

BİDGE Yayınları

Malzeme Biliminden Yapay Zekaya, Eğitimden Enerji
Uygulamalarına Uzanan Teknolojik Yenilikler ve Fiziksel Süreçler

Editör: Dr. Öğr. Üyesi Hamit ÖZTÜRK

ISBN: 978-625-372-556-3

1. Baskı

Sayfa Düzeni: Gözde YÜCEL

Yayınlama Tarihi: 25.12.2024

BİDGE Yayınları

Bu eserin bütün hakları saklıdır. Kaynak gösterilerek tanıtım için yapılacak kısa alıntılar dışında yayıncının ve editörün yazılı izni olmaksızın hiçbir yolla çoğaltılamaz.

Sertifika No: 71374

Yayın hakları © BİDGE Yayınları

www.bidgeyayinlari.com.tr - bidgeyayinlari@gmail.com

Krc Bilişim Ticaret ve Organizasyon Ltd. Şti.

Güzeltepe Mahallesi Abidin Daver Sokak Sefer Apartmanı No: 7/9 Çankaya /
Ankara



İçindekiler

Fiziksel Süreçlerde Yapay Zekâ ve Makine Öğrenimi Kullanımı...	5
Ali TOZAR.....	5
Fotoanot Modifikasyonu ile Boya Duyarlı Güneş Hücreleri Performansının İyileştirilmesi.....	18
A GENCER İMER	18
Organik Molekül (PR) Arakatmanlı Hibrit Aygıtın I-V ve C-V Karakteristikleri	50
A GENCER İMER	50
İlköğretim Okullarında Gürültü Kirliliğinin Belirlenmesi: Uşak İli Örneği.....	74
Engin TEKİN	74
Sena Ünzile AYPAZ	74
İrem Nur YEĞİN, Ayşe OKYAY	74
Hibrit İnce Film Üretim Teknolojileri: Yöntemler, Uygulamalar ve Gelecek Perspektifleri	87
İdris CANDAN.....	87
Gülcan AYDIN.....	87
Didem AVCI KARAKURT	87
Abeer ALEDRESİ.....	87
Ezgi TANTOĞLU	87
Yarıiletken İnce Filmlerin Kristal Yapı Ve Kusurları	156
Tuba ÇAYIR TAŞDEMİRCİ.....	156

Bakır (II)-Sulfamethazin kompleksinin Hesaplamalı Kimya Metodu ile spektroskopik özelliklerinin incelenmesi: Moleküler Docking Çalışması ve ADME	188
Filiz ÖZTÜRK	188
Tuğba AYCAN ²	188

BÖLÜM I

Fiziksel Süreçlerde Yapay Zekâ ve Makine Öğrenimi Kullanımı

Ali TOZAR¹

Giriş

Günümüzde bilimsel ve teknolojik gelişmeler, veri odaklı yaklaşımların yükselmesiyle büyük bir dönüşüm yaşamaktadır. Bu dönüşümde yapay zekâ (YZ) ve makine öğrenimi (MÖ) gibi yöntemler, fizik bilimi dahil olmak üzere birçok disiplinde önemli bir rol oynamaktadır. Yapay zekâ, insan zekâsını taklit ederek makinelerin öğrenmesini ve karar vermesini sağlayan sistemler geliştirirken, makine öğrenimi ise verilerden örüntüler çıkararak sistemlerin davranışlarını modelleme yeteneğini sunar. Özellikle büyük veri kümeleri ve karmaşık sistemlerin anlaşılması gereken fiziksel süreçlerde bu yöntemler, geleneksel matematiksel yaklaşımların sınırlarını aşan yenilikçi çözümler ortaya koymaktadır.

Fiziksel süreçler, doğası gereği karmaşık etkileşimleri, çoklu değişkenli sistemleri ve dinamik davranışları içerir. Bu tür sistemleri

¹ Doç. Dr., Hatay Mustafa Kemal Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Hatay/Türkiye, Orcid: 0000-0003-3039-1834 tozarali@gmail.com

analiz etmek ve modellemek için uzun yıllar boyunca matematiksel denklemler ve sayısal yöntemler kullanılmıştır. Ancak bazı fiziksel olayların doğasında bulunan belirsizlikler, kaotik yapı ve yüksek boyutlu veri kümeleri, klasik yöntemlerin yetersiz kalmasına neden olabilir. Yapay zekâ ve makine öğrenimi teknikleri, bu noktada devreye girerek büyük miktardaki veriden öğrenme yoluyla bu sistemleri anlamayı kolaylaştırmakta ve analiz süreçlerini hızlandırmaktadır.

Son yıllarda, fiziksel süreçlerde YZ ve MÖ tekniklerinin kullanımı giderek artmaktadır. Akışkan dinamiği, kuantum fiziği, katı hâl fiziği, iklim modellemeleri, yüksek enerji fiziği ve astronomi gibi alanlarda bu teknikler başarılı uygulamalarla dikkat çekmektedir. Örneğin, derin öğrenme algoritmaları kullanılarak kuantum sistemlerinin simülasyonu gerçekleştirilebilmekte, deneysel verilerden hareketle teorik modeller doğrulanabilmekte ve fiziksel olayların tahmini yapılabilmektedir. Ayrıca YZ destekli yöntemler, parçacık fiziği deneylerinden elde edilen devasa veri kümelerini analiz ederek yeni fiziksel keşiflerin kapısını aralamaktadır.

Bu kitap bölümünde, fiziksel süreçlerin modellenmesi ve analizinde yapay zekâ ve makine öğreniminin rolü detaylı bir şekilde ele alınacaktır. Bölümde ayrıca bu teknolojilerin mevcut uygulama alanlarına, sağladıkları avantajlara ve gelecekteki potansiyel yönlerine odaklanılacaktır. Yapay zekâ ve makine öğreniminin fizik bilimine kazandırdığı yenilikler, bilimsel keşiflerin hızlanmasına olanak tanırken, karmaşık problemleri çözmede de güçlü araçlar sunmaktadır.

1. Yapay Zekâ ve Makine Öğrenimi Nedir?

Yapay zekâ (YZ), insan benzeri düşünme, öğrenme ve karar verme yeteneklerini bilgisayar sistemlerinde simüle eden bir teknoloji alanıdır. YZ sistemleri, karmaşık görevleri yerine getirmek için verilerden öğrenir, mantıksal çıkarımlar yapar ve zamanla performansını iyileştirir. Bu teknoloji, özellikle büyük veri çağında,

karmaşık sistemleri analiz etmede ve çeşitli bilimsel problemlerin çözülmesinde devrim niteliğinde yenilikler sunmuştur.

Makine öğrenimi (MÖ) ise yapay zekânın bir alt dalı olarak, bilgisayarların veri setlerindeki örüntüleri keşfederek belirli görevleri öğrenmesini sağlar. Geleneksel programlamada insan müdahalesiyle yazılan kuralların aksine, makine öğrenimi modelleri verilerden doğrudan bilgi çıkarır ve elde ettiği örüntülerle gelecekteki olayları tahmin edebilir. Makine öğrenimi teknikleri genel olarak denetimli öğrenme, denetimsiz öğrenme ve pekiştirmeli öğrenme olmak üzere üç ana kategoriye ayrılır.

- Denetimli öğrenme, etiketlenmiş veri setlerinden öğrenir ve bu veriler aracılığıyla tahminleme veya sınıflandırma gibi görevleri yerine getirir.
- Denetimsiz öğrenme, etiketlenmemiş veriler üzerinde çalışarak verideki gizli yapıları ve ilişkileri keşfetmeyi amaçlar.
- Pekiştirmeli öğrenme ise bir sistemin ödül ve ceza mekanizması ile bir politika öğrenmesini sağlar.

Fizik alanında, makine öğrenimi algoritmaları özellikle büyük ölçekli veri setlerinin analiz edilmesi, karmaşık fiziksel sistemlerin modellenmesi ve deneysel gözlemlerin yorumlanması gibi konularda yaygın bir şekilde kullanılmaktadır. Örneğin, kuantum mekaniği gibi disiplinlerde, sistemlerin sahip olduğu çoklu parametreler ve büyük boyutlu hesaplamalar, geleneksel matematiksel yöntemlerle çözülemez hale gelmektedir. Bu durumda, makine öğrenimi algoritmaları yaklaşık çözümler üreterek büyük veri kümeleri üzerinde kısa sürede analiz yapabilir.

Benzer şekilde, termodinamik veya akışkanlar mekaniği gibi alanlarda, makine öğrenimi teknikleri fiziksel süreçlerin daha doğru modellenmesini sağlar. Deneysel veriler ile teorik modeller arasındaki uyum, makine öğrenimi sayesinde optimize edilerek sistemlerin davranışları daha net anlaşılır hale gelir. Örneğin, akışkan dinamiklerinde nöral ağlar kullanılarak türbülanslı akışların simülasyonu gerçekleştirilebilirken, kuantum fiziğinde derin

öğrenme algoritmaları ile kuantum sistemlerinin enerji seviyeleri tahmin edilebilmektedir.

Sonuç olarak, yapay zekâ ve makine öğrenimi, fizik biliminde geleneksel yöntemlerin sınırlarını genişleterek bilim insanlarına karmaşık problemleri çözmede güçlü ve esnek araçlar sunmaktadır. Bu sayede fiziksel süreçlerin daha hızlı analiz edilmesi, tahmin edilmesi ve modellenmesi mümkün hale gelmektedir.

2. Fiziksel Süreçlerde Yapay Zekâ Uygulamaları

Günümüzde yapay zekâ (YZ) ve makine öğrenimi (MÖ), fiziksel süreçlerin incelenmesi ve modellenmesi için giderek daha yaygın bir şekilde kullanılmaktadır. Deneysel ve teorik fizik alanlarında YZ tabanlı yöntemler, karmaşık veri setlerinin işlenmesi ve fiziksel sistemlerin daha iyi anlaşılması için güçlü araçlar sunmaktadır. Ayrıca, malzeme bilimi gibi disiplinler, yeni materyallerin keşfi ve tasarımı süreçlerinde YZ'nin sağladığı avantajlardan faydalanmaktadır. Bu bölümde, YZ ve MÖ'nün fiziksel süreçlere yönelik uygulama alanları detaylı olarak ele alınacaktır.

2.1. Deneysel Fizik ve Veri Analizi

Modern fizik deneyleri, büyük ölçekli veri üretimiyle dikkat çeker. Örneğin, CERN'deki Büyük Hadron Çarpıştırıcısı (LHC), saniyede petabayt düzeyinde veri oluşturmakta ve bu verilerden fiziksel olarak anlamlı olayların ayrıştırılması için ileri düzey analiz teknikleri gerekmektedir. Geleneksel veri işleme yöntemleri, bu büyüklükteki veri setlerinin analizi için yetersiz kalabilmektedir. İşte tam bu noktada, yapay zekâ ve makine öğrenimi yöntemleri devreye girerek büyük veri kümelerinin işlenmesi ve fiziksel anlam taşıyan olayların tespiti konusunda yeni yaklaşımlar sunmaktadır.

