

Boya Duyarlı Güneş Pili İçin Farklı Çapa Grupları İçeren Malzemelerin Sentezi ve  
Karakterizasyonu

Münire Gökben Arapoğlu

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

Kimya Anabilim Dalı

Aralık 2024



Synthesis and Characterization of Materials Containing Different Anchor Groups for Dye  
Sensitive Solar Cells

Münire Gökben Arapođlu

**MASTER OF SCIENCE THESIS**

Department of Chemistry

December 2024

Boya Duyarlı Güneş Pili İçin Farklı Çapa Grupları İçeren Malzemelerin Sentezi ve Karakterizasyonu

Münire Gökben Arapoğlu

Eskişehir Osmangazi Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Lisansüstü Eğitim ve Öğretim Yönetmeliği Uyarınca

Kimya Anabilim Dalı

Organik Kimya Bilim Dalında

YÜKSEK LİSANS TEZİ

olarak hazırlanmıştır.

Danışman: Doç. Dr. Kamuran GÖRGÜN

Aralık 2024

## ONAY

Kimya Anabilim Dalı Yüksek Lisans öğrencisi **Münire Gökben ARAPOĞLU**'nun YÜKSEK LİSANS tezi olarak hazırladığı “Boya Duyarlı Güneş Pili İçin Farklı Çapa Grupları İçeren Malzemelerin Sentezi ve Karakterizasyonu” başlıklı bu çalışma, jürimizce lisansüstü yönetmeliğin ilgili maddeleri uyarınca değerlendirilerek oybirliği ile kabul edilmiştir.

Danışman : Doç. Dr. Kamuran GÖRGÜN

İkinci Danışman : -

Yüksek Lisans Savunma Jürisi:

Üye: Doç. Dr. Kamuran GÖRGÜN

Üye: Prof.Dr. Tülay HURMA

Üye: Prof.Dr. Funda TAY

Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun ..... tarih ve  
..... sayılı kararıyla onaylanmıştır.

Prof. Dr. Fatma TÜMSEK

Enstitü Müdürü

## ETİK BEYAN

Eskişehir Osmangazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kılavuzuna göre, Doç. Dr. Kamuran GÖRGÜN danışmanlığında hazırlamış olduğum “Boya Duyarlı Güneş Pilleri İçin Farklı Çapa Grupları İçeren Malzemelerin Sentezi ve Karakterizasyonu” başlıklı Yüksek Lisans /Doktora tezimin özgün bir çalışma olduğunu; tez çalışmamın tüm aşamalarında bilimsel etik ilke ve kurallarına uygun davrandığımı; tezimde verdiğim bilgileri, verileri akademik ve bilimsel ilke ve kurallara uygun olarak elde ettiğimi; tez çalışmamda yararlandığım eserlerin tümüne atıf yaptığımı ve kaynak gösterdiğimi ve bilgi, belge ve sonuçları bilimsel etik ilke ve kurallara göre sunduğumu beyan ederim.

20/12/2024

Münire Gökben ARAPOĞLU

İmza

## ÖZET

Yapılan bu tezde, karbazolün aromatik trisiklik yapısından yararlanarak karbazolün elektronik özelliklerini ayarlamak için F-, CN- ve CF<sub>3</sub>- gibi elektron çeken gruplar kullanılarak 4,4'-(9-oktil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-florobenzonitril) (MG1), 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-florobenzonitril) (MG2), 4,4'-(9-oktil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-(triflorometil)benzonitril)) (MG3), 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-(triflorometil)benzonitril)) (MG4) moleküllerin tasarımlarını ve sentezlerini gerçekleştirdik. Sentezlenen bu bileşiklerin yapıları FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR ve <sup>13</sup>C-NMR teknikleri kullanılarak karakterizasyonları yapılmıştır. Ayrıca bu bileşiklerin UV-GB ve Floresans spektrumları da alınarak fotofiziksel analizleri de gerçekleştirilmiştir. Yapılan sentez yöntemleri arasında yer alan Suzuki-Miyaura kenetlenme reaksiyonu, bromlama ve alkilleme reaksiyonları kullanılarak yeni boya duyarlı güneş pillerinde (BDGP) kullanılacak moleküller sentezlenmiştir. Temiz enerji alanında kullanılma potansiyeli olabilecek hedef moleküller (MG1, MG2, MG3, MG4) kullanılarak farklı karşıt elektrotlar (TiO<sub>2</sub> ve ZnO) ile BDGP fabrikasyonları yapıldıktan sonra pil performans ölçümleri de alınarak gerçekleştirilen pillerin kısa devre akım yoğunluğu (J<sub>sc</sub>) değerleri, açık devre gerilimi (V<sub>oc</sub>) ve yüzde verimleri ölçülmüştür.

**Anahtar Kelimeler:** Karbazol, Çapa Grupları, Boya Duyarlı Güneş Pilleri, Spektroskopi

## SUMMARY

In this thesis, using electron-withdrawing groups such as F-, CN- and CF<sub>3</sub>- to adjust the electronic properties of carbazole by utilizing the aromatic tricyclic structure of carbazole 4,4'-(9-octyl-9H-carbazole-3,6-diyl)bis(2-fluorobenzonitrile) (MG1), 4,4'-(9-hexyl-9H-carbazole-3,6-diyl)bis(2-fluorobenzonitrile) (MG2), 4,4'-(9-octyl-9H-carbazole-3,6-diyl)bis(2-(trifluoromethyl)benzonitrile) (MG3), 4,4'-(9-hexyl-9H-carbazole-3,6-diyl)bis(2-(trifluoromethyl)benzonitrile) (MG4) have designed and synthesized molecules. The structures of these synthesized compounds were characterized using FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR and <sup>13</sup>C-NMR techniques. UV-GB and Fluorescence spectra of these compounds were also taken and photophysical analysis was also carried out. Among the synthesis methods, Suzuki-Miyaura cross coupling reaction, bromination and alkylation reactions were used to synthesize molecules that can be used in new dye sensitized solar cells (DSSCs). After fabricating DSSCs with different counter electrodes (TiO<sub>2</sub> and ZnO) using target molecules (MG1, MG2, MG3, MG4) that may have the potential to be used in the field of clean energy, battery performance measurements were taken and short circuit current density (J<sub>SC</sub>) values, open circuit voltage (V<sub>OC</sub>) and percent efficiency of the realized batteries were measured.

**Key Words:** Carbazole, Donor-acceptor, Dye Sensitized Solar Cells, Spectroscopy

## TEŞEKKÜR

Bu tezin ortaya çıkmasında, her anlamda kendisinden çok şey öğrendiğim, akademik deneyimlerinden, bilgisinden yararlandığım ve akademik duruşunu her daim örnek aldığım, emeğini, desteğini ve güler yüzünü esirgemeyen değerli hocam ve danışmanım Doç. Dr. Kamuran GÖRGÜN'e teşekkür ederim.

Çalışmalarım sırasında her zaman birlikte olduğumuz, her konuda her daim yanımda olan yüksek lisans arkadaşlarım Yağmur DURLU ve Selenay KARAMEŞE' ye teşekkür ederim. Ayrıca laboratuvarında desteklerini esirgemeyen Dr. Merve YANDIMOĞLU ve M.Sc. Betül DERİNCE' ye de ayrıca teşekkür ederim.

Boya Duyarlı Güneş pillerini fabrikasyonları ve ölçümleri sürecimde verdikleri desteklerden dolayı Eskişehir Teknik Üniversitesi Fizik Bölümü Öğretim Üyeleri Prof. Dr. Müjdat ÇAĞLAR ve Prof. Dr. Yasemin ÇAĞLAR'a teşekkürlerimi sunarım.

Bugüne kadar her zaman yanımda olan, annem Solmaz YILDIRIM ve babam Kadir YILDIRIM'a, Ablam Gökçen GÜNGÖR'e sonsuz teşekkür ederim.

Hayatımın her aşamasında her zaman destek olan, sevgisini, anlayışını esirgemeyen, hayat arkadaşım Bilal ARAPOĞLU'na teşekkür ederim.

## İÇİNDEKİLER

### Sayfa

ÖZET.....	vi
SUMMARY.....	vii
TEŞEKKÜR.....	viii
İÇİNDEKİLER.....	ix
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	xii
ÇİZELGELER DİZİNİ.....	xiv
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ.....	xv
1. GİRİŞ ve AMAÇ.....	1
2. LİTERATÜR ARAŞTIRMASI.....	3
2.1. Karbazol.....	3
2.2. Karbazolün Fotofiziksel Özellikleri.....	4
2.3. Boya Duyarlı Güneş Pilleri (BDGP).....	5
2.3.1. Boya Duyarlı Güneş Pilleri Bileşenleri.....	6
2.3.1.1. <u>Çalışma Elektrodu</u> .....	6
2.3.1.2. <u>Boya Duyarlaştırıcı</u> .....	7
2.3.1.3. <u>Redoks Aracı veya Elektrolit</u> .....	8
2.3.1.4. <u>Karşıtlı Elektrot</u> .....	9
2.4. Boya Duyarlı Güneş Pillerinin Çalışma Prensibi.....	9
2.5. Boya Duyarlı Güneş Pillerinin Sınırlamaları.....	11
2.6. Boya Duyarlaştırıcı Seçenekleri.....	12
2.6.1. Rutenyum Kompleksleri.....	13

## İÇİNDEKİLER

### Sayfa

2.6.2. Kullanılan Metal Kompleksler.....	16
2.6.2.1. <u>Demir (II)</u> .....	16
2.6.2.2. <u>Magnezyum</u> .....	16
2.6.2.3. <u>Titanyum</u> .....	17
2.6.2.4. <u>Çinko</u> .....	17
2.7. Organik Boyalar.....	18
2.7.1. D- $\pi$ -A Boyaları.....	19
2.7.2. D-A- $\pi$ -A Boyaları.....	20
2.7.3. Çift Donör Bazlı Boyalar.....	22
<b>3. MATERYAL VE YÖNTEM</b> .....	24
3.1. Kullanılan kimyasal Maddeler ve Malzemeler.....	24
3.2. Kullanılan Cihazlar ve Yardımcı Gereçler.....	25
3.3. Gerçekleştirilen Sentezlerin Reaksiyon Koşulları.....	26
3.4. Boya Duyarlı Güneş Pillerinde Kullanılmak Üzere Yapılan Reaksiyonlar.....	26
3.4.1. 3,6-Dibromokarbazol (II) Bileşiğinin Sentezi.....	27
3.4.2. 3,6-Dibromo-9-oktilkarbazol (III) Bileşiğinin Sentezi.....	28
3.4.3. 3,6-Dibromo-9-hekzilkarbazol (IV) Bileşiğinin Sentezi.....	29
3.4.4. 4,4'-(9-oktil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-florobenzonitril) (MG1)bileşiğinin sentezi.....	30
3.4.5. 4,4'-(9-oktil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-(triflorometil)benzonitril) (MG3) bileşiğinin sentezi.....	31

## İÇİNDEKİLER

### Sayfa

3.4.6. 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2- florobenzonitril))	
(MG2) bileşiğinin sentezi.....	32
3.4.7. 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-(triflorometil)benzonitril))	
(MG4) bileşiğinin sentezi.....	33
3.5. Boya Duyarlı Güneş Pillerinin Oluşturulması.....	34
<b>4. BULGULAR VE TARTIŞMA.....</b>	<b>36</b>
4.1. Boya Duyarlı Güneş Pillerinde Kullanılacak Maddelerin Fotofiziksel	
Özellikleri.....	36
4.2. Sentezlenen Bileşiklerin Karakterizasyonu.....	44
4.2.1. Sentezlenen Bileşiklerin FT-IR Spektrum Yorumları.....	44
4.2.2. Sentezlenen Bileşiklerin <sup>1</sup> H-NMR ve <sup>13</sup> C-NMR Spektrum Yorumları.....	45
4.2.3. Pil Yorumu.....	47
<b>5. SONUÇ ve ÖNERİLER.....</b>	<b>50</b>
<b>KAYNAKLAR DİZİNİ.....</b>	<b>51</b>
<b>EK AÇIKLAMALAR .....</b>	<b>71</b>
Ek Açıklama-A: FT-IR Spektrumları.....	74
Ek Açıklama-B: <sup>1</sup> H-NMR Spektrumları.....	81
Ek Açıklama-C: <sup>13</sup> C-NMR Spektrumları.....	88

## ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>Sekil</u>	<u>Sayfa</u>
2.1. Boya duyarlı güneş pilinin şematik diyagramı .....	9
2.2. n-tipi ve p-tipi BDGP'lerin şematik diyagramı.....	11
2.3. İki farklı Çift donör bazlı metal içermeyen boya hassaslaştırıcının şematik diyagramı..	23
2.4. Farklı D-D- $\pi$ -A Yapılarının Geometrilere.....	24
3.1. Hedef Ürünlerin (MG1 ve MG3) Sentez Şeması.....	27
3.2. Hedef Ürünlerin (MG2 ve MG4) Sentez Şeması.....	28
3.3. Boya Duyarlı Güneş Pillerinin Fabrikasyonu.....	35
4.1. 4,4'-(9-oktil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-florobenzonitril) (MG1) $1 \times 10^{-6}$ M Farklı Çözücülerde Alınan Absorbans Spektrumu.....	37
4.2. 4,4'-(9-oktil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-florobenzonitril) (MG1) Bileşiğinin $1 \times 10^{-7}$ M Farklı Çözücülerde Alınan Emisyon Spektrumu.....	37
4.3. MG1 Bileşiğinin (a) Gün Işığı ve (b) UV Işığı (360 nm) Altında Görüntüsü .....	38
4.4. 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-florobenzonitril)Bileşiğinin (MG2) $1 \times 10^{-6}$ M Farklı Çözücülerde Alınan Absorbans Spektrumu.....	39
4.5. 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-florobenzonitril) Bileşiğinin (MG2) $1 \times 10^{-7}$ M Farklı Çözücülerde Alınan Emisyon Spektrumu.....	39
4.6. MG2 Bileşiğinin (a) Gün Işığı ve (b) UV Işığı (360 nm) Altında Görüntüsü.....	40
4.7. 4,4'-(9-oktil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-(triflorometil)benzonitril) Bileşiğinin (MG3) $1 \times 10^{-6}$ M Farklı Çözücülerde Alınan Absorbans Spektrumu .....	41
4.8. 4,4'-(9-oktil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-(triflorometil)benzonitril) Bileşiğinin (MG3) $1 \times 10^{-7}$ M Farklı Çözücülerde Alınan Emisyon Spektrumu.....	41
4.9. MG3 Bileşiğinin (a) Gün Işığı ve (b) UV Işığı (360 nm) Altında Görüntüsü .....	42

**ŞEKİLLER DİZİNİ****Sekil****Sayfa**

<b>4.10.</b> 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2(triflorometil)benzonitril) Bileşiğinin (MG4) $1 \times 10^{-6}$ M Farklı Çözücülerde Alınan Absorbans Spektrumu ...	43
<b>4.11.</b> 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazole-3,6-diil)bis(2(triflorometil)benzonitril) Bileşiğinin (MG4) $1 \times 10^{-7}$ M Farklı Çözücülerde Alınan Emisyon Spektrumu .....	43
<b>4.12.</b> MG4 Bileşiğinin (a) Gün Işığı ve (b) UV Işığı (360 nm) Altında Görüntüsü.....	44
<b>4.13.</b> TiO <sub>2</sub> -MG1, MG2, MG3, MG4 BDGP'lerin Akım Yoğunluğu-Voltaj Grafikleri.....	48
<b>4.14.</b> ZnO-MG1, MG2, MG3, MG4 BDGP'lerin Akım Yoğunluğu-Voltaj Grafikleri.....	49

## ÇİZELGELER DİZİNİ

### Cizelge

### Sayfa

2.1. N-tipi DSSC için bazı rutenyum bazlı boyaların $J_{SC}$ , $V_{OC}$ , FF ve PCE değerleri ile 10'dan fazla PCE ve fotoanot malzemesi olarak $TiO_2$ dikkate alınmıştır.....	14
2.2. En önemli performans parametrelerini içeren metalsiz D- $\pi$ -A organik boyaları ile BDGP'leri ele alan çalışmaların listesi.....	21
3.1. Kullanılan kimyasal maddeler ve malzemeler.....	24
4.1. MG1 bileşiğinin fotofiziksel verileri .....	36
4.2. MG2 bileşiğinin fotofiziksel verileri .....	38
4.3. MG3 bileşiğinin fotofiziksel verileri .....	40
4.4. MG4 bileşiğinin fotofiziksel verileri .....	42
4.5. Boya duyarlı güneş pillerinin performans değerleri.....	47

**SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ**

<b><u>Simgeler</u></b>	<b><u>Açıklama</u></b>
$\lambda$	Dalga Boyu (nm)
$\alpha$	Absorpsiyon Katsayısı
$^{\circ}\text{C}$	Santigrat Derece
A	Absorbans
FF	Dolum Faktörü
Hz	Hertz
I <sub>sc</sub>	Kısa Devre Akımı
J	Eşleşme Sabiti
J <sub>sc</sub>	Kısa Devre Akım Yoğunluğu
P <sub>in</sub>	Işık Şiddeti
V <sub>oc</sub>	Açık Devre Voltajı
<b><u>Kısaltmalar</u></b>	<b><u>Açıklama</u></b>
<sup>13</sup> C-NMR	<sup>13</sup> C Nükleer Manyetik Rezonans
<sup>1</sup> H-NMR	<sup>1</sup> H Nükleer Manyetik Rezonans
AcN	Asetonitril
BDGP	Boya Duyarlı Güneş Pili
CDCl <sub>3</sub>	Döterokloroform
cm	Santimetre
d	İkili (Dublet)

**SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ**

<b><u>Kısaltmalar</u></b>	<b><u>Açıklama</u></b>
DCM	Diklorometan
dd	İkilinin İkili
DMF	<i>N,N</i> -Dimetilformamit
DMSO	Dimetilsülfoksit
eg	Eşdeğer Gram
EtOAc	Etil Asetat
FT-IR	Fourier Dönüşümlü Kızılötesi Spektroskopisi
HOMO	En Yüksek Dolu Moleküler Orbital
LUMO	En Yüksek Dolu Moleküler Orbital
m	Çoklu (multiplet)
mL	Mililitre
mmol	Milimol
NBS	N-Bromosüksinimid
nm	Nanometre
NMR	Nükleer Manyetik Rezonans
Pd(PPh <sub>3</sub> ) <sub>4</sub>	Tetrakis(trifenilfosfin)palladyum
Ph	Fenil
s	Tekli (singlet)
t	Üçlü (triplet)
UV-GB	Ultraviyole-Görünür Bölge

## 1. GİRİŞ ve AMAÇ

Fosil yakıtlara alternatif olarak temiz yenilenebilir enerji kaynaklarının geliştirilmesi günümüzde büyük önem taşımaktadır ve bu bağlamda boya duyarlı güneş pilleri (BDGP 'ler) (Grätzel, 2009; Nazeeruddin vd.,2005; O'regan vd., 1991), %11'i aşan en yüksek sertifikalı verimlilik ve %13'ün üzerinde laboratuvar-hücre verimliliği ile rekabetçi verimlilik ve kararlılık göstermiştir (Yella vd., 2011). Bu cihazda, nanokristal oksit (TiO<sub>2</sub> ve ZnO gibi) yüzeyine aşılana tek katmanlı bir hassaslaştırıcı boya, güneş radyasyonunu emer ve ardından gelen foto-uyarılmış elektronları boş yarı iletken durumların (CB) manifolduna enjekte eder. Yarı iletken CB' ye uyarılmış durum yükü enjeksiyonu üzerine boya üzerinde oluşan yük deliği, karşı elektrotta bir katalizör tarafından rejenere edilen redoks aracısına aktarılır ve devre kapanır. Sıvı I<sup>-</sup>/I<sup>3-</sup> elektrolit (Boschloo ve Hagfeldt, 2009), kullanan en yüksek performanslı cihazlar Ru(II)-bazlı boyalarla hassaslaştırılmış olsa da (Nazeeruddin vd., 1993; Nazeeruddin vd.,1997; Nazeeruddin vd.,1999; Nazeeruddin vd.,2001) literatürde bir dizi umut verici metal içermeyen boya geliştirilmiştir (Liang ve Chen, 2013; Hagfeldt vd.,2010) Ayrıca, yeni ferrosen veya kobalt bazlı elektrolitlerle birlikte, organik boyalar Ru(II) boyalarına kıyasla daha iyi performans elde etmiştir (Yella vd., 2011; Mosconi vd., 2012; Daeneke vd.,2011; Feldt vd.,2010; Han vd.,2012)

Organik boyalar genellikle bir elektron verici grup, bir konjuge bağlayıcı ve bir elektron kabul eden / bağlayıcı grup içeren bir itme-çekme yapısına sahiptir. N, N-dimetilanilin grubu (Hara vd., 2003; Hara vd.,2005 a), kumarinler (Hara vd.,2003 a; Hara vd.,2018; Hara vd.,2003 b; Hara vd.,2005 b; Hara vd.,2005 c; Hara vd.,2003c; Wang vd., 2007) tetrahidrokinolinler (Chen vd., 2007 a; Chen vd., 2007 b), pirolidin (Campbell vd., 2007), karbazoller (Wang vd., 2008 a), difenilamin (Thomas vd., 2005), trifenilamin (Hwang vd., 2007; Xu vd., 2008; Liu vd., 2008; Hagberg vd.,2007; Mao vd.,2012), indolin (Yang vd., 2014) vb. içeren çeşitli farklı donör gruplar önerilmiştir. Diğer taraftan, boya duyarlaştırıcılarının çapa grupları tarafından oksit yüzeyine kimyasal olarak adsorbe edilir. (Gupta vd., 2015)

Bu tez çalışmasının amacı yukarıda bahsedildiği gibi literatürde bulunmayan donör-akseptör özelliğine sahip boya duyarlı güneş pillerinde (BDGP) kullanılabilme kapasitesinin araştırılması için dört yeni farklı çapa grupları içeren karbazol türevli maddeler

sentezlenmiştir. Sentezlenen bu dört karbazol türevli bileşiklerin yapıları FT-IR,  $^1\text{H}$  NMR,  $^{13}\text{C}$  NMR teknikleri kullanılarak karakterizasyonları yapılmıştır. Ayrıca bu bileşiklerin UV-GB ve Floresans spektrumları da alınarak fotofiziksel analizleri yapılmıştır. Analizleri ve karakterizasyon çalışmaları tamamlanan bileşiklerin Boya duyarlı Güneş Pili (BDGP) fabrikasyonları, farklı elektrotlar ( $\text{ZnO}$  ve  $\text{TiO}_2$ ) kullanılarak yapıldıktan sonra pil ölçümleri alınmış ve çapa gruplarının etkisinin araştırılması gerçekleştirilmiştir.



## 2. LİTERATÜR ARAŞTIRMASI

### 2.1. Karbazol

Karbazol büyük bir aromatik sisteme ve geniş elektron delokalizasyonu gösteren merkezinde bir azot atomuna sahip bileşiktir (Ziarani vd., 2018). Ayrıca bu bileşik 0.03Å'lık sapmalar dahilinde yaklaşık olarak düzlemseldir ve moleküldeki iki benzen halkası arasındaki açı 1,63°'dir. (Kurahashi vd., 1969)

Buna ilaveten genellikle bu bileşik elektron verici- $\pi$ -elektron alıcı (D- $\pi$ -A) organik boyalar oluşturmak için  $\pi$ -konjuge köprü olarak da kullanılabilir. Karbazol bazlı organik boyalar, boyaya duyarlı güneş pillerinde (BDGP) önemli özellikler göstermiştir (Ziarani vd., 2018, Wang vd., 2008 b; Tang vd., 2010; Teng vd., 2009). Donör gruplar boyaların özelliklerinde önemli bir rol oynar, çünkü sadece absorpsiyon spektrumlarını etkilemekle kalmaz, aynı zamanda boyaların enerji seviyelerini de ayarlayabilirler (Reddy vd., 2014). Kumarin (Hara vd.,2018; Seo vd., 2012), skuarin (Etagar vd., 2012; Funabiki vd., 2012), indolin (Tefashe vd.,2012; Higashijima vd., 2012), fenotiyazin (PTZ) (Marszalek vd., 2012; Wan vd., 2012; Liang vd., 2014), trifenilamin (Wang vd., 2014; Haid vd., 2012; Xu vd., 2012; Gautam vd., 2015; Wan vd., 2015), floren (Higashijima vd., 2012; Kim vd., 2006; Ko vd., 2010), karbazol (Lai vd., 2012; Ramkumar vd., 2012; Ramkumar ve Anandan, 2013) ve tetrahidrokinolin (Hao vd., 2012) iyi performans göstermiştir. Bunlar arasında karbazol 240 °C'ye kadar termal stabiliteye sahiptir ve ayrıca termal stabiliteyi arttırmak için başka herhangi bir parça bağlanabilir. Karbazol ucuz bir başlangıç maddesidir ve azot atomu çeşitli sübstitüentlerle kolayca işlevselleştirilebilir (Chen vd., 2007; Fu vd., 2011) (Nabavi vd., 2018).

Karbazol, fotoiletkenlik ve fotorefraktivite gibi ilginç optik ve elektronik özelliklere sahip konjuge bir birimdir. Elektrolüminesans alanında, karbazol türevleri, yüksek yük hareketliliği ve termal kararlılıkları nedeniyle genellikle boşluk taşıma ve ışık yayan katmanlar için malzeme olarak kullanılır ve köprü azot atomu tarafından geliştirilmiş düzlemsel bifenil biriminin büyük bant aralığı nedeniyle mavi elektrolüminesans gösterir. (Liou ve Yen., 2012).

Ayrıca, aşağıdaki özelliklere sahip prototipik bir organik moleküldür. Bu moleküle dayanan polimerler, yüksek boşluk taşıma hareketliliği, ultraviyole spektral bölgede güçlü absorpsiyon ve mavi ışık emisyonu nedeniyle iyi elektro ve foto-aktif özelliklere sahiptir. Karbazol polimerleri endüstride fotoiletken yük taşıma katmanları olarak kullanılmaktadır (Romero vd., 1996).

## 2.2. Karbazolün Fotofiziksel Özellikleri

Son yirmi yılda, organik ışık yayan diyotlarda (OLED'ler), organik ince film transistörlerinde (OTFT'ler), organik ve fotovoltaj hücrelerde (OPV'ler) kullanılmak üzere çeşitli organik karbazol bazlı bileşikler sentezlenmiştir (Yu vd., 2014; Higginbotham vd., 2017; Hfaiedh vd., 2023; Li vd., 2023). Karbazol bazlı bileşikler, mükemmel boşluk taşıma kabiliyetleri, iyi termal ve oksidasyon kararlılıkları nedeniyle donör malzemeler olarak yaygın bir şekilde kullanılmaktadır (Zhang vd., 2023). Bu benzersiz avantajlar, yalnız bir çift elektron taşıyan karbazol birimi üzerindeki azot atomundan kaynaklanır, böylece karbazol parçasına daha fazla elektron verme yeteneği sağlar. Karbazol grubunun düzlemsel yapısı ve geniş bant aralığı, onu ve türevlerini iyi mavi ışık yayıcılar (Grigoras ve Antonoaia, 2005) ve iyi delik taşıyıcı malzemeler ve fotoiletkenler (Guo vd., 2012) yapar. Yalnız çift elektronlar, elektrofilik aromatik süstitüsyon için karbazol ünitesinin 3,6-pozisyonunu aktive edebilir, böylece fonksiyonelleştirilmiş karbazol türevleri üretmek için basit ve düşük maliyetli bir yaklaşım sağlar (Liu vd., 2022). Nitekim, 3,6-karbazol bazlı bileşikler, mükemmel termal ve fotokimyasal kararlılıkları, nispeten yüksek delik hareketliliği ve yaygın organik çözücülerde iyi çözünürlükleri nedeniyle çeşitli optoelektronik cihazlar (Radhakrishna vd., 2023), ışık yayan diyotlar (Luizys vd., 2021), elektrokromik cihazlar (Kulasi vd., 2007) için umut verici adaylardır. Farklı elektronik ve optik özelliklere sahip fonksiyonel grupların eklenmesiyle 3,6-süstitüe karbazolün modifiye edilmesi istenebilir (Lai vd., 2010). Karbazol, yüksek yük taşıyıcı hareketliliği (Higginbotham vd., 2017), elektron bağışlama özelliği (Hfaiedh vd., 2023; Li vd., 2023; Zhang vd., 2023) ve fotoiletkenliği ile ünlüdür (Grigoras ve Antonoaia, 2005). 3,6-, 2,7- veya N-pozisyonlarında çeşitli farklı gruplarla zahmetsizce işlevselleştirilebilir (Higginbotham vd., 2017; Grigoras ve Antonoaia, 2005; Guo vd., 2012; Liu vd., 2022; Radhakrishna vd., 2023; Luizys vd., 2021), aralarında 3,6-süstitüe karbazol elektrolitik olarak daha kararlıdır ve 2,7-karşıtlarından daha yüksek bir triplet enerjisine (ET) sahiptir (Kulasi vd., 2007; Lai vd., 2010; Fei vd., 2009). Etkin konjugasyon uzunluğu ve elektron verme özelliklerindeki

farklılıklar, bağlantının molekül içi yük transferini (ICT) ve dolayısıyla ortaya çıkan polimerlerin elektrokimyasal, optik ve elektronik özelliklerini ayarlamayı sağladığını göstermektedir. Molekül içi yük transfer kompleksleri, elektron zengini karbazol türevleri (elektron vericisi: D) ve elektron eksikliği olan kısımları (elektron alıcısı: A) dönüşümlü olarak içeren malzemeler kullanılarak oluşturulabilir. Bu nedenle, sübstitüye 3,6- karbazol türevlerinin elektrokimyasal ve fosforesans uygulamaları için çok ilginç olduğu literatürde bulunmuştur. (Sriyab vd., 2016). Organik iletken polimerlerin kullanılmasının en önemli nedeni, HOMO ve LUMO seviyelerinin polimerin çekirdeğine veya asılı zincirine çeşitli sübstitüentler eklenerek ayarlanabilmesidir (Higginbotham vd., 2017). Karbazollere dayalı polimerler, uygun elektronik özellikleri, dayanıklılıkları, yaygın organik çözücülerde çözünürlükleri ve tercih edilen  $\pi$ - $\pi$  yığın etkileşimleri ve daha fazla delik hareketliliği nedeniyle optoelektronik cihazlardaki uygulamalar için kapsamlı olarak değerlendirilmiştir (Higginbotham vd., 2017; Sathiyam vd., 2016; Keremane ve Adhikari, 2021). Bu nedenle, polimerlerdeki karbazol kısımları, son zamanlarda büyük ilgi gören elektrolüminesans ve fotorefraktif malzemeler olarak hareket etmek için çok sayıda fotonik uygulamaya olanak sağlamaktadır (Radhakrishna vd., 2023; Sanda vd., 2007). Konjuge polimerlerdeki donör-akseptör (D-A) mimarileri, HOMO ve LUMO enerji seviyelerinin ayarlanmasında önemli bir rol oynamaktadır. Bu enerji seviyesi değişikliği, polimer yapısı içindeki donör ve alıcı moleküller arasındaki entegre molekül içi yük transferi (ICT) nedeniyle oldukça mümkündür (Jenekhe vd., 2007) (Devadiga vd., 2024)

### 2.3. Boya Duyarlı Güneş Pilleri

Boya duyarlı güneş pilleri (BDGP'ler) p-n eklemli fotovoltaik cihazlara teknik ve ekonomik bir alternatif oluşturmaktadır. 1970'lerde araştırma çabaları ZnO tek kristalleri üzerine odaklanmıştır, ancak bu tür BDGP'ler ZnO katmanlarının sınırlı ışık emiciliği nedeniyle çok düşük bir verimlilik göstermektedir (Tributsch ve Calvin, 1971; Tsubomura vd., 1976), ancak gözeneklilikleri optimize edilerek iyileştirilebilir. Gratzel hücreleri olarak bilinen ilk uygun modern BDGP'ler 1991 yılında UC Berkeley'de Brian O'Regan ve Michael Gratzel tarafından geliştirilmiş (O'regan ve Grätzel, 1991) ve boya duyarlı güneş hücrelerini çok popüler hale getirmiştir.

Yukarıda belirtildiği gibi, bahsedilen tüm güneş pili teknolojilerinin eksiklikleri vardır. OPV'ler uygun bir yük alanı sıralamasıyla zorlanır; PSC'ler kararlılık ve nem hassasiyeti oluşturmaktadır. BDGP'ler daha yüksek bir verimlilik sergilemek için geniş bir

soğurma spektrumuna sahip ışığa duyarlı malzemelere ihtiyaç duyar. Genel olarak, pratik dış ortamlarda BDGP'ler en iyi performansı göstermiştir (Fakharuddin vd., 2014). Boya duyarlı güneş pilleri, ışığın geliş açısından bağımsız olarak, düşük yoğunluklu ışığa maruz kaldıklarında bile gün boyunca önemli bir güç üretim performansı sergilerler (Daniel ve Delcamp, 2021). BDGP'lerin fotofiziksel performansları tek molekül seviyesindeki özelliklere dayanmaktadır. Bu nedenle, moleküler tasarım değiştirilerek ve bazı süstitüentler eklenerek moleküler düzeyde nispeten kolay bir şekilde ayarlanabilir. Ayrıca, BDGP'ler düşük sıcaklıklar ve düşük ışıklı ortamlar gibi zorlu koşullar altında, nem varlığında bile kararlı ve verimlidirler [Bella vd., 2015; Wang vd., 2018; Peddapuram vd., 2017]. Bu nedenle, BDGP'ler hala en umut verici güneş pili teknolojilerinden biridir ve bu tür güneş pillerinin verimliliğini artırmayı amaçlayan araştırmalar hem deneysel hem de teorik olarak devam etmektedir. Duyarlılaştırıcılar genellikle  $-COOH$ ,  $-PO_3H_2$  ve  $-B(OH)_2$  gibi fonksiyonel gruplarla tasarlanır ve yüksek ışık absorpsiyonu verimliliği sağlar (Kunzmann vd., 2018; Nazeeruddin vd., 2011; Altobello vd., 2004). H.J. Snaith (2010) tarafından öngörülen %20'lik teorik güç dönüşüm verimliliği, BDGP'lerin verimliliklerini artırmak ve ticarileştirme yönünde uygulanabilirliklerini genişletmek için kapsamlı araştırmalar yapmıştır.

### **2.3.1. Boya duyarlı güneş pilleri bileşenleri**

Bir BDGP veya Boya Hassaslaştırıcı Güneş Pili dört temel bileşenden oluşur:

- a. Çalışma elektrodu (fotoelektrot veya genellikle yarı iletken)
- b. Boya hassaslaştırıcı
- c. Redoks aracı veya elektrolit
- d. Karşı elektrot.

#### **2.3.1.1. Çalışma elektrodu (fotoelektrot veya genellikle yarı iletken)**

Çalışma elektrodu genellikle şeffaf bir iletken cam plaka üzerine ince bir yarı iletken malzeme tabakası (p-tipi veya n-tipi) biriktirilerek hazırlanır. İletken cam plaka, gelen ışığın geçtiği ve boya hassaslaştırıcılarına ulaştığı BDGP'nin üst kısmına yerleştirilir. BDGP'ler genellikle bu tür iki iletken şeffaf malzeme ile inşa edilir. Tipik olarak, ana amacı şeffaf malzeme olarak flor katkılı kalay oksit (FTO) veya indiyum katkılı kalay oksit (ITO) kullanılır:

- I. Optimum güneş ışığının hassaslaştırıcıya geçmesi için yüksek şeffaflık ve
- II. BDGP içindeki yük transferinin verimli bir şekilde yapılması ve bu tür malzemeden kaynaklanan herhangi bir kayba neden olmaması için yüksek bir iletkenliğe sahip olması beklenir.

