized phenothiazine-based hole transport material for highly efficient perovskite solar cell with efficiency exceeding 22%,” *Chem. Eng. J.*, vol. 410, no. December 2020, p. 128328, 2021, doi: 10.1016/j.cej.2020.128328.
- [21] Cho, H., Jeong, S. H., Park, M. H., Kim, Y. H., Wolf, C., Lee, C. L., “Overcoming the electroluminescence efficiency limitations of perovskite light-emitting diodes,” *Science (80-.)*, vol. 350, no. 6265, pp. 1222–1225, 2015, doi: 10.1126/science.aad1818.
- [22] Sathiyam, G., Syed, A. A., Chen, C., Wu, C., Tao, L., Ding, X., Ding, L. “Dual effective dopant based hole transport layer for stable and efficient perovskite solar cells,” *Nano Energy*, vol. 72, p. 104673, 2020, doi: 10.1016/j.nanoen.2020.104673.
- [23] Y Rong, Y., Hu, Y., Mei, A., Tan, H., Saidaminov, M. I., Seok, S. I., Han, H. “Challenges for commercializing perovskite solar cells,” *Science (80-.)*, vol. 361, no. 6408, 2018, doi: 10.1126/science.aat8235.
- [24] Correa-Baena, J. P., Saliba, M., Buonassisi, T., Grätzel, M., Abate, A., Tress, W., Hagfeldt, A. “Promises and challenges of perovskite solar cells,” *Science (80-.)*, vol. 358, no. 6364, pp. 739–744, 2017, doi: 10.1126/science.aam6323.
- [25] Zhou, H., Chen, Q., Li, G., Luo, S., Song, T. B., Duan, H. S., Yang, Y., “Interface engineering of highly efficient perovskite solar cells accumbens,” *Science (80-.)*, vol. 345, no. 6196, pp. 535–542, 2014, doi: 10.1126/science.1254050.
- [26] Lian, X., Chen, J., Qin, M., Zhang, Y., Tian, S., Lu, X., Chen, H., “The Second Spacer Cation Assisted Growth of a 2D Perovskite Film with Oriented Large Grain for Highly Efficient and Stable Solar Cells,” *Angew. Chemie - Int. Ed.*, vol. 58, no. 28, pp. 9409–9413, 2019, doi: 10.1002/anie.201902959.
- [27] N. Li, X. Niu, Q. Chen, and H. Zhou, “Towards commercialization: The operational stability of perovskite solar cells,” *Chem. Soc. Rev.*, vol. 49, no. 22, pp. 8235–8286, 2020, doi: 10.1039/d0cs00573h.
- [28] Tao, L., Wang, B., Wang, H., Chen, C., Ding, X., Tian, Y., Cheng, M., “Surface Defect Passivation and Energy Level Alignment Engineering with a Fluorine-Substituted Hole Transport Material for Efficient Perovskite Solar Cells,” *ACS Appl. Mater. Interfaces*, vol. 13, no. 11, pp. 13470–13477, 2021, doi: 10.1021/acsami.0c21975.
- [29] Liu, Z., Qiu, L., Ono, L. K., He, S., Hu, Z., Jiang, M., Qi, Y., “A holistic approach to interface stabilization for efficient perovskite solar modules with over 2,000-hour operational stability,” *Nat. Energy*, vol. 5, no. 8, pp. 596–604, 2020, doi: 10.1038/s41560-020-0653-2.
- [30] Berhe, T. A., Su, W. N., Chen, C. H., Pan, C. J., Cheng, J. H., Chen, H. M., Hwang, B. J., “Organometal halide perovskite solar cells: Degradation and stability,” *Energy Environ. Sci.*, vol. 9, no. 2, pp. 323–356, 2016, doi: 10.1039/c5ee02733k.
- [31] Aristidou, N., Sanchez-Molina, I., Chotchuangchutchaval, T., Brown, M., Martinez, L., Rath, T., Haque, S. A. “The Role of Oxygen in the Degradation of Methylammonium Lead Trihalide Perovskite Photoactive Layers,” *Angew. Chemie - Int. Ed.*, vol. 54, no. 28, pp. 8208–8212, 2015, doi: 10.1002/anie.201503153.
- [32] D. Bryant *et al.*, “Light and oxygen induced degradation limits the operational stability of methylammonium lead triiodide perovskite solar cells,” *Energy Environ. Sci.*, vol. 9, no. 5, pp. 1655–1660, 2016, doi: 10.1039/c6ee00409a.
- [33] W. S. Yang *et al.*, “High-performance photovoltaic perovskite layers fabricated through intramolecular exchange,” *Science*, vol. 348, no. 6240, pp. 1234–1237, 2015, doi: 10.1126/science.aaa9272.