Özellikle Convolutional Neural Networks (CNN) gibi derin öğrenme algoritmaları, parçacık fiziği deneylerinde sıkça kullanılmaktadır. CNN'ler, karmaşık görsel veri setlerindeki örüntüleri tanıma konusunda oldukça başarılıdır. Bu nedenle, Higgs bozonu gibi nadir olayların tespiti için çarpışma sonuçlarının

analizinde yoğun bir şekilde uygulanmaktadır. Aynı şekilde, deneysel cihazlardan gelen zaman serisi verilerinin analizi için Recurrent Neural Networks (RNN) gibi modeller kullanılmaktadır. Bu modeller, zamana bağılı karmaşık veri dizilerini analiz etmede etkili olup, deneylerdeki anomalileri veya kritik olayları tespit etmek için önemli bir araçtır.

Parçacık fiziği dışında, astronomi ve kozmoloji gibi alanlarda da yapay zekâ uygulamaları hızla artmaktadır. Örneğin, astronomik gözlemlerde kullanılan teleskoplardan elde edilen görüntüler, büyük veri setleri oluşturur. Yapay zekâ algoritmaları bu veri setlerini tarayarak galaksilerin sınıflandırılması, kara deliklerin tespiti ve karanlık maddeye dair ipuçlarının bulunması gibi görevlerde kullanılmaktadır. Gravitasyonel dalga gözlemleri gibi daha yeni alanlarda da sinyalleri arka plan gürültüsünden ayırmak için YZ destekli analiz teknikleri başarıyla uygulanmaktadır.

2.2. Teorik Fizik ve Modelleme

Teorik fizik, fiziksel olayların anlaşılması için matematiksel modelleme ve analitik çözümler sunar. Ancak bazı karmaşık sistemlerde, geleneksel yöntemler çözüm üretmekte zorlanır. Bu noktada, yapay zekâ teknikleri, teorik fizik araştırmalarına yeni bir boyut kazandırmıştır. Özellikle kuantum mekaniği, YZ ve MÖ tekniklerinin başarılı bir şekilde uygulandığı alanlardan biridir.

Kuantum sistemlerinin simülasyonu, durum sayısının sistem boyutuyla üssel olarak artmasından dolayı klasik bilgisayarlar için ciddi bir zorluk oluşturur. Bununla birlikte, yapay sinir ağları, kuantum sistemlerinin dinamiklerini ve enerji seviyelerini modellemek için kullanılabilir. Örneğin, Variational Quantum Eigensolver (VQE) gibi algoritmalar, kuantum kimyası ve fizik problemlerinde temel enerji seviyelerinin tahmini için başarıyla uygulanmaktadır. Bu algoritmalar, kuantum bilgisayarlarının sınırlı kaynaklarını optimize ederek, daha karmaşık sistemlerin modellenmesine olanak sağlar.

Ayrıca, teorik fizikte faz geçişlerini ve kritik fenomenleri anlamak için makine öğrenimi modelleri kullanılmaktadır. Bir

sistemin fazının belirlenmesi veya kritik sıcaklıkların tespit edilmesi, geleneksel yöntemlerle oldukça zaman alıcıdır. Ancak makine öğrenimi algoritmaları, bu tür analizleri hem hızlandırmakta hem de daha doğru sonuçlar sağlamaktadır. Örneğin, evrişimli sinir ağları (CNN) kullanılarak, spin modellerinde faz geçişleri tespit edilebilmekte ve sistemin özellikleri detaylı bir şekilde incelenebilmektedir.

2.3. Malzeme Bilimi ve Simülasyonlar

Makine öğrenimi, malzeme bilimi alanında devrim niteliğinde yenilikler sunmaktadır. Geleneksel yöntemlerle malzemelerin geliştirilmesi, uzun süren deneysel çalışmalar ve yüksek maliyetler gerektirir. Ancak YZ tabanlı yaklaşımlar, belirli fiziksel özelliklere sahip yeni malzemelerin tasarımını ve keşfini büyük ölçüde hızlandırmaktadır.

Örneğin, şekil hafızalı alaşımlar, yüksek dayanımlı metaller veya enerji depolama malzemeleri gibi sistemlerde, makine öğrenimi algoritmaları moleküler düzeydeki fiziksel özellikleri tahmin etmek için kullanılmaktadır. Gaussian Process Regression (GPR), Random Forest ve Destek Vektör Makineleri (SVM) gibi algoritmalar, malzeme özelliklerini tahmin etmek ve deneysel verilerle uyumlu modeller oluşturmak için yaygın olarak uygulanmaktadır.

Malzeme bilimi simülasyonlarında, YZ ayrıca yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) gibi teorik hesaplamaları optimize etmek için kullanılmaktadır. DFT hesaplamaları, malzeme özelliklerini tahmin etmede güçlü bir araç olsa da yüksek hesaplama maliyetlerine sahiptir. YZ tabanlı modeller, bu süreci hızlandırarak DFT'nin sonuçlarını tahmin edebilen düşük maliyetli alternatifler sunar.

Bir diğer önemli uygulama alanı ise moleküler dinamik simülasyonlarıdır. Bu simülasyonlar, atomik ve moleküler düzeyde malzeme davranışlarını anlamak için kullanılır. Yapay zekâ algoritmaları, bu simülasyonlardan elde edilen verileri analiz ederek

malzemelerin uzun vadeli davranışlarını tahmin etmekte etkili çözümler sunar.

Sonuç olarak, deneysel fizik, teorik fizik ve malzeme bilimi gibi alanlarda yapay zekâ ve makine öğrenimi tekniklerinin sağladığı avantajlar, bilimsel keşiflerin hızlanmasına ve fiziksel süreçlerin daha iyi anlaşılmasına olanak tanımaktadır. Bu teknolojilerin gelecekte daha geniş bir yelpazede uygulanması, fizik bilimine yeni boyutlar kazandıracaktır.

3. Yöntemler ve Teknikler

Fiziksel süreçlerin analizinde kullanılan yapay zekâ (YZ) ve makine öğrenimi (MÖ) teknikleri, spesifik problemler ve uygulama alanlarına göre özelleştirilmektedir. Fizik biliminin karmaşık yapıları ve büyük veri setleriyle çalışmak, bu tekniklerin etkin kullanımını zorunlu kılmaktadır. Aşağıda, fiziksel sistemlerin modellenmesi, simülasyonu ve optimizasyonunda yaygın olarak kullanılan temel yöntemler ele alınmıştır:

Sinir Ağları: Yapay sinir ağları (ANN), özellikle derin öğrenme yöntemleri aracılığıyla fiziksel sistemlerdeki çok boyutlu ve karmaşık veri setlerinin modellenmesinde oldukça etkilidir. Sinir ağları, büyük miktardaki veriden öğrenerek örüntüleri tanır ve bu verilerden türetilen yeni bilgileri kullanarak tahminler yapabilir. Özellikle derin sinir ağları (DNN), çok katmanlı yapısı sayesinde karmaşık fiziksel sistemlerin parametrelerinin modellenmesinde idealdir. Örneğin, Convolutional Neural Networks (CNN), parçacık fiziği veya görüntü tabanlı verilerde kullanılarak verilerin analiz edilmesini sağlar. Benzer şekilde, Recurrent Neural Networks (RNN) ise zaman serisi verilerinin analizinde etkili olup, dinamik sistemlerin tahmininde kullanılır.

Takviye Öğrenimi: Takviye öğrenimi (Reinforcement Learning, RL), bir ajanın bir ortamla etkileşimde bulunarak ödül ve ceza mekanizması ile karar verme süreçlerini optimize etmesini sağlar. RL, özellikle kontrol problemleri ve simülasyon süreçlerinde fiziksel sistemlerin yönetiminde kullanılmaktadır. Örneğin, fiziksel süreçlerde karmaşık optimizasyon problemlerinin çözümünde

takviye öğrenimi algoritmaları sayesinde sistem performansı artırılabilir. Ayrıca, simülasyonlarda RL kullanarak enerji sistemlerinin optimizasyonu, parçacık hızlandırıcılarının kontrolü veya kuantum sistemlerinin davranışlarının tahmini gibi alanlarda başarılı sonuçlar elde edilmektedir.

Bayeşçi Optimizasyon: Bayeşçi optimizasyon, özellikle az veriyle çalışılan sistemlerde ve deneysel tasarımda önemli bir rol oynar. Geleneksel optimizasyon yöntemleri, genellikle çok sayıda deney veya simülasyon gerektirirken, Bayeşçi optimizasyon, sınırlı veriyle en iyi sonucu bulmayı amaçlar. Bu teknik, fiziksel sistemlerin optimizasyonu için olasılıksal modeller kullanarak parametre uzayını daha verimli bir şekilde keşfetmeye olanak sağlar. Özellikle malzeme bilimi gibi alanlarda, yeni malzemelerin özelliklerini tahmin etmek ve deneysel tasarımları optimize etmek için sıklıkla tercih edilmektedir.

Bu teknikler, fiziksel süreçlerin modellenmesi ve analizi sırasında geleneksel yöntemlerin yetersiz kaldığı durumlarda, daha hızlı ve etkin çözümler sunar. Gelecekte, bu yöntemlerin bir arada kullanıldığı hibrid modeller sayesinde fizik bilimi ve mühendislik alanlarında daha karmaşık problemlerin üstesinden gelinmesi mümkün olacaktır.

4. Zorluklar ve Etik Sorunlar

Yapay zekâ (YZ) ve makine öğrenimi (MÖ) tekniklerinin fiziksel süreçlerde kullanımı, birçok avantaj sağlasa da beraberinde bazı zorluklar ve etik sorunları da getirmektedir. Bu zorluklar, teknik altyapıdan kaynaklanabileceği gibi uygulamaların fiziksel anlamlandırılması ve güvenilirliği gibi konularda da ortaya çıkmaktadır.

4.1. Veri Eksikliği ve Kalitesi

YZ ve MÖ modellerinin başarılı bir şekilde çalışabilmesi için genellikle büyük ve kaliteli veri setlerine ihtiyaç duyulur. Ancak fiziksel süreçlerde her zaman yeterli veri elde edilemeyebilir. Özellikle deneysel çalışmaların maliyetli ve zaman alıcı olması, veri

eksikliğine yol açar. Ayrıca, veri setlerindeki gürültü ve hatalar, modellerin performansını olumsuz etkileyebilir. Veri miktarının az olduğu durumlarda, Bayesçi optimizasyon gibi yöntemler bir çözüm sunsa da bu durum yine de modelin güvenilirliğini sınırlandırabilir.

4.2. Kara Kutu Problemi

Yapay zekâ algoritmalarının en önemli zorluklarından biri şeffaflık eksikliği olarak bilinen “kara kutu” problemidir. Sinir ağları ve diğer karmaşık MÖ modelleri, genellikle girdiler ve çıktılar arasında doğru ilişkileri kurabilse de bu ilişkilerin neden ve nasıl kurulduğu genellikle anlaşılması zor bir süreçtir. Özellikle fizik alanında, bir modelin ortaya koyduğu çözümün fiziksel anlamda nasıl yorumlanacağı büyük önem taşır. Fiziksel sistemlerin temel yasalarına aykırı görünen bir sonuç, güven sorunlarına neden olabilir ve modeli bilimsel açıdan tartışmalı hale getirebilir.

4.3. Etik ve Sorumluluk Sorunları

Yapay zekâ uygulamalarının etik boyutu, fiziksel bilimlerde de giderek daha önemli hale gelmektedir. Özellikle büyük deneylerde, karar mekanizmalarının yapay zekâyâ bırakılması durumunda sorumluluk sorunu ortaya çıkabilir. Bir modelin hatalı karar vermesi durumunda, bu hatanın sorumluluğu kimde olacaktır? Ayrıca, veri gizliliği ve güvenliği de önemli bir etik sorundur. Örneğin, bilimsel araştırmalar sırasında paylaşılan verilerin kötüye kullanımı hem araştırma etiğine hem de bireysel haklara aykırı olabilir.