TiO<sub>2</sub>, Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, ZnO, SnO<sub>2</sub> gibi farklı yarı iletken malzemeler n-tipi BDGP'ler için kullanılırken, NiO, Cu<sub>2</sub>O geniş bant aralıkları nedeniyle p-tipi BDGP'ler için kullanılmaktadır. Toksik olmaması, düşük maliyeti ve kolay bulunabilirliği TiO<sub>2</sub>'yi n-tipi BDGP'ler için en popüler yarı iletken malzeme haline getirmiştir. Ayrıntılı olarak, anataz TiO<sub>2</sub>, daha geniş bir bant aralığına sahip olması nedeniyle rutil TiO<sub>2</sub>'den daha uygundur (Grant, 1959; Roberts vd., 1978) ZnO, Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, SnO<sub>2</sub> gibi diğer oksitler için de umut verici sonuçlar elde edilmiştir [Tennakone vd., 1999; Duan vd., 2015; Bendjedidi vd., 2015; Sayama vd., 1998]. P-tipi BDGP'ler için NiO en çok kullanılan yarı iletkenler arasındadır (Qin vd., 2008 b; Sen ve Groß, 2019; Qin vd., 2009). Son zamanlarda Cu<sub>2</sub>O da birçok araştırma grubu tarafından p-tipi BDGP'ler için düşünülmektedir (Ursu vd., 2019; Yang vd., 2019). Gözenekli malzemeyi bir çalışma elektroduna dönüştürmek için tipik işlem, onu boya hassaslaştırıcı içeren çözücüye daldırmaktır. Bu boya molekülleri, yük aktarım işlemi için önemli olan yarı iletken yüzeye kovalent olarak bağlanabilir.

### **2.3.1.2. Boya duyarlaştırıcı**

Boya duyarlaştırıcı, BDGP'nin aslında ışık hasadının verimliliğinden sorumlu olan parçasıdır. Böyle bir boya hassaslaştırıcının ana rolü, gelen ışığı elektronik bir uyarıma dönüştürmek ve yarı iletken yüzeye yük transferini indüklemektir. Bazı spesifik fotofiziksel ve elektrokimyasal özellikler, bir güneş pili içindeki bir boya hassaslaştırıcının verimliliği için çok önemlidir. Özellikle, iyi bir boya aşağıdaki özelliklere sahip olmalıdır:

- I. Görünür bölge ile ultraviyole-görünür (UV-vis) bölge, yakın kızılötesi (NIR) bölgelerinde boyanın güçlü ışık absorpsiyon yeteneğine sahip olması gerekir.
- II. Boya gelen ışığı soğurduktan sonra hem temel durumunda hem de uyarılmış durumda kararlı olmalıdır.
- III. N-tipi BDGP'leri için, en yüksek işgal edilmiş molekül orbitalinin enerjisi (HOMO) iletim bandının (CB) altında olmalıdır. Ayrıca, HOMO enerjisi elektrolit redoks çiftinin enerjisinden de önemli ölçüde düşük olmalıdır. En

düşük işgal edilmemiş moleküler orbitalin enerjisi (LUMO) iletim bandının (CB) minimumuna yakın ya da üzerinde olmalıdır.

- IV. P-tipi BDGP'leri için, boyanın HOMO'su, boşluk enjeksiyonu için itici gücü arttırmak amacıyla yarı iletkenin valans bandı (VB) maksimumunun oldukça altında olmalıdır, LUMO enerjisi ise n-tipi BDGP'lerde olduğu gibi redoks enerjisinden daha yüksek olmalıdır.
- V. Boyanın en dıştaki atomları ve geri kalan grupları, çevre ve elektrolit ile temas halindeyken uzun vadeli kararlılığı sağlamak için hidrofobik olmalıdır.
- VI. Çapa grupları yarı iletken ile etkin bir yük transferinin yanı sıra boya ve yarı iletken arasında boyanın güçlü etkileşimini sağlamalıdır. (Sen vd., 2023)

### **2.3.1.3. Redoks aracı veya elektrolit**

Bir redoks çifti, çözünebilir olması koşuluyla BDGP için elektrolit görevini üstlenir. Bu tür çiftlere  $I^-/I^+$ ,  $SCN^-/SCN^{2-}$  veya  $Co(II)/Co(III)$  örnek olarak verilebilir (Ferrere vd., 1997; Oskam vd., 2001; Nusbaumer vd., 2001). İyonik sıvılar elektrolit olarak da kullanılabilir. Uygun bir elektrolit olarak hareket etmek için, sistemler aşağıdaki gibi bazı spesifik özelliklere sahip olmalıdır:

- (i) Farklı koşullarda kararlı olmalıdır. Termal, kimyasal veya elektrokimyasal stabilite sorunları olmamalıdır.
- (ii) Elektrolitin boya duyarlaştırıcı veya çalışma/karşıt elektrotlarla herhangi bir aşındırıcı reaksiyonu olmamalıdır.
- (iii) Redoks çifti fotosensitizörü etkin bir şekilde oksitlemeli veya indirgemelidir.
- (iv) Soğurma spektrumları boya molekülleri ile örtüşmemelidir.
- (v) Elektrolit, çalışma ve karşıt elektrot arasında hızlı yük transfer süreçlerini mümkün kılmak için yüksek bir iyon hareketliliği sergilemelidir.

BDGP'de en sık kullanılan elektrolit  $I^-/I^{3-}$ 'tür (Gao vd., 2008). Yine de elektrotlarda korozyon etkilerine neden olması veya uzun vadeli stabilitesinin zayıf olması gibi bazı sınırlamaları vardır (Toivola vd., 2006; Wu vd., 2008). İyonik sıvılar da bir dereceye kadar etkili bir şekilde kullanılabilir, ancak en büyük dezavantajlarından biri sızıntı faktörleriyle ilgilidir. Son zamanlarda, bu dezavantajların üstesinden gelmek için katı hal elektrolitleri kullanılmaktadır (Wang vd., 2009; Fakharuddin vd., 2014).

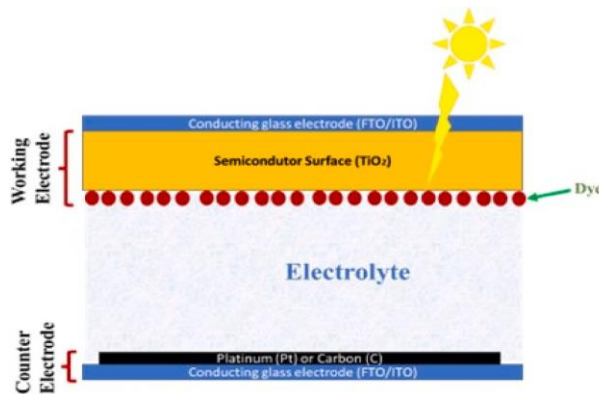
### 2.3.1.4. Karşıt elektrot

Karşıt elektrot, BDGP'lerin çok önemli bir bileşenidir. Ana önemi, dış devreden elektronları toplamak ve elektrolitteki redoks indirgemesini katalize etmekle bağlantılıdır. Tipik olarak platin (Grätzel ve Moser, 2001) veya karbon (Wang vd., 2014 a) iletken malzeme olarak biriktirilmiş bir katot görevi görür. Bu durum fotovoltaiik performansı, BDGP'lerin kararlılığını ve ayrıca cihazın maliyetini önemli ölçüde etkilemektedir. Karşıt elektrotlar için diğer alternatif malzemelere karbonil sülfür (COS) (Grätzel, 2005), FeSe (Cai vd., 2014), CoNi (Yeoh ve Chan, 2021), PEDOT (Venkatesan vd., 2022) gibi alaşımlar Au/GNP (Altın nanoparçacık) örnek verilebilir (Kakiage vd., 2015).

### 2.4. **Boya Duyarlı Güneş Pillerinin Çalışma Prensibi**

BDGP'lerin çalışma prensibi dört adıma dayanmaktadır.

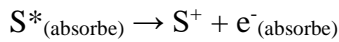
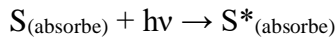
- Güneş tarafından yayılan ışığın boya tarafından emilmesi.
- Elektronların boyadan yarı iletkene (n-tipi için) ve yarı iletken boyaya (p-tipi için) enjekte edilmesi.
- Elektronların veya boşlukların yarı iletken içinde taşınması.
- Akımın toplanması (bkz. Şekil 2.1.)



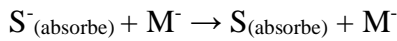
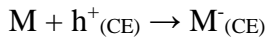
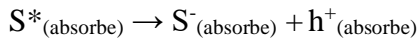
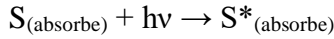
**Şekil 2.1.** Boya duyarlı güneş pilinin şematik diyagramı. (Sen vd., 2023)

Şekil 2.2. şematik diyagramda gösterildiği gibi, n-tipi bir BDGP için, gelen ışık fotosensitizer (S) tarafından emilir ve S'yi elektronik temel durumdan S\* ile gösterilen

uyarılmış bir duruma yükseltir. Uyarılmış duyarlaştırıcı daha sonra elektronları n tipi yarı iletkenin iletim bandına enjekte eder. Bu uyarılmış elektronlar nanosaniye mertebesinde yaşam sürelerine sahiptir. Enjekte edilen elektronlar nano parçacıkların içinde yayılmakta ve harici devre aracılığıyla karşıt elektroda ulaşmaktadır. Boya duyarlaştırıcının verimliliğinin kısıtlanması boyaya elektron transferinin geri gelmesiyle açıklanabilir. Karşıt elektroda enjekte edilen elektronlar redoks çiftini ( $M/M^{\cdot-}$ ) azaltır ve böylece boyanın rejenerasyonu gerçekleşir, bu da döngüyü tamamlar:

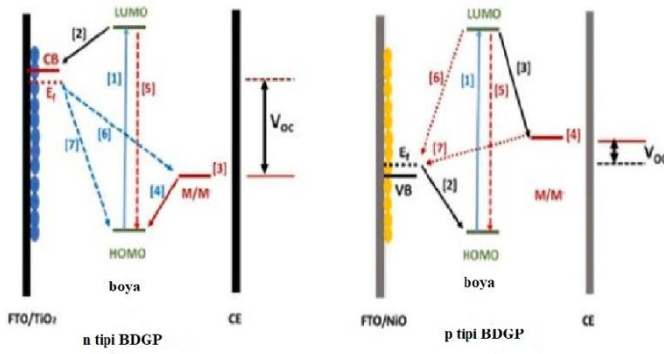


P tipi BDGP'ler söz konusu olduğunda, bir elektron yarı iletkenin boyaya aktarılır. Uyarılan boya, elektronu karşıt elektrot aracılığıyla yarı iletkene geri aktarılmak üzere redoks çiftine aktarır veya daha fazla fotokatalitik faaliyet için katalizöre aktarır. Boşluk, yarı iletkenin valans bandında oluşturulur. Tüm elektron/boşluk transfer mekanizması Şekil 2.2. de gösterilmiştir:



Bir BDGP'nin performansı veya verimliliği Eşitlik (1) kullanılarak değerlendirilir:

$$\eta (\%) = \frac{J_{SC} * V_{OC} * FF}{P_{in}} \quad (1)$$



Şekil 2.2. n-tipi ve p-tipi BDGP'lerin şematik diyagramı. (Sen vd., 2023)

1. Ara bağlantılar (seri veya paralel) ve harici elektrik bağlantıları
2. Elektrolit sızıntısını ve nem girişini önlemek için kapsamlı sızdırmazlık
3. TCO'lar üzerine büyük ölçekli metal oksit kaplanması
4. Elektrolit dolumu
5. Geleneksel silikon bazlı PV teknolojileri ile karşılaştırılabilir bir cihaz ömrü beklentisi (Yeoh ve Chan, 2021, Fakharuddin vd., 2014)

Bir boyanın verimliliği dört terimden oluşmaktadır. i. açık devre voltajı ( $V_{OC}$ ), ii. kısa devre akım yoğunluğu ( $J_{SC}$ ), iii. gelen ışığın maksimum gücü ( $P_{in}$ ) ve iv. dolun faktörü (FF) (Murakami ve Grätzel, 2008). Açık devre gerilimi veya  $V_{OC}$ , açık devre koşulları altında iki elektrot arasındaki gerilimdir.  $J_{SC}$ , güneş pilinin üretebileceği maksimum akımdır ve güneş pilinin optik özelliklerine bağlıdır.  $P_{in}$ , BDGP'nin güneş ışığını elektriğe dönüştürmek için maksimum verimliliğidir. FF Dolun faktörü, maksimum güç çıkışının açık devre voltajı ve kısa devre akım yoğunluğunun çarpımına oranı ile verilir. Harici kuantum verimliliği veya gelen fotondan akıma verimlilik (IPCE) de BDGP'nin verimliliğini anlamak için önemlidir. Harici devreden akan elektron sayısının yüzeye gelen foton sayısına oranı ile belirlenir. IPCE değeri, boya duyarlaştırıcının ışık hasat verimliliği (LHE) ile doğrudan ilişkilidir.

## 2.5. Boya Duyarlı Güneş Pillerinin Sınırlamaları

BDGP'ler düşük maliyetli, kolay üretim ve bakım sağlayan umut verici bir teknolojiye karşılık gelse de BDGP'lerin geliştirilmesi hala sınırlamalarla karşı karşıyadır (Yeoh vd. 2019; Kabir vd., 2019; Yoon vd., 2011). BDGP'ler tarafından ulaşılabilen son maksimum verimlilik % 14-15 civarındadır (Ji vd.,2020; Burschka vd., 2013). BDGP'lerin

mevcut maksimum verimliliği, amorf yapıdaki BDGP'lerin verimliliğini çoktan aşmış durumdadır. Ancak yine de birleşik silikon bazlı güneş pillerinin verimliliğinden daha düşüktür (Fakharuddin vd., 2014). Bu nedenle, BDGP'lerin performansını artırmak için daha fazla araştırma ve geliştirmeye ihtiyaç duyulmaktadır. BDGP'lerin ana sınırlayıcı faktörlerinden biri, elektrolitin çalışma sıcaklık aralığının daha düşük olması ile ilgilidir, çünkü BDGP'ler çok yüksek ve çok düşük sıcaklıklara duyarlıdır (Yeoh ve Chan, 2021). Düşük sıcaklıklarda elektrolit donabilir ve yüksek sıcaklıklarda sıvı elektrolit genişler ve genellikle güneş pilini kullanılamaz hale getirir. Sıvı elektrolitler ayrıca potansiyel kararsızlık, maksimum çalışma sıcaklığının sınırlandırılması, buharlaşma tehlikesi ve sızıntı veya buharlaşma nedeniyle elektriksel seri bağlantı oluşturulduğunda ekstra maliyet gibi sorunlara neden olur (Zhang vd., 2021; Ono vd., 2016; Jung ve Park, 2015). BDGP'ler fotoliz, fotodedektörler ve güç kaynağı, karbon elektrot tabanlı hücreler, tandem hücreler gibi çeşitli uygulamalarda yüksek güç verimlilikleri nedeniyle tek kristal hücreler (Zuo vd.,2016; Zhou ve Lin, 2020; Dang vd., 2016; Eperon vd., 2016) vb. kullanılmaktadır. Ancak güneş pillerinin pratik kullanımında, özellikle de uzun süreli kararlılıkları açısından sınırlamalar mevcuttur (Sarwar vd., 2020; Wand vd.,2018; Ma vd., 2017 a; Mohammadnezhad vd., 2018). Buna ek olarak, verimsiz bir hassaslaştırıcı rejenerasyonu da BDGP'lerin toplam verimliliğini etkileyecektir (Jennings vd., 2011). Ve son olarak, BDGP'nin yüksek ölçekli üretimi laboratuvarın endüstri ölçeğine getirilmesi, halka açılma sonrasında toplam verimliliği belirlediği için başka bir zorluk teşkil etmektedir. Rekabetçi BDGP'ler üretmek için, laboratuvar ölçeğinde mevcut olmayan ek faktörlerin ve cihaz parçalarının dikkate alınması gerektiği görülmektedir.

Bazı araştırma grupları, W tipi ara bağlantılar kullanarak %8,2'ye kadar verimliliğe sahip DSSC modüllerinin üretimi gibi BDGP'nin yükseltilmesiyle ilgili zorlukları ele almaya başlamıştır. Ayrıca cihaz ömürlerini uzatmak için katı hal BDGP modüllerinin geliştirilmesi ve seri üretime daha uygun olan esnek BDGP modülünün ortaya çıkmaya başlamıştır. (Sen vd., 2023)

## 2.6. Boya Duyarlılaştırıcı Seçenekleri

Bir BDGP cihazında boya hassaslaştırıcıların uygun seçimi için birkaç önemli kriter vardır ve bu kriter Gratzel vd. nin (1991) makalesinin ortaya çıkmasından sonra dünya çapında birçok grubun birincil araştırma konularından biri haline gelmiştir. İki spesifik boya hassaslaştırıcı türü özellikle dikkat çekmiştir: metal bazlı boyalar ve son zamanlarda metal

içermeyen organik boyalar. Bu derlemede, hem metal bazlı boyalara (az veya çok miktarda metal içeren) hem de D- $\pi$ -A tipi geometrilere sahip metalsiz organik boyalara odaklanıyoruz.

### 2.6.1. Rutenyum kompleksleri

Boya hassaslaştırıcıların en yaygın seçimi, 1991 yılında O'Brien ve Grätzel tarafından BDGP'lerin ilk tasarımından bu yana kullanılan Rutenyum bazlı boyadır. L 2,2'-bipiridin-4,4' -dikarboksilik asit ve L' 2,2' -bipiridin olmak üzere trimerik bir rutenyum kompleksi olan  $RuL_2(\mu-(CN)Ru(CN)L)_2$ 'yi fotoanot olarak bir  $TiO_2$  filmi ile birlikte kullanmışlardır (Amadelli vd., 1990; Nazeeruddin vd., 1990). Daha sonra Nazeeruddin vd., ligand olarak karboksillenmiş terpiridil ve üç tiyosiyanat grubu içeren bir rutenyum kompleksi hassaslaştırıcı sentezleyerek pankromatik boyalar geliştirmiştir. Tam AM 1,5 güneş ışığı altında yapılan ölçüme göre, bu boya  $20,5 \text{ mA/cm}^2$  kısa devre akımı ve  $0,72 \text{ V}$  açık devre voltajı elde etmiştir. Bu boyanın genel dönüşüm verimliliği %10,4'tür (Nazeeruddin vd., 2001). Genel olarak, rutenyum bazlı boyalar, uygun foto-elektrokimyasal özellikleri ve oksitlenmiş durumdaki yüksek kararlılıkları nedeniyle BDGP uygulamalarında ışığa duyarlı hale getiriciler olarak özellikle dikkat çekmiş ve pratik uygulamaları mümkün kılmıştır (Kohle vd., 1997). Rutenyum bazlı boyalarla elde edilebilecek maksimum verimlilik yaklaşık %11'dir ve N749 ve N719 gibi iyi bilinen Ru-duyarlılaştırıcıların çoğu, Rutenyum metal merkezine bağlanan tiyosiyanat ligandına sahiptir ve bu da BDGP'nin diğer ligandlara göre daha iyi bir verimliliğe sahip olmasını sağlar. Ancak kararlılık problemlerinin yanı sıra cihazda bulunan farklı türlerle (örn. 4-tert-butilpiridin (TBP)) kolayca yer değiştirebilmesi nedeniyle, bu tür kararsız ligandların değiştirilmesi önemlidir (Mauri vd., 2021). Bessho vd. nin 2009 yılında NCS ligandını siklometalize 2,4-diflorofenilpiridin ile değiştirerek YE05 kompleksini elde etmesiyle başlayan süreçte tiyosiyanat için bazı umut verici alternatif ligandlar önerilmiştir; bu kompleks, siklometalize ligandın iki tiyosiyanat grubundan daha güçlü donör yeteneği nedeniyle N719'a kıyasla kırmızıya kaymış bir absorpsiyon spektrumu göstermiştir (Bessho vd., 2009). Böyle bir yetenek, en yüksek işgal edilmiş moleküler orbitalin (HOMO) en düşük işgal edilmemiş moleküler orbitalden (LUMO) daha güçlü bir şekilde dengesizleşmesine neden olur (Nazeeruddin vd., 2011).

$N^N$ - veya  $N^O$ -tipi ligandlar (Rutenyum merkezini en az bir anyonik azot atomu üzerinden şelatlayan) ailesine dayanan diğer ligandlar da araştırmacılar tarafından

çalışılmıştır (Mauri vd., 2021). Wu ve çalışma arkadaşları 2013 yılında Rutenyum kompleksleri için dciby bazlı ankraj grupları sentezlemişlerdir, yardımcı ligandlar CF<sub>3</sub> grubu taşıyan pirazol halkalı pirazol-(izo)kinolinil'dir (Yang vd.,2011). Dört farklı boyayı (TFRS-51, TFRS-52, TFRS-53 ve TFRS-54, Şekil 4f), TFRS52 en yüksek ~%10,88 olmak üzere yüksek verimlilikle sentezlemişlerdir (Wu vd., 2013 a). 10'un üzerinde yüksek verimliliğe sahip bu tür diğer rutenyum bazlı boyaların bir listesi Çizelge 2.1.'de verilmiştir.

**Çizelge 2.1.**N-tipi DSSC için bazı rutenyum bazlı boyaların J<sub>SC</sub>, V<sub>OC</sub>, FF ve PCE değerleri ile 10'dan fazla PCE ve fotoanot malzemesi olarak TiO<sub>2</sub> dikkate alınmıştır.

No.	Boya	J <sub>SC</sub> (mA·cm <sup>-2</sup> )	V <sub>OC</sub> (mV)	FF (%)	PCE (%)	Referans
1	N3	18.20	720.0	73.0	10.00	(Nazeeruddin vd., 1993)
2	N749	20.53	720.0	70.4	10.40	(Nazeeruddin vd.,2001)
3	N719	17.73	846.0	72.0	11.18	(Nazeeruddin vd., 2005)
4	Z910	17.20	777.0	76.4	10.20	(Wang vd., 2004)
5	C101	17.94	777.7	78.5	11.00	(Gao vd.,2008)
6	C103	18.35	760.0	74.8	10.40	(Yu vd.,2009)
7	C104	17.87	760.0	77.6	10.53	(Gao vd.,2008)
8	C105	18.90	747.0	74.4	10.06	(Gao vd.,2009)
9	C106	19.20	776.0	75.9	11.29	(Gao vd.,2009)
10	C107	19.18	739.0	75.1	10.70	(Yu vd.,2009)
11	C219	17.94	770.0	73.0	10.10	(Zeng vd., 2010)
12	RC-36	19.17	721.0	74.0	10.23	(Chen vd., 2017)
13	PRT4	21.60	714.0	65.2	10.05	(Chen vd., 2009)
14	PRT14	19.70	760.0	68.6	10.30	(Yang vd., 2011)
15	PRT21	19.00	760.0	74.9	10.81	(Wang vd., 2014 b)
16	PRT22	20.40	740.0	73.9	11.16	(Wang vd., 2014 b)
17	PRT23	18.70	760.0	73.4	10.43	(Wang vd., 2014 b)
18	PRT24	20.10	730.0	71.6	10.51	(Wang vd., 2014 b)
19	YE05	17.00	800.0	74.0	10.10	(Bessho vd., 2009)
20	TF2	20.00	790.0	66.5	10.50	(Yang vd., 2011)
21	TF3	21.39	760.0	66.0	10.70	(Yang vd., 2011)
22	TF4	20.27	770.0	67.5	10.50	(Yang vd., 2011)
23	HIS-2	23.07	680.0	71.0	11.10	(Numata vd., 2013)
24	TFRS-4	18.70	750.0	72.9	10.20	(Wang vd., 2013)
25	TFRS-52	16.30/16.80	860.0/832.0	72.0/78.0	10.17/10.88	(Wu vd., 2013 a)
26	IJ-1	19.20	748.0	72.0	10.30	(Yum vd., 2009)

Rutenyum bazlı komplekslerin n-tipi BDGP'ler için boya olarak kullanılmasına yönelik çalışmalar sadece deneylerle sınırlı kalmamış, aynı zamanda elektronik ve fotokimyasal özelliklerin çözülmesi ve BDGP'ler için potansiyel uygulamaya sahip Rutenyum komplekslerinin bulunması ile ilgili çeşitli teorik çalışmalar da yapılmıştır. Genişletilmiş  $TiO_2$  kümesinin Ru(II) boyalarının (N719 ve YE05), yani  $(TiO_2)_{38}$  ve  $(TiO_2)_{82}$ 'nin (De Angelis vd., 2010) adsorpsiyon geometrisi ve elektronik yapısının ilk prensip modelleme çalışmaları 2010 yılında De Angelis ve meslektaşları tarafından gerçekleştirilmiştir, ancak bu çalışma bu kompleks sistemlerin fotokimyasal özelliklerini dikkate almamıştır.

Bir başka örnek 2016 yılında Ling-Jun vd. tarafından verilmiştir (He vd., 2016). Burada, teorik bir perspektiften bir boya- $TiO_2$  arayüzünün BDGP performansı üzerindeki etkisine odaklandılar. Bahsi geçen bu çalışmada üç farklı Rutenyum bazlı boya,  $[Ru(bpp-1)(bpy)Cl]^+$ ,  $[Ru(bpp-2)(bpy)Cl]^+$  ve  $[Ru(bpp-3)(bpy)Cl]^+$  kullanılmıştır.  $TiO_2$  (101) yüzeyinin modellenmesi için  $Ti_5O_2OH_{22}$  kümesi uygulanmıştır (He vd., 2016). İlave hidrojen atomları  $TiO_2$  kümesinin bağlarını pasifleştirmek için eklenmiştir. De Angelis vd. nin çalışmasının aksine, Ru bazlı boyalar ile  $Ti_5O_2OH_{22}$ 'nin birleştirilmesinin fotokimyasal özellikleri dikkate alınmıştır. Bu çalışmaya göre, güneş pilinin kısa devre akım yoğunluğu ( $J_{sc}$ ) ile ilişkili olan integral foton akı yoğunluğu ( $\Phi(\lambda)$ ) tahmin edilebilir (He vd., 2016).

Rutenyum bazlı moleküllerin NiO gibi p-tipi yarı iletkenlerle bağlantılı olarak p-tipi BDGP'lerde boya olarak da kullanılabilir. Şu ana kadar taranan literatürde, p-tipi BDGP'ler için Ru-boyalarının uygulanması ilk olarak 2011 yılında Odobel'in grubu tarafından tanıtılmıştır (Pellegrin vd., 2011). Rutenyum tris bipyridin komplekslerini  $[Ru(bpy)_3]^{2+}$  dört farklı çapa varyasyonu, karboksilik asit, ditiyokarboksilik asit, katekol ve metil fosfonik asitler ile kullandılar. Bu ilk Ru bazlı boya p-tipi BDGP için, metil fosfonik asit çapası kullanılan çapalar arasında en yüksek verimi vermiştir. Bununla birlikte, verimlilik çok küçüktü (yaklaşık %0,025). Daha sonra, Ru bazlı boya p-tipi BDGP'lerin uygulanmasına yönelik çok sayıda çalışma yapılmıştır (Pellegrin vd., 2011; Nattestad vd., 2008; Freys vd., 2012; Wood vd., 2014; Lyu vd., 2016; Sinopoli vd., 2017; Brunner vd., 2016; Ji vd., 2012). Bununla birlikte, fotoanot olarak NiO içeren Ru tabanlı p-BDGP'lerin özelliklerinin listelendiği Tablo 1'de gösterildiği gibi, bu sistemlerde elde edilebilecek en yüksek verimlilik

hala nispeten küçüktür ve %1'in altındadır. Bu nedenle, verimli p-tipi BDGP'lerin tasarımıyla ilgili hala birçok açık soru bulunmaktadır.

## 2.6.2. Kullanılan metal kompleksler

Rutenyum ve osmiyum kıtlığı nedeniyle, alternatif metal kompleksleri arayışı halen devam etmektedir. Renyum, rodyum, iridyum gibi az bulunan bazı metaller, boya hassaslaştırıcılar bağlamında özellikleri aşağıda tartışılacak olan demir, bakır, kobalt, krom vb. gibi bol bulunan metallerle birlikte incelenmiştir.

### 2.6.2.1. Demir (II)

Yerkabuğunun %5'i demirden oluşur ve bu da onu alüminyumdan sonra en bol bulunan ikinci metal yapar. Demir bazlı boyalar ilk olarak 1998 yılında Ferrere vd. tarafından geliştirilmiştir (Ferrere vd., 1998). Bununla birlikte,  $[\text{Fe}(\text{dcbpy})_2(\text{CN})_2]$  komplekslerini kullanan demir bazlı BDGP'ler çok düşük kısa devre akım yoğunluğu ( $J_{\text{SC}}$ ) ve açık devre voltajı ( $V_{\text{OC}}$ ) göstermektedir. Bunun nedeni, MLCT'nin metal merkezli durumdan hızlı bir şekilde devre dışı bırakılmasıdır, bu da yarı iletkene verimsiz bir elektron enjeksiyonuna yol açarak daha düşük bir kısa devre akım yoğunluğuna ( $J_{\text{SC}}$ ) neden olur (Wenger, 2019). Demir bazlı boya hassaslaştırıcıların performansını artırmaya yönelik girişimler çeşitli gruplar tarafından gerçekleştirilmiştir. Jakubikova, McCusker ve çalışma arkadaşları, daha uygun elektrolitlerin seçilmesinin  $J_{\text{SC}}$ 'nin yanı sıra bu tür boyaların genel verimliliğini de artırabileceğini göstermiştir (Tichnell vd., 2020)

### 2.6.2.2. Magnezyum

Bir diğer bol bulunan malzeme olan magnezyum (yer kabuğunda %2,1) da BDGP'lerde kullanılmıştır, ancak fotoaktif metal organik komplekslerinde alternatif bir metal olarak değil,  $\text{TiO}_2/\text{ZnO}$  elektrot yüzeyleri için bir katkılayıcı olarak kullanılmıştır. Ringlebet vd., değişen Mg konsantrasyonlarına sahip nanopartiküllere dayanan Mg katkılı ZnO (MZO) fotoanotların  $V_{\text{OC}}$ 'yi önemli ölçüde artırdığını ve boyanın toplam verimliliğinde bir artışa yol açtığını göstermiştir (Ringleb vd., 2021). N. Siregaret vd. tarafından yapılan yakın tarihli bir çalışmada fotoanot olarak Mg katkılı ZnO ince film ve gül mersin doğal boyası (*Rhodomyrtus tomentosa*) kullanılarak 500 °C tavlama sıcaklığında %3,53 maksimum verim elde edilmiştir (Siregar vd., 2021). Bu çalışma aynı zamanda fotoanodun

tavlama sıcaklığının bir BDGP cihazının verimliliğini hassas bir şekilde etkileyebileceğini göstermiştir.  $TiO_2$  fotoanotların magnezyum nitrat kullanılarak benzer yüzey modifikasyonları M. Asemiet vd. tarafından gerçekleştirilmiş ve sonuç olarak fotojenere elektronların rekombinasyonu azaltılmıştır (Yasin vd., 2024).

### **2.6.2.3. Titanyum**

Titanyum, bol bulunan bir diğer malzemedir ve n-tipi BDGP'ler için en uygun yarı iletken malzeme olarak yaygın şekilde kullanılmaktadır. Bununla birlikte, bazı çalışmalar titanyum bazlı boya hassaslaştırıcılara da odaklanmıştır. M.V. Martínez-Díaz vd., yakın IR bölgesinde emilim sergileyen titanyum metal merkezli ftalosiyanın bazlı boyalar üzerinde çalışmışlardır. Yavaş rekombinasyon ile etkili bir elektron enjeksiyonu rapor edilmiştir. Yine de zayıf yük ayrımı nedeniyle, sadece yaklaşık %0,2'lik bir genel verimlilik gözlemlenmiştir (Palomares vd., 2004; Martinez-Diaz vd., 2010). Zarate vd. nin DFT çalışmaları, porfirazin titanyum (IV) kompleksleri kullanılarak daha iyi bir performansa ulaşılabileceğini göstermiştir (Zarate vd., 2011).

### **2.6.2.4. Çinko**

Porfirazin bazlı boyalar aslında son zamanlarda Zn-metal boya hassaslaştırıcıları için düşünülmüştür. Flores'in hesaplamalı bir çalışması, çeşitli elektriksel sübstitüentlere ve çapalara sahip bir dizi yüksek verimli çinko ftalosiyanın boyası tanımlamıştır (Linares-Flores vd., 2018). Hem teorik hem de deneysel yaklaşımlar kullanılarak benzer Zn-metal bazlı boyalarla BDGP'ler için Zn bazlı boya hassaslaştırıcı potansiyelini gösteren daha fazla çalışma yapılmıştır (Martinez-Diaz vd., 2010; Luo vd., 2014; POONAM vd., 2016; Zarate vd., 2013; Ashokkumar vd., 2014). Son çalışmalar ayrıca boya duyarlı güneş pilleri (BDGP'ler) için Zn-ftalosiyanın türevlerinin katılımını ele almıştır, bu tür boyalar elektronları  $TiO_2$ 'nin iletim bandına enjekte etmek için yeterli itici güce sahiptir (Zarate vd., 2013). Benzer çalışmalar, elektron verici tert-bütilsülfanil veya heksilsülfanil grupları ve bir karboksilik asit bağlayıcı grubu taşıyan asimetrik çinko ftalosiyanın boyaları üzerinde de gerçekleştirilmiştir. Benzer sonuçlar veren kuantum kimyasal hesaplamalar da yapılmıştır. Çinko porfirin halkası bazlı boya hassaslaştırıcıları %7,13 gibi yüksek güç dönüşüm verimliliği sergileyen çalışmalar yapılmıştır (Chen vd., 2014; Gros vd., 2018). C. Li vd., Zn-porfirin bazlı boya hassaslaştırıcıları için %10,7'lik en yüksek toplam verimliliği göstermiştir (bir eş hassaslaştırıcı ve bir eş emici yokluğunda rutenyum olmayan iyot bazlı BDGP'ler için

bir rekor) (Li vd., 2016). Pthalocyanin ile porfirinler de boya hassaslaştırıcı olarak kullanılmıştır.