- [34] J. M. Ball, M. M. Lee, A. Hey, and H. J. Snaith, “Low-temperature processed meso-superstructured to thin-film perovskite solar cells,” *Energy Environ. Sci.*, vol. 6, no. 6, pp. 1739–1743, 2013, doi: 10.1039/c3ee40810h.
- [35] P. W. Liang *et al.*, “Additive enhanced crystallization of solution-processed perovskite for highly efficient planar-heterojunction solar cells,” *Adv. Mater.*, vol. 26, no. 22, pp. 3748–3754, 2014, doi: 10.1002/adma.201400231.
- [36] Z. Y. Zhang *et al.*, “Elucidating the band structure and free charge carrier dynamics of pure and impurities doped CH₃NH₃PbI₃-xCl_x perovskite thin films,” *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 17, no. 44, pp. 30084–

- 30089, 2015, doi: 10.1039/c5cp04333f.
- [37] R. Zheng *et al.*, “Defect passivation grain boundaries using 3-aminopropyltrimethoxysilane for highly efficient and stable perovskite solar cells,” *Sol. Energy*, vol. 224, no. December 2020, pp. 472–479, 2021, doi: 10.1016/j.solener.2021.06.001.
- [38] Burschka, J., Pellet, N., Moon, S. J., Humphry-Baker, R., Gao, P., Nazeeruddin, M. K., Grätzel, M. “Sequential deposition as a route to high-performance perovskite-sensitized solar cells,” *Nature*, vol. 499, no. 7458, pp. 316–319, Jul. 2013, doi: 10.1038/nature12340.
- [39] M. Liu, M. B. Johnston, and H. J. Snaith, “Efficient planar heterojunction perovskite solar cells by vapour deposition,” *Nature*, vol. 501, no. 7467, pp. 395–398, 2013, doi: 10.1038/nature12509.
- [40] Y. Li *et al.*, “Fabrication of planar heterojunction perovskite solar cells by controlled low-pressure vapor annealing,” *J. Phys. Chem. Lett.*, vol. 6, no. 3, pp. 493–499, 2015, doi: 10.1021/jz502720a.
- [41] Y. Shao, Z. Xiao, C. Bi, Y. Yuan, and J. Huang, “Origin and elimination of photocurrent hysteresis by fullerene passivation in CH₃NH₃PbI₃ planar heterojunction solar cells,” *Nat. Commun.*, vol. 5, no. March 2015, pp. 1–7, 2014, doi: 10.1038/ncomms6784.
- [42] A. Ávila-López, J. C. Cruz, J. A. Díaz-Real, K. García-Uitz, D. Cante-Góngora, and G. Rodríguez-May, “A Review of Perovskite-Based Solar Cells over the Last Decade: The Evolution of the Hole Transport Layer and the Use of WO₃ as an Electron Transport Layer,” *Coatings*, vol. 15, no. 2, pp. 1–18, 2025, doi: 10.3390/coatings15020132.
- [43] M. K. Hossain *et al.*, “An extensive study on multiple ETL and HTL layers to design and simulation of high-performance lead-free CsSnCl₃-based perovskite solar cells,” *Sci. Rep.*, vol. 13, no. 1, pp. 1–24, 2023, doi: 10.1038/s41598-023-28506-2.
- [44] Ünal, M., Akın, S., Ebiç, M., Baynal, B. (2024). Perovskit Güneş Hücrelerinde Li-TFSI Katkılı TiO₂ Elektron Transfer Tabakasının Optimizasyonu. Afyon Kocatepe Üniversitesi Fen Ve Mühendislik Bilimleri Dergisi, 24(4), 921-930. doi:10.35414/akufemubid.1403743.
- [45] Ebiç M, Akar Ş, Akman E, Özel F, Akin S. SnO₂ Elektron Transfer Tabakasının Slot-Die Tekniği ile Üretimi ve Optimizasyonu. IJIEA. June 2022;6(1):170-182. doi:10.46460/ijiea.1086169
- [46] Ebiç, M. (2023). Perovskite Güneş Hücreleri İçin EMIMBF₄ İyonik Sıvı Katkılı SnO₂ Elektron Transfer Tabakasının Düşük Sıcaklıkta Üretimi ve Optimizasyonu. Journal of the Institute of Science and Technology, 13(3), 2130-2142. doi:10.21597/jist.1273053.
- [47] Q. Li, C. Zhang, L. Xue, B. Wang, Y. Lv, and Q. Yan, “Design and construction of electronic transport layer based on organic small molecule for inverted perovskite solar cells,” *Mater. Res. Bull.*, vol. 189, no. April, p. 113471, 2025, doi: 10.1016/j.materresbull.2025.113471.