4.4. Fiziksel Yorumlama ve Doğrulama

YZ ve MÖ tekniklerinin fiziksel süreçlere uygulanmasında karşılaşılan bir diğer zorluk, modellerin sunduğu çözümlerin fiziksel gerçeklik ile tutarlı olup olmadığının değerlendirilmesidir. Yapay zekâ sistemleri, veriye dayalı yaklaşımlar kullandığı için bazen fiziksel yasaları ihmal edebilir veya yanlış yorumlayabilir. Bu nedenle, model çıktılarını geleneksel yöntemlerle doğrulamak ve fiziksel anlamlandırmasını yapmak kritik bir adımdır. Özellikle

karmaşık sistemlerde, model sonuçlarının doğru yorumlanması için hem fiziksel bilgi birikimi hem de modelin detaylı analizi gerekir.

Sonuç olarak, yapay zekâ ve makine öğrenimi tekniklerinin fiziksel süreçlerde kullanımı önemli fırsatlar sunsa da veri kalitesi, şeffaflık, etik sorumluluk ve fiziksel anlamlandırma gibi konular bu alanda dikkat edilmesi gereken zorluklar olarak öne çıkmaktadır. Bu sorunların çözümü için güçlendirilmiş algoritmalar, etik çerçeveler ve multidisipliner yaklaşımlar büyük önem taşımaktadır.

5. Gelecek Perspektifleri

5. Sonuç ve Gelecek Perspektifleri

Yapay zekâ (YZ) ve makine öğrenimi (MÖ), fizik biliminin çeşitli alt dallarındaki dönüşümünde güçlü bir etken haline gelmiştir. Günümüzde bu teknolojiler, deneysel verilerin işlenmesinden teorik modellemelere, malzeme keşfinden kuantum sistemlerinin simülasyonuna kadar pek çok alanda etkin bir şekilde kullanılmaktadır. Fizik bilimi, karmaşık sistemlerin ve süreçlerin anlaşılmasında geleneksel yöntemlerle bazı sınırlamalarla karşı karşıya kalırken, YZ ve MÖ bu sınırlamaları aşma potansiyeline sahiptir. Ancak bu teknolojilerin başarılı bir şekilde uygulanabilmesi için veri kalitesi, şeffaflık ve etik konularında önemli zorlukların üstesinden gelinmesi gerekmektedir.

Gelecek Perspektifleri

YZ ve MÖ'nün fizik bilimi üzerindeki etkisinin önümüzdeki yıllarda daha da artması beklenmektedir. Bu gelişimin yönünü belirleyecek bazı kritik alanlar şunlardır:

Kuantum Hesaplama ile Entegrasyon

Kuantum hesaplama, yapay zekâ ve makine öğrenimi tekniklerinin gücünü katlayarak artıracak bir teknoloji olarak öne çıkmaktadır. Geleneksel bilgisayarların sınırlarını aşan hesaplama kapasitesiyle kuantum bilgisayarlar, büyük ölçekli fiziksel simülasyonların ve karmaşık optimizasyon problemlerinin

çözümünde YZ'nin etkinliğini artırabilir. Özellikle kuantum makine öğrenimi (QML) alanındaki gelişmeler, fiziksel süreçlerin çok daha hızlı ve doğru bir şekilde analiz edilmesini sağlayacaktır.

Daha Verimli Algoritmaların Geliştirilmesi

Makine öğrenimi algoritmaları, sürekli gelişim göstererek daha verimli hale gelmektedir. Gelecekte, daha az veriyle çalışabilen, fiziksel anlamlandırmayı kolaylaştıran ve "kara kutu" problemini azaltan algoritmaların geliştirilmesi beklenmektedir. Özellikle fizik tabanlı yapay zekâ yaklaşımları, fiziksel ilkeleri doğrudan algoritmaların içine entegre ederek, model çıktılarının fiziksel anlamını ve güvenilirliğini artırabilir.

Büyük Veri Kaynaklarının Kullanımı

Fizik bilimi, giderek artan veri hacmiyle çalışmaktadır. Özellikle parçacık fiziği, astronomi ve malzeme bilimi gibi alanlarda büyük veri setlerinin işlenmesi, geleceğin en önemli zorluklarından biri olacaktır. YZ ve MÖ'nün bu veri setlerinden anlamlı bilgi çıkarma konusundaki yetenekleri, fizik biliminin ilerleyişinde kilit bir rol oynayacaktır. Örneğin, daha güçlü teleskoplar ve dedektörler sayesinde astronomi alanında toplanan verilerin analiz edilmesi, evrenin doğası hakkında yeni bilgiler ortaya koyabilir.

Etik ve Multidisipliner Yaklaşımlar

YZ ve MÖ'nün fizik bilimi ve diğer disiplinlerle entegrasyonu, yalnızca teknik değil, aynı zamanda etik ve sosyal boyutları da içeren bir gelişim gösterecektir. Gelecekte, yapay zekânın fiziksel sistemlerdeki karar mekanizmalarında kullanımıyla ilgili etik kuralların daha belirgin hale gelmesi gerekecektir. Ayrıca, fizik bilimi ile bilişim, mühendislik, biyoloji gibi farklı disiplinlerin kesişim noktalarında multidisipliner çalışmaların artması beklenmektedir.

Sonuç olarak, yapay zekâ ve makine öğrenimi, fizik bilimine yalnızca pratik çözümler sunmakla kalmayıp, aynı zamanda bilimsel bilgi üretimi süreçlerini kökten değiştirecek bir potansiyele sahiptir.

Gelecekte bu teknolojilerin daha geniş bir yelpazede uygulanmasıyla, fizik biliminin çözmekte zorlandığı birçok problemin üstesinden gelinmesi ve bilimsel keşiflerin hızlanması mümkün olacaktır. Bununla birlikte, etik sorunlara ve teknik sınırlamalara yönelik çözümler geliştirilmesi, bu teknolojilerin sürdürülebilir ve güvenilir bir şekilde uygulanması için kritik öneme sahip olacaktır.

Kaynakça

Goodfellow, I., Bengio, Y., & Courville, A. (2016). *Deep learning*. MIT Press.

Bishop, C. M. (2006). *Pattern recognition and machine learning*. Springer.

Carleo, G., *et al.* (2019). Machine learning and the physical sciences. *Reviews of Modern Physics*, 91(4), 045002. doi: 10.1103/RevModPhys.91.045002

Hastie, T., Tibshirani, R., & Friedman, J. (2009). *The elements of statistical learning*. Springer.

Mehta, P., *et al.* (2019). A high-bias, low-variance introduction to Machine Learning for physicists. *Physics Reports*, 810, 1-124. doi: 10.1016/j.physrep.2019.03.001

CERN Document Server. (2023). Applications of AI in particle physics. [Online]. Available: <https://cds.cern.ch>

LeCun, Y., Bengio, Y., & Hinton, G. (2015). Deep learning. *Nature*, 521(7553), 436-444. doi: 10.1038/nature14539

Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks. *Journal of Computational Physics*, 378, 686-707. doi: 10.1016/j.jcp.2018.10.042

BÖLÜM II

Fotoanot Modifikasyonu ile Boya Duyarlı Güneş Hücreleri Performansının İyileştirilmesi

A GENCER İMER¹

Giriş

İnsanlığın günlük konfor beklentilerinin artırması ile birlikte temiz ve güvenilir enerji kaynaklarına olan ihtiyaç her geçen gün artmaktadır. Günümüzde herhangi bir ulus için toplumsal düzeyde vazgeçilmez olan modern endüstriyel gelişmenin temeli elektrik enerjisine dayanır ve bu ihtiyaç çoğunlukla fosil yakıtların kullanımı ile sağlanmaktadır. Artan kullanıma bağlı olarak bu kaynaklar hızla tükenirken, bu tüketim sonucu oluşan sera gazları çevresel ve toplumsal olumsuz sonuçlar doğurmaktadır. Bu nedenle, yenilenebilir kaynakların kullanımı bu ikilemi aşmak için esastır. Üçüncü nesil fotovoltaiik (güneş) hücreleri güncel seçenek olarak umut vadetmektedir. Bu grupta yer alan, boya duyarlı güneş hücreleri (DSSC) fotoanot/katot, organik (doğal ve sentetik) ya da inorganik duyarlaştırıcı boya ve redox elektrolit gibi bileşenleri içermektedir (O'Regan & Grätzel, 1991). Güneş hücresi teknolojisinin hızla ilerlemesi, fotovoltaiik cihazların verimliliğini ve

¹ Prof. Dr., Arife Gencer İmer, Van Yüzüncü Yıl Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Van/Türkiye, Orcid: 0000-0002-8147-9169, gencerimerarife@gmail.com

dayanıklılığını artırabilecek yenilikçi malzemelere olan ihtiyacı artırmaktadır.

Bu bölüm, güneş pili teknolojisi hakkında önemli dönüm noktalarını anlatan kısa bir giriş kısmı ile başlamaktadır. Ardından DSSC yapısı, bileşenleri ve çalışma ilkeleri açıklanmaktadır. DSSC'de genel olarak kullanılan fotoanotların geçmişten günümüze gelişimi ve farklı yarıiletken tabanlı fotoanotlardaki ilerleme detaylı olarak ele alınmaktadır. Son kısımda, boya duyarlı güneş hücreleri ile ilişkili genel sorunlar özetlenerek ve aygıt performansını artırabilecek diğer iyileştirmeler belirtilerek sonlandırılmaktadır. Bu çalışma, DSSC teknolojisi konusunda çalışan bilim insanlarına ışık tutup ve ufuk açacak, yeni DSSC tasarımlarında sunulan farklı yol gösterici perspektifler sağlayacaktır.

2.Güneş Pili Teknolojisi

Enerji talebi, insan nüfusunun büyümesiyle hızla artmaktadır ve elektrik enerjisi modern insan yaşamında en hızlı büyüyen ihtiyaç haline gelmiştir. Uluslararası Enerji Ajansı (IEA) ve Avrupa Fotovoltaik Endüstrisi Birliği'nin (EPIA) istatistikleri, 2011'den 2030'a kadar enerji tüketiminde üçte birlik artış öngörmüştür. (Atli, 2023). Şu anda enerjinin çok büyük kısmı fosil (hidrokarbon) yakıtlarla sağlandığından, enerji tüketimindeki büyümeye fosil yakıt kullanımında büyük artış ve karbondioksit gibi sera gazlarının kapsamlı emisyonu eşlik etmektedir. Sanayi devrimin başlangıcından bu yana atmosferik karbondioksit konsantrasyonundaki hızlı artış, dünyanın iklimini ve dolayısıyla çevreyi ve insan hayatını olumsuz etkilemektedir. Bu nedenle yenilenebilir enerji kaynaklarına olan ilgi artmıştır. Son on beş yılda çeşitli DSSC bileşenleri üzerinde küresel olarak yürütülen birkaç önemli araştırma ve inovasyon girişimi kaynaklarda yer almaktadır (Atli & Yıldız, 2022; He & Wang, 2021; R. Kaur, Kim, & Deep, 2017; Kaya, Gencer Imer, & Gülcan, 2025; Ozel, Atilgan, & Yıldız, 2024). Analizlere göre, araştırma çabalarının çoğu uygun fiyatlı, çevre dostu, kararlı ve etkili DSSC'ler üretmeye yöneliktir.