## 2.7. Organik Boyalar

Önceki bölümlerde tartışıldığı gibi, BDGP arařtırmaları uzun bir süre boyunca yüksek verimlilikleri nedeniyle Ru bazlı boyalara odaklanılmıştır, ancak hem az ve hem de bol miktarda bulunan diđer metal bazlı boyaları ele alan arařtırma ve geliřmeler, umut verici alternatifler olduđunu göstermiştir. Metal içermeyen organik boyalar, farmasötik kimya, antikanser ve anti-viral ilaç arařtırmaları, tekstil endüstrileri gibi birçok alanda yaygın olarak kullanılmaktadır. Yella vd. 2011 yılında, hala metal merkezi içeren porfirin bazlı boyaların yüksek verimliliđini göstermiştir (Yella vd., 2011), ancak organik kısımdaki deđişiklik, BDGP uygulamaları için organik boyaların kapsamlı çalışmalarına giden yolu açmıştır. Düşük maliyetleri, yüksek molar sönme katsayıları, sentez kolaylıđı ve yüksek sıcaklık altında yüksek kararlılıkları nedeniyle metalsiz organik boyalar, metal bazlı, özellikle Ru bazlı komplekslere kıyasla günümüzde giderek daha popüler hale gelmiştir (Zhang vd., 2013). Metal içermeyen bir organik boyanın yapısı, sırasıyla donörler, boşluk oluřturucular veya bađlayıcılar ve alıcılar olarak adlandırılan üç temel parçadan oluřur. Donör kısımlar elektron veren gruplardan oluřur ve 'D' ile gösterilir. Bađlayıcılar veya boşluk oluřturucular genellikle donör ve alıcı grupları birbirine bađlayan  $\pi$ -konjuge sistemlerden oluřur. Elektronların donör bölgeden alıcı bölgeye hızlı transferi bu ' $\pi$ -aralıklarına' bađlıdır. 'A' ile gösterilen alıcı gruplar elektron alıcılarıdır ve önemli bir rol oynarlar. Yukarıda tartışıldığı gibi, bu tür D- $\pi$ -A hassaslaştırıcıların donör grupları fenilamin, kumarin, indolin, trifenilamin, karbazoller vb. gibi elektron bakımından zengin gruplardan seçilir.  $\pi$ -uzayıcıları tiyofen, pirol, etenil, fenilen, benzotriazol, kinoksalin vb. gibi basitten karmaşıđa konjuge bileřikler arasından seçilebilir (Sen ve Groß, 2019). Alıcı gruplar, karboksilik asit, sülfonik asit, salisilik asit, siyanoakrilik asit, piridin vb. gibi yarı iletken yüzeyle kolayca etkileřime girebilen farklı bileřiklerden seçilebilir (Sen vd., 2020). Son arařtırmalar, donörlerin (He vd., 2017; Fan vd., 2012; Biswal vd., 2021), aralayıcıların (Sen ve Groß, 2019) ve alıcıların (Brunner vd., 2016) uygun bir şekilde deđiřtirilmesi yoluyla BDGP'lerin performansını artırmaya odaklanmıştır. Metal içermeyen organik boyaların kimyasal yapısı, BDGP cihazlarının verimliliđi ve kararlılıđı için çok önemlidir (Zhu vd., 2011). Bu nedenle, birçok çalışma metalsiz organik boyaların kimyasal yapısının optimizasyonuna ayrılmıştır. řimdiye kadar, organik boyalar için D-( $\pi$ -A)<sub>2</sub>, D- $\pi$ -A, D-D- $\pi$ -A, D-A- $\pi$ -A ve (D- $\pi$ -A)<sub>3</sub>L<sub>2</sub>

gibi çeşitli iskeleler geliştirilmiştir. Bununla birlikte, donör- $\pi$ -köprü-alıcı (D- $\pi$ -A) yapıları, kolay sentezleri, düşük maliyetleri, yüksek molar absorpsiyon katsayıları, yüksek verimlilikleri, gelişmiş çevresel uyumlulukları ve bileşenlerinin bolluğu nedeniyle BDGP'ler için metalsiz organik boyalar için en popüler tasarıma karşılık gelir. Bu bileşikler,  $\pi$ -köprüsü aracılığıyla A alt biriminden D'ye molekül içi yük transferini (ICT) kolaylaştıran bir itme-çekme cihazı yapısına sahiptir. Ayrıca, HOMO-LUMO boşluğunun azaltılması ve gelişmiş absorpsiyon özellikleri D,  $\pi$  ve A kısımlarının modifiye edilmesiyle elde edilebilir. Genel olarak, hassaslaştırıcı boyalar elektron alıcı grup aracılığıyla yarı iletken yüzeye bağlanır. Yukarıda bahsedilen kavramları uygulayarak, son yirmi yılda yüzlerce metalsiz organik boya BDGP için hassaslaştırıcı olarak başarıyla test edilmiştir. Metal içermeyen organik boyalar arasında, trifenilamin (TPA), süstitüe trifenilamin (Qin vd., 2008 a; Murakami vd., 2016; Eom vd., 2017; Dong vd., 2017; Wu vd., 2013 a; Polo-Garzon vd., 2019; Mahmood, 2016; Kitamura vd., 2004; Ma vd., 2017 b; Prachumrak vd., 2017; Wan vd., 2021), karbazol (Kakiage vd., 2014; Zhang vd., 2019; Koumura vd., 2009) ve indolin boyası (Ito vd., 2006; Ito vd., 2008; Tian vd., 2020) gibi donör gruplara sahip boya molekülleri dikkate değer bir verimlilik elde edilmiştir (Selopal vd., 2016).

### 2.7.1. D- $\pi$ -A Boyaları

Karbazol, güçlü elektron zengini doğası, mükemmel hol taşıma yeteneği ve mükemmel kararlılığı nedeniyle D- $\pi$ -A iskeletlerinde en yaygın kullanılan yardımcı donörlerden biridir (Yao vd., 2015 a; Liang ve Chen, 2013). İlk uygulamalardan biri olarak, Koumura vd. BDGP'de hassaslaştırıcı olarak karbazol bazlı bir organik boya kullanmışlardır (Koumura vd., 2006; Yao vd., 2015 b). Daha birçok karbazol bazlı boya test edilmiş ve bunların çoğu mükemmel güç dönüşüm verimlilikleri göstermiştir (Zhang vd., 2009; Koumura vd., 2009). Hara vd. BDGP'ler için indolo[3,2-b]karbazol boyaları (MKZ-21 ve MKZ-22) tasarlayıp sentezlemiş ve MKZ-21'in MKZ-22'den daha iyi bir PCE'ye sahip olmasıyla daha iyi bir fotovoltaiik performansı kolaylaştıran güçlü elektron verme yeteneklerini göstermiştir (Zhang vd., 2009).

2009 yılında aynı grup, MK-14 ve MK-16 olarak adlandırılan BDGP'ler için heksiloksifenil grubu bulunan karbazol boyaları tasarlamış ve sentezlemişlerdir. Bir heksiloksifenil süstitüentinin elektron ömrünü arttırdığını ve açık devre voltajını iyileştirdiğini bulmuşlardır (Koumura vd., 2009). Karbazol bazlı boyalarla PCE'yi geliştirmek için Hara vd. üç yeni tiyeno [3,2-b] indol bazlı organik boya MKZ-39, MKZ-40

ve MKZ-41 sentezlemiştir (Kato, 2012). Hesaplamalı bir çalışma tieno[3,2-b] indolün karbazolden daha büyük bir donör yeteneğine sahip olduğunu göstermiştir. Bununla birlikte, donör kısım olarak tieno[3,2-b]indol, molekülü karbazol bazlı boyalara kıyasla daha düzlemsel hale getirir. Üç boya arasında MKZ-40 %7,8 ile en yüksek verimi göstererek tieno[3,2-b]indolün BDGP'ler için umut verici bir donör grup olarak kullanılabilceğini göstermişlerdir.

Verici birimdeki elektron verici grupların (-CH<sub>3</sub>, -NH<sub>2</sub> ve -OH) ve alıcı birimlerdeki elektron çekici grupların (-CF<sub>3</sub>, -COCl, -F ve -NO<sub>2</sub>) etkisi Kalita vd. tarafından incelenmiştir (Ahmed vd., 2021). COU-BTZ ve COU-IND boyalarında alıcı üniteye bağlı -NO<sub>2</sub> grubunun çalışılan diğer boyalara göre daha verimli boyalar olduğunu gözlemlemişlerdir. Yapılan tüm teorik çalışmalarda, öncelikle bazı deneysel gözlemlerin DFT ve TDDFT çalışmaları ile doğrulandığı ve ayrıca daha verimli organik boyaların tasarlandığı ve fotofiziksel özelliklerinin belirlendiği gözlemlenmiştir.

### 2.7.2. D-A- $\pi$ -A boyaları

Daha önce belirtildiği gibi, metallsiz organik boyaların kimyasal yapıları BDGP cihazlarının verimliliği ve kararlılığı için çok kritiktir (Wubie vd., 2012). Bu nedenle, birçok araştırmacı kendilerini metallsiz organik boyaların kimyasal yapılarını optimize etmeye adanmıştır. Şimdiye kadar D-( $\pi$ -A)<sub>2</sub>, D- $\pi$ -A, D-D- $\pi$ -A, D-A- $\pi$ -A ve (D- $\pi$ -A)<sub>3</sub>L<sub>2</sub> gibi çeşitli organik boya iskeleleri geliştirilmiştir. Bununla birlikte, donör- $\pi$ -köprü-alıcı (D- $\pi$ -A) yapısı, BDGP'lerde metallsiz organik boyalar için hala en popüler tasarımıdır. Bir D- $\pi$ -A konfigürasyonuna dayanarak; geleneksel D- $\pi$ -A çerçevesine ek bir alıcı dahil edilmiş ve “D-A- $\pi$ -A” konfigürasyonları için alternatif etkili bir moleküler mühendislik stratejisi ortaya çıkmıştır [345]. 2011 yılında Zhu ve ortak yazarlar, yardımcı alıcı olarak elektron eksikliği olan bir benzotiyadiazol grubu ekleyerek ilk D-A- $\pi$ -A moleküllerini rapor etmişlerdir (Zhu vd., 2011). Yardımcı alıcının varlığı, UV-görünür bölgede geniş absorpsiyon ve emisyon bantları, verimli molekül içi yük transferi, kolayca ayarlanabilen moleküler orbital enerji seviyeleri, yüksek redoks kararlılığı ve optoelektronik özellikler ve daha fazla NIR ışığı toplamak için dar bir bant aralığı enerjisi gibi çeşitli avantajlar getirmişlerdir (Han vd., 2019). Sonuç olarak, “D-A- $\pi$ -A” organik hassaslaştırıcıların kullanımı, geleneksel D- $\pi$ -A çerçevesine göre güneş pillerinde hücre verimliliğini artırmak ve fotovoltaj performansını iyileştirmek için umut verici bir yaklaşım olarak kabul edilmiştir. En başarılı boyalardan biri

olan WS-6, Zhu ve ortak yazarları tarafından açıklandığı gibi, 16  $\mu\text{m}$  kalınlığındaki  $\text{TiO}_2$  film cihazında  $\eta = \%7,76$  değerine ulaşmıştır (Wu vd., 2012) (bkz. Çizelge 2.2.).

### Çizelge 2.2.

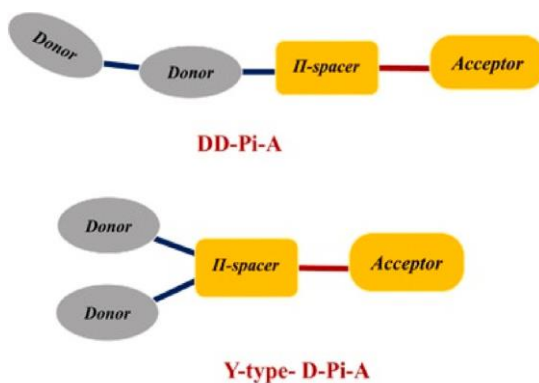
En önemli performans parametrelerini içeren metallsiz D- $\pi$ -A organik boyaları ile BDGP'leri ele alan çalışmaların listesi.

Organik Boyalar	$\lambda_{\text{max}}$ (nm)	$J_{\text{SC}}$ ( $\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$ )	$V_{\text{OC}}$ (mV)	FF (%)	$\eta$ (%)	Ref.
MKZ-21	429	15.4	710	0.67	7.3	(Zhang vd., 2009)
MKZ-22	437	15.5	700	0.62	6.7	(Zhang vd., 2009)
MK-14	483	16.0	710	0.71	8.1	(Koumura vd., 2009)
MK-16	480	14.5	730	0.69	7.3	(Koumura vd., 2009)
MKZ-39	502	13.8	700	0.77	7.4	(Zhang vd., 2010)
MKZ-40	496	14.6	700	0.76	7.8	(Zhang vd., 2010)
MKZ-41	490	15.0	660	0.74	7.3	(Zhang vd., 2010)
C203	372	14.33	734	0.76	8.0	(Qin vd., 2008 a)
MK-89	495	13.4	822	0.70	7.7	(Murakami vd., 2016)
MK-123	497	10.9	907	0.64	6.3	(Murakami vd., 2016)
MK-136	495	14.3	880	0.71	8.9	(Murakami vd., 2016)
SGT-141	405	9.20	744	0.76	5.2	(Eom vd., 2017)
SGT-142	426	10.46	752	0.79	6.2	(Eom vd., 2017)
SGT-143	443	12.79	742	0.75	7.1	(Eom vd., 2017)
SGT-144	451	14.38	694	0.74	7.4	(Eom vd., 2017)
SGT-145	392	14.70	653	0.74	7.1	(Eom vd., 2017)
AZ6	491	17.03	710	0.64	7.69	(Dong vd., 2017)
Z954	484	14.48	744	0.69	7.44	(Dong vd., 2017)
Z970	502	16.71	717	0.64	7.66	(Dong vd., 2017)
Z887	478	13.84	726	0.68	6.81	(Dong vd., 2017)
AZ1	423	9.7	739	0.63	4.51	(Wu vd., 2013 b)
AZ2	423	9.9	770	0.66	4.94	(Wu vd., 2013 b)
AZ3	428	9.3	739	0.69	4.73	(Wu vd., 2013 b)
AZ4	426	9.9	780	0.69	5.33	(Wu vd., 2013 b)
AZ5	347	9.0	780	0.64	4.44	(Wu vd., 2013 b)
AZ6	443	14.8	749	0.66	7.29	(Wu vd., 2013 b)
L156	491	12.20	1.096	0.69	9.26	(Polo-Garzon vd., 2019)
L224	487	11.32	1.095	0.68	8.27	(Polo-Garzon vd., 2019)
CRD-I	496	13.62	690	0.72	6.77	(Wan vd., 2021)
CRD-IV	499	16.43	752	0.73	9.02	(Wan vd., 2021)
CRD-VII	488	14.08	721	0.72	7.31	(Wan vd., 2021)

D149	526	19.96	653	0.70	8.00	(Ito vd., 2006)
D205		18.68	710	0.71	9.52	(Ito vd., 2008)
CS-31	488	12.84	733	0.72	6.73	(Tian vd., 2020)
CS-32	503	13.23	743	0.71	6.93	(Tian vd., 2020)
CS-33	519	15.79	755	0.71	8.38	(Tian vd., 2020)
CS-34	520	15.21	751	0.71	8.08	(Tian vd., 2020)
ADEKA-1	498	15.6	1.036	0.774	12.5	(Kakiage vd., 2014)
C272	512	15.42	908	0.743	10.4	(Wu vd., 2015)
C275		17.03	956	77.0	12.5	(Yao vd., 2015 b)
C278	565	19.64	843	72.8	12.0	(Ma vd., 2015)
R6	631	19.69	850	75.4	12.6	(Ren vd., 2018)
SGT-130	389	17.49	898	72.2	11.4	(Eom vd., 2015)
SGT-149	389	17.49	898	72.2	11.4	(Zhou vd., 2015)

### 2.7.3. Çift donör bazlı boyalar

Çift Donör bazlı boya duyarlı güneş pilleri, organik boya duyarlı hale getiricilerin güneş pili verimliliğini artırmak için oldukça yeni bir stratejiye karşılık gelmektedir. Çift donör bazlı boya hassaslaştırıcıların yapısı için iki farklı strateji kullanılabilir. Biri DD- $\pi$ -A yapısının oluşumuna dayanırken, diğeri Y-tipi D- $\pi$ -A boya hassaslaştırıcılarının oluşumunu içerir (Şekil 2.3.). Çeşitli çalışmalar, çift donör bazlı boyaların tekli muadillerine göre daha yüksek ışık hasat verimliliği gösterdiğini ve dolayısıyla BDGP dönüşüm verimliliğinin arttığını ortaya koymuştur (Hua vd., 2013; Ren vd., 2012; Hong vd., 2014; Hong vd., 2012; Cao vd., 2011; Hong vd., 2011)

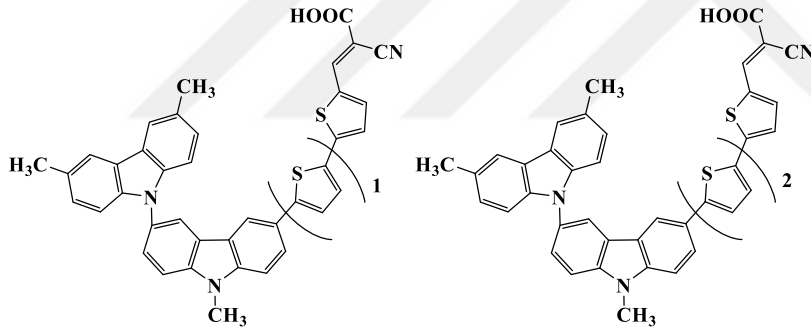


**Şekil 2.3.** İki farklı Çift donör bazlı metal içermeyen boya hassaslaştırıcının şematik diyagramı. (Sen vd., 2023)

Çift donör bazlı boya hassaslaştırıcılar

- (i) Yüksek ışık emme kapasitesi,
- (ii) HOMO ve LUMO enerji seviyesi arasındaki düşük boşluk ve
- (iii) Geniş emme spektrumları ile ilişkilidir ve bunların tümü bu BDGP'lerin yüksek verimliliğine katkıda bulunur.

Ning vd., bu tür Y tipi çift donör boyaların yüksek potansiyelini doğrulayan bir dizi yeni triarilamin bazlı boyayla D-D- $\pi$ -A konfigürasyonunu tanıtan ilk kişilerdir (Şekil 2.4.) (Ning vd., 2008). Jungstuttiwong vd., ikili donörler için  $\pi$ -ara parçalarının eklenmesini teorik bir perspektiften araştırmış ve  $\pi$ -ara parçası olarak birden fazla tiyofenin iyi ICT özelliklerine yol açtığını bulmuşlardır (Jungstuttiwong vd., 2013). Analizleri, birden fazla tiyofen parçasının eklenmesiyle verimliliğin artırılabilirliğini göstermiştir. (Sen vd., 2023)



**Şekil 2.4.** Farklı D-D- $\pi$ -A Yapılarının Geometrileri (Sen vd., 2023)

### 3. MATERYAL VE YÖNTEM

#### 3.1. Kullanılan Kimyasal Maddeler ve Malzemeler

Çizelge 3.1. Kullanılan Kimyasal Maddeler ve Malzemeler

<b>Adı</b>	<b>Markası</b>
<b>Sodyum Hidroksit</b>	Sigma Aldrich
<b>Aseton</b>	Merck
<b>Heksan</b>	VWR Chemical
<b>Petrol Eteri</b>	Riedel-de Haen
<b>Diklorometan</b>	Riedel-de Haen
<b>Etil asetat</b>	Sigma Aldrich
<b>Asetonitril</b>	Sigma Aldrich
<b>Dimetilsülfoksit</b>	Sigma Aldrich
<b>N-N-Dimetilformamid</b>	Riedel-de Haen
<b>Dietil eter</b>	Riedel-de Haen
<b>Etanol</b>	Isolab
<b>Dimetoksietan</b>	abcr
<b>N-Bromosüksinimit</b>	Acros

---

<b>Magnezyum Sülfat</b>	Sigma Aldrich
<b>Tetrakis(trifenilfosfin)palladyum</b>	Alfa Aesar
<b>Potasyum Karbonat</b>	Sigma Aldrich
<b>İTK silikajel 60 F254 25 alüminyum plakalar</b>	Merck
<b>4-florofenil boronik asit</b>	Acros
<b>4-triflorometilfenil boranik asit</b>	Acros
<b>Kolon kromatografisi için silika jel 60 (0.063-0200mm)</b>	Merck
<b>Opak Titanyum Oksit Elektrot</b>	Solaronix
<b>İyot çözeltisi AN-50 20 ml elektrolit</b>	Solaronix
<b>Kloroform-D1</b>	Merck
<b>Meltonix sealing film</b>	Solaronix
<b>Flor katkılı kalay oksit (FTO) alttaş</b>	Solaronix
<b>Delikli Platin Elektrot</b>	Solaronix

---

### 3.2. Kullanılan Cihazlar ve Yardımcı Gereçler

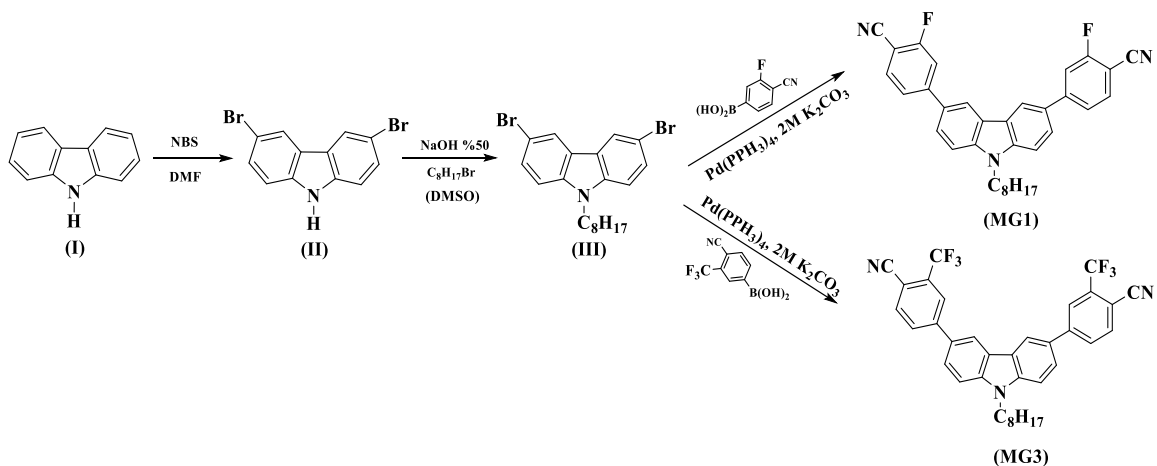
Sentezlenen bileşiklerin Floresans ve FT-IR analizleri, Eskişehir Osmangazi Üniversitesi Teknoloji ve İnovasyon Merkezi'ndeki Anorganik Kimya Laboratuvarı'nda gerçekleştirildi. FT-IR ölçümleri, KBr disk üzerinde yapılan analizlerle ve Bruker FT-IR spektrometresi kullanılarak elde edildi. Spektrumlar  $4000-400\text{ cm}^{-1}$  aralığında alındı ve sonuçlar SpectraGryph yazılımı ile değerlendirildi. Floresans spektrumları ise Perkin Elmer LS 55 Fluorescence Spectrometer cihazı kullanılarak ölçüldü.  $^1\text{H-NMR}$  ve  $^{13}\text{C-NMR}$  analizleri, Eskişehir Osmangazi Üniversitesi Merkezi Araştırma Laboratuvarı'nda (ARUM)

yapıldı.  $^{13}\text{C}$ -NMR (125 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) ve  $^1\text{H}$ -NMR (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ) spektrometreleri ile sonuçlar kaydedildi. UV-GB spektrumları, Eskişehir Teknik Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü'ndeki Yarıiletken Karakterizasyon Laboratuvarı'nda Shimadzu UV-1400 UV-GB spektrometresi ile alındı ve UVProbe yazılımı kullanıldı ve yorumlanıp kaydedildi. İnce Tabaka Kromatografisi (İTK) için Merck marka silika kaplı tabakalar kullanıldı. Ayrıca, Eskişehir Teknik Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü'nde yer alan Yarıiletken Proses Laboratuvarı'nda, BDGP'lerin akım-voltaj ölçümleri, FYTRONIX OPTOSENSE güneş pili ölçüm sistemi ve ilgili solar simülatörle yapıldı.

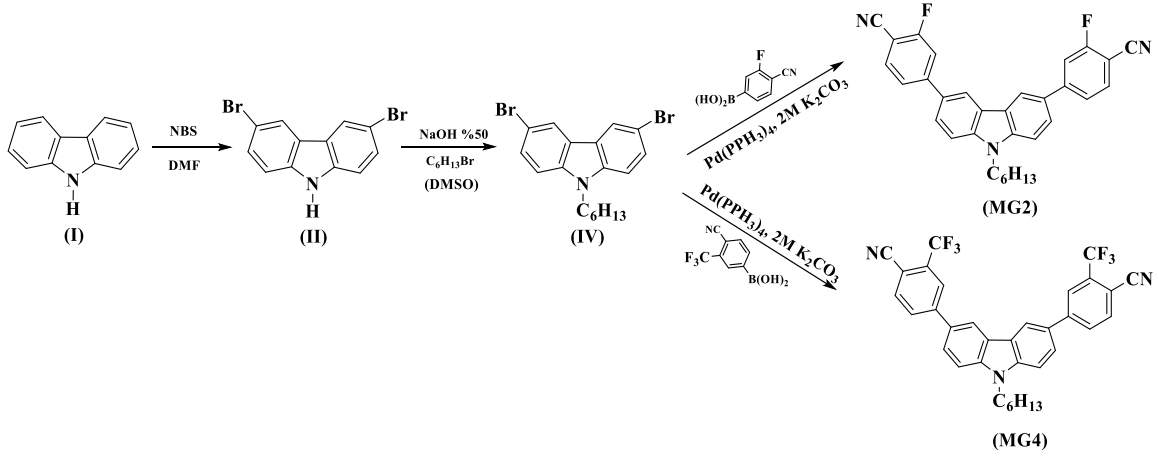
### 3.3. Gerçekleştirilen Sentezlerin Reaksiyon Koşulları

Boya duyarlı güneş pillerinde kullanılmak üzere sentezlenen organik boyalar (MG1, MG2, MG3 ve MG4) için gerçekleştirmiş olduğumuz reaksiyonların verimleri sırası ile %52, %69, %66, ve %60 aralığında bulunmuştur. Gerçekleştirilen bu reaksiyonlar karbazol ana bileşiği kullanılarak sırasıyla bromlama alkilleme ve Suzuki Miyaura çapraz kenetlenme reaksiyonları kullanılmıştır. Yapılan bu reaksiyonlarda kullanılan çözücüler bromlama reaksiyonunda N,N-dimetilformamid alkilleme reaksiyonunda dimetilsülfoksit ve Suzuki Miyaura çapraz kenetlenme reaksiyonlarında ise 1,2-dimetoksietan/ $\text{H}_2\text{O}$  kullanılmıştır ve bir önceki çalışmalar dikkate alınarak yapılmış olup istenilen verimde sentezler gerçekleştirilmiştir. Ayrıca yeniden optimizasyon koşullarına gerek kalmamıştır. Hedef ürünlerin sentez şeması Şekil 3.1. ve 3.2. de verildiği gibidir.

### 3.4. Boya Duyarlı Güneş Pillerinde Kullanılmak Üzere Yapılan Reaksiyonlar

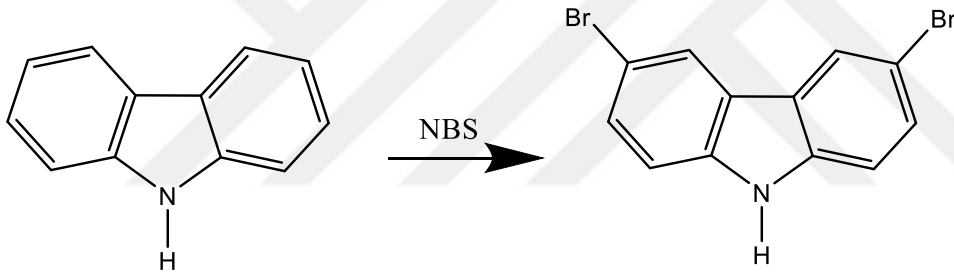


Şekil 3.1. Hedef Ürünlerin (MG1 ve MG3) Sentez Şeması



Şekil 3.2. Hedef Ürünlerin (MG2 ve MG4) Sentez Şeması

### 3.4.1. 3,6-Dibromokarbazol (II) bileşiğinin sentezi



Reaksiyon balonuna 0,0299 mol, 5 g karbazol (1eg) alınarak 25 ml DMF (*N, N*-dimetilformamid) ile çözüldü. Reaksiyon 0 °C ye getirildi. İçerisine 0,0598 mol, 10,64 g *N*-bromosüksinimid (2eg) yavaş bir şekilde ilave edildi. Reaksiyon karışımı İTK yöntemi kullanılarak kontrol edildi. Reaksiyon oda koşullarına geldikten 2 saat sonra sonlandırıldı ve karışım soğuk su içerisine boşaltıldı. Elde edilen ürün vakumda süzülerek alındı ve oda koşullarında kurutuldu. Elde edilen 3,6 dibromokarbazol bileşiği 11,30 g olarak ölçüldü. İki ayrı alkil (hekzil ve oktil) grubu oluşturmak için eşit şekilde 5,65 er g tartılıp deney tüplerine alındı.

**Molekül Formülü:**  $C_{12}H_7Br_2N$

**Molekül Ağırlığı:** 325,00 g/mol

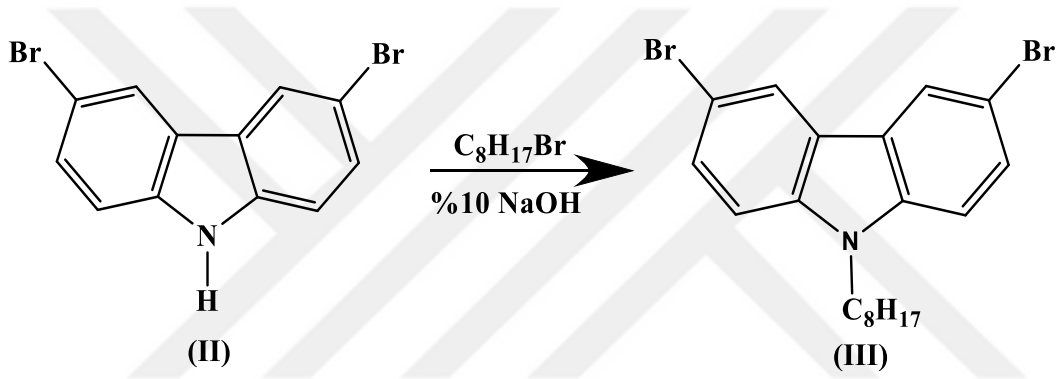
**Madde Miktarı:** 11,30 g

**FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ):** 3422, 3066, 1564, 1470, 1431, 1285, 1239, 1051, 867, 802, 683, 636, 562.

**$^1\text{H-NMR}$  (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ,  $\delta$  ppm):** 8,11 (qs, 2H), 8,08 (bs, 1H, N-H), 7,50 (dd,  $J=8,6$ ,  $J=1,9$  Hz, 2H), 7,29 (d,  $J=8,6$  Hz, 2H).

**$^{13}\text{C-NMR}$  (125 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ,  $\delta$  ppm):**133, 653, 124, 649, 119, 409, 118, 602, 107, 948, 107, 573, 72,605, 72,356, 72,097.

### 3.4.2. 3,6-Dibromo-9-oktilkarbazol (III) bileşiminin sentezi



3,6-Dibromo-9-oktilkarbazol (III) bileşiminin sentezi için 5,40 g, 0,0166 mol (1 eg) 3,6-dibromokarbazol deney balonuna alındıktan sonra 30 ml DMSO da çözüldü. 0,0249 mol 4,305 ml 1-bromooktan eklenerek 7 ml  $\%10$  luk NaOH çözeltisi karışıma damla damla ilave edildi. Reaksiyon karışımı 24 saat boyunca oda koşullarında manyetik karıştırıcı yardımıyla karıştırılarak reaksiyonun gerçekleşmesi sağlandı ve İTK kontrollü olarak yapıldı. Reaksiyon sonucunda karışım ayırma hunisine alınarak 30 ml dietileter ve 30 ml saf su ile ekstraksiyon işlemi (4x30) gerçekleştirildi.  $\text{MgSO}_4$  üzerinden kurutuldu ve süzülme döner buharlaştırıcı kullanılarak çözücüsü uçuruldu. Elde edilen beyaz katı maddelerin saflığı İTK ile kontrol edilerek yeniden saflaştırma işleminin yapılmamasına karar verildi.

**Molekül Formülü:**  $\text{C}_{20}\text{H}_{23}\text{Br}_2\text{N}$

**Molekül Ağırlığı:** 437,22 g/mol

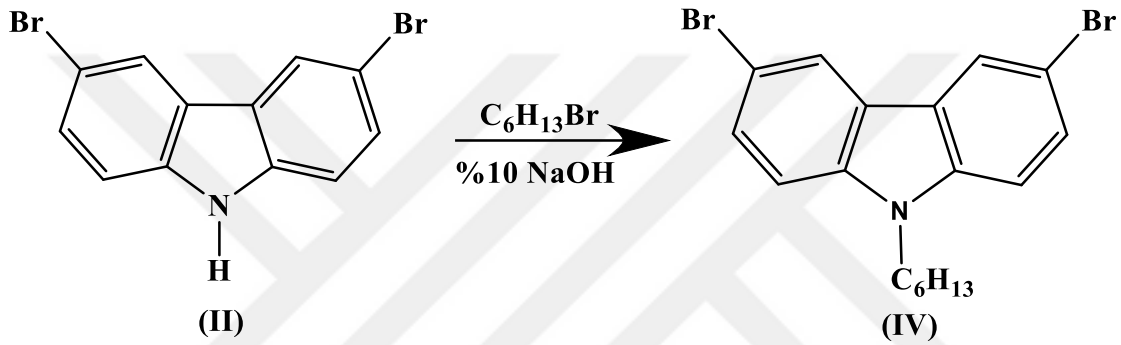
**Madde Miktarı:** 6,216 g

**FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ):** 3073, 2957, 2922, 2851, 1623, 1592, 1469, 1434, 1347, 1283, 1221, 1144, 1051, 1012, 865, 798, 643, 562.

**<sup>1</sup>H-NMR (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>, δ ppm):** 8,06 (qs, 2H), 7,47 (dd, *J*=8,7, *J*=2,1 Hz 2H), 7,19 (d, *J*=9,0 Hz, 2H), 4,16 (t, *J*=7,4 Hz, 2H), 1,81-1,78 (m, 2H), 1,24-1,15 (m, 10H), 0,78 (t, *J*=7,2 Hz, 3H).

**<sup>13</sup>C-NMR (125 MHz, CDCl<sub>3</sub>, δ ppm):** 139,36, 129,07, 123,48, 123,33, 111,97, 110,49, 43,43, 31,84, 29,41, 29,23, 28,95, 27,31, 22,69, 14,18.

### 3.4.3. 3,6-Dibromo-9-hekzilkarbazol (IV) bileşiğinin sentezi



3,6-Dibromo-9-hekzilkarbazol (IV) bileşiğinin sentezi için 5,65 g, 0,0166 mol (1 eg) 3,6-Dibromokarbazol deney balonuna alındıktan sonra 30 ml DMSO da çözüldü. 0,0260 mol 3,679 ml bromohekzan eklenerek 16 ml %10 luk NaOH çözeltisi damla damla ilave edildi. Reaksiyon karışımı 24 saat boyunca oda koşullarında manyetik karıştırıcı yardımıyla karıştırılarak reaksiyonun gerçekleşmesi sağlandı ve İTK kontrollü olarak yapıldı. Reaksiyon sonucunda karışım ayırma hunisine alınarak 30 ml dietileter ve 30 ml saf su ile ekstraksiyon işlemi (4x30) gerçekleştirildi. MgSO<sub>4</sub> üzerinden kurutuldu ve süzülür döner buharlaştırıcı kullanılarak çözücüsü uçuruldu. Elde edilen beyaz katı maddelerin saflığı İTK ile kontrol edilerek yeniden saflaştırma işleminin yapılmamasına karar verildi.