- [48] J. W. Jung, C. C. Chueh, and A. K. Y. Jen, “A Low-Temperature, Solution-Processable, Cu-Doped Nickel Oxide Hole-Transporting Layer via the Combustion Method for High-Performance Thin-Film Perovskite Solar Cells,” *Adv. Mater.*, vol. 27, no. 47, pp. 7874–7880, 2015, doi: 10.1002/adma.201503298.
- [49] C. H. Chiang and C. G. Wu, “Bulk heterojunction perovskite-PCBM solar cells with high fill factor,” *Nat. Photonics*, vol. 10, no. 3, pp. 196–200, 2016, doi: 10.1038/nphoton.2016.3.
- [50] H. Min *et al.*, “Perovskite solar cells with atomically coherent interlayers on SnO₂ electrodes,” *Nature*, vol. 598, no. 7881, pp. 444–450, 2021, doi: 10.1038/s41586-021-03964-8.
- [51] C. Zhu *et al.*, “Bifunctional bridging capping layer enables 24.5% efficiency of perovskite solar cells with polymer-based hole transport materials,” *Sci. China Chem.*, vol. 68, no. 1, pp. 350–359, 2024, doi: 10.1007/s11426-024-2142-4.
- [52] Caputo, M., Cefarin, N., Radivo, A., Demitri, N., Gigli, L., Plaisier, J. R., Goldoni, A., Electronic structure of MAPbI₃ and MAPbCl₃: importance of band alignment. Scientific reports, 9(1), 15159, 2019, doi: 10.1038/s41598-019-50108-0.
- [53] Afre, R. A., Pugliese, D., Perovskite Solar Cells: A Review of the Latest Advances in Materials, Fabrication Techniques, and Stability Enhancement Strategies. Micromachines, 15(1), 2024, doi: 10.3390/mi15020192.
- [54] Geng, W., Zhang, L., Zhang, Y. N., Lau, W. M., Liu, L. M., First-principles study of lead iodide perovskite tetragonal and orthorhombic phases for photovoltaics. The Journal of Physical Chemistry C, 118(34), 19565-19571, 2014, doi: 10.1021/jp504951h.
- [55] J. Kong *et al.*, “CO₂ doping of organic interlayers for perovskite solar cells,” *Nature*, vol. 594, no. 7861, pp. 51–56, 2021, doi: 10.1038/s41586-021-03518-y.
- [56] F. M. Rombach, S. A. Haque, and T. J. Macdonald, “Lessons learned from spiro-OMeTAD and PTAA in perovskite solar cells,” *Energy Environ. Sci.*, vol. 14, no. 10, pp. 5161–5190, 2021, doi: 10.1039/d1ee02095a.
- [57] T. H. Schloemer, J. A. Christians, J. M. Luther, and A. Sellinger, “Doping strategies for small molecule organic hole-transport materials: impacts on perovskite solar cell performance and stability,” *Chem. Sci.*, vol. 10, no. 7, pp. 1904–1935, 2019, doi: 10.1039/C8SC05284K.
- [58] J. Du, J. Yuan, J. Xi, F. Huang, and J. Tian, “Enhanced performance of MAPbI₂.85Br_{0.15} perovskite solar cells via ionic liquid-induced surface passivation of perovskite films,” *J. Alloys Compd.*, vol. 961, p. 171115, 2023, doi: 10.1016/j.jallcom.2023.171115.
- [59] X. Ji *et al.*, “A mixed hole transport material employing a highly planar conjugated molecule for efficient and stable perovskite solar cells,” *J. Mater. Chem. A*, vol. 8, no. 10, pp. 5163–5170, 2020, doi: 10.1039/c9ta13365h.
- [60] G. W. Kim, G. Kang, K. Choi, H. Choi, and T. Park, “Solution Processable Inorganic–Organic Double-Layered Hole Transport Layer for Highly Stable Planar Perovskite Solar Cells,” *Adv. Energy Mater.*, vol. 8, no. 26, pp. 1–7, 2018, doi: 10.1002/aenm.201801386.
- [61] G. W. Kim, J. Lee, G. Kang, T. Kim, and T. Park, “Donor–Acceptor Type Dopant-Free, Polymeric Hole Transport Material for Planar Perovskite Solar Cells (19.8%),” *Adv. Energy Mater.*, vol. 8, no. 4, pp. 1–5, 2018, doi: 10.1002/aenm.201701935.
- [62] E. H. Jung *et al.*, “Efficient, stable and scalable perovskite solar cells using poly(3-hexylthiophene),” *Nature*, vol. 567, no. 7749, pp. 511–515, 2019, doi: 10.1038/s41586-019-1036-3.