2.1 DSSC Tarihsel Gelişimi

Boya duyarlı güneş hücreleri (DSSC'ler), pn eklemli fotovoltaiik cihazlara teknik ve ekonomik olarak güvenilir bir alternatif olarak ortaya çıkmıştır. 1960'ların sonlarında, elektrokimyasal hücrelerde aydınlatılmış organik boyalar aracılığıyla elektrik üretilebileceği keşfedilmiştir. California Üniversitesi'nde, ıspanaktan klorofil ekstrasyonu başarılınca, klorofil duyarlı ilk çinko oksit (ZnO) elektrot üretilmiştir (Tributsch & Calvin, 1971). Böylece, fotosentez benzeri bir mekanizma ile, uyarılmış boya moleküllerinin geniş bir bant aralığına elektron enjeksiyonu yoluyla, fotonlar elektriğe dönüştürülmüştür (Tsubomura, Matsumura, Nomura, & Amamiya, 1976). Ancak duyarlaştırıcı boya molekülleri tarafından gelen ışığın yalnızca %1'inin soğurulabilmesi nedeniyle bu ilk DSSClerin verimliliği çok zayıftır. Zamanla, ince oksit tozundan yapılmış elektrodun gözenekliliği optimize edilerek verimlilik artırılmış, böylece elektrot üzerindeki boya emilimi geliştirilmiş ve ışık hasadı verimliliği (LHE) artırılabilmiştir. Sonuç olarak, yaklaşık 1000 pürüzlülük faktörüne sahip nano gözenekli titanyum dioksit (TiO₂) elektrotlar keşfedilmiş ve 1991'de %7 verimliliğe sahip DSSC'ler icat edilmiştir (O'Regan & Grätzel, 1991). Grätzel hücreleri olarak da bilinen bu hücreler, ilk olarak Brian O'Regan ve Michael Grätzel tarafından UC Berkeley'de icat edilmiş ve aynı bilim insanları tarafından 1991'e kadar Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne'da daha da geliştirilmiştir.

O'Regan ve Grätzel tarafından ideal spektral özelliklere sahip bir yük transfer boyasının tek tabakasıyla kaplanmış, 10 µm kalınlığında, yüksek yüzey alanlı ve optik olarak şeffaf bir TiO₂ nanopartikül film temelli DSSC pil üretilmiştir. Pil, gelen ışık enerjisi akısının %46'lık oranını toplamış ve gelen fotonların elektrik akımına dönüştürülmesinde %80'den fazla verimlilik göstermiştir. Gelen foton-akım dönüşüm verimliliği (IPCE) simüle edilmiş güneş ışığında %7.1-7.9 ve dağınık güneş ışığında %12 olarak raporlanmıştır. Yeterli kısa devre akım yoğunluğu ($J_{sc} > 12 \text{ mA/cm}^2$), kararlılık ve düşük maliyet avantajları bu pratik aygıtı uygulanabilir hale getirdi (O'Regan & Grätzel, 1991). 1993'te

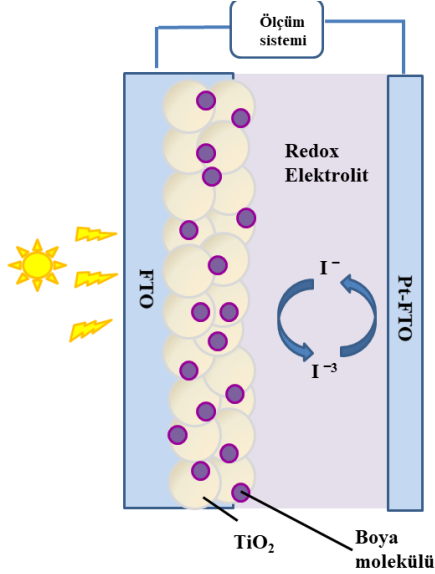
Grätzel ve ark. tarafından hücrelerin % 9.6'lık verime ulaştığı bildirilmiş ve ardından 1997'de Ulusal Yenilenebilir Enerji Laboratuvarı'nda (NREL) %10'a ulaşılmıştır. Bu çalışmada yarı iletken alt tabakaya kararlı adsorpsiyon sağlanması için duyarlılaştırıcı boyalar $-\text{COOH}$, $-\text{PO}_3\text{H}_2$ ve $-\text{B}(\text{OH})_2$ gibi fonksiyonel gruplara sahip moleküler yapılar şeklinde tasarlanmıştır (Altobello et al., 2004; Md K Nazeeruddin, Baranoff, & Grätzel, 2011). Yakın zamanda 2018'de Kunzmann vd. tarafından düşük sıcaklık uygulamaları için hibrit boya-titanya nanopartikül tabanlı DSSC için %8.75'lik bir verime ulaşıldığı bildirilmiştir (Kunzmann et al., 2018). Bugüne kadar, elektrolit olarak kobalt kompleksi, duyarlılaştırıcı olarak karbazol/hekzil-fonksiyonelleştirilmiş oligotiyofen/trimetoksisilil (ADEKA-1) boyası ve dibifenilmonofenilamin (LEG4) boyası birlikte kullanılarak elde edilen boya kompleksi ile hazırlanan DSSC için %14.7'lik en yüksek verime ulaşılmıştır (Kakiage et al., 2015).

3. DSSC Yapısı ve Bileşenleri

Çalışma elektrodu (fotoanot), duyarlılaştırıcı (boya), redoks çifti/ortamı (elektrolit) ve karşıt elektrot (fotokatot) DSSC için önemli dört temel parametredir. DSSC, duyarlılaştırıcı boya adsorbe edilmiş çalışma elektrodu ve katalizör olarak Pt kaplı karşıt elektrot bir araya getirilerek; bu elektrotlar arasına elektrolit ile doldurulan elektrokimyasal düzendir. Tipik bir DSSC'nin yapısı ve bileşenleri şematik olarak Şekil 1'de gösterilmiştir.

3.1 Şeffaf-İletken Oksit Kaplı Altlık

DSSC'lerde, yarı iletken ve katalizörün biriktirilmesi için mekanik destek ve aynı zamanda akım toplayıcı görevi gören iki iletken-şeffaf oksit ince film kaplanmış cam altlıklar kullanılır (Mehmood, Rahman, Harrabi, Hussein, & Reddy, 2014). Bir DSSC'de kullanılan altlığın iki ana özelliği vardır: İlk olarak, hücrenin etkin alanına optimum güneş ışığının geçmesine izin vermek için %80'den fazla şeffaf olmalıdır.



Şekil 1: DSSC yapısı ve bileşenleri

İkinci olarak, DSSC'lerde verimli yük transferi ve minimum enerji kaybı için yüksek bir elektrik iletkenliğine sahip olması gerekir. Flor katkılı kalay oksit (FTO, $\text{SnO}_2\text{:F}$) ve indiyum katkılı kalay oksit (ITO, $\text{In}_2\text{O}_3\text{:Sn}$) genellikle DSSC'lerde iletken altlık tabaka olarak uygulanır. ITO filmleri %80'den fazla geçirgenliğe ve $18 \text{ } \Omega/\text{cm}^2$ 'lik bir tabaka direncine sahipken, FTO filmleri görünür bölgede %75'lik geçirgenliğe ve $8.5 \text{ } \Omega/\text{cm}^2$ 'lik tabaka direncine sahiptir (Mehmood et al., 2014).

3.2 Çalışma elektrodu (WE)

DSSC'de, çalışma elektrodu (WE) geniş bant aralıklı yarı iletken ince filminden oluşur. Geleneksel bir güneş hücresinde Si yarıiletkenin iki işlevi, fotoelektron kaynağı olmak ve yükleri ayırarak bir akım oluşturmak için elektrik alanı sağlamak şeklinde özetlenebilir. Ancak, DSSC'lerde, yarı iletkenin büyük kısmı sadece yük taşıyıcı olarak kullanılır ve fotoelektronlar ışığa duyarlı boyalar tarafından sağlanır. DSSC'de, yarı iletken/boya arayüzeyi, boyanın foto-uyarılmasından sonra yük ayrımı için platform sağlar. Ayrıca, enjekte edilen fotoelektronların dış devreye doğru iletimini sağlar.

Bu nedenle, DSSC'lerde kullanılan yarı iletken malzemeler birkaç temel özelliğe sahip olmalıdır: Bunlar, geniş bir yüzey alanı, boya molekülleri için güçlü kimyasal afinite, uygun iletim bandı (CB) ve değerlik bandı (VB) potansiyelleri ve yüksek yük hareketliliği olarak sıralanabilir.

DSSC'lerde fotoanot olarak çeşitli malzemeler araştırılmıştır, bunlar arasında TiO_2 (Grant, 1959; Roberts, Thomas, & Bickley, 1978), ZnO (Tennakone, Kumara, Kottegoda, & Perera, 1999), Nb_2O_5 (Sayama, Sugihara, & Arakawa, 1998), CeO_2 (Corma, Atienzar, García, & Chane-Ching, 2004), Zn_2SnO_4 (Tan, Toman, Li, & Wu, 2007) ve BaSnO_3 (Shin et al., 2013) bulunur. Bu şeffaf-iletken oksit yarı iletken malzemelerin ince bir tabakasının FTO veya ITO'dan yapılmış şeffaf bir iletken cam altlık üzerine biriktirilmesiyle WE hazırlanır. Bu oksitler 3.0–3.2 eV'lik geniş bir optik bant aralığına sahiptir. Bunlar arasında, daha yüksek duyarlaştırıcı boya yüklemesi için anataz ve daha iyi ışık saçılması için rutil TiO_2 formları DSSC'lerde yaygın olarak kullanılmaktadır (Chiba et al., 2006). Toksik olmaması, daha ucuz ve kolay erişilebilir olması gibi avantajlarının yanı sıra TiO_2 yarı iletken film UV bölgesindeki ışığın yalnızca küçük bir kısmını soğurabilir; bu nedenle, WE fotoduyarlı moleküler adsorbe edilir. Bunun için, WE duyarlaştırıcı boya çözeltisine batırıldıktan sonra, boya molekülleri TiO_2 yüzeyine kovalent olarak bağlanır. Elektrodun gözenekli yapıya ve geniş yüzey alanına sahip olması durumunda, çok sayıda boya molekülü nanokristalin TiO_2 yüzeyine bağlanabilir ve böylece yarı iletken yüzeyindeki ışık Emilimi artar. Ancak, TiO_2 yarıiletkeninde eksitonların hızlı rekombinasyonu sebebiyle araştırmacılar güneş pili uygulamaları için alternatif fotoanot malzemeleri keşfetmeye yönelmiştir.