**Molekül Formülü:** C<sub>18</sub>H<sub>19</sub>Br<sub>2</sub>N

**Molekül Ağırlığı:** 409,17 g/mol

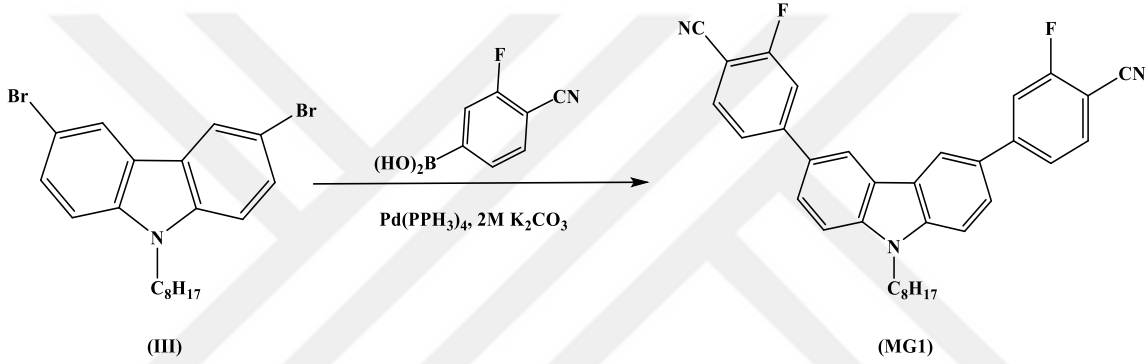
**Madde Miktarı:** 5,798 g

**FT-IR (KBr, cm<sup>-1</sup>):** 2925, 2850, 1656, 1601, 1479, 1434, 1384, 1355, 1237, 799, 543.

**<sup>1</sup>H-NMR (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>, δ ppm):** 8,11 (d, *J*=2,1 Hz 2H), 7,56-7,50 (m, 2H), 7,23 (d, 2H), 4,20 (t, *J*=7,1 Hz, 2H), 1,79 (p, *J*=7,2 Hz, 2H), 1,34-1,24 (m, 6H), 0,84 (t, *J*=6,7 Hz, 3H).

**<sup>13</sup>C-NMR (125 MHz, CDCl<sub>3</sub>, δ ppm):** 139,37, 129,08, 123,50, 123,33, 111,99, 110,48, 43,42, 31,59, 28,91, 26,98, 22,61, 14,10.

#### 3.4.4. 4,4'-(9-oktil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-florobenzonitril) (MG1) bileşiğinin sentezi



Reaksiyonda başlangıç maddesi olan 3,6-Dibromo-9-oktilkarbazol (III) bileşiğinden 0,4 g, 0,915 mmol (1eg) iki boyunlu tepkime balonuna alındı. DME:su (2:1) karışımı eklendikten sonra ısıtıcı 50 °C ye getirilip çözünmesi beklendi. Daha sonra sırası ile %10'luk 0.02013 mmol, 0,0233 g tetrakis(trifenilfosfin)palladyum (Pd(PPh<sub>3</sub>)), 2,012 mmol, 0,332 g (2,2eg) 4-siyano-3-florofenil boranik asit ve 3,432 ml, 6,686 mmol (7,5eg) 2M K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> çözeltisi reaksiyon karışımına eklendi. Sıcaklık 80 °C ye getirilerek tepkime 24 saat boyunca İTK kontrollü devam etti. Karışımın İTK sı alındıktan sonra tepkime durduruldu ve reaksiyon balonu oda sıcaklığına gelince DCM ile 4 kez ekstraksiyon işlemi yapıp MgSO<sub>4</sub> üzerinden kurutuldu. Döner buharlaştırıcı yardımıyla çözücüsü uçurulduktan sonra elde edilen ham ürün kolon kromatografisinde Etilasetat:Heksan (1:3) çözücü kullanılarak saflaştırıldı.

**Molekül Formülü:** C<sub>34</sub>H<sub>29</sub>F<sub>2</sub>N<sub>3</sub>

**Molekül Ağırlığı:** 517,62 g/mol

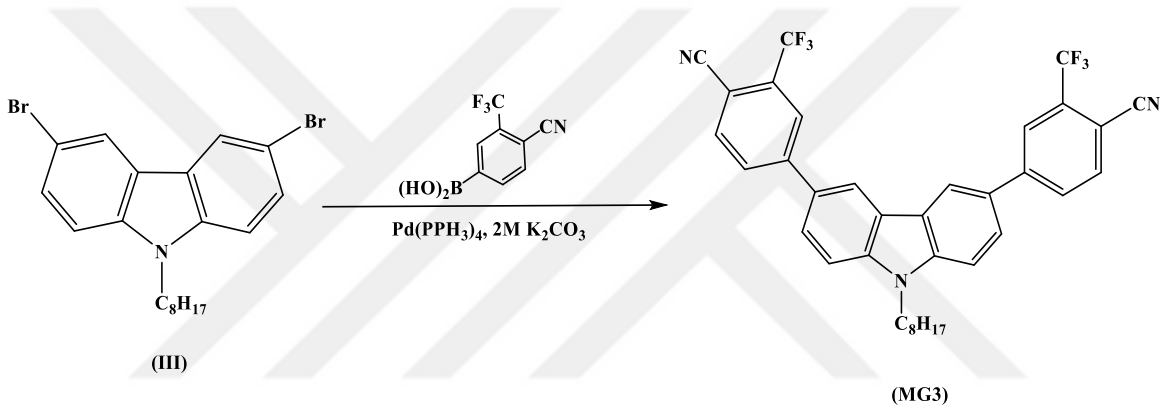
**Madde Miktarı:** 0,248 g

**FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ):** 3066, 2924, 2852, 2230, 1612, 1481, 1554, 1257, 1121, 797.

**$^1\text{H-NMR}$  (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ,  $\delta$  ppm):**  $\delta$  8.36 (d,  $J = 1.8$  Hz, 2H), 7.76 – 7.65 (m, 4H), 7.60 (dd,  $J = 8.1, 1.7$  Hz, 2H), 7.58 – 7.49 (m, 4H), 4.36 (t,  $J = 7.2$  Hz, 2H), 1.91-1.87 (m,  $J = 6.7$  Hz, 2H), 1.26-1.17 (t,  $J = 7.0$  Hz, 10H), 0.84 (s, 3H).

**$^{13}\text{C-NMR}$  (125 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ,  $\delta$  ppm):**  $\delta$  141.56, 133.78, 129.57, 125.64, 123.52, 123.33, 119.47, 114.70, 114.54, 114.47, 109.97, 77.31, 58.59, 43.64, 31.84, 31.06, 29.42, 29.24, 29.10, 27.37, 22.68, 18.53, 14.16.

### 3.4.5. 4,4'-(9-oktil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-(triflorometil)benzonitril) (MG3) bileşiminin sentezi



Reaksiyonda başlangıç maddesi 3,6-Dibromo-9-oktilkarbazol (III) bileşiminden 0,4 g, 0,914 mmol (1eg) iki boyunlu tepkime balonuna alındı. DME:su (2:1) karışımı eklendikten sonra ısıtıcı 50 °C ye getirilip çözünmesi beklendi. Daha sonra sırası ile %10'luk 0,0914 mmol, 0,105 g tetrakis(trifenilfosfin)palladyum ( $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ ), 2,012 mmol, 0,432 g (2,2eg) 4-siyano-3-florometilfenil boranik asit ile ve 3,432 ml, 6,686 mmol (7,5eg) 2M  $\text{K}_2\text{CO}_3$  çözeltisi reaksiyon karışımına eklendi. Sıcaklık 80 °C ye getirilerek tepkime 24 saat boyunca iTK kontrollü devam etti. Karışımın İTK sı alındıktan sonra tepkime durduruldu ve oda sıcaklığına gelince DCM ile 4 kez ekstraksiyon işlemi yapıp  $\text{MgSO}_4$  üzerinden kurutuldu. Döner buharlaştırıcı yardımıyla çözücüsü uçurulduktan sonra elde edilen ham ürün kolon kromatografisinde Etilasetat:Heksan (1:3) çözücü kullanılarak saflaştırıldı.

**Molekül Formülü:**  $\text{C}_{36}\text{H}_{29}\text{F}_6\text{N}_3$

**Molekül Ağırlığı:** 617,64 g/mol

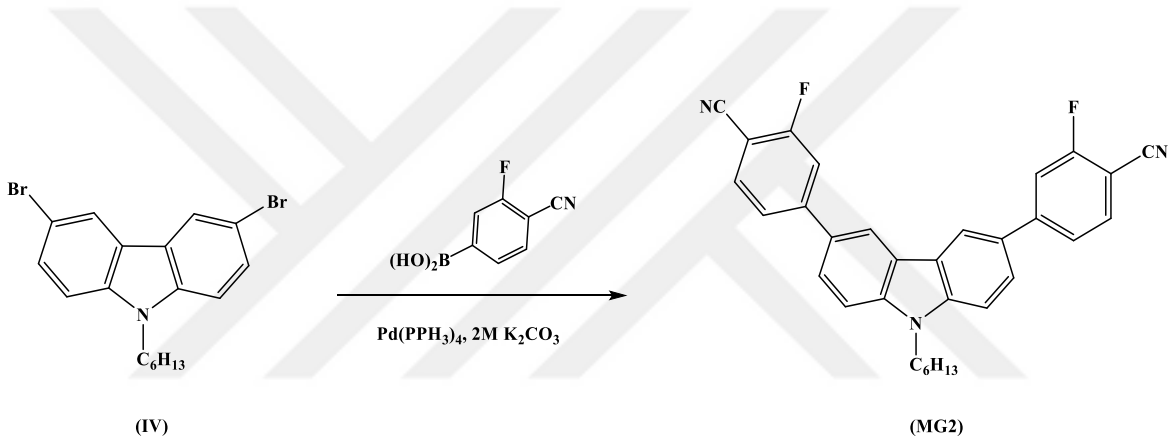
**Madde Miktarı:** 0,372 g

**FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ):** 3061, 2927, 2855, 2233, 1604, 1490, 1462, 1332, 1140, 843.

**$^1\text{H-NMR}$  (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ,  $\delta$  ppm):**  $\delta$  8.41 (d,  $J = 1.9$  Hz, 2H), 8.12 (s, 2H), 7.99 (s, 2H), 7.92 – 7.90 (m, 2H), 7.77 (dd,  $J = 8.5, 1.9$  Hz, 2H), 7.56 (d,  $J = 8.5$  Hz, 2H), 4.38 (t,  $J = 7.2$  Hz, 2H), 1.92 (p,  $J = 7.2$  Hz, 2H), 1.23 (d,  $J = 4.5$  Hz, 10H), 0.84 (s, 3H).

**$^{13}\text{C-NMR}$  (125 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ,  $\delta$  ppm):**  $\delta$  146.80, 142.56, 141.66, 135.83, 135.31, 130.98, 130.28, 129.34, 125.78, 125.69, 125.23, 123.62, 119.65, 115.96, 114.88, 110.19, 107.38, 43.67, 31.84, 29.79, 29.42, 29.22, 29.10, 27.36, 22.67, 14.15.

### 3.4.6. 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-florobenzonitril) (MG2) bileşiminin sentezi



Reaksiyonda başlangıç maddesi 3,6-Dibromo-9-hekzilkarbazol (IV) bileşiminden 0,4 g, 0,992 mmol (1eg) iki boyunlu tepkime balonuna alındı. DME:su (2:1) karışımı eklendikten sonra ısıtıcı  $50^\circ\text{C}$  ye getirilip çözünmesi beklendi. Daha sonra sırası ile %10'luk 0.00992 mmol, 0,0114 g tetrakis(trifenilfosfin)palladyum ( $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ ), 2,18 mmol, 0,359 g (2,2eg) 4-siyano-3-florofenil boranik asit ve 3,721 ml, 7,44 mmol (7,5eg) 2M  $\text{K}_2\text{CO}_3$  çözeltisi reaksiyon karışımına eklendi. Sıcaklık  $80^\circ\text{C}$  ye getirilerek tepkime 24 saat boyunca İTK kontrollü devam etti. Karışımın İTK sı alındıktan sonra tepkime durduruldu ve oda sıcaklığına gelince DCM ile 5 kez ekstraksiyon işlemi yapıp  $\text{MgSO}_4$  ile kurutuldu. Döner buharlaştırıcı yardımıyla çözücüsü uçurulduktan sonra elde edilen ham ürün kolon kromatografisinde Etilasetat:Heksan (1:3) çözücü kullanılarak saflaştırıldı.

**Molekül Formülü:**  $\text{C}_{32}\text{H}_{25}\text{F}_2\text{N}_3$

**Molekül Ağırlığı:** 489,57 g/mol

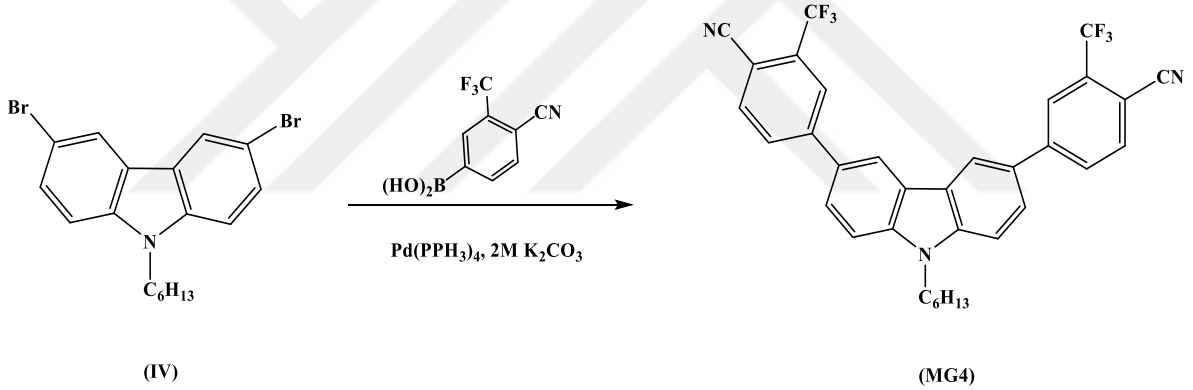
**Madde Miktarı:** 0,336 g

**FT-IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ):** 3061, 2933, 2855, 2228, 1618, 1554, 1115, 799.

**$^1\text{H-NMR}$  (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ,  $\delta$  ppm):**  $\delta$  8.34 (d,  $J = 1.9$  Hz, 2H), 7.75 – 7.63 (m, 4H), 7.59 (dd,  $J = 8.1, 1.6$  Hz, 2H), 7.56 – 7.49 (m, 4H), 4.36 (t,  $J = 7.2$  Hz, 2H), 1.91 (m,  $J = 7.3$  Hz, 2H), 1.33 (m, 6H), 0.87 (t,  $J = 6.9$  Hz, 3H).

**$^{13}\text{C-NMR}$  (125 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ,  $\delta$  ppm):**  $\delta$  164.68, 162.63, 149.30, 149.23, 141.57, 133.74, 129.51, 125.62, 123.52, 123.30, 123.27, 119.44, 114.64, 114.47, 109.98, 98.91, 98.79, 43.64, 32.02, 31.62, 29.79, 29.09, 27.03, 22.63, 14.10.

### 3.4.7. 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-(triflorometil)benzonitril) (MG4) bileşiğinin sentezi



Reaksiyonda başlangıç maddesi 3,6-Dibromo-9-hekzilkarbazol (IV) bileşiğinden 0,4 g, 0,992 mmol (1eg) iki boyunlu tepkime balonuna alındı. DME:su (2:1) karışımı eklendikten sonra ısıtıcı  $50^\circ\text{C}$  ye getirilip çözünmesi beklendi. Daha sonra sırası ile %10'luk 0,00992 mmol, 0,0114 g tetrakis(trifenilfosfin)palladyum ( $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ ), 2,18 mmol, 0,359 g (2,2eg) 4-siyano-3-florometilfenil boranik asit ile ve 3,721 ml, 7,44 mmol (7,5eg)  $2\text{M K}_2\text{CO}_3$  çözeltisi reaksiyon karışımına eklendi. Sıcaklık  $80^\circ\text{C}$  ye getirilerek tepkime 24 saat boyunca İTK kontrollü devam etti. Karışımın İTK sı alındıktan sonra tepkime durduruldu ve oda sıcaklığına gelince DCM ile 5 kez ekstraksiyon işlemi yapıp  $\text{MgSO}_4$  ile kurutuldu. Döner buharlaştırıcı yardımıyla çözücüsü uçurulduktan sonra elde edilen ham ürün kolon kromatografisinde Etilasetat:Heksan (1:3) çözücü kullanılarak saflaştırıldı.

**Molekül Formülü:**  $C_{34}H_{25}F_6N_3$

**Molekül Ağırlığı:** 589,59 g/mol

**Madde Miktarı:** 0,351 g

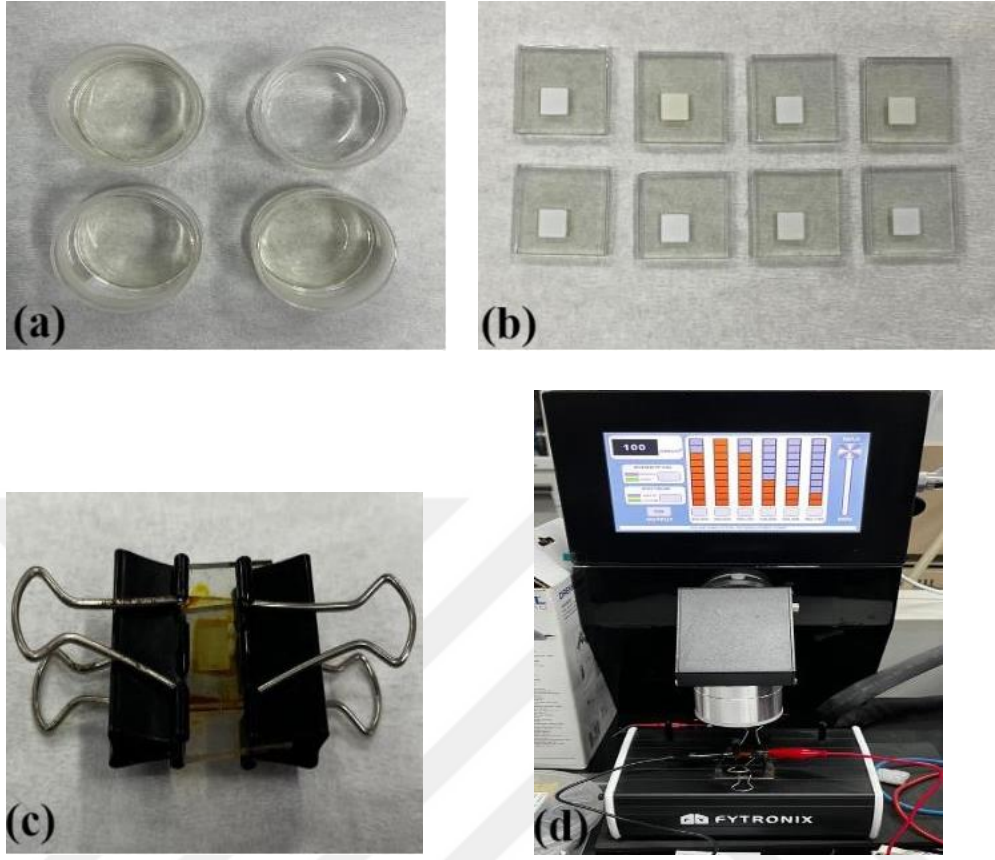
**FT-IR (KBr,  $cm^{-1}$ ) (VI):** 3042, 2925, 2858, 2231, 1601, 1484, 1329, 1179, 1135, 843, 815.

**$^1H$ -NMR (500 MHz,  $CDCl_3$ ,  $\delta$  ppm):**  $\delta$  8.41 (d,  $J = 2.0$  Hz, 2H), 8.12 (d,  $J = 1.9$  Hz, 2H), 8.00 – 7.99 (m, 2H), 7.91 (d,  $J = 4.1$  Hz, 2H), 7.77 (dd,  $J = 8.5, 1.9$  Hz, 2H), 7.56 (d,  $J = 8.5$  Hz, 2H), 4.39 (t,  $J = 7.2$  Hz, 2H), 1.92 (p,  $J = 7.3$  Hz, 2H), 1.34 – 1.29 (m, 6H), 0.86 (s, 3H).

**$^{13}C$ -NMR (125 MHz,  $CDCl_3$ ,  $\delta$  ppm):**  $\delta$  146.77, 142.55, 141.65, 135.83, 135.31, 130.98, 130.28, 129.34, 125.77, 125.65, 125.23, 125.19, 124.56, 124.06, 123.62, 121.55, 119.65, 119.15, 115.94, 114.88, 110.18, 107.43, 43.67, 34.95, 32.02, 31.61, 31.52, 30.26, 29.79, 29.46, 29.08, 27.02, 22.79, 22.61, 14.22, 14.09.

### 3.5. Boya Duyarlı Güneş Pillerinin Oluşturulması (BDGP)

Hazır alınan titanyum oksit ve önceden alınan çinko oksit foto anotlar yeni sentezlenen organik boyalar (MG1, MG2, MG3, MG4) ve kloroform kullanarak 3mM lık çözeltiler hazırlanmıştır. Hazırlanan bu çözeltiler vezin kaplarının içerisine alınıp (Şekil 3.3.a) foto anotlar da bu çözeltilerin içerisine alınıp 24 saat bekletilmiştir. Bu sürenin sonunda çıkarılan fotoanotlar Şekil 3.3.b de görüldüğü gibidir. Boyayı emen fotoanotlar üzerini Meltonix konularak platin kaplı elektrot ile kapatılmıştır ve içerisine iyot enjekte edilmiştir. Oluşturulan boya duyarlı güneş pili Şekil 3.3.c de görüldüğü gibidir. Boya duyarlı güneş pillerinin oluşturulmasından sonra tüm bu pillerin akım voltaj ölçümleri Fytronix Optosense güneş pili ölçüm sistemi ile ve bu sisteme entegre AM1,5 G ( $100 \text{ mW/cm}^2$ ) solar similatör kullanılarak yapılmıştır (şekil 3.3.d).



Şekil 3.3. Boya Duyarlı Güneş Pillerinin Fabrikasyonu

## 4. BULGULAR VE TARTIŞMA

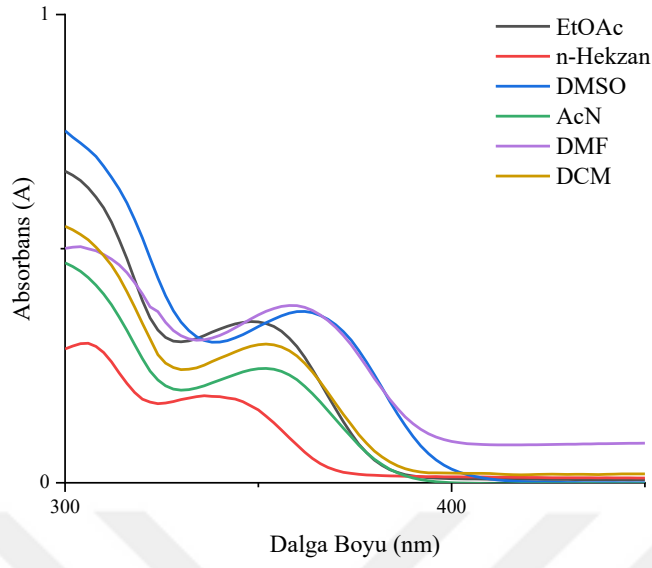
### 4.1. Boya Duyarlı Güneş Pillerinde Kullanılacak Maddelerin Fotofiziksel Özellikleri

Boya Duyarlı Güneş Pillerinde Kullanılacak Maddelerin Fotofiziksel Özelliklerini belirlemek için etilasetat, n-heksan, dimetilsülfoksit, asetonitril, N,N-dimetilformamid ve diklorometan çözücüleri seçilerek maksimum absorpsiyon ve emisyonları için dalga boyları ölçüldü. Alınan bu spektrumlar hedeflenen MG1, MG2, MG3, MG4 kodlu bileşiklerin UV-GB spektrumları aşağıda verildiği gibidir.

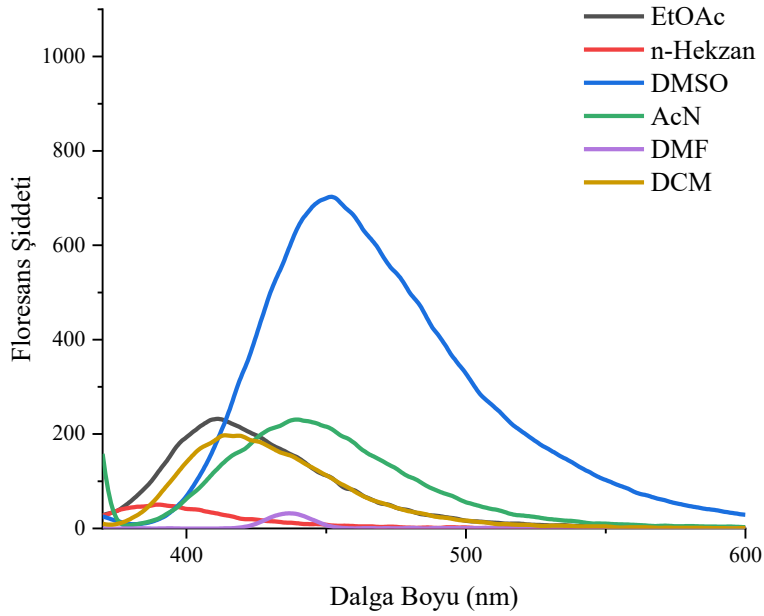
#### UV-GB Absorpsiyon Spektrumu

**Çizelge 4.1. MG1 Bileşiğinin Fotofiziksel Verileri**

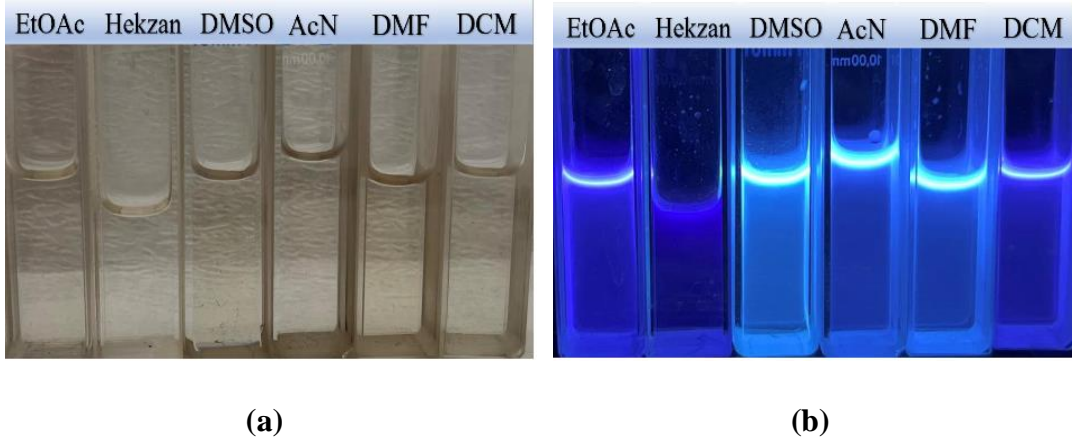
Çözücü	$\lambda_{(\max)}$ abs (nm)	$\lambda_{(\max)}$ ems (nm)
EtOAc	350	440
n-Hekzan	340	387
DMSO	364	454
AcN	352	442
DMF	358	415
DCM	352	420



**Şekil 4.1.** 4,4'-(9-oktil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-florobenzonitril) (MG1) Bileşiğinin  $1 \times 10^{-6}$  M Farklı Çözücülerde Alınan Absorbans Spektrumu



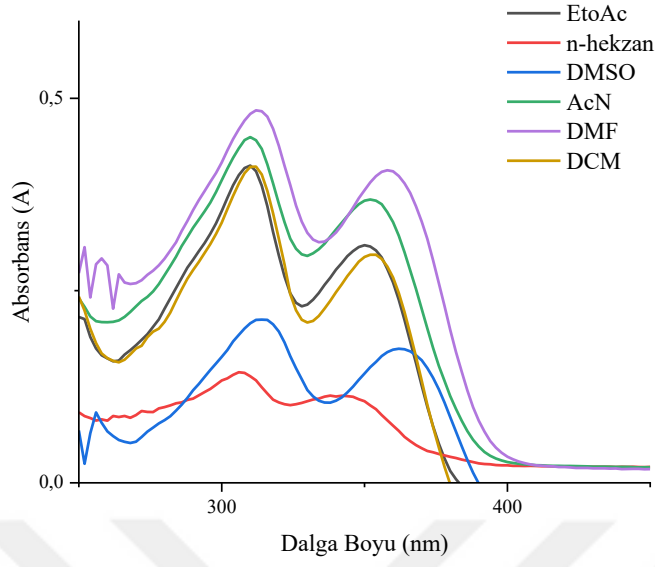
**Şekil 4.2.** 4,4'-(9-oktil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-florobenzonitril) (MG1) Bileşiğinin  $1 \times 10^{-7}$  M Farklı Çözücülerde Alınan Emisyon Spektrumu



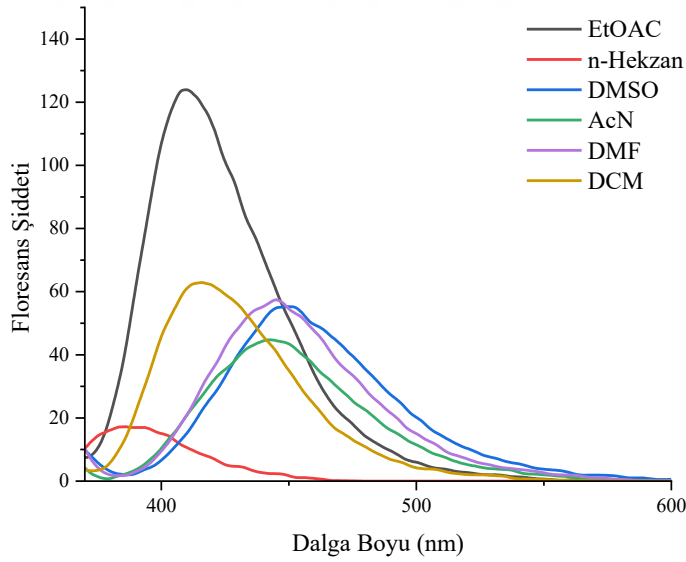
Şekil 4.3. MG1 Bileşiğinin (a) Gün Işığ ve (b) UV Işığ (360 nm) Altında Görüntüsü

Çizelge 4.2. MG2 Bileşiğinin Fotofiziksel Verileri

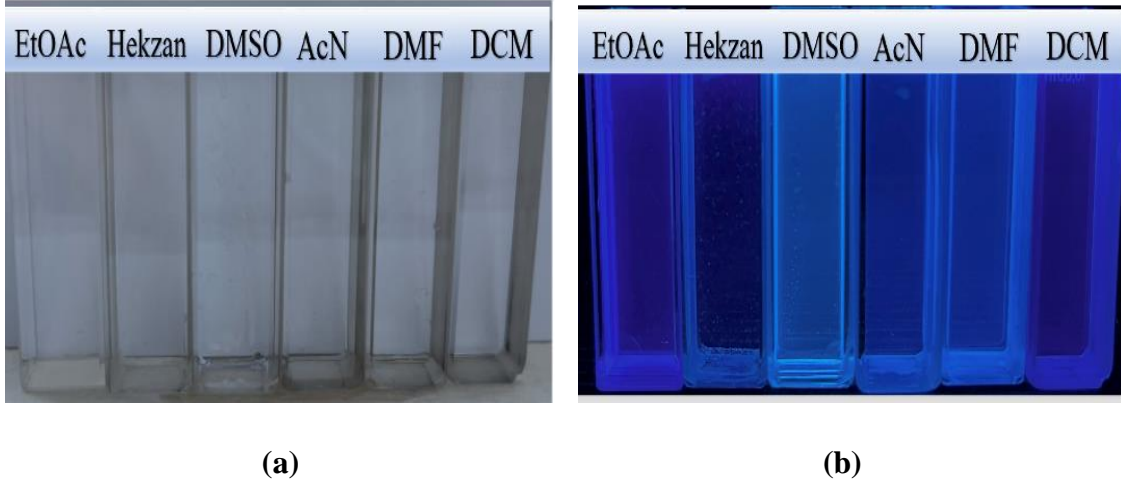
Çözücü	$\lambda_{(\max)}$ abs (nm)	$\lambda_{(\max)}$ ems (nm)
EtOAc	349	409
n-Hekzan	340	386
DMSO	363	448
AcN	351	443
DMF	357	444
DCM	354	415



**Şekil 4.4.** 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-florobenzonitril) Bileşiğinin (MG2)  $1 \times 10^{-6}$  M Farklı Çözücülerde Alınan Absorbans Spektrumu



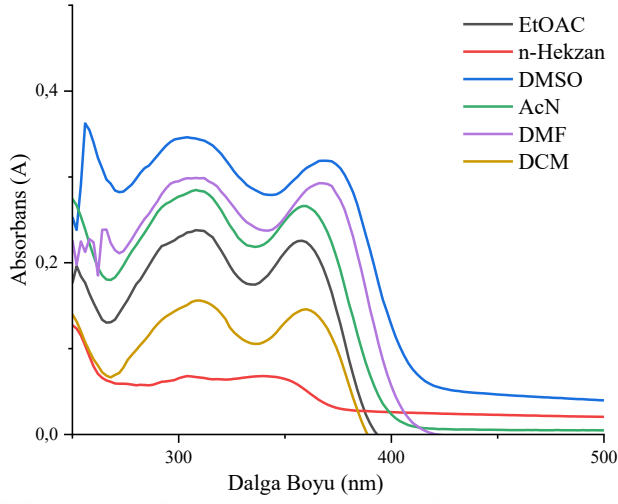
**Şekil 4.5.** 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-florobenzonitril) Bileşiğinin (MG2)  $1 \times 10^{-7}$  M Farklı Çözücülerde Alınan Emisyon Spektrumu



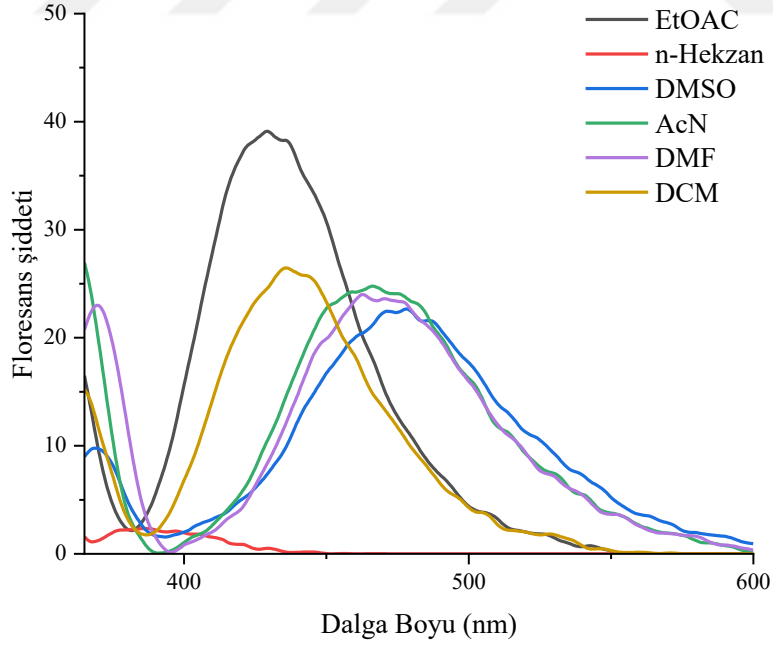
Şekil 4.6. MG2 Bileşiğinin (a) Gün Işığı ve (b) UV Işığı (360 nm) Altında Görüntüsü