- [63] J. Lee, G. W. Kim, M. Kim, S. A. Park, and T. Park,

- “Nonaromatic Green-Solvent-Processable, Dopant-Free, and Lead-Capturable Hole Transport Polymers in Perovskite Solar Cells with High Efficiency,” *Adv. Energy Mater.*, vol. 10, no. 8, pp. 1–7, 2020, doi: 10.1002/aenm.201902662.
- [64] D. Xu *et al.*, “Constructing molecular bridge for high-efficiency and stable perovskite solar cells based on P3HT,” *Nat. Commun.*, vol. 13, no. 1, pp. 1–8, 2022, doi: 10.1038/s41467-022-34768-7.
- [65] S. Ullah *et al.*, “All-inorganic CsPbBr₃ perovskite: A promising choice for photovoltaics,” *Mater. Adv.*, vol. 2, no. 2, pp. 646–683, 2021, doi: 10.1039/d0ma00866d.
- [66] C. M. Pelicano, I. Raifuku, Y. Ishikawa, Y. Uraoka, and H. Yanagi, “Hierarchical core-shell heterostructure of H₂O-oxidized ZnO nanorod@Mg-doped ZnO nanoparticle for solar cell applications,” *Mater. Adv.*, vol. 1, no. 5, pp. 1253–1261, 2020, doi: 10.1039/d0ma00313a.
- [67] Y. Zhang, M. Elawad, Z. Yu, X. Jiang, J. Lai, and L. Sun, “Enhanced performance of perovskite solar cells with P3HT hole-transporting materials: Via molecular p-type doping,” *RSC Adv.*, vol. 6, no. 110, pp. 108888–108895, 2016, doi: 10.1039/c6ra21775c.
- [68] H. Choi *et al.*, “A dual functional molecule for perovskite/P3HT interface to achieve stable perovskite solar cells,” *J. Mater. Chem. A*, vol. 11, no. 30, pp. 16363–16369, 2023, doi: 10.1039/d3ta01910a.
- [69] Z. Wang, H. Gao, D. Wu, J. Meng, J. Deng, and M. Cui, “Defects and Defect Passivation in Perovskite Solar Cells,” *Molecules*, vol. 29, no. 9, 2024, doi: 10.3390/molecules29092104.
- [70] Y. Miao *et al.*, “Construction of efficient perovskite solar cell through small-molecule synergistically assisted surface defect passivation and fluorescence resonance energy transfer,” *Chem. Eng. J.*, vol. 426, no. June, p. 131358, 2021, doi: 10.1016/j.cej.2021.131358.
- [71] S. Buyukcelebi, M. Kazici, Y. Torlak, M. Kus, and M. Ersoz, “Sumeyra Buyukcelebi, Mehmet Kazici, Yasemin Torlak, Mahmut Kus, * and Mustafa Ersoz,” 2025, doi: 10.1021/acsomega.4c01242.
- [72] Z. Wu, M. Jiang, Z. Liu, A. Jamshaid, L. K. Ono, and Y. Qi, “Highly Efficient Perovskite Solar Cells Enabled by Multiple Ligand Passivation,” *Adv. Energy Mater.*, vol. 10, no. 10, pp. 1–5, 2020, doi: 10.1002/aenm.201903696.
- [73] Y. C. Kim *et al.*, “Beneficial Effects of PbI₂ Incorporated in Organo-Lead Halide Perovskite Solar Cells,” *Adv. Energy Mater.*, vol. 6, no. 4, pp. 1–8, 2016, doi: 10.1002/aenm.201502104.
- [74] M. Kim *et al.*, “Methylammonium Chloride Induces Intermediate Phase Stabilization for Efficient Perovskite Solar Cells,” *Joule*, vol. 3, no. 9, pp. 2179–2192, 2019, doi: 10.1016/j.joule.2019.06.014.
- [75] M. Xu *et al.*, “Surface Passivation of Perovskite Film by Small Molecule Infiltration for Improved Efficiency of Perovskite Solar Cells,” *IEEE Photonics J.*, vol. 8, no. 5, 2016, doi: 10.1109/JPHOT.2016.2608619.
- [76] Ç. K. Kurukavak, M. Tok, M. Yurdakul, and M. Ku, “Dual - and triple - hetero - atom - doped carbon dots as novel additives for the engineering of defects passivation to boost performance of perovskite solar cells,” 2025, doi: 10.1007/s10854-025-14547-y.
- [77] W. Xiang *et al.*, “Europium-Doped CsPbI₂ Br for Stable and Highly Efficient Inorganic Perovskite Solar Cells,” *Joule*, vol. 3, no. 1, pp. 205–214, 2019, doi: 10.1016/j.joule.2018.10.008.