3.3 Fotoduyarlaştırıcı boya

Duyarlaştırıcı boya, DSSC'nin gelen ışığın maksimum Emiliminden sorumlu bileşenidir. Güneş ışığını soğurduktan sonra, duyarlılaştırıcı boya foto-uyarılmış hale gelir ve daha sonra fotoelektronları fotoanotta bulunan TiO_2 yarıiletkenin iletim bandına (CB) enjekte eder. Oksidasyon işleminden sonra, elektrolit

tarafından boyanın redüksiyonu gerçekleşir. DSSC'lerde etkili yük enjeksiyonu/yenileme işlemi için, boyanın birkaç kritere sahip olması gerekir. Boyanın soğurma spektrumları UV-vis ve yakın kızılötesi (NIR) bölgeyi kapsamalıdır. Ayrıca, etkin yük enjeksiyonunu sağlamak için boyanın en düşük boş moleküler orbital (LUMO) seviyesi, TiO_2 yarıiletkenin CB seviyesine göre daha yüksek potansiyelde olmalıdır. Ek olarak, verimli boya rejenerasyonunu kolaylaştırmak için duyarlaştırıcı boyanın en yüksek dolu moleküler orbital (HOMO) seviyesi, redoks elektrolitin seviyesinden daha düşük seviyede olmalıdır. Hücrelerin uzun vadeli kararlılığını artırmak için boyanın çevresi hidrofobik olmalıdır, çünkü bu elektrolit ile anot arasındaki doğrudan teması en aza indirir. Aksi takdirde, boyanın TiO_2 yüzeyinden suya bağlı bozulması ortaya çıkabilir ve bu da hücrelerin kararlılığını azaltabilir. Son olarak, boyanın TiO_2 yüzeyinde çökmesini ve kümelenmesini önlemek için, kenodeoksikolik asit (CDCA) gibi yardımcı emiciler ve alkoksi-silil (Fung, Chiu, & Lam, 2003), fosforik asit (Zaban, Ferrere, & Gregg, 1998) ve karboksilik asit grubu (Hagberg et al., 2008; M K Nazeeruddin et al., 1993) gibi bağlayıcı gruplar kullanılabilir. Böylece redoks elektrolit ile TiO_2 nanokatmanındaki elektronlar arasındaki rekombinasyon reaksiyonunu sınırlar ve ayrıca kararlı bağ oluşumuyla sonuçlanır (Neale, Kopidakis, Van De Lagemaat, Grätzel, & Frank, 2005).

Rutenyum (Ru) bazlı duyarlılaştırıcılar, (Kohle, Grätzel, Meyer, & Meyer, 1997) başlangıcından bu yana dikkat odağı olan kararlılıkları ve fotokimyasal aktiviteleri ile en uygun olanlardır. Duyarlılaştırıcı boyanın gelişiminde önemli bir kilometre taşı, 1993'te siyah boyanın (N3) hassaslaştırıcı olarak kullanılmasıdır (K. Nazeeruddin, Péchy, & Grätzel, 1997). Siyah boya, 800 nm'ye yakın bir soğurma sınırı ile güçlü soğurmaya sahiptir. Daha sonra, aynı araştırma grubu tarafından N3'ün geliştirilmiş bir versiyonu olan N719 geliştirilmiştir (Mathew et al., 2014). Ru türevi duyarlılaştırıcıların DSSC'lerde üstün fotokimyasal performansına rağmen, araştırmacılar dikkatlerini çinko bazlı (Gencer Imer, Syan, Gülcan, Ocak, & Tombak, 2018) ve diğer metal bazlı kompleks

hassaslařtırıcılar (Bessho et al., 2008; D. Y. Lee et al., 2014; Linfoot et al., 2011) gibi daha bol bulunan ve uygun maliyetli alternatiflere çevirmiřtir. DSSC'lerde alternatif hassaslařtırıcı boyalarla yeterince yüksek PCE elde edilmiř olsa da, aygıtlara dahil edildiğinde önemli desorpsiyon, bağlanma modlarında ve etkileřimlerde deęiřkenlik ve boya molekülü agregasyonu gibi zorluklar halen devam etmekte ve bunların hepsi cihaz performansını düşürmektedir.

3.4 Redox elektrolit

Elektrolit, redoks çifti ve çözücüden oluşurken, bazı durumlarda katkı maddeleri, iyonik sıvılar ve katyonlar eklendiğinde beř bileřenden oluşur. DSSC'lerde elektrolit, cihazın hem kararlılıęını hem de verimlilięini belirlemede önemli işlevlere sahiptir. Birincil işlevi, çalışma elektrotunda adsorblanan oksitlenmiř boyayı karřıt elektrottan yük taşıyarak yenilemektir. Bir elektrolitin etkili olması için, hızlı rejenerasyon/yenileme sürecini kolaylařtırmalı, eksiton rekombinasyonunu baskılamalıdır. Ayrıca, elektrolitin soęurma spektrumu duyarlařtırıcı boyanın soęurma spektrumu ile örtüşmemeli ve 400-700 nm dalga boyu aralıęında düşük soęurma sağlamalıdır. Elektrolit yük taşıyıcılarının hızlı difüzyonuna izin verebilmeli, iletkenlięi artırabilmeli ve WE/CE arasında etkin temas oluřturabilmelidir. Yukarıda belirtilen gereksinimlerin karřılanması, seçilen çözücüdeki yüksek çözünürlüęe ve iyonik hareketlilięe baęlıdır. Ek olarak, boya yenilenmesi minimum potansiyelle gerçekteřmelidir (Hamann & Ondersma, 2011; H. Wang & Hu, 2012). Triiyodür/iyodür (I^{-3}/I^{-}) redoks çifti, DSSC'lerde en yaygın kullanılan çift olmuřtur ve duyarlılařtırıcı olarak N749 boyasıyla eřleřtirildiğinde %11'lik verime ulařmıřtır (Chiba et al., 2006). Redoks kinetik mekanizmasında; I^{-} hızlı boya rejenerasyon oranı sunarken, CE'de I^{-3} 'ün yavař indirgenmesi taşıyıcı toplanmasını artırır ve çıkıř rekombinasyonunu en aza indirir. Elektrolit olarak I^{-3}/I^{-} kullanan aygıtlar farklı kořullar altında iyi bir kararlılık göstermiřtir ve bu redoks çiftini ticari uygulamalar için güçlü bir aday haline getirir. Ancak yaygın kullanımına raęmen, mavi dalga boyu bölgesindeki I^{-3}/I^{-} emilimi (duyarlılařtırıcı ile rekabet eder) ve PV modüllerindeki

gümüş ve bakır gibi toplayıcı metaller üzerindeki koroziyif/aşındırıcı etkileri gibi bazı dezavantajları nedeniyle alternatifler araştırılmıştır (Boschloo & Hagfeldt, 2009; Grätzel, 2001). Asetonitril (ACN), N - metilpirolidin (NMP) ve ACN/valeronitril gibi çözücü karışımları, yüksek dielektrik sabitlerine sahip çözücü olarak kullanılmıştır (M K Nazeeruddin et al., 1993). Heterosiklik bileşikler ve tert-bütülpiridin (tBP) gibi katkı maddeleri, redoks potansiyelini ve rekombinasyon kinetiğini etkileyerek cihazın performansını artırmak ve böylece fotovoltaiik parametreleri iyileştirmek için DSSC'lerde kullanılmıştır (M K Nazeeruddin et al., 1993). Performansı daha da artırmak için deoksikolik asitler ve fosfonik asitler gibi katkı maddeleri kullanılmış olup, kenodeoksikolik asit (keno) aygıtın ürettiği akımı önemli ölçüde artırmada özellikle etkili olduğu kanıtlanmıştır (Daeneke et al., 2011; Xie & Hamann, 2013; Zhou et al., 2007).

3.5 Karşıt elektrot (CE)

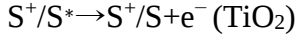
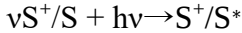
CE, boya duyarlı güneş hücresinde kontak noktası olarak işlev görür ve devreyi tamamlamak için dış devreden gelen yük taşıyıcılarının yeniden girişini kolaylaştırır. CE, FTO altlık üzerine biriktirilmiş bir katalizör tabakasına sahiptir ve redoks ortamıyla uyumlu olmalıdır. CE'nin birincil rolü, redoks ortamının hızlı indüksiyonunu desteklemek olduğundan dolayı minimum potansiyelle yüksek elektrokimyasal performansa sahip olmalıdır (Thomas et al., 2014). Karşıt elektrot, I^-/I^{3-} sıvı elektrolitin indirgenmesini katalize eder ve hol taşıma malzemesinden holleri toplar. Son yıllarda, karbon (M. Wu, Lin, Wang, Qiu, & Ma, 2011; G. Zhu, Pan, Lu, Xu, & Sun, 2011), geçiş metalleri (G. R. Li, Song, Pan, & Gao, 2011; X. Sun, Dou, Xie, Li, & Wei, 2014) ve metal alaşımları (Peng et al., 2009) gibi çeşitli malzemeler DSSC'ler için potansiyel CE malzemeleri alternatif olarak kullanılmıştır. Bunlar arasında Pt, yüksek maliyeti ile güneş hücrelerinin genel maliyetini önemli ölçüde artırmasına rağmen, mükemmel katalitik özelliği ve farklı koşullardaki kararlılığı nedeniyle DSSC'de CE olarak halen en yaygın kullanılan malzemedir (Thomas et al., 2014).

4. DSSC Çalışma Prensibi

DSSC'nin çalışma prensibi aşağıda belirtilen adımları içerir. dört temel adımı içerir: Işığın soğurulması, elektron enjeksiyonu, taşıyıcının taşınması ve akımın toplanması. Fotonların akıma dönüştürülmesinde aşağıdaki adımlar yer alır:

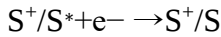
1. Öncelikle, gelen ışık duyarlaştırmacı tarafından soğurulur ve böylece foton Emilimi nedeniyle elektronlar temel durumdan (S^+/S) boyanın uyarılmış durumuna (S^+/S^*) yükselir; çoğu boyanın soğurma sınırı 700 nm civarındadır ve foton enerjisi yaklaşık 1.72 eV'ye karşılık gelir.

2. Ardından, nanosaniye aralığında yaşam ömrüne sahip uyarılmış elektronlar, boyanın uyarılmış durumunun altında bulunan nanogözenekli TiO_2 elektrodunun iletim bandına enjekte edilir, burada TiO_2 , UV bölgesinden gelen güneş ışınlarının küçük bir kısmını emer. Sonuç olarak, boya oksitlenir.

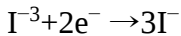


3. Enjekte edilen bu elektronlar TiO_2 nanopartikülleri arasında taşınır ve arka kontak noktasına (saydam iletken oksite) doğru yayılır. Dış devre aracılığıyla elektronlar karşı elektroda ulaşır.

4. Karşı elektrottaki elektronlar I^{-3} 'ü I^- 'e indirir; böylece I^- iyonun redoks aracısından elektron kabulü sayesinde boya rejenerasyonu veya boyanın temel halinin rejenerasyonu gerçekleşir ve I^- iyonu I^{-3} 'e oksitlenir.