Çizelge 4.3. MG3 Bileşiğinin Fotofiziksel Verileri

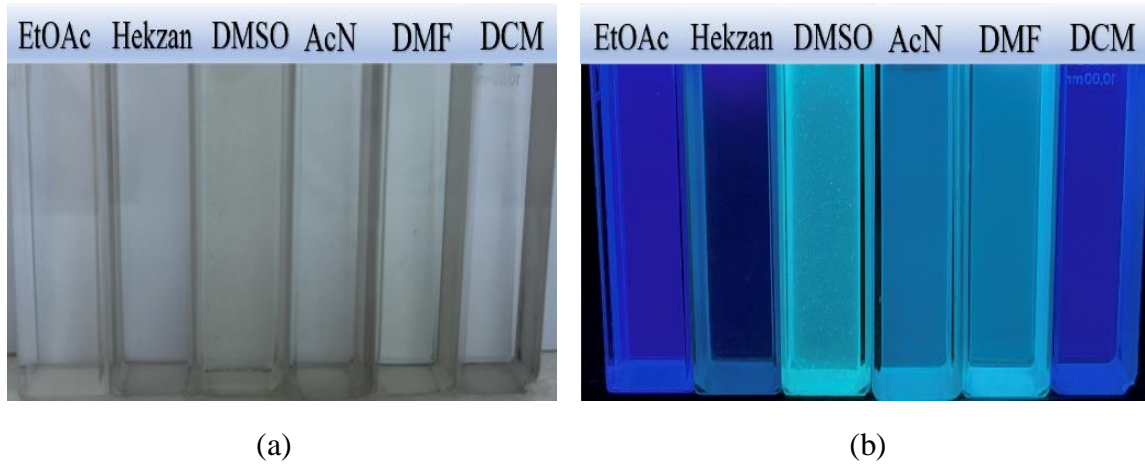
Çözücü	$\lambda_{(\max)}$ abs (nm)	$\lambda_{(\max)}$ ems (nm)
EtOAc	357	429
n-Hekzan	342	386
DMSO	370	478
AcN	358	466
DMF	368	462
DCM	360	435



**Şekil 4.7.** 4,4'-(9-oktil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-(triflorometil)benzonitril) Bileşiğinin (MG3)  $1 \times 10^{-6}$  M Farklı Çözücülerde Alınan Absorbans Spektrumu



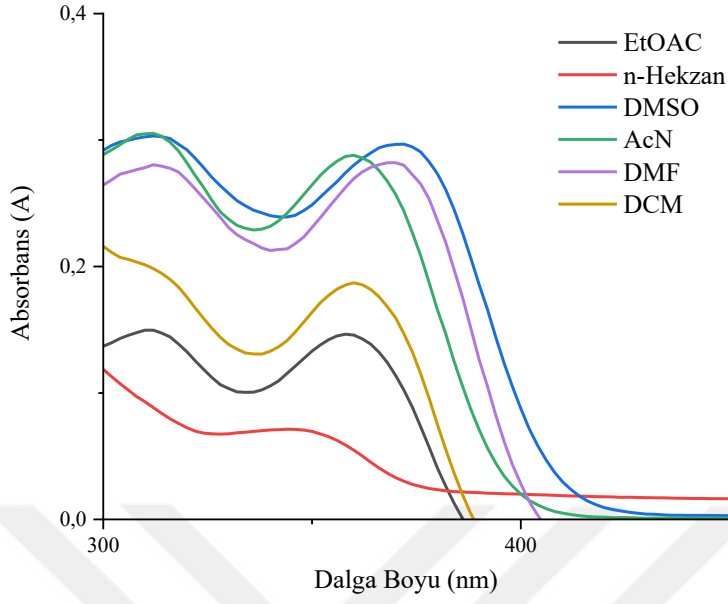
**Şekil 4.8.** 4,4'-(9-oktil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-(triflorometil)benzonitril) Bileşiğinin (MG3)  $1 \times 10^{-7}$  M Farklı Çözücülerde Alınan Emisyon Spektrumu



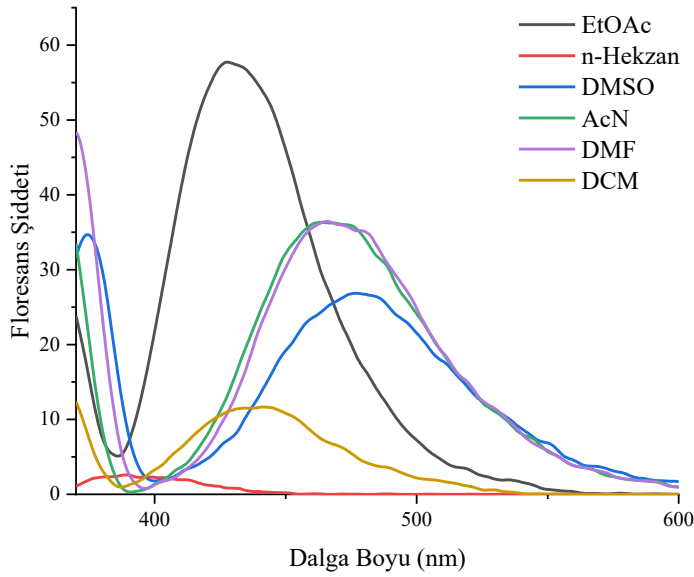
Şekil 4.9. MG3 Bileşiğinin (a) Gün Işığ ve (b) UV Işığ (360 nm) Altında Görüntüsü

Çizelge 4.4. MG4 Bileşiğinin Fotofiziksel Verileri

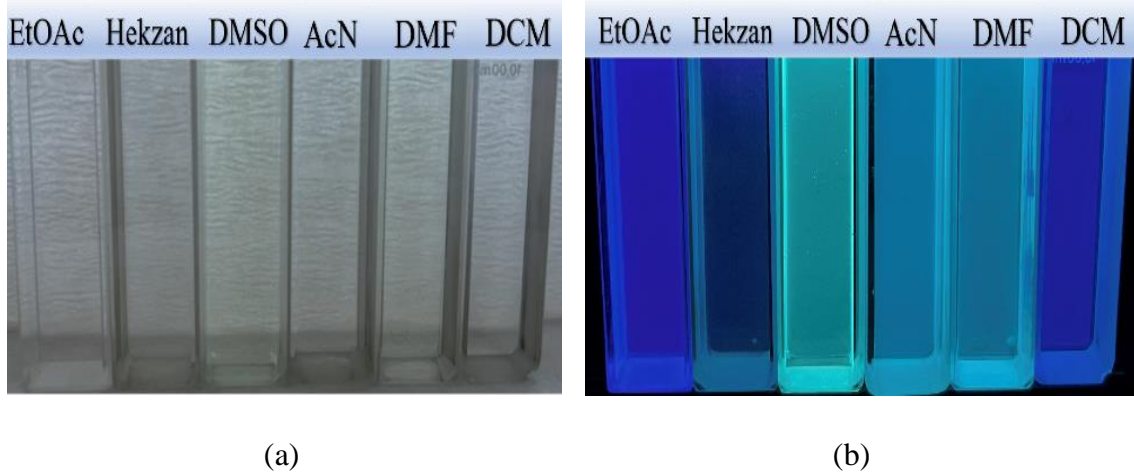
Çözücü	$\lambda_{(\max)}$ abs (nm)	$\lambda_{(\max)}$ ems (nm)
EtOAc	357	428
n-Hekzan	344	388
DMSO	372	475
AcN	359	465
DMF	369	466
DCM	359	438



**Şekil 4.10.** 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2(triflorometil)benzonitril) Bileşiğinin (MG4)  $1 \times 10^{-6}$  M Farklı Çözücülerde Alınan Absorbans Spektrumu



**Şekil 4.11.** 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazole-3,6-diil)bis(2(triflorometil)benzonitril) Bileşiğinin (MG4)  $1 \times 10^{-7}$  M Farklı Çözücülerde Alınan Emisyon Spektrumu



**Şekil 4.12.** MG4 Bileşiğinin (a) Gün Işığı ve (b) UV Işığı (360 nm) Altında Görüntüsü

Sentezlenen MG1, MG2, MG3 ve MG4 moleküllerine ait UV-GB ve floresans spektrumlarında görüldüğü gibi çözücünün polaritesi artmasıyla n-Heksanda gözlemlenen sinyallerin sırasıyla 340, 340, 342, 344 nm de ki dalga boyunun çok polar olan DMSO da 364, 363, 370 ve 372 nm ye kaydığı ve alınan emisyon spektrumundan da n-Heksan çözücüsü içerisinde alınan emisyon sinyallerin sırasıyla 387, 386, 386, 388 nm olduğu gözlenmiştir. Ayrıca yine emisyon spektrumundan DMSO çözücüsünden alınan bu sinyallerin sırasıyla 454, 448, 478, 475 nm ye kaydığı gözlenmiştir. Alınan bu absorpsiyon ve emisyon değerlerine göre polaritenin artmasıyla kırmızıya kayma olduğu gözlenmiştir. Ayrıca tüm sentezlenen bileşiklerin polaritesi farklı hazırlanan çözeltilerde gün ışığında çözeltilerin renginde bir değişiklik olmadığı görülmüştür. Bu çözeltilerin 360 nm deki emisyon ışımlarında ise çözeltilerin renklerinde değişim olduğu gözlemlenmiş ve emisyon ışımlarının farklı çözücülerde farklı etkisi olduğu görülmüştür.

## 4.2. Sentezlenen Bileşiklerin Karakterizasyonu

### 4.2.1. Sentezlenen Bileşiklerin FT-IR Spektrum Yorumları

Sentezlemiş olduğumuz bileşiklerin karakterizasyonlarını belirlemek için KBr disk hazırlanarak FT-IR spektrumları alınmıştır. Karbazol N-Bromosuksinimid oktil bromür, heksil bromür ve farklı çapa grupları içeren aril boranik asitlerle yapılan sentezler sonucunda

elde edilen ve literatürde olmayan bileşikler MG1, MG2, MG3 ve MG4 olarak kodlandırılmış olup FT-IR sonuçları ek açıklama bölümünde verilmiştir.

Gözlenen karakteristik pikler (II) numaralı moleküle ait olan N-H gerilme sinyalinin 3422 ve N-H eğilme sinyalinin 1564  $\text{cm}^{-1}$  de geldiği ve CBr gruplarına ait sinyalin ise 562  $\text{cm}^{-1}$  de geldiği gözlenmiştir. Reaksiyonumuzun ikinci aşamasında (III) nolu bileşik oktil bromür ile vermiş olduğu reaksiyonda karbazolün 9 konumuna bağlı azot grubundan alkillendiği ve bu sinyallerin 3073  $\text{cm}^{-1}$ , 2957  $\text{cm}^{-1}$ , 2922  $\text{cm}^{-1}$ , 2851  $\text{cm}^{-1}$  olduğu görülmüştür. Sentezin son aşamasında elde edilen MG1, MG2, MG3 ve MG4 bileşiklerine ait sırasıyla CN grubunun karakteristik sinyalleri 2230  $\text{cm}^{-1}$ , 2228  $\text{cm}^{-1}$ , 2233  $\text{cm}^{-1}$  ve 2231  $\text{cm}^{-1}$  de görülmüştür. Ayrıca 562  $\text{cm}^{-1}$  de görülen CBr sinyallerinin de tüm sentezlenen moleküllerde kaybolduğu ve yerine alınan 1,3 disübstitüe bileşiklerine ait sinyallerinde sırasıyla 798  $\text{cm}^{-1}$ , 799  $\text{cm}^{-1}$ , 842  $\text{cm}^{-1}$ , 813  $\text{cm}^{-1}$  de gözlemlendiği FT-IR spektrumlarından (ek açıklamalarda) görülmektedir.

#### 4.2.2. Sentezlenen Bileşiklerin $^1\text{H-NMR}$ , $^{13}\text{C-NMR}$ Spektrumlarının Yorumları

Sentezi gerçekleştirilen tüm moleküllerin nükleer manyetik rezonans çalışmaları  $\text{CDCl}_3$  çözücüsü kullanılarak  $^1\text{H-NMR}$  ve  $^{13}\text{C-NMR}$  spektrumları alınmıştır. Bu spektrumlar ek açıklama kısmında verilmiştir.

Sentezi gerçekleştirilen ve fonksiyonel gruplarını FT-IR ile belirlediğimiz tüm maddelerin  $^1\text{H-NMR}$  spektrumunda gözlenen karakteristik pikler aromatik ve alifatik bölge olarak yorumlanmıştır. Genel olarak aromatik halkaya ait sinyallerin 8,41-7,19 ppm arasında gözlenmektedir. Ayrıca sentezlenen moleküllere ait alifatik gruplara ait protonlar ise 4,39-0,78 ppm arasında gözlenmektedir. Sentezlenen tüm bileşiklerin integrasyonu bileşiklerdeki protonlar uyumlu olduğu alınan tüm spektrumlarda görülmektedir.

3,6-Dibromokarbazol (II), 3,6-Dibromo-9-oktilkarbazol (III) ve 3,6-Dibromo-9-Hekzilkarbazol (IV) bileşikleri önceki bölümlerde bahsedildiği gibi bromlama ve alkilleme reaksiyonları yapılmış ve bu reaksiyonlardan elde edilen  $^1\text{H-NMR}$  spektrumları literatürle (Li, Y. vd.,2004) ve önceden yapılan tezlerle (Derince, 2022) karşılaştırıldığında uyumlu olduğu görülmüştür. Yapılan karakterizasyon çalışmaları sonucunda maddelerin (II, III, IV) sentezlendiği görülmektedir.

Hedef ürünlerin sentezinde kullanılan III ve IV numaralı maddenin sırasıyla 4-siyano-3-florometilfenil boranik asit ile reaksiyona girmesi sonucunda MG1 ve MG2 maddeleri elde edilmiştir. Bu maddelerin  $^1\text{H-NMR}$  spektrumları ek açıklamalarda verilmiştir. Bu spektrumlara göre aromatik bölgede gözlemlenen karbazol ve fenil halkasına ait 12 protonluk sinyallerin 8,36-8,49 ppm arasında geldiği gözlemlenmiştir. Ayrıca MG1 kodlu bileşiğe ait alkil grubunda toplam 17 protonluk sinyalin 4,36-0,84 ppm arasında, MG2 kodlu bileşiğe ait alkil gruplarının da toplam 13 protonluk sinyallerin de 4,36-0,87 ppm arasında olduğu görülmüştür. Alınan bu  $^1\text{H-NMR}$  spektrumlarına göre sentezlenen hedef moleküllerin yapıları karakterize edilmiştir.

Hedef ürünlerin sentezinde kullanılan III ve IV numaralı maddenin sırasıyla 4-siyano-3-triflorokarbon fenil boranik asit ile reaksiyona girmesi sonucunda MG3 ve MG4 maddeleri elde edilmiştir. Bu maddelerin  $^1\text{H-NMR}$  spektrumları ek açıklamalarda verilmiştir. Bu spektrumlara göre aromatik bölgede gözlemlenen karbazol ve fenil halkasına ait 12 protonluk sinyallerin 8,41-7,56 ppm arasında geldiği gözlemlenmiştir. Ayrıca MG3 kodlu bileşiğe ait alkil grubunda toplam 17 protonluk sinyalin 4,38-0,84 ppm arasında, MG4 kodlu bileşiğe ait alkil gruplarının da toplam 13 protonluk sinyallerin de 4,39-0,86 ppm arasında olduğu görülmüştür. Alınan bu  $^1\text{H-NMR}$  spektrumlarına göre sentezlenen hedef moleküllerin yapıları karakterize edilmiştir.

Ayrıca sentezlenen tüm bileşiklere ait  $^{13}\text{C-NMR}$  spektrumları alınmıştır. Bu spektrumlar ek açıklama kısmında verilmiştir.

3,6-Dibromokarbazol (II), 3,6-Dibromo-9-oktilkarbazol (III) ve 3,6-Dibromo-9-Hekzilkarbazol (IV) bileşikleri önceki bölümlerde bahsedildiği gibi bromlama ve alkilleme reaksiyonları yapılmış ve bu reaksiyonlardan elde edilen  $^{13}\text{C-NMR}$  spektrumları literatürle (Li, Y.vd, 2004) ve önceden yapılan tezlerle (Derince, 2022) karşılaştırıldığında uyumlu olduğu görülmüştür. Yapılan karakterizasyon çalışmaları sonucunda maddelerin (II, III, IV) sentezlendiği görülmektedir.

Hedef ürünlerin MG1, MG2, MG3, MG4  $^{13}\text{C-NMR}$  spektrumlarında aromatik bölgeye ait sinyaller 149,30-107,38 ppm, alifatik bölgeye ait olan sinyallerin ise 43,64-14,09 ppm arasında gözlemlenmiştir. Bu verilerden tüm maddelerin yapıları aydınlatılmıştır.

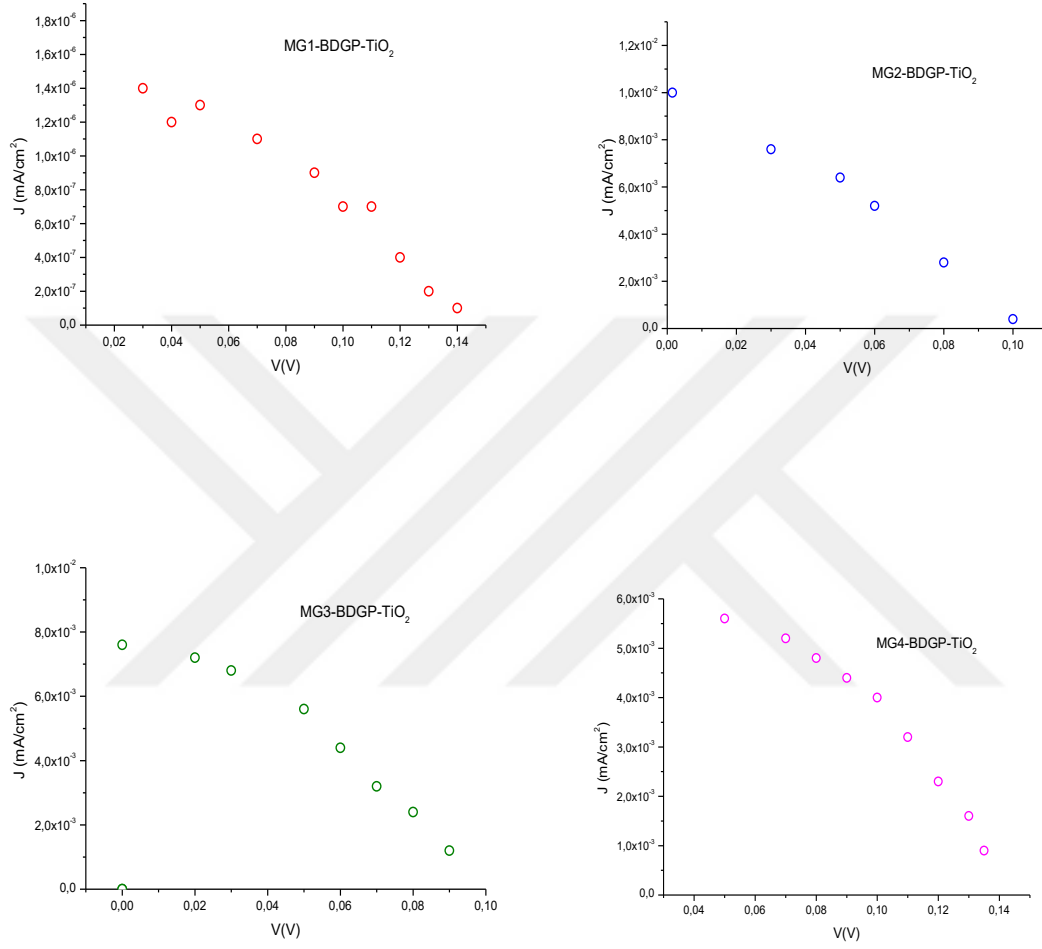
### 4.2.3. PİL YORUMU

**Çizelge 4.5.** Boya Duyarlı Güneş Pillerinin Performans Değerleri

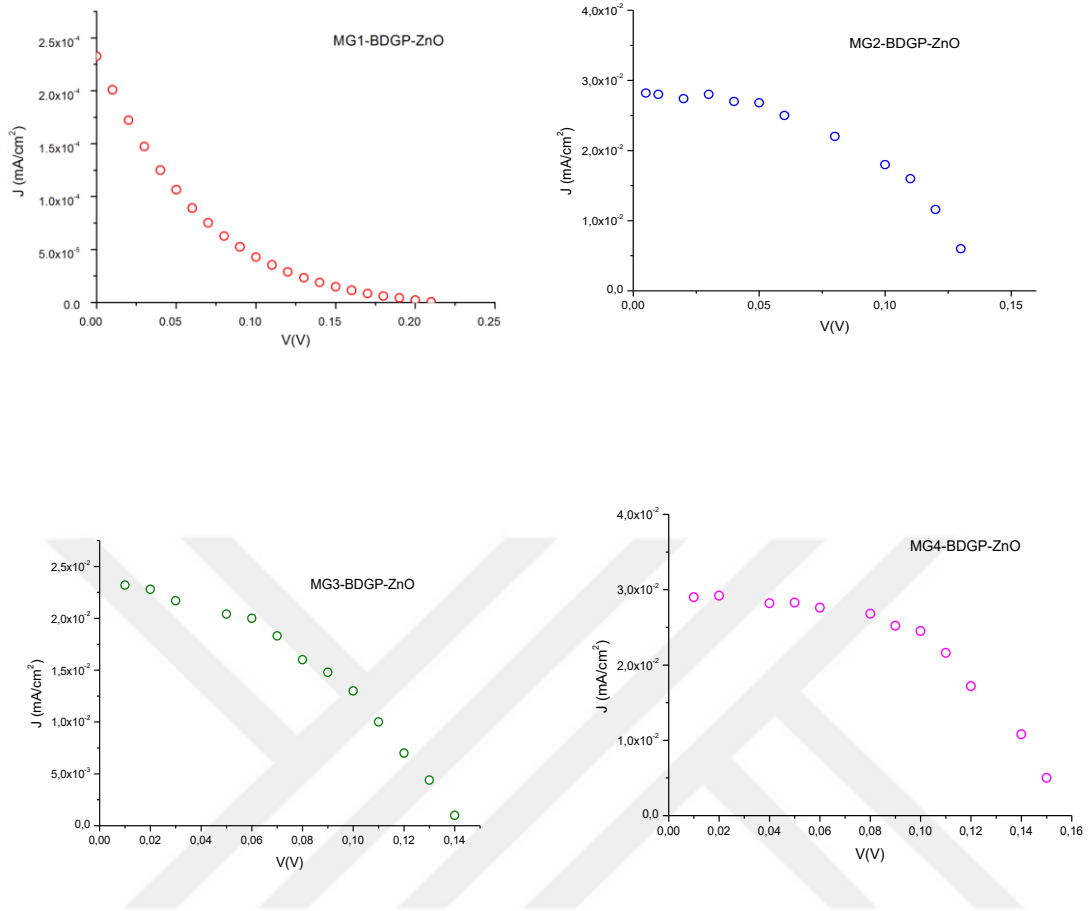
<b>BDGP-kodu</b>	<b>J<sub>sc</sub> (mA/cm<sup>2</sup>)</b>	<b>V<sub>oc</sub> (V)</b>	<b>FF</b>	<b>% (n)</b>
<b>MG1-TiO<sub>2</sub></b>	2,20x10 <sup>-6</sup>	0,13	0,409	0,000325
<b>MG2-TiO<sub>2</sub></b>	1,9x10 <sup>-6</sup>	0,11	1,199	0,000886
<b>MG3-TiO<sub>2</sub></b>	1,9x10 <sup>-6</sup>	0,08	0,296	0,000125
<b>MG4-TiO<sub>2</sub></b>	1,9x10 <sup>-6</sup>	0,14	0,375	0,000278
<b>MG1-ZnO</b>	5,8x10 <sup>-8</sup>	0,21	0,221	0,000704
<b>MG2-ZnO</b>	6,7x10 <sup>-6</sup>	0,22	0,427	0,00252
<b>MG3-ZnO</b>	5,6x10 <sup>-6</sup>	0,14	0,471	0,00148
<b>MG4-ZnO</b>	7,5x10 <sup>-6</sup>	0,17	0,486	0,00248

Boya duyarlı güneş pillerinin performans değerleri Çizelge 4.4. de verildiği gibidir. Duyarlaştırıcı olarak MG1, MG2, MG3 ve MG4 kullanıldığında, fabrikasyonları yapılan güneş pillerinde kullanılan TiO<sub>2</sub> karşıt elektrotlarında kısa devre akım yoğunluğu (J<sub>sc</sub>) değerleri 1,9x10<sup>-6</sup> – 2,2x10<sup>-6</sup> mA/cm<sup>2</sup>, açık devre gerilimi (V<sub>oc</sub>) değerleri 0,08-0,14 V ve bu pillerin yüzde verimleri %n 8,86x10<sup>-4</sup> – 1,25x10<sup>-4</sup> aralığında geldiği görülmüştür. Aynı koşullar altında, duyarlaştırıcı olarak MG1, MG2, MG3 ve MG4 kullanıldığında, fabrikasyonları yapılan güneş pillerinde kullanılan ZnO karşıt elektrotlarında kısa devre akım yoğunluğu (J<sub>sc</sub>) değerleri 5,8x10<sup>-8</sup> -7,5x10<sup>-6</sup> mA/cm<sup>2</sup>, açık devre gerilimi (V<sub>oc</sub>) değerleri 0,14-0,22 V ve bu pillerin yüzde verimleri %n 7,04x10<sup>-4</sup> – 2,52x10<sup>-3</sup> aralığında

geldiği görülmüştür. Fabrikasyonu yapılan güneş pilleri ölçümlerinde hem  $\text{TiO}_2$  hem de  $\text{ZnO}$  elektrotlarıyla yapılan MG2'nin daha yüksek verimlilik gösterdiği görülmüştür.



**Şekil 4.13.**  $\text{TiO}_2$ -MG1,  $\text{TiO}_2$ -MG2,  $\text{TiO}_2$ -MG3,  $\text{TiO}_2$ -MG4 BDGP'lerin Akım Yoğunluğu-Voltaj Grafikleri



**Şekil 4.14.** ZnO-MG1, ZnO-MG2, ZnO-MG3, ZnO-MG4 BDGP'lerin Akım Yoğunluğu-Voltaj Grafikleri

## 5. SONUÇ VE ÖNERİLER

3,6-Dibromokarbazol (II), 3,6-Dibromo-9-oktilkarbazol (III), 3,6-Dibromo-9-hekzilkarbazol (IV), 4,4'-(9-oktil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-florobenzonitril) (MG1), 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-florobenzonitril))(MG2), 4,4'-(9-oktil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-(triflorometil)benzonitril)) (MG3) ve 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-(triflorometil)benzonitril)) (MG4) numaralı bileşikler bromlama, alkilleme ve Suzuki-Miyaura çapraz kenetlenme reaksiyonları kullanılarak sentezlenmiştir. Bu bileşiklerin karakterizasyonları FT-IR, <sup>1</sup>H-NMR ve <sup>13</sup>C-NMR Spektrumları ile yapılmış ve yapıları tam olarak aydınlatılmıştır.

Hedeflenen bileşiklerin fotofiziksel analizleri farklı çözücüler kullanılarak alınmıştır. Yeni sentezlenen MG1, MG2, MG3 ve MG4 kodlu moleküllerin fotofiziksel (UV-GB ve Floresans) özellikleri incelenmiştir ve moleküllerde fenil halkasına direkt bağlı F- grubunun bulunması ile floresans şiddetini arttırdığı gözlemlenmiştir. Ayrıca fenil halkasına bağlı CF<sub>3</sub>- grubunun varlığı çözücü polaritesinin artmasıyla dalga boyu değerlerinin arttırdığını ve kırmızıya kaydığı gözlenmiştir.

Ayrıca sentezlenen moleküllerin boya duyarlı güneş pillerinin performans değerleri de fabrikasyonları yapılarak ölçülmüştür. Duyarlaştırıcı olarak MG1, MG2, MG3 ve MG4 molekülleri kullanıldığında, fabrikasyonları yapılan güneş pillerinde kullanılan TiO<sub>2</sub> ve ZnO karşıt elektrotlarında sırasıyla kısa devre akım yoğunluğu (J<sub>SC</sub>) değerleri 1,9x10<sup>-6</sup> –2,2x10<sup>-6</sup> ve 5,8x10<sup>-8</sup> -7,5x10<sup>-6</sup> mA/cm<sup>2</sup>, açık devre gerilimi (V<sub>OC</sub>) değerleri 0,08-0,14 V ve 0,14-0,22 V bu pillerin yüzde verimleri %n 8,86x10<sup>-4</sup> – 1,25x10<sup>-4</sup> ve 7,04x10<sup>-4</sup> – 2,52x10<sup>-3</sup> aralığında geldiği görülmüştür. Fabrikasyonu yapılan güneş pilleri ölçümlerinde hem TiO<sub>2</sub> hem de ZnO elektrotlarıyla yapılan MG2'nin daha yüksek verimlilik gösterdiği görülmüştür.

Bu çalışmadan sonra yapılacak ilerideki çalışmalarda enerji alanında güneş pili hücrelerinde kullanılmak üzere pil verimliliğinin artırılması hedeflenerek yeni moleküllerin sentezlerinin yapılması önerilebilir.

## KAYNAKLAR DİZİNİ

- Ahmed, S., Bora, S. R., Chutia, T., & Kalita, D. J. (2021). Structural modulation of phenothiazine and coumarin based derivatives for high performance dye sensitized solar cells: a theoretical study. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 23(23), 13190-13203.
- Altobello, S., Bignozzi, C. A., Caramori, S., Larramona, G., Quici, S., Marzanni, G., & Lakhmiri, R. (2004). Sensitization of TiO<sub>2</sub> with ruthenium complexes containing boronic acid functions. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 166(1-3), 91-98.
- Amadelli, R., Argazzi, R., Bignozzi, C. A., & Scandola, F. (1990). Design of antenna-sensitizer polynuclear complexes. Sensitization of titanium dioxide with [Ru (bpy)<sub>2</sub> (CN)<sub>2</sub>] 2Ru (bpy (COO)<sub>2</sub>)<sub>2</sub>. *Journal of the American Chemical Society*, 112(20), 7099-7103.
- Ashokkumar, R., Kathiravan, A., & Ramamurthy, P. (2014). Aggregation behaviour and electron injection/recombination dynamics of symmetrical and unsymmetrical Zn-phthalocyanines on TiO<sub>2</sub> film. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 16(3), 1015-1021.
- Bella, F., Gerbaldi, C., Barolo, C., & Grätzel, M. (2015). Aqueous dye-sensitized solar cells. *Chemical Society Reviews*, 44(11), 3431-3473.
- Bendjedidi, H., Attaf, A., Saidi, H., Aida, M. S., Semmari, S., Bouhdjar, A., & Benkhetta, Y. (2015). Properties of n-type SnO<sub>2</sub> semiconductor prepared by spray ultrasonic technique for photovoltaic applications. *Journal of Semiconductors*, 36(12), 123002.
- Bessho, T., Yoneda, E., Yum, J. H., Guglielmi, M., Tavernelli, I., Imai, H., ... & Grätzel, M. (2009). New paradigm in molecular engineering of sensitizers for solar cell applications. *Journal of the American Chemical Society*, 131(16), 5930-5934.
- Biswal, D., Jha, A., & Sen, A. (2021). Screening donor and acceptor groups for organic azo-based dyes for dye sensitized solar cells. *Journal of Molecular Structure*, 1228, 129776.
- Boschloo, G., & Hagfeldt, A. (2009). Characteristics of the iodide/triiodide redox mediator in dye-sensitized solar cells. *Accounts of chemical research*, 42(11), 1819-1826.
- Brunner, F., Marinakis, N., Wobill, C., Willgert, M., Ertl, C. D., Kosmalski, T., ... & Housecroft, C. E. (2016). Modular synthesis of simple cycloruthenated complexes with state-of-the-art performance in p-type DSCs. *Journal of Materials Chemistry C*, 4(41), 9823-9833.
- Burschka, J., Pellet, N., Moon, S. J., Humphry-Baker, R., Gao, P., Nazeeruddin, M. K., & Grätzel, M. (2013). Sequential deposition as a route to high-performance perovskite-sensitized solar cells. *Nature*, 499(7458), 316-319.

## KAYNAKLAR DİZİNİ

- Cai, H., Tang, Q., He, B., Li, R., & Yu, L. (2014). Bifacial dye-sensitized solar cells with enhanced rear efficiency and power output. *Nanoscale*, 6(24), 15127-15133.
- Campbell, W. M., Jolley, K. W., Wagner, P., Wagner, K., Walsh, P. J., Gordon, K. C., ... & Officer, D. L. (2007). Highly efficient porphyrin sensitizers for dye-sensitized solar cells. *The Journal of Physical Chemistry C*, 111(32), 11760-11762.
- Cao, D., Peng, J., Hong, Y., Fang, X., Wang, L., & Meier, H. (2011). Enhanced performance of the dye-sensitized solar cells with phenothiazine-based dyes containing double D– A branches. *Organic Letters*, 13(7), 1610-1613.
- Chen, B. S., Chen, K., Hong, Y. H., Liu, W. H., Li, T. H., Lai, C. H., ... & Lee, G. H. (2009). Neutral, panchromatic Ru (II) terpyridine sensitizers bearing pyridine pyrazolate chelates with superior DSSC performance. *Chemical Communications*, (39), 5844-5846.
- Chen, B., Li, X., Wu, W., Zha, Q., & Xie, Y. (2014). A novel trigeminal zinc porphyrin and corresponding porphyrin monomers for dye-sensitized solar cells. *RSC Advances*, 4(21), 10439-10449.
- Chen, R., Yang, X., Tian, H., & Sun, L. (2007). Tetrahydroquinoline dyes with different spacers for organic dye-sensitized solar cells. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 189(2-3), 295-300.
- Chen, R., Yang, X., Tian, H., Wang, X., Hagfeldt, A., & Sun, L. (2007). Effect of tetrahydroquinoline dyes structure on the performance of organic dye-sensitized solar cells. *Chemistry of Materials*, 19(16), 4007-4015.
- Chen, W. C., Kong, F. T., Ghadari, R., Li, Z. Q., Guo, F. L., Liu, X. P., ... & Dai, S. Y. (2017). Unravelling the structural-electronic impact of arylamine electron-donating antennas on the performances of efficient ruthenium sensitizers for dye-sensitized solar cells. *Journal of Power Sources*, 346, 71-79.
- Daeneke, T., Kwon, T. H., Holmes, A. B., Duffy, N. W., Bach, U., & Spiccia, L. (2011). High-efficiency dye-sensitized solar cells with ferrocene-based electrolytes. *Nature chemistry*, 3(3), 211-215.
- Dang, Y., Ju, D., Wang, L., & Tao, X. (2016). Recent progress in the synthesis of hybrid halide perovskite single crystals. *CrystEngComm*, 18(24), 4476-4484.
- Daniel, A., & Delcamp, J. H. (2021). Dye-Sensitized Solar Cells: A Brief Historical Perspective and Uses in Multijunction Devices. In *Development of Solar Cells: Theory and Experiment* (pp. 81-98). Cham: Springer International Publishing.
- De Angelis, F., Fantacci, S., Selloni, A., Nazeeruddin, M. K., & Grätzel, M. (2010). First-principles modeling of the adsorption geometry and electronic structure of Ru (II) dyes on extended TiO<sub>2</sub> substrates for dye-sensitized solar cell applications. *The Journal of Physical Chemistry C*, 114(13), 6054-6061.

## KAYNAKLAR DİZİNİ

- Derince, B., Gorgun, K., Caglar, Y., & Caglar, M. (2022). Architectural design of new conjugated systems carrying donor- $\pi$ -acceptor groups (carbazole-CF<sub>3</sub>): Characterizations, optical, photophysical properties and DSSC's applications. *Journal of Molecular Structure*, 1250, 131689.
- Devadiga, D., BM, S., & TN, A. (2024). Synthetic Strategies for 3, 6-Substituted Carbazole-based Polymers and Their Opto-Electronic Applications—A Review. *Journal of Fluorescence*, 1-23
- Dong, L., Chen, R., Weng, Q., An, Z., Chen, X., & Chen, P. (2017). The effect of furan linkers on the properties of cyclic thiourea functionalized triphenylamine dye sensitizers. *Dyes and Pigments*, 139, 772-778.
- Duan, Y., Zheng, J., Fu, N., Fang, Y., Liu, T., Zhang, Q., ... & Pan, F. (2015). Enhancing the performance of dye-sensitized solar cells: doping SnO<sub>2</sub> photoanodes with Al to simultaneously improve conduction band and electron lifetime. *Journal of Materials Chemistry A*, 3(6), 3066-3073.
- Eom, Y. K., Choi, I. T., Kang, S. H., Lee, J., Kim, J., Ju, M. J., & Kim, H. K. (2015). Thieno [3, 2-b][1] benzothiophene derivative as a new  $\pi$ -bridge unit in D- $\pi$ -A structural organic sensitizers with over 10.47% efficiency for dye-sensitized solar cells. *Advanced Energy Materials*, 5(15), 1500300.
- Eom, Y. K., Hong, J. Y., Kim, J., & Kim, H. K. (2017). Triphenylamine-based organic sensitizers with  $\pi$ -spacer structural engineering for dye-sensitized solar cells: Synthesis, theoretical calculations, molecular spectroscopy and structure-property-performance relationships. *Dyes and Pigments*, 136, 496-504.
- Eperon, G. E., Leijtens, T., Bush, K. A., Prasanna, R., Green, T., Wang, J. T. W., ... & Snaith, H. J. (2016). Perovskite-perovskite tandem photovoltaics with optimized band gaps. *Science*, 354(6314), 861-865.
- Etgar, L., Park, J., Barolo, C., Lesnyak, V., Panda, S. K., Quagliotto, P., ... & Grätzel, M. (2012). Enhancing the efficiency of a dye sensitized solar cell due to the energy transfer between CdSe quantum dots and a designed squaraine dye. *RSC advances*, 2(7), 2748-2752.
- Fakharuddin, A., Jose, R., Brown, T. M., Fabregat-Santiago, F., & Bisquert, J. (2014). A perspective on the production of dye-sensitized solar modules. *Energy & Environmental Science*, 7(12), 3952-3981.
- Fan, W., Tan, D., & Deng, W. Q. (2012). Acene-modified triphenylamine dyes for dye-sensitized solar cells: a computational study. *ChemPhysChem*, 13(8), 2051-2060.
- Fei, T., Cheng, G., Hu, D., Lu, P., & Ma, Y. (2009). A wide band gap polymer derived from 3, 6-carbazole and tetraphenylsilane as host for green and blue phosphorescent complexes. *Journal of Polymer Science Part A: Polymer Chemistry*, 47(18), 4784-4792.

## KAYNAKLAR DİZİNİ

- Feldt, S. M., Gibson, E. A., Gabrielsson, E., Sun, L., Boschloo, G., & Hagfeldt, A. (2010). Design of organic dyes and cobalt polypyridine redox mediators for high-efficiency dye-sensitized solar cells. *Journal of the American Chemical Society*, *132*(46), 16714-16724.
- Ferrere, S., & Gregg, B. A. (1998). Photosensitization of TiO<sub>2</sub> by [FeII (2, 2'-bipyridine-4, 4'-dicarboxylic acid) 2 (CN) 2]: band selective electron injection from ultra-short-lived excited states. *Journal of the American Chemical Society*, *120*(4), 843-844.
- Ferrere, S., Zaban, A., & Gregg, B. A. (1997). Dye sensitization of nanocrystalline tin oxide by perylene derivatives. *The Journal of Physical Chemistry B*, *101*(23), 4490-4493.
- Freys, J. C., Gardner, J. M., D'Amario, L., Brown, A. M., & Hammarström, L. (2012). Ru-based donor-acceptor photosensitizer that retards charge recombination in a p-type dye-sensitized solar cell. *Dalton Transactions*, *41*(42), 13105-13111.
- Fu, Y., Kim, J., Siva, A., Shin, W. S., Moon, S. J., & Park, T. (2011). Parameters influencing the molecular weight of 3, 6-carbazole-based D- $\pi$ -A-type copolymers. *Journal of Polymer Science Part A: Polymer Chemistry*, *49*(20), 4368-4378.
- Funabiki, K., Mase, H., Saito, Y., Otsuka, A., Hibino, A., Tanaka, N., ... & Matsui, M. (2012). Design of NIR-absorbing simple asymmetric squaraine dyes carrying indoline moieties for use in dye-sensitized solar cells with Pt-free electrodes. *Organic letters*, *14*(5), 1246-1249.
- Gao, F., Cheng, Y., Yu, Q., Liu, S., Shi, D., Li, Y., & Wang, P. (2009). Conjugation of selenophene with bipyridine for a high molar extinction coefficient sensitizer in dye-sensitized solar cells. *Inorganic Chemistry*, *48*(6), 2664-2669.
- Gao, F., Wang, Y., Shi, D., Zhang, J., Wang, M., Jing, X., ... & Grätzel, M. (2008). Enhance the optical absorptivity of nanocrystalline TiO<sub>2</sub> film with high molar extinction coefficient ruthenium sensitizers for high performance dye-sensitized solar cells. *Journal of the American Chemical Society*, *130*(32), 10720-10728.
- Gautam, P., Misra, R., Siddiqui, S. A., & Sharma, G. D. (2015). Unsymmetrical donor-acceptor-acceptor- $\pi$ -donor type benzothiadiazole-based small molecule for a solution processed bulk heterojunction organic solar cell. *ACS Applied Materials & Interfaces*, *7*(19), 10283-10292.
- Grant, F. A. (1959). Properties of rutile (titanium dioxide). *Reviews of Modern Physics*, *31*(3), 646.
- Grätzel, M. (2005). Solar energy conversion by dye-sensitized photovoltaic cells. *Inorganic chemistry*, *44*(20), 6841-6851.
- Grätzel, M. (2009). Recent advances in sensitized mesoscopic solar cells. *Accounts of chemical research*, *42*(11), 1788-1798.

## KAYNAKLAR DİZİNİ

- Grätzel, M., & Moser, J. E. (2001). Solar energy conversion. *Electron transfer in chemistry*, 5(3), 589-644.
- Grigoras, M., & Antonoaia, N. C. (2005). Synthesis and characterization of some carbazole-based imine polymers. *European Polymer Journal*, 41(5), 1079-1089.
- Gros, C. P., Michelin, C., Bucher, L., Desbois, N., Devillers, C. H., Coutsolelos, A. G., ... & Sharma, G. D. (2018). Synthesis and characterization of zinc carboxy-porphyrin complexes for dye sensitized solar cells. *New Journal of Chemistry*, 42(10), 8151-8159.
- Guo, L., Deng, J., Zhang, L., Xiu, Q., Wen, G., & Zhong, C. (2012). Synthesis and applications of 3, 6-carbazole-based conjugated side-chain copolymers containing complexes of 1, 10-phenanthroline with Zn (II), Cd (II) and Ni (II) for dye-sensitized solar cells. *Dyes and pigments*, 92(3), 1062-1068.
- Gupta, K. S., Zhang, J., Marotta, G., Reddy, M. A., Singh, S. P., Islam, A., ... & Pastore, M. (2015). Effect of the anchoring group in the performance of carbazole-phenothiazine dyads for dye-sensitized solar cells. *Dyes and Pigments*, 113, 536-545.
- Hagberg, D. P., Marinado, T., Karlsson, K. M., Nonomura, K., Qin, P., Boschloo, G., ... & Sun, L. (2007). Tuning the HOMO and LUMO energy levels of organic chromophores for dye sensitized solar cells. *The Journal of organic chemistry*, 72(25), 9550-9556.
- Haid, S., Marszalek, M., Mishra, A., Wielopolski, M., Teuscher, J., Moser, J. E., ... & Bäuerle, P. (2012). Significant improvement of dye-sensitized solar cell performance by small structural modification in  $\pi$ -conjugated donor-acceptor dyes. *Advanced Functional Materials*, 22(6), 1291-1302.
- Han, L., Islam, A., Chen, H., Malapaka, C., Chiranjeevi, B., Zhang, S., ... & Yanagida, M. (2012). High-efficiency dye-sensitized solar cell with a novel co-adsorbent. *Energy & Environmental Science*, 5(3), 6057-6060.
- Han, L., Liu, J., Liu, Y., & Cui, Y. (2019). Novel DA- $\pi$ -A type benzocarbazole sensitizers for dye sensitized solar cells. *Journal of Molecular Structure*, 1180, 651-658.
- Hao, Y., Yang, X., Cong, J., Hagfeldt, A., & Sun, L. (2012). Engineering of highly efficient tetrahydroquinoline sensitizers for dye-sensitized solar cells. *Tetrahedron*, 68(2), 552-558.
- Hara, K., Kurashige, M., Dan-oh, Y., Kasada, C., Shinpo, A., Suga, S., ... & Arakawa, H. (2003). Design of new coumarin dyes having thiophene moieties for highly efficient organic-dye-sensitized solar cells. *New Journal of Chemistry*, 27(5), 783-785.
- Hara, K., Kurashige, M., Ito, S., Shinpo, A., Suga, S., Sayama, K., & Arakawa, H. (2003). Novel polyene dyes for highly efficient dye-sensitized solar cells. *Chemical communications*, (2), 252-253.

## KAYNAKLAR DİZİNİ

- Hara, K., Miyamoto, K., Abe, Y., & Yanagida, M. (2005). Electron transport in coumarin-dye-sensitized nanocrystalline TiO<sub>2</sub> electrodes. *The Journal of Physical Chemistry B*, 109(50), 23776-23778.
- Hara, K., Sato, T., Katoh, R., Furube, A., Ohga, Y., Shinpo, A., ... & Arakawa, H. (2003). Molecular design of coumarin dyes for efficient dye-sensitized solar cells. *The Journal of Physical Chemistry B*, 107(2), 597-606.
- Hara, K., Sato, T., Katoh, R., Furube, A., Yoshihara, T., Murai, M., ... & Arakawa, H. (2005). Novel conjugated organic dyes for efficient dye-sensitized solar cells. *Advanced Functional Materials*, 15(2), 246-252.
- Hara, K., Sayama, K., Ohga, Y., Shinpo, A., Suga, S., & Arakawa, H. (2018). A Coumarin-Derivative Dye-Sensitized Nanocrystalline TiO<sub>2</sub> Solar Cell Having a High Solar Energy Conversion Efficiency up to 5.6 Per Cent. In *Renewable Energy*(pp. Vol2\_214-Vol2\_218). Routledge.
- Hara, K., Tachibana, Y., Ohga, Y., Shinpo, A., Suga, S., Sayama, K., ... & Arakawa, H. (2003). Dye-sensitized nanocrystalline TiO<sub>2</sub> solar cells based on novel coumarin dyes. *Solar Energy materials and Solar cells*, 77(1), 89-103.
- Hara, K., Sayama, K., Ohga, Y., Shinpo, A., Suga, S., & Arakawa, H. (2018). A Coumarin-Derivative Dye-Sensitized Nanocrystalline TiO<sub>2</sub> Solar Cell Having a High Solar Energy Conversion Efficiency up to 5.6 Per Cent. In *Renewable Energy*(pp. Vol2\_214-Vol2\_218). Routledge.
- Hara, K., Wang, Z. S., Sato, T., Furube, A., Katoh, R., Sugihara, H., ... & Suga, S. (2005). Oligothiophene-containing coumarin dyes for efficient dye-sensitized solar cells. *The Journal of Physical Chemistry B*, 109(32), 15476-15482.
- He, L. J., Chen, J., Bai, F. Q., Jia, R., Wang, J., & Zhang, H. X. (2016). The influence of a dye-TiO<sub>2</sub> interface on DSSC performance: a theoretical exploration with a ruthenium dye. *RSC advances*, 6(85), 81976-81982.
- He, L. J., Wang, J., Chen, J., Jia, R., & Zhang, H. X. (2017). The effect of relative position of the  $\pi$ -spacer center between donor and acceptor on the overall performance of D- $\pi$ -A dye: a theoretical study with organic dye. *Electrochimica Acta*, 241, 440-448.
- Hfaiedh, A., Labiedh, M., Mabrouk, A., Braiek, M. B., & Alimi, K. (2023). Synthesis, characterization and structure-property study of new push-pull carbazole materials. *Macromolecular Research*, 31(10), 981-999.
- Higashijima, S., Inoue, Y., Miura, H., Kubota, Y., Funabiki, K., Yoshida, T., & Matsui, M. (2012). Organic dyes containing fluorene-substituted indoline core for zinc oxide dye-sensitized solar cell. *RSC advances*, 2(7), 2721-2724.
- Higginbotham, H. E. A. T. H. E. R., Karon, K. R. Z. Y. S. Z. T. O. F., Ledwon, P. R. Z. E. M. Y. S. L. A. W., & Data, P. (2017). Carbazoles in optoelectronic applications. *Disp. Imaging*, 2(3-4), 207-216.

## KAYNAKLAR DİZİNİ

- Hong, Y., Iqbal, Z., Yin, X., & Cao, D. (2014). Synthesis of double D–A branched organic dyes employing indole and phenoxazine as donors for efficient DSSCs. *Tetrahedron*, 70(36), 6296-6302.
- Hong, Y., Liao, J. Y., Cao, D., Zang, X., Kuang, D. B., Wang, L., ... & Su, C. Y. (2011). Organic dye bearing asymmetric double donor- $\pi$ -acceptor chains for dye-sensitized solar cells. *The Journal of organic chemistry*, 76(19), 8015-8021.
- Hong, Y., Liao, J. Y., Fu, J., Kuang, D. B., Meier, H., Su, C. Y., & Cao, D. (2012). Performance of dye-sensitized solar cells based on novel sensitizers bearing asymmetric double D-  $\pi$ - A chains with arylamines as donors. *Dyes and Pigments*, 94(3), 481-489.
- Hua, Y., Chang, S., Huang, D., Zhou, X., Zhu, X., Zhao, J., ... & Wong, W. K. (2013). Significant improvement of dye-sensitized solar cell performance using simple phenothiazine-based dyes. *Chemistry of Materials*, 25(10), 2146-2153.
- Hwang, S., Lee, J. H., Park, C., Lee, H., Kim, C., Park, C., ... & Kim, C. (2007). A highly efficient organic sensitizer for dye-sensitized solar cells. *Chemical Communications*, (46), 4887-4889.
- Ito, S., Miura, H., Uchida, S., Takata, M., Sumioka, K., Liska, P., ... & Grätzel, M. (2008). High-conversion-efficiency organic dye-sensitized solar cells with a novel indoline dye. *Chemical communications*, (41), 5194-5196.
- Ito, S., Zakeeruddin, S. M., Humphry-Baker, R., Liska, P., Charvet, R., Comte, P., ... & Grätzel, M. (2006). High-efficiency organic-dye-sensitized solar cells controlled by nanocrystalline-TiO<sub>2</sub> electrode thickness. *Advanced Materials*, 18(9), 1202-1205.
- Jenekhe, S. A., Lu, L., & Alam, M. M. (2001). New conjugated polymers with donor-acceptor architectures: synthesis and photophysics of carbazole-quinoline and phenothiazine-quinoline copolymers and oligomers exhibiting large intramolecular charge transfer. *Macromolecules*, 34(21), 7315-732
- Jennings, J. R., Liu, Y., & Wang, Q. (2011). Efficiency limitations in dye-sensitized solar cells caused by inefficient sensitizer regeneration. *The Journal of Physical Chemistry C*, 115(30), 15109-15120.
- Ji, J. M., Zhou, H., Eom, Y. K., Kim, C. H., & Kim, H. K. (2020). 14.2% efficiency dye-sensitized solar cells by co-sensitizing novel thieno [3, 2-b] indole-based organic dyes with a promising porphyrin sensitizer. *Advanced Energy Materials*, 10(15), 2000124.
- Ji, Z., Natu, G., Huang, Z., Kokhan, O., Zhang, X., & Wu, Y. (2012). Synthesis, photophysics, and photovoltaic studies of ruthenium cyclometalated complexes as sensitizers for p-type NiO dye-sensitized solar cells. *The Journal of Physical Chemistry C*, 116(32), 16854-16863.
- Jung, H. S., & Park, N. G. (2015). Perovskite solar cells: from materials to devices. *small*, 11(1), 10-25.

## KAYNAKLAR DİZİNİ

- Jungsuttiwong, S., Tarsang, R., Sudyoadsuk, T., Promarak, V., Khongpracha, P., & Namuangruk, S. (2013). Theoretical study on novel double donor-based dyes used in high efficient dye-sensitized solar cells: the application of TDDFT study to the electron injection process. *Organic Electronics*, 14(3), 711-722.
- Kabir, F., Sakib, S. N., Uddin, S. S., Efaz, E. T., & Himel, M. T. F. (2019). Enhance cell performance of DSSC by dye mixture, carbon nanotube and post TiCl<sub>4</sub> treatment along with degradation study. *Sustainable Energy Technologies and Assessments*, 35, 298-307.
- Kakiage, K., Aoyama, Y., Yano, T., Otsuka, T., Kyomen, T., Unno, M., & Hanaya, M. (2014). An achievement of over 12 percent efficiency in an organic dye-sensitized solar cell. *Chemical Communications*, 50(48), 6379-6381.
- Kakiage, K., Aoyama, Y., Yano, T., Oya, K., Fujisawa, J. I., & Hanaya, M. (2015). Highly-efficient dye-sensitized solar cells with collaborative sensitization by silyl-anchor and carboxy-anchor dyes. *Chemical communications*, 51(88), 15894-15897.
- Katoh, R. (2012). Quantitative evaluation of electron injection efficiency in dye-sensitized TiO<sub>2</sub> films. *Ambio*, 41, 143-148.
- Keremane, K. S., & Adhikari, A. V. (2021). Simple carbazole derivatives with mono/dimethoxyphenylacrylonitrile substituents as hole-transporting materials: Performance studies in hybrid perovskite solar cells. *Electrochemical Science Advances*, 1(3), e2000036.
- Kim, S., Lee, J. K., Kang, S. O., Ko, J., Yum, J. H., Fantacci, S., ... & Grätzel, M. (2006). Molecular engineering of organic sensitizers for solar cell applications. *Journal of the American Chemical Society*, 128(51), 16701-16707.
- Kitamura, T., Ikeda, M., Shigaki, K., Inoue, T., Anderson, N. A., Ai, X., ... & Yanagida, S. (2004). Phenyl-conjugated oligoene sensitizers for TiO<sub>2</sub> solar cells. *Chemistry of Materials*, 16(9), 1806-1812.
- Ko, S., Choi, H., Kang, M. S., Hwang, H., Ji, H., Kim, J., ... & Kang, Y. (2010). Silole-spaced triarylamine derivatives as highly efficient organic sensitizers in dye-sensitized solar cells (DSSCs). *Journal of Materials Chemistry*, 20(12), 2391-2399.
- Kohle, O., Grätzel, M., Meyer, A. F., & Meyer, T. B. (1997). The photovoltaic stability of bis (isothiocyanato) ruthenium (II)-bis-2, 2' bipyridine-4, 4'-dicarboxylic acid and related sensitizers. *Advanced Materials*, 9(11), 904-906.
- Koumura, N., Wang, Z. S., Miyashita, M., Uemura, Y., Sekiguchi, H., Cui, Y., ... & Hara, K. (2009). Substituted carbazole dyes for efficient molecular photovoltaics: long electron lifetime and high open circuit voltage performance. *Journal of Materials Chemistry*, 19(27), 4829-4836.
- Koumura, N., Wang, Z. S., Mori, S., Miyashita, M., Suzuki, E., & Hara, K. (2006). Alkyl-functionalized organic dyes for efficient molecular photovoltaics. *Journal of the American Chemical Society*, 128(44), 14256-14257.

## KAYNAKLAR DİZİNİ

- Kulasi, A., Yi, H., & Iraqi, A. (2007). Triarylamine N-functionalized 3, 6-linked carbazole main chain polymers and copolymers: Preparation and physical properties. *Journal of Polymer Science Part A: Polymer Chemistry*, 45(24), 5957-5967.
- Kunzmann, A., Valero, S., Sepúlveda, Á. E., Rico-Santacruz, M., Lalinde, E., Berenguer, J. R., ... & Costa, R. D. (2018). Hybrid Dye-Titania Nanoparticles for Superior Low-Temperature Dye-Sensitized Solar Cells. *Advanced Energy Materials*, 8(12), 1702583.
- Kurahashi, M., Fukuyo, M., Shimada, A., Furusaki, A., & Nitta, I. (1969). The crystal and molecular structure of carbazole. *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, 42(8), 2174-2179.
- Lai, H., Hong, J., Liu, P., Yuan, C., Li, Y., & Fang, Q. (2012). Multi-carbazole derivatives: new dyes for highly efficient dye-sensitized solar cells. *RSC advances*, 2(6), 2427-2432.
- Lai, M. H., Tsai, J. H., Chueh, C. C., Wang, C. F., & Chen, W. C. (2010). Syntheses of New 3, 6-Carbazole-Based Donor/Acceptor Conjugated Copolymers for Optoelectronic Device Applications. *Macromolecular Chemistry and Physics*, 211(18), 2017-2025.
- Li, C., Luo, L., Wu, D., Jiang, R., Lan, J., Wang, R., ... & You, J. (2016). Porphyrins with intense absorptivity: highly efficient sensitizers with a photovoltaic efficiency of up to 10.7% without a cosensitizer and a coabsorbate. *Journal of Materials Chemistry A*, 4(30), 11829-11834.
- Li, X., Liu, Z., Li, C., Gao, R., Qi, Y., & Ren, Y. (2023). Synthesis and Photophysical Properties of Carbazole-Functionalized Diazaphosphepines via Sequent P–N Chemistry. *The Journal of Organic Chemistry*, 88(19), 13678-13685.
- Liang, G., Yuan, Y., Wang, D., Zhong, Z., & Xu, J. (2014). Tuning the electronic structures and related properties of phenothiazine-based donor- $\pi$ -acceptor dyes for dye-sensitized solar cells: A theoretical study. *Monatshefte für Chemie-Chemical Monthly*, 145, 1737-1744.
- Liang, M., & Chen, J. (2013). Arylamine organic dyes for dye-sensitized solar cells. *Chemical Society Reviews*, 42(8), 3453-3488.
- Linares-Flores, C., Schott, E., Claveria-Cadiz, F., & Zarate, X. (2018). Energy conversion process of substituted phthalocyanines with potential application to DSSC: a theoretical study. *Theoretical Chemistry Accounts*, 137, 1-10.
- Liou, G. S., & Yen, H. J. (2012). Polyimides in Polymer Science: A Comprehensive Reference. *Press: Elsevier BV, Amsterdam*.
- Liu, J., Hou, W., Xu, R., Gao, Y., Xu, L., Jiang, L., & Zhang, C. (2022). Synthesis and electrochemical properties of donor-acceptor-conjugated polymers based on carbazole-EDOT derivatives with different electron-withdrawing groups. *ACS Applied Polymer Materials*, 4(3), 2132-2139.

## KAYNAKLAR DİZİNİ

- Liu, W. H., Wu, I. C., Lai, C. H., Lai, C. H., Chou, P. T., Li, Y. T., ... & Chi, Y. (2008). Simple organic molecules bearing a 3, 4-ethylenedioxythiophene linker for efficient dye-sensitized solar cells. *Chemical Communications*, (41), 5152-5154.
- Luizys, P., Xia, J., Daskeviciene, M., Kantminiene, K., Kasparavicius, E., Kanda, H., ... & Nazeeruddin, M. K. (2021). Branched methoxydiphenylamine-substituted carbazole derivatives for efficient perovskite solar cells: bigger is not always better. *Chemistry of materials*, 33(17), 7017-7027.
- Luo, J. H., Li, Q. S., Yang, L. N., Sun, Z. Z., & Li, Z. S. (2014). Theoretical design of porphyrazine derivatives as promising sensitizers for dye-sensitized solar cells. *RSC Advances*, 4(39), 20200-20207.
- Lyu, S., Farré, Y., Ducasse, L., Pellegrin, Y., Toupance, T., Olivier, C., & Odobel, F. (2016). Push-pull ruthenium diacetylide complexes: new dyes for p-type dye-sensitized solar cells. *RSC advances*, 6(24), 19928-19936.
- Ma, C., Rangasamy, E., Liang, C., Sakamoto, J., More, K. L., & Chi, M. (2015). Excellent stability of a lithium-ion-conducting solid electrolyte upon reversible Li<sup>+</sup>/H<sup>+</sup> exchange in aqueous solutions. *Angewandte Chemie International Edition*, 54(1), 129-133.
- Ma, J., Zhou, G., Chu, L., Liu, Y., Liu, C., Luo, S., & Wei, Y. (2017). Efficient removal of heavy metal ions with an EDTA functionalized chitosan/polyacrylamide double network hydrogel. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 5(1), 843-851.
- Ma, L. W., Huang, Z. S., Wang, S., Meier, H., & Cao, D. (2017). Impact of  $\pi$ -conjugation configurations on the photovoltaic performance of the quinoxaline-based organic dyes. *Dyes and Pigments*, 145, 126-135.
- Mahmood, A. (2016). Triphenylamine based dyes for dye sensitized solar cells: A review. *Solar energy*, 123, 127-144.
- Mao, J., He, N., Ning, Z., Zhang, Q., Guo, F., Chen, L., ... & Tian, H. (2012). Stable dyes containing double acceptors without COOH as anchors for highly efficient dye-sensitized solar cells. *Angewandte Chemie (International ed. in English)*, 51(39), 9873-9876.
- Marszalek, M., Nagane, S., Ichake, A., Humphry-Baker, R., Paul, V., Zakeeruddin, S. M., & Grätzel, M. (2012). Tuning spectral properties of phenothiazine based donor- $\pi$ -acceptor dyes for efficient dye-sensitized solar cells. *Journal of Materials Chemistry*, 22(3), 889-894.
- Martinez-Diaz, M. V., de la Torre, G., & Torres, T. (2010). Lighting porphyrins and phthalocyanines for molecular photovoltaics. *Chemical Communications*, 46(38), 7090-7108.
- Mauri, L., Colombo, A., Dragonetti, C., Roberto, D., & Fagnani, F. (2021). Recent investigations on thiocyanate-free ruthenium (II) 2, 2'-bipyridyl complexes for dye-sensitized solar cells. *Molecules*, 26(24), 7638.

## KAYNAKLAR DİZİNİ

- Mohammadnezhad, M., Selopal, G. S., Wang, Z. M., Stansfield, B., Zhao, H., & Rosei, F. (2018). Towards long-term thermal stability of dye-sensitized solar cells using multiwalled carbon nanotubes. *ChemPlusChem*, 83(7), 682-690.
- Mosconi, E., Yum, J. H., Kessler, F., Gomez Garcia, C. J., Zuccaccia, C., Cinti, A., ... & De Angelis, F. (2012). Cobalt electrolyte/dye interactions in dye-sensitized solar cells: a combined computational and experimental study. *Journal of the American Chemical Society*, 134(47), 19438-19453.
- Murakami, T. N., & Grätzel, M. (2008). Counter electrodes for DSC: application of functional materials as catalysts. *Inorganica Chimica Acta*, 361(3), 572-580.
- Murakami, T. N., Koumura, N., Yoshida, E., Funaki, T., Takano, S., Kimura, M., & Mori, S. (2016). An alkyloxyphenyl group as a sterically hindered substituent on a triphenylamine donor dye for effective recombination inhibition in dye-sensitized solar cells. *Langmuir*, 32(4), 1178-1183.
- Nabavi, S. M. J., Hosseinzadeh, B., Tajbakhsh, M., & Alinezhad, H. (2018). Three novel bis carbazole organic dyes for dye-sensitized solar cells. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 29, 3270-3280
- Nattestad, A., Ferguson, M., Kerr, R., Cheng, Y. B., & Bach, U. (2008). Dye-sensitized nickel (II) oxide photocathodes for tandem solar cell applications. *Nanotechnology*, 19(29), 295304.
- Nazeeruddin, M. K., Baranoff, E., & Grätzel, M. (2011). Dye-sensitized solar cells: A brief overview. *Solar energy*, 85(6), 1172-1178.
- Nazeeruddin, M. K., De Angelis, F., Fantacci, S., Selloni, A., Viscardi, G., Liska, P., ... & Grätzel, M. (2005). Combined experimental and DFT-TDDFT computational study of photoelectrochemical cell ruthenium sensitizers. *Journal of the American Chemical Society*, 127(48), 16835-16847.
- Nazeeruddin, M. K., Kay, A., Rodicio, I., Humphry-Baker, R., Müller, E., Liska, P., ... & Grätzel, M. (1993). Conversion of light to electricity by cis-X2bis (2, 2'-bipyridyl-4, 4'-dicarboxylate) ruthenium (II) charge-transfer sensitizers (X= Cl-, Br-, I-, CN-, and SCN-) on nanocrystalline titanium dioxide electrodes. *Journal of the American Chemical Society*, 115(14), 6382-6390.
- Nazeeruddin, M. K., Liska, P., Moser, J., Vlachopoulos, N., & Grätzel, M. (1990). Conversion of light into electricity with trinuclear ruthenium complexes adsorbed on textured TiO<sub>2</sub> films. *Helvetica Chimica Acta*, 73(6), 1788-1803.
- Nazeeruddin, M. K., Pechy, P., & Grätzel, M. (1997). Efficient panchromatic sensitization of nanocrystalline TiO<sub>2</sub> films by a black dye based on a trithiocyanato-ruthenium complex. *Chemical Communications*, (18), 1705-1706.
- Liang, M., & Chen, J. (2013). Arylamine organic dyes for dye-sensitized solar cells. *Chemical Society Reviews*, 42(8), 3453-3488.
- Hagfeldt, A., Boschloo, G., Sun, L., Kloo, L., & Pettersson, H. (2010). Dye-sensitized solar cells. *Chemical reviews*, 110(11), 6595-6663.

## KAYNAKLAR DİZİNİ

- Nazeeruddin, M. K., Pechy, P., Renouard, T., Zakeeruddin, S. M., Humphry-Baker, R., Comte, P., ... & Grätzel, M. (2001). Engineering of efficient panchromatic sensitizers for nanocrystalline TiO<sub>2</sub>-based solar cells. *Journal of the American Chemical Society*, 123(8), 1613-1624.
- Nazeeruddin, M. K., Zakeeruddin, S. M., Humphry-Baker, R., Jirousek, M., Liska, P., Vlachopoulos, N., ... & Grätzel, M. (1999). Acid– Base equilibria of (2, 2'-Bipyridyl-4, 4'-dicarboxylic acid) ruthenium (II) complexes and the effect of protonation on charge-transfer sensitization of nanocrystalline titania. *Inorganic Chemistry*, 38(26), 6298-6305.
- Ning, Z., Zhang, Q., Wu, W., Pei, H., Liu, B. O., & Tian, H. E. (2008). Starburst triarylamine based dyes for efficient dye-sensitized solar cells. *The Journal of organic chemistry*, 73(10), 3791-3797.
- Numata, Y., Singh, S. P., Islam, A., Iwamura, M., Imai, A., Nozaki, K., & Han, L. (2013). Enhanced light-harvesting capability of a panchromatic Ru(II) sensitizer based on  $\pi$ -extended terpyridine with a 4-methylstyryl group for dye-sensitized solar cells. *Advanced Functional Materials*, 23(14), 1817-1823.
- Nusbaumer, H., Moser, J. E., Zakeeruddin, S. M., Nazeeruddin, M. K., & Grätzel, M. (2001). CoII (dbbp) 22+ complex rivals tri-iodide/iodide redox mediator in dye-sensitized photovoltaic cells. *The Journal of Physical Chemistry B*, 105(43), 10461-10464.
- O'regan, B., & Grätzel, M. (1991). A low-cost, high-efficiency solar cell based on dye-sensitized colloidal TiO<sub>2</sub> films. *nature*, 353(6346), 737-740.
- Ono, L. K., Leyden, M. R., Wang, S., & Qi, Y. (2016). Organometal halide perovskite thin films and solar cells by vapor deposition. *Journal of Materials Chemistry A*, 4(18), 6693-6713.
- Oskam, G., Bergeron, B. V., Meyer, G. J., & Searson, P. C. (2001). Pseudohalogens for dye-sensitized TiO<sub>2</sub> photoelectrochemical cells. *The Journal of Physical Chemistry B*, 105(29), 6867-6873.
- Palomares, E., Martínez-Díaz, M. V., Haque, S. A., Torres, T., & Durrant, J. R. (2004). State selective electron injection in non-aggregated titanium phthalocyanine sensitised nanocrystalline TiO<sub>2</sub> films. *Chemical communications*, (18), 2112-2113.
- Peddapuram, A., Cheema, H., Adams, R. E., Schmehl, R. H., & Delcamp, J. H. (2017). A stable panchromatic green dual acceptor, dual donor organic dye for dye-sensitized solar cells. *The Journal of Physical Chemistry C*, 121(16), 8770-8780.
- Pellegrin, Y., Le Pleux, L., Blart, E., Renaud, A., Chavillon, B., Szuwarski, N., ... & Odobel, F. (2011). Ruthenium polypyridine complexes as sensitizers in NiO based p-type dye-sensitized solar cells: Effects of the anchoring groups. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 219(2-3), 235-242.

## KAYNAKLAR DİZİNİ

- Polo-Garzon, F., Luo, S., Cheng, Y., Page, K. L., Ramirez-Cuesta, A. J., Britt, P. F., & Wu, Z. (2019). Neutron scattering investigations of hydride species in heterogeneous catalysis. *ChemSusChem*, 12(1), 93-103.
- POONAM, Nagpal, R., Arora, S., & S CHAUHAN, S. M. (2016). Efficient synthesis of metallated thioporphyrazines in task specific ionic liquids and their spectroscopic investigation of binding with selected transition metal ions. *Journal of Chemical Sciences*, 128, 1417-1422.
- Prachumrak, N., Sudyoardsuk, T., Thangthong, A., Nalaoh, P., Jungsuttiwong, S., Daengngern, R., ... & Promarak, V. (2017). Improvement of D- $\pi$ -A organic dye-based dye-sensitized solar cell performance by simple triphenylamine donor substitutions on the  $\pi$ -linker of the dye. *Materials Chemistry Frontiers*, 1(6), 1059-1072.
- Qin, H., Wenger, S., Xu, M., Gao, F., Jing, X., Wang, P., ... & Grätzel, M. (2008). An organic sensitizer with a fused dithienothiophene unit for efficient and stable dye-sensitized solar cells. *Journal of the American Chemical Society*, 130(29), 9202-9203.
- Qin, P., Linder, M., Brinck, T., Boschloo, G., Hagfeldt, A., & Sun, L. (2009). High incident photon-to-current conversion efficiency of p-type dye-sensitized solar cells based on NiO and organic chromophores. *Advanced Materials (Weinheim)*, 21.
- Qin, P., Zhu, H., Edvinsson, T., Boschloo, G., Hagfeldt, A., & Sun, L. (2008). Design of an organic chromophore for p-type dye-sensitized solar cells. *Journal of the American Chemical Society*, 130(27), 8570-8571.
- Qiu, F., Tu, C., Chen, Y., Shi, Y., Song, L., Wang, R., ... & Han, T. (2010). Control of the Optical Properties of a Star Copolymer with a Hyperbranched Conjugated Polymer Core and Poly (ethylene glycol) Arms by Self-Assembly. *Chemistry—A European Journal*, 16(42), 12710-12717.
- Radhakrishna, K., Manjunath, S. B., Devadiga, D., Chetri, R., & Nagaraja, A. T. (2023). Review on carbazole-based hole transporting materials for perovskite solar cell. *ACS Applied Energy Materials*, 6(7), 3635-3664.
- Ramkumar, S., & Anandan, S. (2013). Synthesis of bianchored metal free organic dyes for dye sensitized solar cells. *Dyes and Pigments*, 97(3), 397-404.
- Ramkumar, S., Manoharan, S., & Anandan, S. (2012). Synthesis of D-( $\pi$ -A) 2 organic chromophores for dye-sensitized solar cells. *Dyes and Pigments*, 94(3), 503-511.
- Reddy, M. A., Vinayak, B., Suresh, T., Niveditha, S., Bhanuprakash, K., Singh, S. P., ... & Chandrasekharam, M. (2014). Highly conjugated electron rich thiophene antennas on phenothiazine and phenoxazine-based sensitizers for dye sensitized solar cells. *Synthetic metals*, 195, 208-216.
- Ren, X., Jiang, S., Cha, M., Zhou, G., & Wang, Z. S. (2012). Thiophene-bridged double D- $\pi$ -A dye for efficient dye-sensitized solar cell. *Chemistry of Materials*, 24(17), 3493-3499.