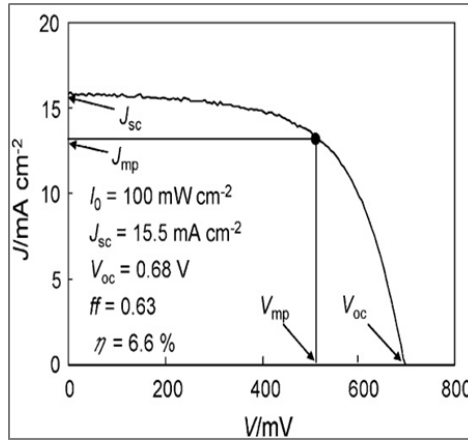


5. Tekrar oksitlenen mediatör (I^{-3}) karşı elektroda doğru difüze olur ve I^- iyonuna indirgenir.



4.1 DSSC performans analizi

Boya duyarlı güneş hücresinin performansı, bir ışık kaynağı ile sabit aydınlanma altında Şekil 3'te gösterildiği gibi, akım yoğunluğu-gerilim grafiği yardımıyla analiz edilir. Bu analiz kısa devre akımı (J_{SC} , mA cm^{-2}), açık devre voltajı (V_{OC} , mV), maksimum güç çıkışı (P_m , W), dolum faktörü (FF, %) ve güç dönüşüm verimi (η , %) kullanılarak değerlendirilebilir. Şekil 2'de gösterildiği gibi, J_{SC} , hücrenin anot ve katot elektrotları sıfır mV gerilimde kısa devre yapıldığında üretilir. V_{OC} ise akım sıfır olduğunda yani açık devre koşulunda anot ve katot elektrotlar arasındaki voltajdır veya basitçe, yarı iletken malzemenin iletim bant enerjisi ile elektrolitin redoks potansiyeli arasındaki potansiyel farkıdır. P_m DSSC'nin güneş ışığını elektrik enerjisine dönüştürmedeki maksimum verimliliğidir.



Şekil 2: DSSC J-V grafiği (Atli, 2023)

Maksimum güç çıkışının ($J_m \times V_m$) parametrelerin çarpımına ($V_{oc} \times J_{sc}$) oranı FF değerini verir.

$$FF = \frac{J_m \times V_m}{J_{sc} \times V_{oc}} \quad (1)$$

Ayrıca, genel verimliliği (η , %), bir fotovoltaik aygıtta gelen güneş enerjisinin elektrik enerjisine dönüşme yüzdesini ifade ederken, η değeri J_{SC} , V_{OC} , FF değerleri ile ilişkilidir

$$\eta(\%) = \frac{J_{SC} \times V_{OC} \times FF}{P_{in}} \quad (2)$$

Kuantum verimliliği (IPCE, %), dış devreden akan elektron sayısının, herhangi bir dalga boyunda (λ) hücre yüzeyine düşen foton sayısına oranıdır. Aşağıdaki gibi verilir:

$$IPCE\%(\lambda) = \frac{1240 \times J_{SC}}{P_{in} \times \lambda} \quad (3)$$

DSSC'lerin teorik olarak öngörülen güç dönüşüm verimliliği (PCE) %15 üzerindedir (Snaith, 2010). Bu nedenle, DSSC'lerin verimliliğini artırmak ve ticarileşmesini sağlamak için halen kapsamlı araştırmalar devam etmektedir. Son yıllarda, DSSC'lerin performansını artırmak için birçok çalışma yapılmıştır.

DSSC, yarı iletkenlerin geniş bant aralığının duyarlılaşmasına bağlı olarak ışık enerjisini elektrik enerjisine dönüştürür. Esas olarak duyarlılaştırıcı (boya), fotokatot, elektrolit, katot ve FTO altlık gibi DSSC'lerin tüm parçaları, genel verimliliği artırmak için iyileştirilmelidir. Bu hücrelerin performansının önemi ve fotoanotların iyileştirilmesine dair yapılan güncel çalışmaların ana sonuçları takip eden kısımda tartışılmaktadır.

5. Fotoanot Modifikasyonu

DSSC'ler için en çok araştırılan fotoanot malzemeleri TiO_2 ve ZnO 'dur. Bu ikili arasında, TiO_2 yeterince geniş optik bant aralığı, ucuz, zararsız ve bol miktarda bulunması nedeniyle çalışma elektrodunda yaygın olarak kullanılmaktadır. Nanoyapılı TiO_2 (15-30 nm) kullanılarak hazırlanan koloidal akışkan macun (pasta) FTO altlık üzerine serigrafi baskı veya Doktor Blade metoduyla 15-50 μm kalınlığında kaplanmaktadır. Kaplanan filmler genellikle 450-500 $^{\circ}C$ sıcaklıkta sinterleme işlemine tabi tutulup, geçirgen nanoyapı elektrot oluşturulmaktadır. Ardından hazırlanan foto elektrot belirli bir süre boyunca duyarlılaştırıcı boya çözeltisinde bekletilerek duyarlı hale getirilmektedir. Genellikle, mezogözenekli TiO_2 nanopartikül

filmleri, verimli boya adsorpsiyonu için geniş yüzey alanı sağladıkları için fotoanot üretiminde kullanılırlar. Ancak, bunlarla ilişkili belirli sınırlamalar vardır. Bunların bazıları kısa elektron difüzyon uzunluğu (10–35 μm), aşırı yüzey durumları, kusurlar, nanopartiküllerin tane sınırları içinde gerçekleşen tuzaklama ve tuzaktan kurtulma sırasında indüklenen rastgele elektriksel transport şeklinde sıralanabilir (Duan, Yu, Li, Wu, & Xi, 2020; W.-Q. Wu, Xu, Su, & Kuang, 2014). Bu sınırlılıkların minimizasyonu için DSSC fotoanotların iyileştirilmesi hakkında farklı incelemeler yapılmıştır (Atli & Yildiz, 2022; R. Kaur, Kim, et al., 2017; Uğur, Gencer Imer, & Gülcan, 2022). Kaynaklarda fotoanodun modifikasyonu için blokaj ve saçılma tabakası eklenerek arayüzey modifikasyonunun yanı sıra, geleneksel mezogözenekli TiO_2 filmleri metalik anyonla (veya non-metalik katyonla) katkılama, 1B veya 2B nanoyapılarla katkılama, Grafen (Grafen oksit) katkılama, uygun elementlerle doping veya MOF yapılarla katkılama gibi metodlar kullanılmıştır (Atilgan & Yildiz, 2022; Lü et al., 2010; Maheswari & Venkatachalam, 2014; Momeni, 2017). TiO_2 'ye farklı molekül solüsyonları emdirme üzerine yapılan çalışmalarda J ve elektron yaşam ömrü gibi önemli fotovoltaiik parametreleri sınırlayan yüksek rekombinasyon direnci sorunu aşılmaya çalışılmıştır (Uğur, Gencer Imer, Kaya, Karataş, & Gülcan, 2022). Örneğin, Atilgan ve Yildiz, 2022, DSSC için Ni katkılı bir TiO_2 fotoanot kullanarak %6.08'lik bir güç dönüşüm verimliliği (PCE) bildirmiştir (Atilgan & Yildiz, 2022). DSSC için bakır nanotel modifiyeli TiO_2 fotoanot önerilen çalışmada ve %9.44'lük bir verim elde edilmiştir (S. Wang et al., 2019). Cu nanopartikül içeren TiO_2 'nin kütlece %0.3 Cu katkısıyla %8.65'lik verime ulaşılmıştır (Dhonde, Sahu, Murty, Nemala, & Bhargava, 2017). Diğer çalışmada, katkısız DSSC'lere kıyasla Ag katkılı DSSC'lerin verimliliğinde %65.3'lük iyileştirme elde edilmiştir (N. Kaur, Mahajan, et al., 2020). Ayrıca Au-Ag bimetalik implante edilmiş fotoanot ile hassaslaştırıcı boyanın ışık emiliminin arttığı bildirilmiştir (N. Kaur, Bhullar, Singh, & Mahajan, 2020).

Metal elementlerle katkılamanın yanı sıra, grafen (G) (Tang et al., 2018), grafen oksit (GO) (Chen, Chen, & Wang, 2018; C. Y. Lee, Van Le, Kim, & Kim, 2015), karbon nanotüpler (CNT) (D. Y.

Lee et al., 2014; Zhao et al., 2015) gibi karbon bazlı malzemeler, daha iyi elektriksel özellikleri ve geniş yüzey alanı nedeniyle fotoanotu modifiye etmek için umut verici malzemeler olarak kullanılmaktadır. DSSC fotoanotunda CNT ekleyerek yapılan deneysel çalışmanın genel sonucu düşük seri direnç değeri, daha iyi yük enjeksiyonu ve elektronun daha uzun ömrü olarak raporlanmıştır. TiO_2 'ye CNT eklenmesi, hücrenin optimum yeterliliğinin elde edilebileceği temel spektral aralığı artırmıştır (Khoomortezaei, Abdizadeh, & Golobostanfard, 2019). G/ TiO_2 nanokompozitinden yapılmış fotoanotlar kullanılarak hazırlanan DSSC'de grafen katman boyutu ve hücre performansı arası bağlantının araştırıldığı çalışmada, duyarlaştırıcı boya adsorpsiyonu, daha küçük grafen katmanları sayesinde artırılmış ve bu daha büyük güç dönüşüm verimliliğiyle sonuçlanmıştır (Kato et al., 2021).

Hu ve arkadaşları, fotoanot olarak grafit-P25 kompozitleri kullanılan DSSC'lerin performansının, yalnızca P25 kullanılanlar ile karşılaştırıldığında dönüşüm verimliliğinde %30'luk bir iyileşmeyle önemli ölçüde artırıldığını belirlemiştir. Kütlece %0.01 oranında grafit eklendiği durumda J_{SC} değerinde 9.03'ten 12.59 mA/cm^2 'ye artışa ve %5.76'lık dönüşüm verimliliğine ulaşıldığı raporlanmıştır (Hu, Huang, Fang, & Liu, 2011). Sun ve ark. TiO_2 fotoanoduna grafen eklenen DSSC'lerin %4.28'lik PCE gösterdiğini ve bu değer grafen içermeyenlerden %59 daha yüksek olduğunu bildirmiştir (S. Sun, Gao, & Liu, 2010). Sharma ve diğerleri, modifiye G- TiO_2 kullanan ortak-duyarlı güneş hücresinin PCE değerinde %7.35'ten %8.15'e iyileşme olduğunu göstermiştir (Sharma et al., 2013).

Son zamanlarda, MOF'un daha yüksek yüzey alanı (1500–2000 m^2/g) ve daha büyük gözenek boyutu gibi üstün özellikleri nedeniyle, verimli DSSC uygulamalarında fotoanotun boya adsorpsiyon kabiliyetini desteklemek için katkı malzemesi olarak kullanıldığı raporlanmıştır (Bella, Bongiovanni, Kumar, Kulandainathan, & Stephan, 2013; Uğur, Gencer Imer, & Gülcan, 2022). MOF/ TiO_2 arayüzündeki yük transfer dinamiklerinin araştırıldığı çalışmada, $\text{Ru}_3(\text{BTC})_2$ MOF yapı bazlı fotoanodun DSSC için enjeksiyon verimliliğini %86 oranında artırdığını göstermiştir (Ismail, O'Neil, Youssef, & Elfeky, 2019). Eu-MOF