## KAYNAKLAR DİZİNİ

- Ren, Y., Sun, D., Cao, Y., Tsao, H. N., Yuan, Y., Zakeeruddin, S. M., ... & Gratzel, M. (2018). A stable blue photosensitizer for color palette of dye-sensitized solar cells reaching 12.6% efficiency. *Journal of the American Chemical Society*, *140*(7), 2405-2408.
- Ringleb, A., Ruess, R., Hofeditz, N., Heimbrodt, W., Yoshida, T., & Schlettwein, D. (2021). Influence of Mg-doping on the characteristics of ZnO photoanodes in dye-sensitized solar cells. *Physical Chemistry Chemical Physics*, *23*(14), 8393-8402.
- Roberts, M. W., Thomas, J. M., & Bickley, R. I. (1978). Photo-induced reactivity at oxide surfaces.
- Romero, D. B., Schaer, M., Leclerc, M., Ades, D., Siove, A., & Zuppiroli, L. (1996). The role of carbazole in organic light-emitting devices. *Synthetic metals*, *80*(3), 271-277.
- Sanda, F., Kawasaki, R., Shiotsuki, M., Takashima, T., Fujii, A., Ozaki, M., & Masuda, T. (2007). Synthesis and Properties of Polyacetylenes Connecting Carbazole at the 2- and 3-Positions: Effect of Polymerization Catalysts and Substitution Positions on the Optoelectronic Properties. *Macromolecular Chemistry and Physics*, *208*(7), 765-771.
- Sarwar, S., Lee, M. S., Park, S., Dao, T. T., Ullah, A., Hong, S., & Han, C. H. (2020). Transformation of a liquid electrolyte to a gel inside dye sensitized solar cells for better stability and performance. *Thin Solid Films*, *704*, 138024.
- Sathiyam, G., Thangamuthu, R., & Sakthivel, P. (2016). Synthesis of carbazole-based copolymers containing carbazole-thiazolo [5, 4-d] thiazole groups with different dopants and their fluorescence and electrical conductivity applications. *RSC advances*, *6*(73), 69196-69205.
- Sayama, K., Sugihara, H., & Arakawa, H. (1998). Photoelectrochemical properties of a porous Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub> electrode sensitized by a ruthenium dye. *Chemistry of Materials*, *10*(12), 3825-3832.
- Selopal, G. S., Wu, H. P., Lu, J., Chang, Y. C., Wang, M., Vomiero, A., ... & Diau, E. W. G. (2016). Metal-free organic dyes for TiO<sub>2</sub> and ZnO dye-sensitized solar cells. *Scientific reports*, *6*(1), 18756.
- Sen, A., & Groß, A. (2019). Does involving additional linker always increase the efficiency of an organic dye for p-type dye-sensitized solar cells?. *ACS Applied Energy Materials*, *2*(9), 6341-6347.
- Sen, A., Kupfer, S., Gräfe, S., & Groß, A. (2020). The role of anchoring groups in ruthenium (II)-bipyridine sensitized p-type semiconductor solar cells—a quantum chemical approach. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, *53*(23), 234001.

## KAYNAKLAR DİZİNİ

- Sen, A., Putra, M. H., Biswas, A. K., Behera, A. K., & Groß, A. (2023). Insight on the choice of sensitizers/dyes for dye sensitized solar cells: A review. *Dyes and Pigments*, 213, 111087.
- sensitized solar cell structures. *Sol Energy Mater Sol Cells* 2006;90:2881–93.
- Seo, K. D., Choi, I. T., Park, Y. G., Kang, S., Lee, J. Y., & Kim, H. K. (2012). Novel D–A– $\pi$ –A coumarin dyes containing low band-gap chromophores for dye-sensitized solar cells. *Dyes and Pigments*, 94(3), 469-474.
- Sinopoli, A., Black, F. A., Wood, C. J., Gibson, E. A., & Elliott, P. I. (2017). Investigation of a new bis (carboxylate) triazole-based anchoring ligand for dye solar cell chromophore complexes. *Dalton Transactions*, 46(5), 1520-1530.
- Siregar, N., Motlan, Panggabean, J. H., Sirait, M., Rajagukguk, J., Gultom, N. S., & Sabir, F. K. (2021). Fabrication of Dye-Sensitized Solar Cells (DSSC) Using Mg-Doped ZnO as Photoanode and Extract of Rose Myrtle (*Rhodomyrtus tomentosa*) as Natural Dye. *International Journal of Photoenergy*, 2021(1), 4033692.
- Snaith, H. J. (2010). Estimating the maximum attainable efficiency in dye-sensitized solar cells. *Advanced Functional Materials*, 20(1), 13-19.
- Sriyab, S., Gleeson, M. P., Hannongbua, S., & Suramitr, S. (2016). Photophysical properties and computational investigation on substituent effects on the structural and electronic properties of 3, 6-di (thiophene-2-yl)-carbazole-based derivatives. *Journal of Molecular Structure*, 1125, 532-539.
- Tang, J., Hua, J., Wu, W., Li, J., Jin, Z., Long, Y., & Tian, H. (2010). New starburst sensitizer with carbazole antennas for efficient and stable dye-sensitized solar cells. *Energy & Environmental Science*, 3(11), 1736-1745.
- Tefashe, U. M., Rudolph, M., Miura, H., Schlettwein, D., & Wittstock, G. (2012). Photovoltaic characteristics and dye regeneration kinetics in D149-sensitized ZnO with varied dye loading and film thickness. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 14(20), 7533-7542.
- Teng, C., Yang, X., Yuan, C., Li, C., Chen, R., Tian, H., ... & Sun, L. (2009). Two novel carbazole dyes for dye-sensitized solar cells with open-circuit voltages up to 1 V based on Br<sup>-</sup>/Br<sup>3-</sup> electrolytes. *Organic Letters*, 11(23), 5542-5545.
- Tennakone, K., Kumara, G. R., Kottegoda, I. R., & Perera, V. P. (1999). An efficient dye-sensitized photoelectrochemical solar cell made from oxides of tin and zinc. *Chemical Communications*, (1), 15-16.
- Thomas, K. J., Lin, J. T., Hsu, Y. C., & Ho, K. C. (2005). Organic dyes containing thienylfluorene conjugation for solar cells. *Chemical Communications*, (32), 4098-4100.

## KAYNAKLAR DİZİNİ

- Tian, L., Wang, Y., Zhang, Y., Li, X., Wu, W., & Liu, B. (2020). Molecular engineering of indoline dyes and their application in dye-sensitized solar cells: effect of planarity and side chain on interfacial charge-transfer processes. *ACS Applied Energy Materials*, 4(1), 242-248.
- Tichnell, C. R., Miller, J. N., Liu, C., Mukherjee, S., Jakubikova, E., & McCusker, J. K. (2020). Influence of electrolyte composition on ultrafast interfacial electron transfer in Fe-sensitized TiO<sub>2</sub>-based solar cells. *The Journal of Physical Chemistry C*, 124(3), 1794-1811.
- Toivola, M., Ahlskog, F., & Lund, P. (2006). Industrial sheet metals for nanocrystalline dye-sensitized solar cell structures. *Solar energy materials and solar cells*, 90(17), 2881-2893.
- Tributsch, H., & Calvin, M. (1971). Electrochemistry of excited molecules: photo-electrochemical reactions of chlorophylls. *Photochemistry and Photobiology*, 14(2), 95-112.
- Tsubomura, H., Matsumura, M., Nomura, Y., & Amamiya, T. (1976). Dye sensitised zinc oxide: aqueous electrolyte: platinum photocell. *Nature*, 261(5559), 402-403.
- Ursu, D., Vajda, M., & Miclau, M. (2019). Investigation of the p-type dye-sensitized solar cell based on full Cu<sub>2</sub>O electrodes. *Journal of Alloys and Compounds*, 802, 86-92.
- Venkatesan, S., Lin, W. H., Hsu, T. H., Teng, H., & Lee, Y. L. (2022). Indoor dye-sensitized solar cells with efficiencies surpassing 26% using polymeric counter electrodes. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 10(7), 2473-2483.
- Wan, Z., Jia, C., Wang, Y., & Yao, X. (2015). Dithiafulvenyl-triphenylamine organic dyes with alkyl chains for efficient coadsorbent-free dye-sensitized solar cells. *RSC Advances*, 5(63), 50813-50820.
- Wan, Z., Jia, C., Zhang, J., Duan, Y., Lin, Y., & Shi, Y. (2012). Triphenylamine-based starburst dyes with carbazole and phenothiazine antennas for dye-sensitized solar cells. *Journal of Power Sources*, 199, 426-431.
- Wan, Z., Yang, J., Xia, J., Shu, H., Yao, X., Luo, J., & Jia, C. (2021). Simple molecular structure but high efficiency: Achieving over 9% efficiency in dye-sensitized solar cells using simple triphenylamine sensitizer. *Journal of Power Sources*, 506, 230214.
- Wandt, J., Jakes, P., Granwehr, J., Eichel, R. A., & Gasteiger, H. A. (2018). Quantitative and time-resolved detection of lithium plating on graphite anodes in lithium ion batteries. *Materials Today*, 21(3), 231-240.
- Wang, H. J., Chen, C. P., & Jeng, R. J. (2014). Polythiophenes comprising conjugated pendants for polymer solar cells: a review. *Materials*, 7(4), 2411-2439.

## KAYNAKLAR DİZİNİ

- Wang, M., Anghel, A. M., Marsan, B., Cevey Ha, N. L., Pootrakulchote, N., Zakeeruddin, S. M., & Grätzel, M. (2009). CoS supersedes Pt as efficient electrocatalyst for triiodide reduction in dye-sensitized solar cells. *Journal of the American Chemical Society*, *131*(44), 15976-15977.
- Wang, P., Yang, L., Wu, H., Cao, Y., Zhang, J., Xu, N., ... & Grätzel, M. (2018). Stable and efficient organic dye-sensitized solar cell based on ionic liquid electrolyte. *Joule*, *2*(10), 2145-2153.
- Wang, P., Zakeeruddin, S. M., Moser, J. E., Humphry-Baker, R., Comte, P., Aranyos, V., ... & Graetzel, M. (2004). Stable new sensitizer with improved light harvesting for nanocrystalline dye-sensitized solar cells. *Advanced Materials*, *16*(20), 1806-1811.
- Wang, S. W., Chou, C. C., Hu, F. C., Wu, K. L., Chi, Y., Clifford, J. N., ... & Hsiao, T. Y. (2014). Panchromatic Ru (II) sensitizers bearing single thiocyanate for high efficiency dye sensitized solar cells. *Journal of Materials Chemistry A*, *2*(41), 17618-17627.
- Wang, S. W., Wu, K. L., Ghadiri, E., Lobello, M. G., Ho, S. T., Chi, Y., ... & Nazeeruddin, M. K. (2013). Engineering of thiocyanate-free Ru (II) sensitizers for high efficiency dye-sensitized solar cells. *Chemical Science*, *4*(6), 2423-2433.
- Wang, Y., Chen, B., Wu, W., Li, X., Zhu, W., Tian, H., & Xie, Y. (2014). Efficient solar cells sensitized by porphyrins with an extended conjugation framework and a carbazole donor: from molecular design to cosensitization. *Angewandte Chemie*, *126*(40), 10955-10959.
- Wang, Z. S., Cui, Y., Dan-oh, Y., Kasada, C., Shinpo, A., & Hara, K. (2007). Thiophene-functionalized coumarin dye for efficient dye-sensitized solar cells: electron lifetime improved by coadsorption of deoxycholic acid. *The Journal of Physical Chemistry C*, *111*(19), 7224-7230.
- Wang, Z. S., Cui, Y., Dan-oh, Y., Kasada, C., Shinpo, A., & Hara, K. (2008). Molecular design of coumarin dyes for stable and efficient organic dye-sensitized solar cells. *The Journal of Physical Chemistry C*, *112*(43), 17011-17017.
- Wang, Z. S., Koumura, N., Cui, Y., Takahashi, M., Sekiguchi, H., Mori, A., ... & Hara, K. (2008). Hexylthiophene-functionalized carbazole dyes for efficient molecular photovoltaics: tuning of solar-cell performance by structural modification. *Chemistry of Materials*, *20*(12), 3993-4003.
- Wenger, O. S. (2019). Is iron the new ruthenium?. *Chemistry—A European Journal*, *25*(24), 6043-6052.
- Wood, C. J., Robson, K. C., Elliott, P. I., Berlinguette, C. P., & Gibson, E. A. (2014). Novel triphenylamine-modified ruthenium (II) terpyridine complexes for nickel oxide-based cathodic dye-sensitized solar cells. *Rsc Advances*, *4*(11), 5782-5791.

## KAYNAKLAR DİZİNİ

- Wu, J., Lan, Z., Hao, S., Li, P., Lin, J., Huang, M., ... & Huang, Y. (2008). Progress on the electrolytes for dye-sensitized solar cells. *Pure and Applied Chemistry*, 80(11), 2241-2258.
- Wu, K. L., Ku, W. P., Clifford, J. N., Palomares, E., Ho, S. T., Chi, Y., ... & Grätzel, M. (2013). Harnessing the open-circuit voltage via a new series of Ru (II) sensitizers bearing (iso-) quinolinyl pyrazolate ancillaries. *Energy & Environmental Science*, 6(3), 859-870.
- Wu, Y., Bai, H., Wang, Z., Cheng, P., Zhu, S., Wang, Y., ... & Zhan, X. (2015). A planar electron acceptor for efficient polymer solar cells. *Energy & Environmental Science*, 8(11), 3215-3221.
- Wu, Y., Zhang, X., Li, W., Wang, Z. S., Tian, H., & Zhu, W. (2012). Hexylthiophene-featured D–A– $\pi$ –A structural indoline chromophores for coadsorbent-free and panchromatic dye-sensitized solar cells. *Advanced Energy Materials*, 2(1), 149-156.
- Wu, Z., An, Z., Chen, X., & Chen, P. (2013). Cyclic thiourea/urea functionalized triphenylamine-based dyes for high-performance dye-sensitized solar cells. *Organic Letters*, 15(7), 1456-1459.
- Wubie, G. Z., Lu, M. N., Desta, M. A., Weldekirstos, H. D., Lee, M. M., Wu, W. T., ... & Sun, S. S. (2021). Structural engineering of organic D–a– $\pi$ –A dyes incorporated with a dibutyl-fluorene moiety for high-performance dye-sensitized solar cells. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 13(20), 23513-23522.
- Xu, M., Zhang, M., Pastore, M., Li, R., De Angelis, F., & Wang, P. (2012). Joint electrical, photophysical and computational studies on D– $\pi$ –A dye sensitized solar cells: the impacts of dithiophene rigidification. *Chemical Science*, 3(4), 976-983.
- Xu, W., Peng, B., Chen, J., Liang, M., & Cai, F. (2008). New triphenylamine-based dyes for dye-sensitized solar cells. *The Journal of Physical Chemistry C*, 112(3), 874-880.
- Yang, J., Ganesan, P., Teuscher, J., Moehl, T., Kim, Y. J., Yi, C., ... & Grätzel, M. (2014). Influence of the donor size in D– $\pi$ –A organic dyes for dye-sensitized solar cells. *Journal of the American Chemical Society*, 136(15), 5722-5730.
- Yang, S. H., Wu, K. L., Chi, Y., Cheng, Y. M., & Chou, P. T. (2011). Tris (thiocyanate) Ruthenium (II) Sensitizers with Functionalized Dicarboxyterpyridine for Dye-Sensitized Solar Cells. *Angewandte Chemie*, 36(123), 8420-8424.
- Yang, Y., Pritzker, M., & Li, Y. (2019). Electrodeposited p-type Cu<sub>2</sub>O thin films at high pH for all-oxide solar cells with improved performance. *Thin Solid Films*, 676, 42-53.
- Yao, Z., Wu, H., Ren, Y., Guo, Y., & Wang, P. (2015). A structurally simple perylene dye with ethynylbenzothiadiazole-benzoic acid as the electron acceptor achieves an over 10% power conversion efficiency. *Energy & Environmental Science*, 8(5), 1438-1442.

## KAYNAKLAR DİZİNİ

- Yao, Z., Zhang, M., Wu, H., Yang, L., Li, R., & Wang, P. (2015). Donor/acceptor indenoperylene dye for highly efficient organic dye-sensitized solar cells. *Journal of the American Chemical Society*, 137(11), 3799-3802.
- Yasin, M. I., Khan, M. I., Kanwal, S., ALResheedi, D. B. N., Fatima, M., Alwadai, N., ... & Iqbal, M. (2024). A novel heterostructure of Cr-doped TiO<sub>2</sub> for reducing the recombination rate of dye sensitized solar cells. *Journal of the Korean Ceramic Society*, 1-12.
- Yella, A., Lee, H. W., Tsao, H. N., Yi, C., Chandiran, A. K., Nazeeruddin, M. K., ... & Grätzel, M. (2011). Porphyrin-sensitized solar cells with cobalt (II/III)-based redox electrolyte exceed 12 percent efficiency. *science*, 334(6056), 629-634.
- Yeoh, M. E., & Chan, K. Y. (2021). A review on semitransparent solar cells for real-life applications based on dye-sensitized technology. *IEEE Journal of Photovoltaics*, 11(2), 354-361.
- Yeoh, M. E., Jaloman, A., & Chan, K. Y. (2019). Aging effect in dye-sensitized solar cells sealed with thermoplastic films. *Microelectronics International*, 36(2), 68-72.
- Yoon, S., Tak, S., Kim, J., Jun, Y., Kang, K., & Park, J. (2011). Application of transparent dye-sensitized solar cells to building integrated photovoltaic systems. *Building and Environment*, 46(10), 1899-1904.
- Yu, J. C., Jang, J. I., Lee, B. R., Lee, G. W., Han, J. T., & Song, M. H. (2014). Highly efficient polymer-based optoelectronic devices using PEDOT: PSS and a GO composite layer as a hole transport layer. *ACS applied materials & interfaces*, 6(3), 2067-2073.
- Yu, Q., Liu, S., Zhang, M., Cai, N., Wang, Y., & Wang, P. (2009). An extremely high molar extinction coefficient ruthenium sensitizer in dye-sensitized solar cells: The effects of  $\pi$ -conjugation extension. *The Journal of Physical Chemistry C*, 113(32), 14559-14566.
- Yum, J. H., Jung, I., Baik, C., Ko, J., Nazeeruddin, M. K., & Grätzel, M. (2009). High efficient donor-acceptor ruthenium complex for dye-sensitized solar cell applications. *Energy & Environmental Science*, 2(1), 100-102.
- Zarate, X., Schott, E., & Arratia-Pérez, R. (2011). A DFT/TDDFT study of porphyrazines and phthalocyanine oxo-titanium derivatives as potential dyes in solar cells. *International Journal of Quantum Chemistry*, 111(15), 4186-4196.
- Zarate, X., Schott, E., Gomez, T., & Arratia-Pérez, R. (2013). Theoretical study of sensitizer candidates for dye-sensitized solar cells: peripheral substituted dizinc pyrazinoporphyrazine-phthalocyanine complexes. *The Journal of Physical Chemistry A*, 117(2), 430-438.
- Zeng, W., Cao, Y., Bai, Y., Wang, Y., Shi, Y., Zhang, M., ... & Wang, P. (2010). Efficient dye-sensitized solar cells with an organic photosensitizer featuring orderly conjugated ethylenedioxythiophene and dithienosilole blocks. *Chemistry of Materials*, 22(5), 1915-1925.

**KAYNAKLAR DİZİNİ**

- Zhang, K., Wang, X., Chang, Y., Wu, Y., Wang, S., & Wang, L. (2023). Carbazole-decorated organoboron emitters with low-lying HOMO levels for solution-processed narrowband blue hyperfluorescence OLED devices. *Angewandte Chemie*, 135(47), e202313084.
- Zhang, L., Zhao, Y., & Dai, Q. (2021). Recent progress in perovskite solar cell: Fabrication, Efficiency, and stability. *Development of Solar Cells*, 1-32.
- Zhang, S., Yang, X., Numata, Y., & Han, L. (2013). Highly efficient dye-sensitized solar cells: progress and future challenges. *Energy & Environmental Science*, 6(5), 1443-1464.
- Zhang, X. H., Cui, Y., Katoh, R., Koumura, N., & Hara, K. (2010). Organic dyes containing thieno [3, 2-b] indole donor for efficient dye-sensitized solar cells. *The Journal of Physical Chemistry C*, 114(42), 18283-18290.
- Zhang, X. H., Wang, Z. S., Cui, Y., Koumura, N., Furube, A., & Hara, K. (2009). Organic sensitizers based on hexylthiophene-functionalized indolo [3, 2-b] carbazole for efficient dye-sensitized solar cells. *The Journal of Physical Chemistry C*, 113(30), 13409-13415.
- Zhou, C., & Lin, S. (2020). Carbon-electrode based perovskite solar cells: effect of bulk engineering and interface engineering on the power conversion properties. *Solar RRL*, 4(2), 1900190.
- Zhou, N., Prabakaran, K., Lee, B., Chang, S. H., Harutyunyan, B., Guo, P., ... & Marks, T. J. (2015). Metal-free tetrathienoacene sensitizers for high-performance dye-sensitized solar cells. *Journal of the American Chemical Society*, 137(13), 4414-4423.
- Zhu, W., Wu, Y., Wang, S., Li, W., Li, X., Chen, J., ... & Tian, H. (2011). Organic D-A- $\pi$ -A solar cell sensitizers with improved stability and spectral response. *Advanced Functional Materials*, 21(4), 756-763.
- Ziarani, G. M., Moradi, R., Lashgari, N., & Kruger, H. G. (2018). *Metal-free synthetic organic dyes*. Elsevier.
- Zuo, C., Bolink, H. J., Han, H., Huang, J., Cahen, D., & Ding, L. (2016). Advances in perovskite solar cells. *Advanced Science*, 3(7), 1500324.

## EK AÇIKLAMALAR

### Sayfa

<b>Ek Açıklama-A: FT-IR Spektrumları.....</b>	<b>74</b>
<b>Ek Açıklama-A.1:</b> 3,6-Dibromokarbazol (II) bileşiğinin KBr İçerisinde Alınan FT-IR Spektrumu .....	74
<b>Ek Açıklama-A.2:</b> 3,6-Dibromo-9-oktilkarbazol (III) bileşiğinin KBr İçerisinde Alınan FT-IR Spektrumu.....	75
<b>Ek Açıklama-A.3:</b> 3,6-Dibromo-9-hekzilkarbazol (IV) bileşiğinin KBr İçerisinde Alınan FT-IR Spektrumu.....	76
<b>Ek Açıklama-A.4:</b> 4,4'-(9-oktil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-florobenzonitril) (MG1) bileşiğinin KBr İçerisinde Alınan FT-IR Spektrumu.....	77
<b>Ek Açıklama-A.5:</b> 4,4'-(9-oktil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-(triflorometil) benzonitril)) (MG3) bileşiğinin KBr İçerisinde Alınan FT-IR Spektrumu.....	78
<b>Ek Açıklama-A.6:</b> 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-florobenzonitril)) (MG2) bileşiğinin KBr İçerisinde Alınan FT-IR Spektrumu.....	79
<b>Ek Açıklama-A.7:</b> 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-(triflorometil) benzonitril)) (MG4) bileşiğinin KBr İçerisinde Alınan FT-IR Spektrumu.....	80
<b>Ek Açıklama-B: <sup>1</sup>H-NMR Spektrumları.....</b>	<b>81</b>
<b>Ek Açıklama-B.1:</b> 3,6-Dibromokarbazol (II) bileşiğinin CDCl <sub>3</sub> İçerisinde Alınan <sup>1</sup> H-NMR Spektrumu.....	81
<b>Ek Açıklama-B.2:</b> 3,6-Dibromo-9-oktilkarbazol (III) bileşiğinin CDCl <sub>3</sub> İçerisinde Alınan <sup>1</sup> H-NMR Spektrumu.....	82

## EK AÇIKLAMALAR

### Sayfa

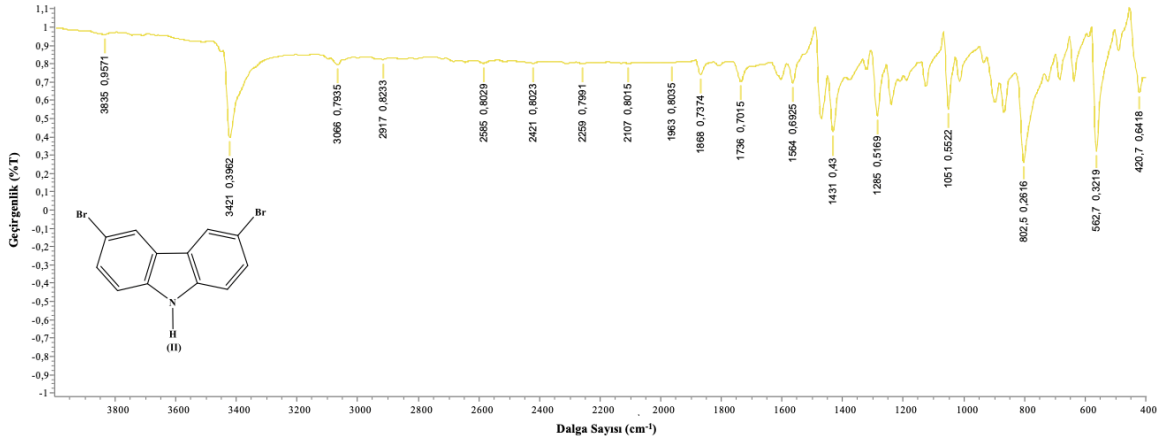
<b>Ek Açıklama-B.3:</b> 3,6-Dibromo-9-hekzilkarbazol (IV) bileşiğinin CDCl <sub>3</sub> İçerisinde Alınan <sup>1</sup> H-NMR Spektrumu .....	83
<b>Ek Açıklama-B.4:</b> 4,4'-(9-oktil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-florobenzonitril) (MG1) bileşiğinin CDCl <sub>3</sub> İçerisinde Alınan <sup>1</sup> H-NMR Spektrumu .....	84
<b>Ek Açıklama-B.5:</b> 4,4'-(9-oktil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-(triflorometil) benzonitril)) (MG3) bileşiğinin CDCl <sub>3</sub> İçerisinde Alınan <sup>1</sup> H-NMR Spektrumu .....	85
<b>Ek Açıklama-B.6:</b> 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-florobenzonitril)) (MG2) bileşiğinin CDCl <sub>3</sub> İçerisinde Alınan <sup>1</sup> H-NMR Spektrumu .....	86
<b>Ek Açıklama-B.7:</b> 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-(triflorometil) benzonitril)) (MG4) bileşiğinin CDCl <sub>3</sub> İçerisinde Alınan <sup>1</sup> H-NMR Spektrumu.....	87
<b>Ek Açıklama-C: <sup>13</sup>C-NMR Spektrumları.....</b>	<b>88</b>
<b>Ek Açıklama-C.1:</b> 3,6-Dibromokarbazol (II) bileşiğinin CDCl <sub>3</sub> İçerisinde Alınan <sup>13</sup> C-NMR Spektrumu.....	88
<b>Ek Açıklama-C.2:</b> 3,6-Dibromo-9-oktilkarbazol (III) bileşiğinin CDCl <sub>3</sub> İçerisinde Alınan <sup>13</sup> C-NMR Spektrumu.....	89
<b>Ek Açıklama-C.3:</b> 3,6-Dibromo-9-hekzilkarbazol (IV) bileşiğinin CDCl <sub>3</sub> İçerisinde Alınan <sup>13</sup> C-NMR Spektrumu .....	90
<b>Ek Açıklama-C.4:</b> 4,4'-(9-oktil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-florobenzonitril) (MG1) bileşiğinin CDCl <sub>3</sub> İçerisinde Alınan <sup>13</sup> C-NMR Spektrumu .....	91
<b>Ek Açıklama-C.5:</b> 4,4'-(9-oktil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-(triflorometil) benzonitril)) (MG3) bileşiğinin CDCl <sub>3</sub> İçerisinde Alınan <sup>13</sup> C-NMR Spektrumu .....	92

**EK AÇIKLAMALAR****Sayfa**

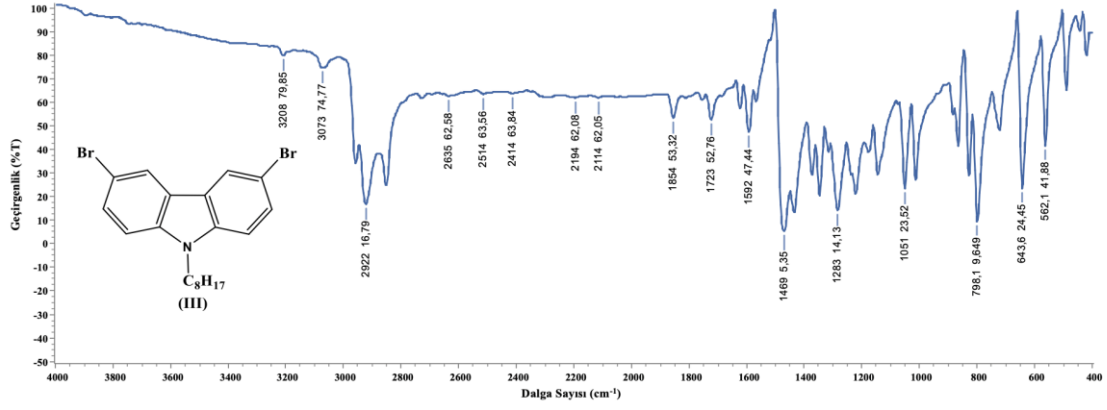
<b>Ek Açıklama-C.6:</b> 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-florobenzonitril)) (MG2) bileşiğinin CDCl <sub>3</sub> İçerisinde Alınan <sup>13</sup> C-NMR Spektrumu .....	93
<b>Ek Açıklama-C.7:</b> 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-(triflorometil) benzonitril)) (MG4) bileşiğinin CDCl <sub>3</sub> İçerisinde Alınan <sup>13</sup> C-NMR Spektrumu.....	94



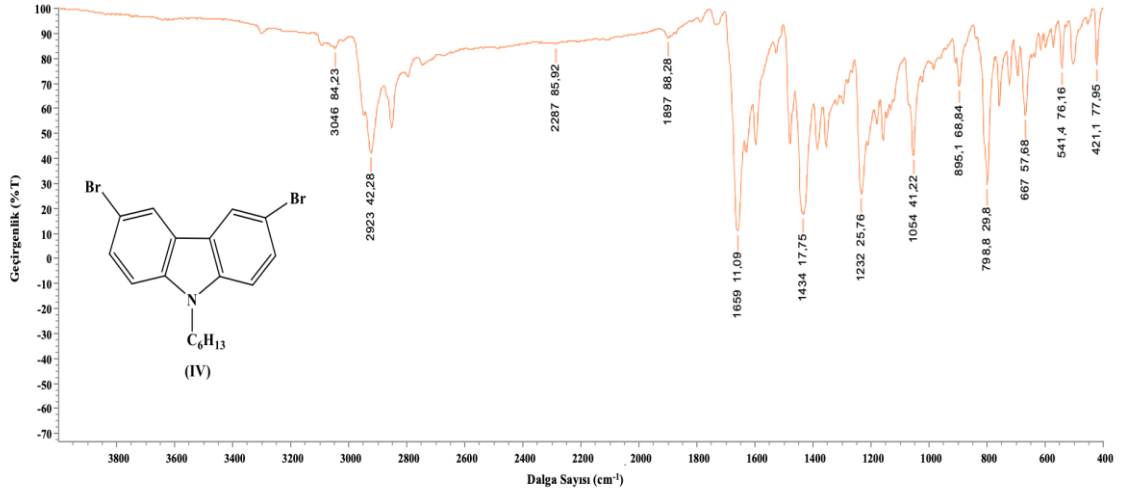
## EK AÇIKLAMALAR



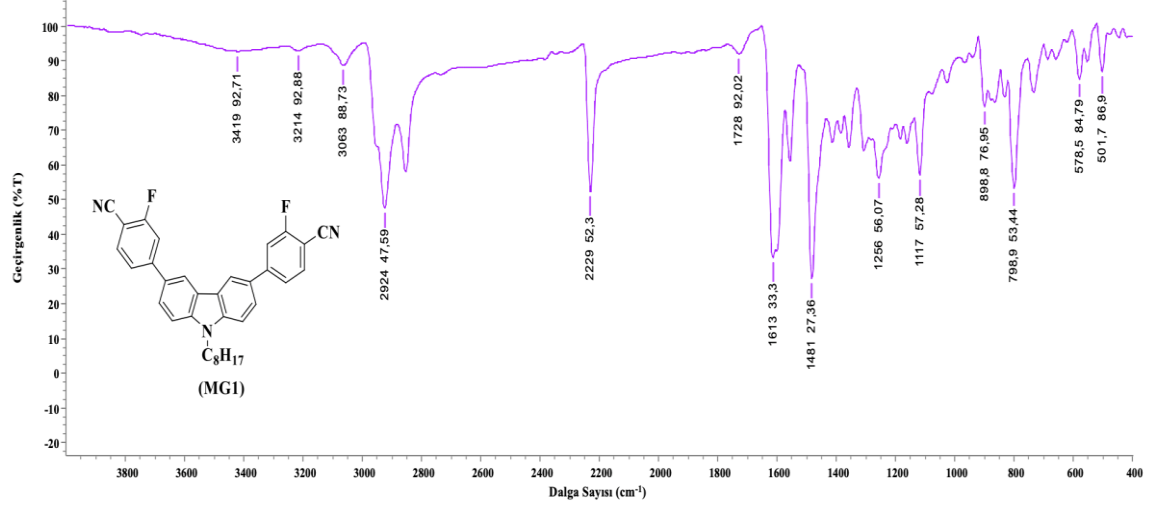
**Ek Açıklama-A.1:** 3,6-Dibromokarbazol (II) bileşiğinin KBr İçerisinde Alınan FT-IR Spektrumu



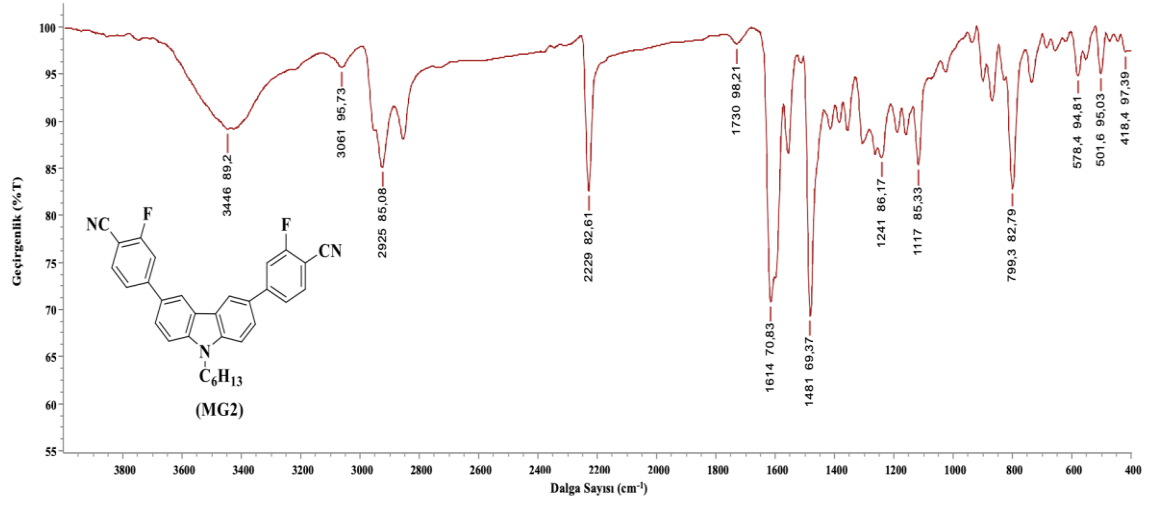
**Ek Açıklama-A.2:** 3,6-Dibromo-9-oktilkarbazol (III) bileşiğinin KBr İçerisinde Alınan FT-IR Spektrumu



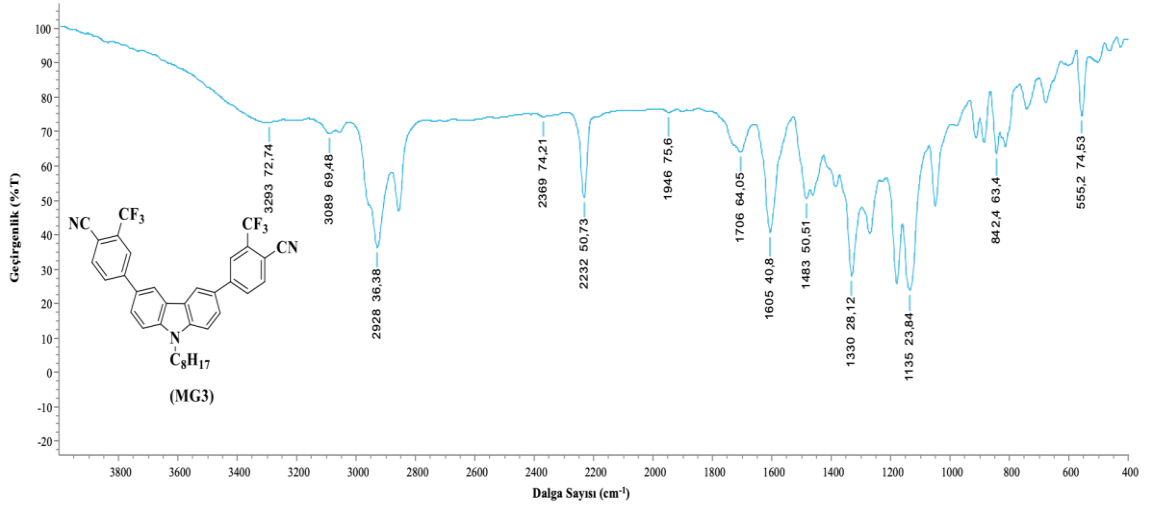
**Ek Açıklama-A.3:** 3,6-Dibromo-9-hekzilkarbazol (IV) bileşiğinin KBr İçerisinde Alınan FT-IR Spektrumu



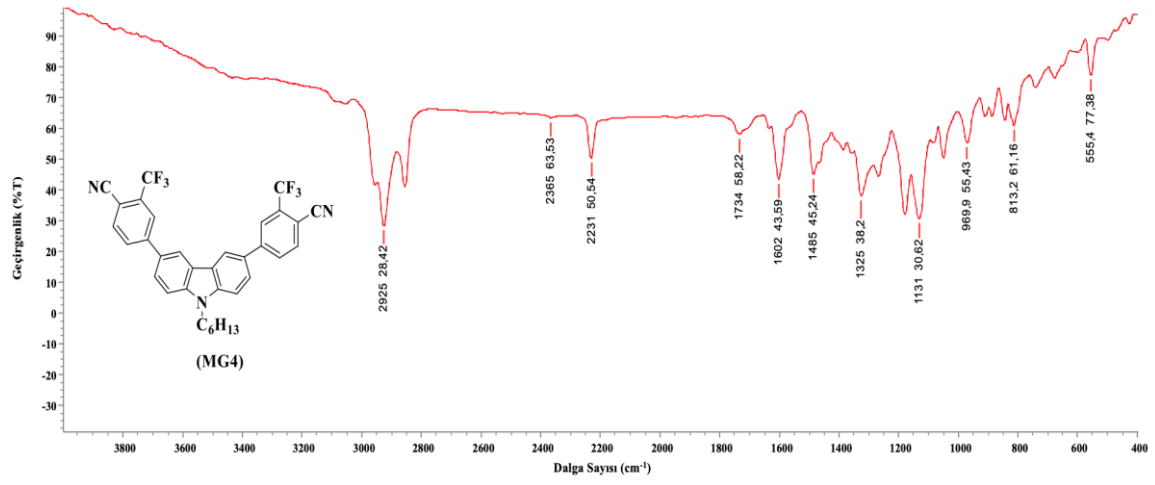
**Ek Açıklama-A.4:** 4,4'-(9-oktil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-florobenzonitril) (MG1) bileşiğinin KBr İçerisinde Alınan FT-IR Spektrumu



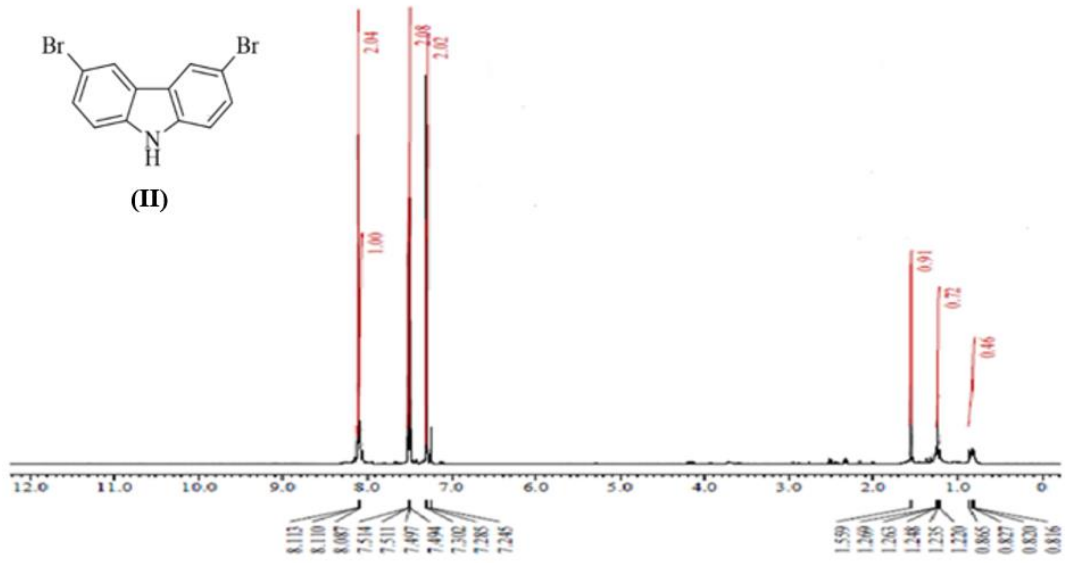
**Ek Açıklama-A.5:** 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-florobenzonitril) (MG2) bileşiğinin KBr İçerisinde Alınan FT-IR Spektrumu



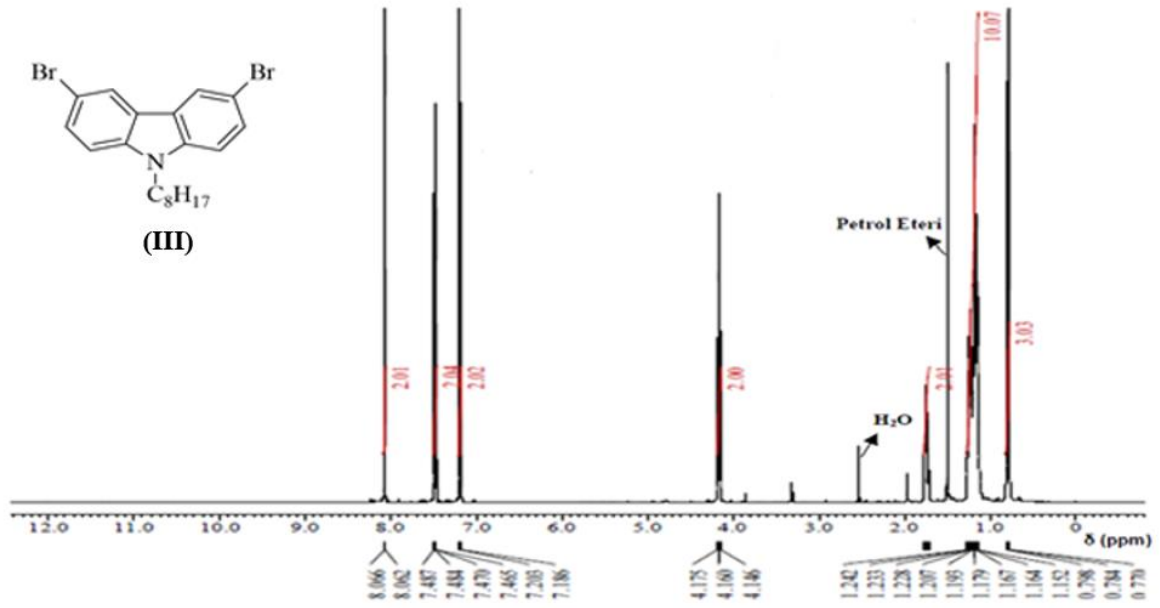
**Ek Açıklama-A.6:** 4,4'-(9-oktil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-(triflorometil)benzonitril)) (MG3) bileşiminin KBr İçerisinde Alınan FT-IR Spektrumu



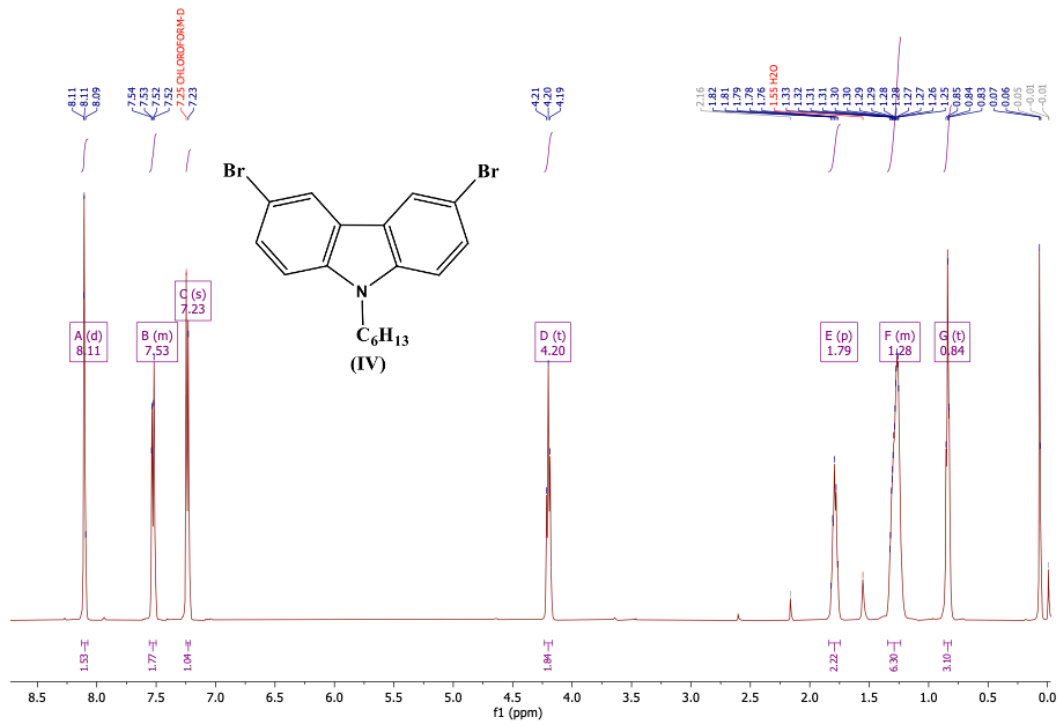
**Ek Açıklama-A.7:** 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-(triflorometil)benzonitril)) (MG4) bileşiğinin KBr İçerisinde Alınan FT-IR Spektrumu



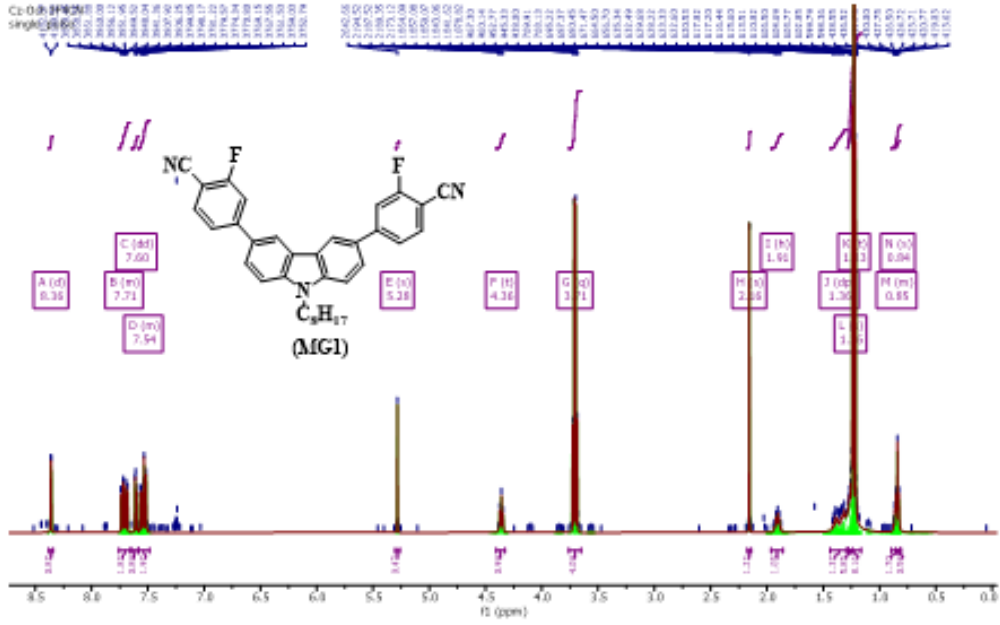
**Ek Açıklama-B.1:** 3,6-Dibromokarbazol (II) bileşiğinin CDCl<sub>3</sub> İçerisinde Alınan <sup>1</sup>H-NMR Spektrumu



**Ek Açıklama-B.2:** 3,6-Dibromo-9-oktilkarbazol (III) bileşğinin  $\text{CDCl}_3$  İçerisinde Alınan  $^1\text{H-NMR}$  Spektrumu

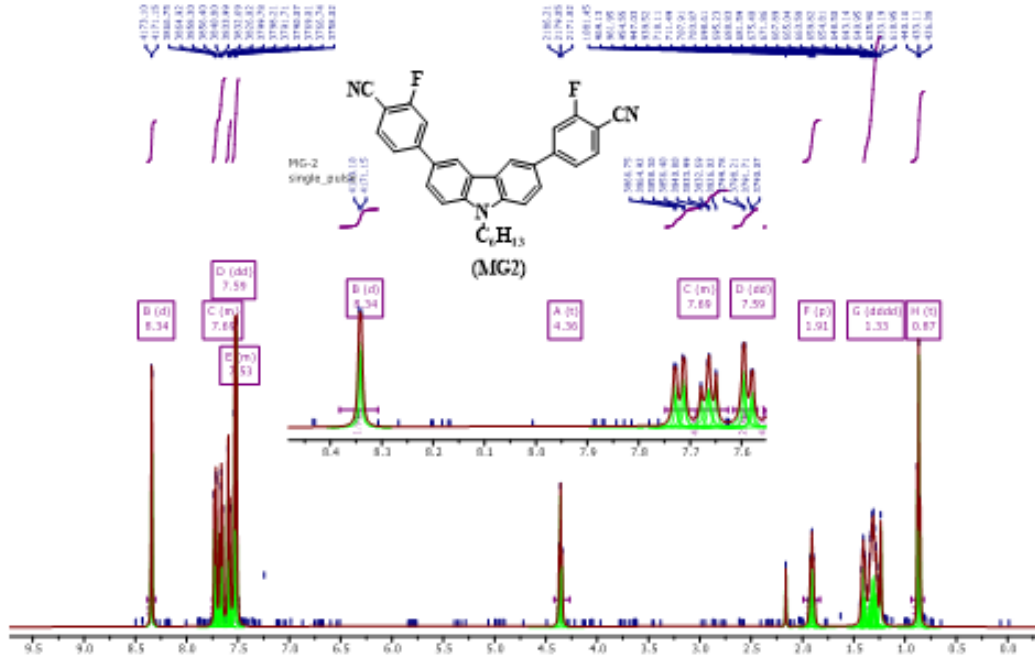


**Ek Açıklama-B.3:** 3,6-Dibromo-9-hekzilkarbazol (IV) bileşiğinin CDCl<sub>3</sub> İçerisinde Alınan <sup>1</sup>H-NMR Spektrumu

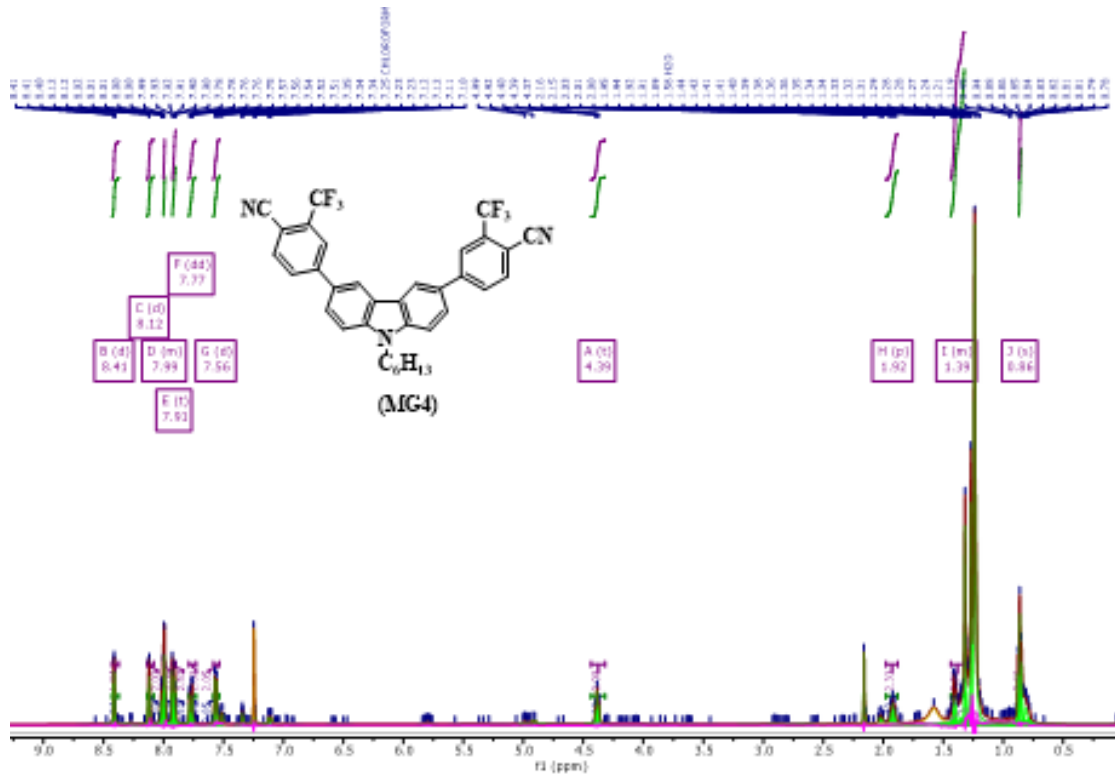


**Ek Açıklama-B.4:** 4,4'-(9-oktil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-florobenzonitril) (MG1) bileşiğinin  $\text{CDCl}_3$  içerisinde Alınan  $^1\text{H-NMR}$  Spektrumu

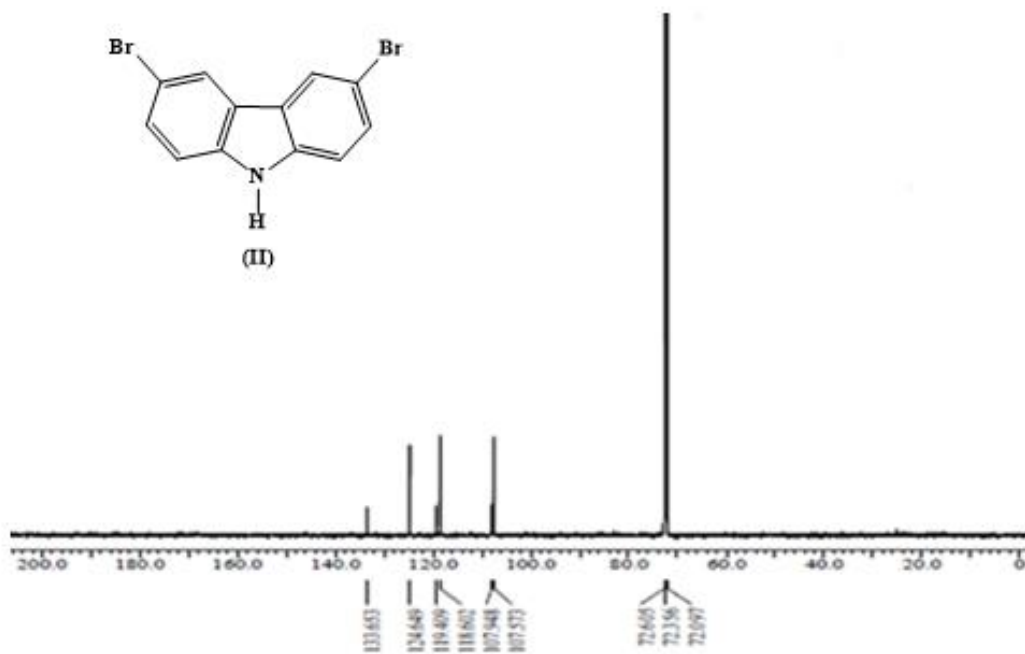




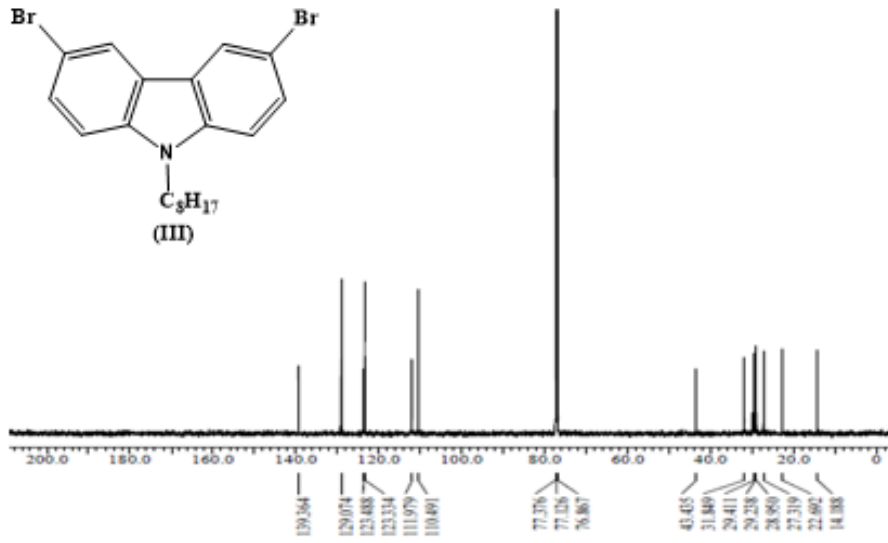
**Ek Açıklama-B.6:** 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-florobenzonitril)) (MG2) bileşiğinin CDCl<sub>3</sub> içerisinde Alınan <sup>1</sup>H-NMR Spektrumu



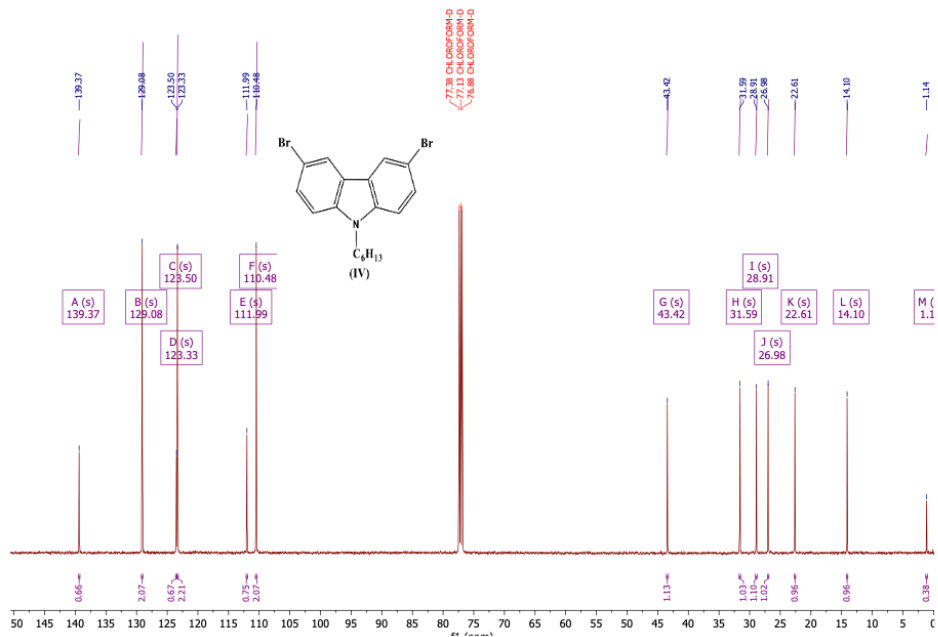
**Ek Açıklama-B.7:** 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-(triflorometil)benzonitril) (MG4) bileşiğinin CDCl<sub>3</sub> İçerisinde Alınan <sup>1</sup>H-NMR Spektrumu



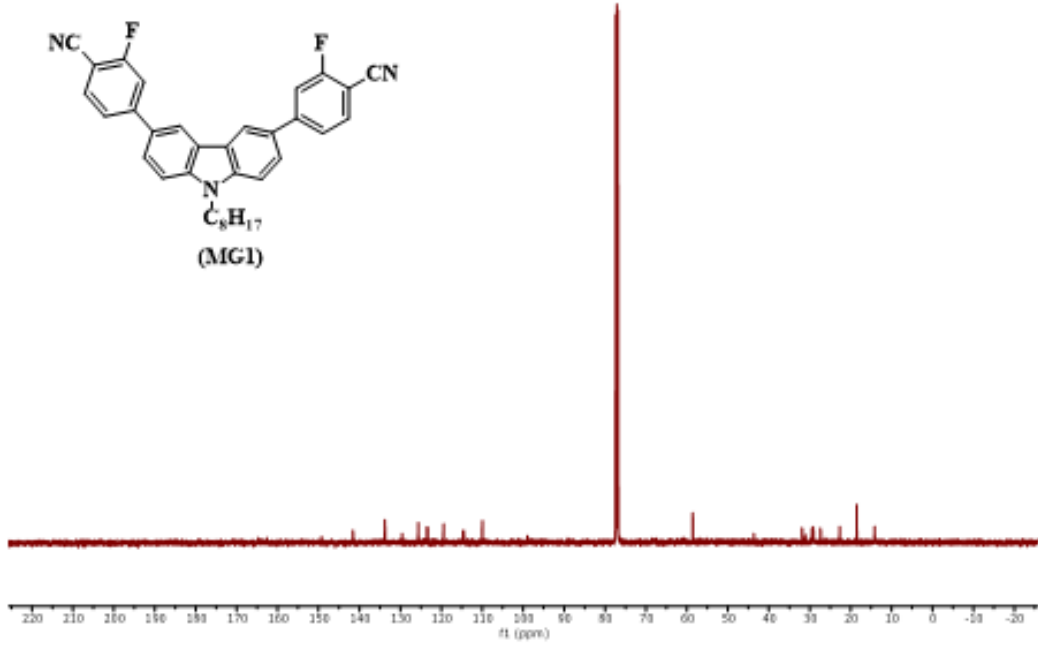
**Ek Açıklama-C.1:** 3,6-Dibromokarbazol (II) bileşiğinin CDCl<sub>3</sub> İçerisinde Alınan <sup>13</sup>C-NMR Spektrumu



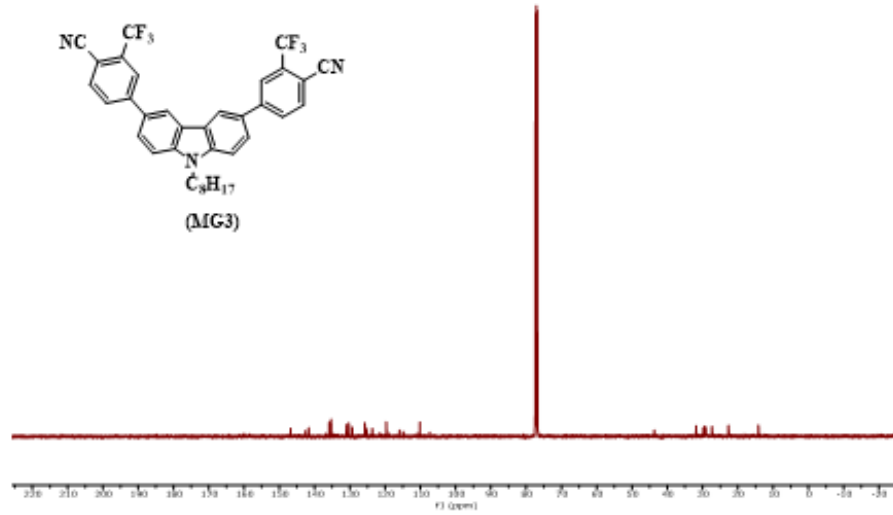
**Ek Açıklama-C.2:** 3,6-Dibromo-9-oktilkarbazol (III) bileşiminin CDCl<sub>3</sub> İçerisinde Alınan <sup>13</sup>C-NMR Spektrumu



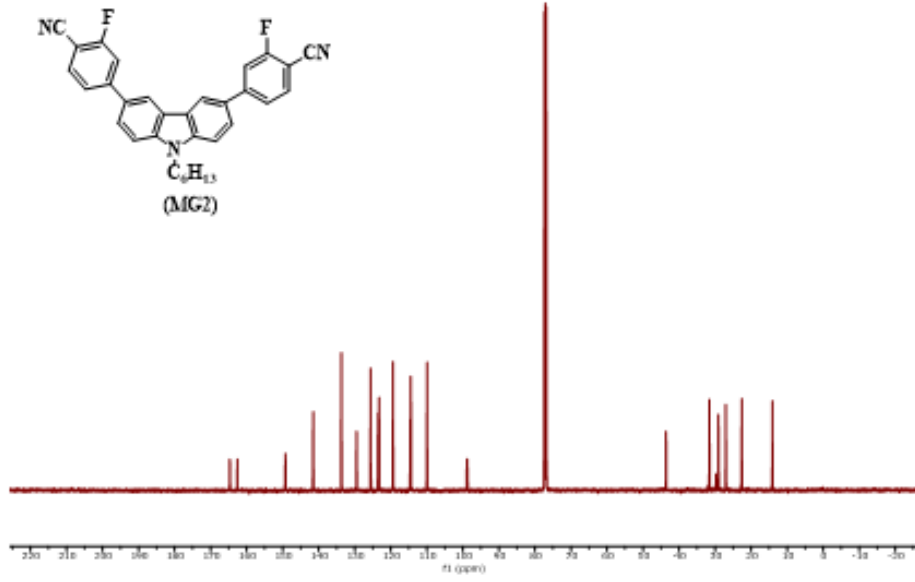
**Ek Açıklama-C.3:** 3,6-Dibromo-9-hekzilkarbazol (IV) bileşiğinin  $\text{CDCl}_3$  İçerisinde Alınan  $^{13}\text{C}$ -NMR Spektrumu



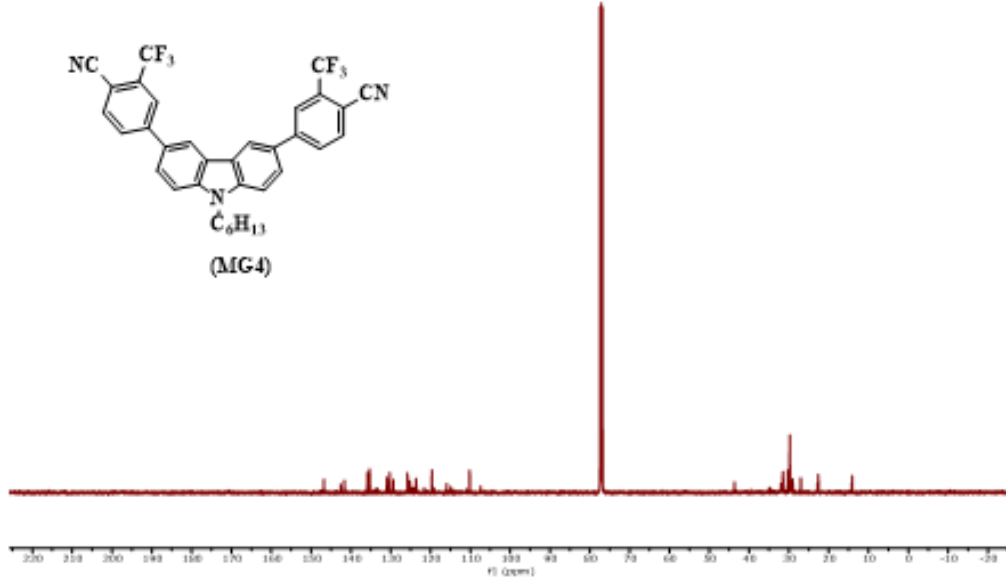
**Ek Açıklama-C.4:** 4,4'-(9-oktil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-florobenzonitril) (MG1) bileşiğinin  $\text{CDCl}_3$  İçerisinde Alınan  $^{13}\text{C}$ -NMR Spektrumu



**Ek Açıklama-C.5:** 4,4'-(9-oktil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-(triflorometil)benzonitril)) (MG3) bileşiğinin CDCl<sub>3</sub> İçerisinde Alınan <sup>13</sup>C-NMR Spektrumu



**Ek Açıklama-C.6:** 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-florobenzonitril) (MG2) bileşğinin CDCl<sub>3</sub> İçerisinde Alınan <sup>13</sup>C-NMR Spektrumu



**Ek Açıklama-C.7:** 4,4'-(9-hekzil-9H-karbazol-3,6-diil)bis(2-(triflorometil)benzonitril) (MG4) bileşiğinin CDCl<sub>3</sub> İçerisinde Alınan <sup>13</sup>C-NMR Spektrumu