katkılı fotoanot, Kaur ve arkadaşları tarafından daha verimli DSSC için kullanılmış ve Eu-MOF katkılı fotoanotta artan boya adsorpsiyonu nedeniyle aygıtın PCE ve J_{sc} değerinde sırasıyla %80 ve %43 artış bildirilmiştir (R. Kaur, Sharma, Kim, & Deep, 2017). Uğur ve arkadaşları, DSSC'de daha yüksek performans eldesi için MIL-101 katkılı TiO_2 'nin kullanarak, geliştirilen boya tutunma yeteneği sayesinde katkısız pile kıyasla MIL-101 katkısı ile %85 daha fazla verimlilik rapor etmiştir (Uğur, Gencer Imer, & Gülcan, 2022). TiO_2 tabakasının üzerine ince bir ZIF-8 tabakası (2 nm) kaplanıp, ve bu yapı DSSC aygıtında fotoanot olarak kullanılmıştır (Y. Li, Pang, Wang, & Wei, 2011). ZIF-8 kaplı TiO_2 için elde edilen daha yüksek rekombinasyon direnci sayesinde arayüz yükü rekombinasyon reaksiyonları baskılanmış, böylece V_{OC} değeri artmıştır (Shen, Pang, Li, Dou, & Wei, 2018). Artan V_{OC} değerine rağmen ZIF-8 tabakasının kalınlığı arttıkça hem J_{sc} hem de verimde önemli bir azalma rapor edilmiştir. Aynı grup, bu yapıda J_{sc} ve PCE üzerindeki olumsuz etkinin azaltmak için yeni yöntem önermiştir. Bu yöntemde, MOF tabakasının TiO_2 'nin (TiO_2 /ZIF-8/Boya) duyarlılaştırılmasından önce ve sonra (TiO_2 /Boya/ZIF-8/Boya) uygulandığı iki farklı tip fotoanot geliştirilmiştir. UV-görünür bölge spektrumlarına göre, ZIF-8 varlığında artan yüzey alanı nedeniyle yüklenen boya miktarında artış gözlenmiştir. Bu, fotoanodun ışık hasadı ve yük toplama verimliliğinde iyileşme sağlamıştır (Y. Li, Chen, Sun, Dou, & Wei, 2014). MIL-125 MOF yapının DSSC'lerde mezogözenekli tabaka olarak uygulanan TiO_2 nanopartiküllerini sentezlemek için kullanıldığı benzer bir çalışma bildirilmiştir (Dou, Li, Xie, Ding, & Wei, 2016). Herhangi bir şablon molekülü kullanmak yerine MIL-125'in basit ayrışması yapılarak, sadece P25'li aygıtlara kıyasla MIL-125 içeren TiO_2 tabakasına sahip aygıtlarda J_{sc} değerindeki iyileşmeye bağlı olarak %7'nin üzerinde verimlilik rapor edilmiştir. Bu verim artışı daha uzun elektron yaşam ömrüne, yüksek boya yükleme kapasitesine, ve daha iyi yük toplama verimliliğine atfedilmiştir (Dou et al., 2016).

Modifiye TiO_2 çalışma elektrodu bileşenli aygıtların yanı sıra, literatürde modifiye ZnO tabanlı fotoanotlarla oluşturulan DSSC'lerin de fotovoltaiik özellikleri ve verimliliğindeki değişim

araştırılmıştır (Ahmadi, Kalae, Moradi, Nosratinia, & Abdouss, 2022; AlHammad, 2021; Y. F. Li, Sun, & Wei, 2016; Zhang, Li, Fu, Li, & Yin, 2020). Örneğin, fotoanot olarak ZnO nanotel dizileri kullanılarak oluşturulan DSSC'lerin daha fazla boyayı tutabildiği, hızlı birikim yollarıyla fotostimülasyonlu aktif bölgeler sunabildiği ve dolayısıyla artan güç dönüşüm verimliliği bildirilmiştir (Kim, Gopi, Srinivasa Rao, Punnoose, & Kim, 2016). Zhu ve meslektaşları tarafından harmanlanmış bir ZnO nanorod-nanosheets (NR-NS) mimarisi tasarlanmıştır. Bir çinko ortamında, DSSC'ler için iki aşamalı bir hidrotermal büyüme tekniği kullanılarak oluşturulan tabanda, uzun nanorodlar omurga görevi görürken, nanosheets ince dallar olarak işlev görür. Bu DSSC için fotoanodun daha uyarlanabilir olmasını teşvik etmiştir (S. Zhu et al., 2014). 2012'de Kundu ve arkadaşları çinko bazlı bir MOF'un kalsinasyonu yoluyla ZnO sentezini incelemiştir (Kundu, Sahoo, & Banerjee, 2012). Bu çalışmada organik ligandın anyonlarındaki değişimin kalsine edilmiş ürünün morfolojisini değiştirdiği rapor edilmiştir. Ayrıca, ZnO kristallerinin şekli farklı kalsinasyon ortamları (N₂ veya hava altında) uygulanarak kontrol edilmiştir. Cl⁻ ve Br⁻'den oluşan öncüllerden türetilen ZnO mikro yapıları, DSSC'lerde sırasıyla %0.14 ve %0.15 verimlilik göstermiştir (Kundu et al., 2012).

Benzer bir çalışma Li ve ark. (2014) tarafından bildirilmiş; burada MOF-5 (tereftalat ligandı ile) türetilen ZnO parçacıkları fotoanodun saçılma tabakası olarak kullanılmıştır (Y. Li, Che, Sun, Dou, & Wei, 2014). ZnO saçılma tabakası, daha sonra ZnO mezogözenekli tabaka üzerine biriktirilen MOF-5'in kalsinasyonu ile elde edilmiştir. Daha fazla iyileştirme için, bunun üzerine ZIF-8 biriktirildiği rapor edilmiştir. Saçılma tabakasının biriktirilmesinden sonra yük rekombinasyonu için yeni yollardaki artış, rekombinasyon direncini düşürmüştür. Işık hasadı verimliliğindeki belirgin iyileşmenin nedeni, aygıtın çift katmanlı yapısı sayesinde yük rekombinasyonu kayıplarının neden olduğu olumsuz etkinin azaltılmasına atfedilmiştir. Modifikasyonlardan sonra, saf ZnO mezogözenekli tabakaya sahip aygıtla kıyaslandığında güç dönüşüm verimliliğinin %16.5 oranında arttığı bildirilmiştir.

Burada, DSSC'de hücrenin etkinliğini ve ömrünü artırmak için fotoanot bileşeni özelinde kullanılan farklı modifikasyonlara dair yapılan güncel çalışmalardan bir kısmı sunulmuştur. Aslında DSSC'nin diğer önemli bileşenlerinde de iyileştirmeler yapmak mümkündür ve bu sayede aygıtın genel güç dönüşüm verimi artırılabilir. Takip eden kısımda bu konuda bazı alternatifler yer almaktadır.

5.1. DSSC performansı iyileştirme alternatifleri

DSSC'nin verimliliğini ve kararlılığını artırmak için araştırmacıların temel üretim yöntemlerine, malzemelerine ve bu bileşenlerin işleyişine odaklanmaları gerekir. Burada, DSSC'nin performansını ve verimliliğini artırmak için farklı alternatifler sıralanmaktadır:

1.DSSC'nin verimliliğini artırmak için, oksitlenmiş boya elektron enjeksiyonundan sonra orijinal temel durumuna hızlıca indirgenmelidir. Başka bir deyişle, rejenerasyon süreci boya oksidasyon sürecine kıyasla hızlı olmalıdır.

2.Redoks aracı potansiyeli (I^- iyon) maksimum fotovoltaja güçlü bir şekilde etki ettiğinden, redoks çiftinin potansiyeli boyanın temel durumuna yakın olmalıdır. Bu uygulanabilir tekrarlanan süreci gerçekleştirmek için yaklaşık 210 mV potansiyel fark gereklidir.

3. TiO_2 nanopartiküllerinin gözenekliliği artırılarak çalışma elektrotunda maksimum boya emilimi sağlanmalıdır.

4.İletken cam levha üzerine TiO_2 nanopartikül ince film blokaj tabakası biriktirilerek, böylece elektrolitin FTO ile doğrudan teması engellenip karanlık akımın oluşumu kısıtlanmalıdır.

5. TiO_2 nanopartiküllerinin bir elektrolit çözücü molekülleri tarafından yakalanması önlenmelidir. Nanoporöz TiO_2 çalışma elektrodunun tüm yüzeyi duyarlılaştırıcı tarafından düzgün bir şekilde kaplanmaması durumunda boya yüklenmeyen TiO_2 nanopartikülleri elektrolit çözücü tarafından yakalanabilir. Bu nedenle, WE duyarlılaştırıcı tarafından düzgün bir şekilde duyarlılaştırılmalıdır.

6.Eş-duyarlılaştırma, DSSC'nin performansını optimize etmenin bir başka yoludur. Farklı soğurma spektrum aralıklarına sahip iki veya daha fazla duyarlılaştırıcı boya karıştırılarak elde edilen kokteyl boya yardımıyla, duyarlılaştırıcının spektral tepki aralığı genişletilmelidir.

7.Elektrot üretiminde nanotüpler, karbon nanotelleri, grafen ve metal organik kafes yapı gibi farklı malzemelerin kullanımı, sıvı elektrolit yerine jel elektrolit veya yarı-katı elektrolitlerin kullanılmalıdır.

8.WE'ye anodizasyon ön işlemi ($TiCl_4$ işlemi gibi farklı ön-son işlemler) yapılması, farklı fiziksel özelliklere sahip CE'ler kullanımı ve hidrofobik duyarlılaştırıcıların geliştirilmesi gibi yöntemlerle de bu hücrelerin performansı ve verimliliği iyileştirilebilir.

6. Sonuç ve Gelecek Çalışmalar İçin Öneriler

Bu değerlendirme, DSSC'nin işleyişini iyileştirmek için yapılan fotoanot çalışmaları hakkında detaylı bir özet sunmaktadır. Yapılan çalışmalar literatüre DSSC'nin performansında ikna edici gelişmeler kazandırmıştır. DSSC'ler maliyet yeterliliği ve artan dönüşüm verimliliği nedeniyle insanlığın kaderinde önem kazanmaktadır. Şu an itibarıyla, tek bağlantı noktalı DSSC ilk kez %13'ün üzerinde dönüşüm verimliliği ulaşmıştır. Mevcut ilerleme hızı devam ederse, tam ticarileşmeye ulaşıldığında üretkenlik seviyeleri %15'e artmalıdır. Yeni becerilerin yanı sıra, en zor kısım aygıtın gücünü artırmak ve maliyet masraflarını düşürmektir.

Ayrıca, uzun bir süre boyunca hücre kararlılığını iyileştirmek gelecekte ele alınması gereken önemli bir konudur. DSSC'lerde kararsızlığın en yaygın nedeni sıvı elektrolitin sızması ve Pt katalizörünün bozulmasıdır. Sızıntıları önlemenin iyi bir yolu, sıvı elektrolit yerine katı hal taşıma malzemesi kullanmaktır.

Aygıt performansını iyileştirmenin yanısıra malzeme ve montaj maliyetlerini düşürmek esastır. Duyarlılaştırıcı boya önemli ve en maliyetli bileşen olup, toksik ham maddeler kullanır ve karmaşık bir işlem gerektirir. Doğal boyalar genellikle erişilebilir, planlanması

kolay, mali açıdan uygun maliyetli, zararsız, çevre dostu ve tamamen biyolojik olarak parçalanabilir. Çeşitli doğal boya ve stabilizatörler mevcuttur; uygun bir doğal boya kararı alınarak ve bir stabilizatörle birlikte duyarlı hale getirilerek verimlilik daha da artırılabilir.

DSSC'de her bileşen için daha fazla iyileştirme ihtiyacı vardır. Geliştirme döngüsü nedeniyle, DSSC'ler hala emekleme aşamasındadır ve performanslarını, etkinliklerini artırmak için yeni çalışmalara ihtiyaç vardır. Bu zorluklar, büyük ölçekli üretimi ve DSSC inovasyonunun yaygın olarak benimsenmesini engellemektedir. Aslında, DSSC şeffaf yapısı nedeniyle entegre fotovoltaiklerin yapımında kullanılmak üzere gerçekten iyi bir potansiyele sahiptir. DSSC yeniliğinin, parasal gelişme, enerji güvenliği ve koşul güvence çevre koruması dahil olmak üzere gelecekteki enerji ihtiyacını karşılamak için kullanılabileceği öngörülmektedir. Bu amaçlara uygun yarı iletkenlerin, boyaların ve elektrolitlerin bulunması için nicel araçların geliştirilmesi gerekmektedir.

Sürekli iyileştirmelerin kümülatif etkisi DSSC'nin genel güç dönüşüm verimliliğini önemli ölçüde artırabilir. Sahip olduğu potansiyeli pratikte gösteremediğinden henüz DSSC çalışmaları erken aşamadadır ve mükemmel bir etkinliğe ulaşmak için önemli miktarda çalışma gereklidir. DSSC'lerin maksimum elektrik dönüşüm verimliliği geleneksel silikon tabanlı güneş hücrelerine kıyasla hala zayıftır. Ayrıca, DSSC'nin ömrü gelişimi üzerinde bir diğer kısıtlamadır; bu nedenle, DSSC'nin verimliliğini ve ömrünü iyileştirmek için araştırmalar gerekli olacaktır.

Teşekkür: Çalışma boyunca kıymetli desteklerinden dolayı Av. Mehmet İMER'e çok teşekkür ederim.

Kaynakça

Ahmadi, S. A. R., Kalaei, M. R., Moradi, O., Nosratinia, F., & Abdouss, M. (2022). Synthesis of novel zeolitic imidazolate framework (ZIF-67)–zinc oxide (ZnO) nanocomposite (ZnO@ ZIF-67) and potential adsorption of pharmaceutical (tetracycline (TCC)) from water. *Journal of Molecular Structure*, 1251, 132013.

AlHammad, M. S. (2021). A Hybrid Photodiode for Solar Tracking Systems. *Silicon*, 13(1), 243–250. <https://doi.org/10.1007/s12633-020-00423-3>

Altobello, S., Bignozzi, C. A., Caramori, S., Larramona, G., Quici, S., Marzanni, G., & Lakhmiri, R. (2004). Sensitization of TiO₂ with ruthenium complexes containing boronic acid functions. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 166(1–3), 91–98.

Atilgan, A., & Yildiz, A. (2022). Ni-doped TiO₂/TiO₂ homojunction photoanodes for efficient dye-sensitized solar cells. *International Journal of Energy Research*, 46(10), 14558–14569.

Atli, A. (2023). *Fabrication and analysis of a dye sensitized solar cell: Hydrothermally grown hybrid photoanode and opaque pt counter electrode*. Yıldırım Beyazıt Üniversitesi, Ankara , Türkiye.

Atli, A., & Yildiz, A. (2022). Hybrid TiO₂ Nanorods Combined with a Buffer Layer for Dye-Sensitized Solar Cells. *Applied Solar Energy*, 58(3), 323–329. <https://doi.org/10.3103/S0003701X22030045>

Bella, F., Bongiovanni, R., Kumar, R. S., Kulandainathan, M. A., & Stephan, A. M. (2013). Light cured networks containing metal organic frameworks as efficient and durable polymer electrolytes for

dye-sensitized solar cells. *Journal of Materials Chemistry A*, 1(32), 9033–9036. <https://doi.org/10.1039/C3TA12135F>

Bessho, T., Constable, E. C., Graetzel, M., Hernandez Redondo, A., Housecroft, C. E., Kylberg, W., ... Schaffner, S. (2008). An element of surprise—efficient copper-functionalized dye-sensitized solar cells. *Chemical Communications*, (32), 3717–3719. h

Boschloo, G., & Hagfeldt, A. (2009). Characteristics of the Iodide/Triiodide Redox Mediator in Dye-Sensitized Solar Cells. *Accounts of Chemical Reserach*, 42(11), 1819–1826. <https://doi.org/10.1021/ar900138m>

Chen, L., Chen, W., & Wang, E. (2018). Graphene with cobalt oxide and tungsten carbide as a low-cost counter electrode catalyst applied in Pt-free dye-sensitized solar cells. *Journal of Power Sources*, 380, 18–25. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2017.11.057>

Chiba, Y., Islam, A., Watanabe, Y., Komiya, R., Koide, N., & Han, L. (2006). Dye-Sensitized Solar Cells with Conversion Efficiency of 11.1%. *Japanese Journal of Applied Physics*, 45(7L), L638. <https://doi.org/10.1143/JJAP.45.L638>

Corma, A., Atienzar, P., García, H., & Chane-Ching, J.-Y. (2004). Hierarchically mesostructured doped CeO₂ with potential for solar-cell use. *Nature Materials*, 3(6), 394–397.

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.

Dhonde, M., Sahu, K., Murty, V. V. S., Nemala, S. S., & Bhargava, P. (2017). Surface plasmon resonance effect of Cu nanoparticles in a dye sensitized solar cell. *Electrochimica Acta*, 249, 89–95. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2017.07.187>

Dou, J., Li, Y., Xie, F., Ding, X., & Wei, M. (2016). Metal–Organic Framework Derived Hierarchical Porous Anatase TiO₂ as a Photoanode for Dye-Sensitized Solar Cell. *Crystal Growth & Design*, 16(1), 121–125. <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.5b01003>

Duan, C., Yu, Y., Li, F., Wu, Y., & Xi, H. (2020). Ultrafast room-temperature synthesis of hierarchically porous metal–organic frameworks with high space–time yields. *CrystEngComm*, 22(15), 2675–2680.

Fung, A. K. M., Chiu, B. K. W., & Lam, M. H. W. (2003). Surface modification of TiO₂ by a ruthenium (II) polypyridyl complex via silyl-linkage for the sensitized photocatalytic degradation of carbon tetrachloride by visible irradiation. *Water Research*, 37(8), 1939–1947.

Gencer Imer, A., Syan, R. H. B., Gülcan, M., Ocak, Y. S., & Tombak, A. (2018). The novel pyridine based symmetrical Schiff base ligand and its transition metal complexes: synthesis, spectral definitions and application in dye sensitized solar cells (DSSCs). *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 29(2), 898–905.

Grant, F. A. (1959). Properties of rutile (titanium dioxide). *Reviews of Modern Physics*, 31(3), 646.

Grätzel, M. (2001). Photoelectrochemical cells. *Nature*, 414(6861), 338–344. <https://doi.org/10.1038/35104607>

Hagberg, D. P., Yum, J.-H., Lee, H., De Angelis, F., Marinado, T., Karlsson, K. M., ... Grätzel, M. (2008). Molecular engineering of organic sensitizers for dye-sensitized solar cell applications. *Journal of the American Chemical Society*, 130(19), 6259–6266.

Hamann, T. W., & Ondersma, J. W. (2011). Dye-sensitized solar cell redox shuttles. *Energy & Environmental Science*, 4(2), 370–381.

He, Y., & Wang, W. (2021). ZIF-8 and three-dimensional graphene network assisted DSSCs with high performances. *Journal of Solid State Chemistry*, 296, 121992.

Hu, X., Huang, K., Fang, D., & Liu, S. (2011). Enhanced performances of dye-sensitized solar cells based on graphite–TiO₂ composites. *Materials Science and Engineering: B*, 176(5), 431–435.

Ismail, F. M., O’Neil, D., Youssef, T., & Elfeky, S. A. (2019). Ultrafast laser dynamics of metal organic frameworks/ TiO₂ nano-arrays hybrid composites for energy conversion applications. *Journal of Energy Chemistry*, 29, 88–94.

K. Nazeeruddin, M., Péchy, P., & Grätzel, M. (1997). Efficient panchromatic sensitization of nanocrystalline TiO₂ films by a black dye based on a trithiocyanato–ruthenium complex. *Chemical Communications*, (18), 1705–1706.

Kakiage, K., Aoyama, Y., Yano, T., Oya, K., Fujisawa, J., & 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.

Kato, K., Puthirath, A. B., Mojibpour, A., Miroshnikov, M., Satapathy, S., Thangavel, N. K., ... John, G. (2021). Light-assisted rechargeable lithium batteries: organic molecules for simultaneous energy harvesting and storage. *Nano Letters*, 21(2), 907–913.

Kaur, N., Bhullar, V., Singh, D. P., & Mahajan, A. (2020). Bimetallic implanted plasmonic photoanodes for TiO₂ sensitized third generation solar cells. *Scientific Reports*, 10(1), 7657.

Kaur, N., Mahajan, A., Bhullar, V., Singh, D. P., Saxena, V., Debnath, A. K., ... Chopra, S. (2020). Ag ion implanted TiO₂ photoanodes for fabrication of highly efficient and economical plasmonic dye sensitized solar cells. *Chemical Physics Letters*, 740, 137070.

Kaur, R., Kim, K.-H., & Deep, A. (2017). A convenient electrolytic assembly of graphene-MOF composite thin film and its photoanodic application. *Applied Surface Science*, 396, 1303–1309.

Kaur, R., Sharma, A. L., Kim, K.-H., & Deep, A. (2017). A novel CdTe/Eu-MOF photoanode for application in quantum dot-sensitized solar cell to improve power conversion efficiency. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 53, 77–81.

Kaya, E., Gencer Imer, A., & Gülcan, M. (2025). Metal organic framework (MOF-5) and graphene oxide (GO) derived photoanodes for an efficient dye-sensitized solar cells. *Journal of Power Sources*, 626, 235811. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2024.235811>

Khoomortezaei, S., Abdizadeh, H., & Golobostanfard, M. R. (2019). Triple layer heterojunction WO₃/BiVO₄/BiFeO₃ porous

photoanode for efficient photoelectrochemical water splitting. *ACS Applied Energy Materials*, 2(9), 6428–6439.

Kim, S. K., Gopi, C. V. V. M., Srinivasa Rao, S., Punnoose, D., & Kim, H. J. (2016). Highly efficient yttrium-doped ZnO nanorods for quantum dot-sensitized solar cells. *Applied Surface Science*, 365, 136–142. <https://doi.org/10.1016/J.APSUSC.2016.01.043>

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.

Kundu, T., Sahoo, S. C., & Banerjee, R. (2012). Solid-State Thermolysis of Anion Induced Metal–Organic Frameworks to ZnO Microparticles with Predefined Morphologies: Facile Synthesis and Solar Cell Studies. *Crystal Growth & Design*, 12(5), 2572–2578.

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.

Lee, C. Y., Van Le, Q., Kim, C., & Kim, S. Y. (2015). Use of silane-functionalized graphene oxide in organic photovoltaic cells and organic light-emitting diodes. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 17(14), 9369–9374.

Lee, D. Y., Shin, C. Y., Yoon, S. J., Lee, H. Y., Lee, W., Shrestha, N. K., ... Han, S.-H. (2014). Enhanced photovoltaic performance of Cu-based metal-organic frameworks sensitized solar cell by addition of carbon nanotubes. *Scientific Reports*, 4(1), 3930.

Li, G. R., Song, J., Pan, G. L., & Gao, X. P. (2011). Highly Pt-like electrocatalytic activity of transition metal nitrides for dye-sensitized solar cells. *Energy & Environmental Science*, 4(5), 1680–1683.

Li, Y., Che, Z., Sun, X., Dou, J., & Wei, M. (2014). Metal–organic framework derived hierarchical ZnO parallelepipeds as an efficient scattering layer in dye-sensitized solar cells. *Chemical Communications*, 50(68), 9769–9772.

Li, Y., Chen, C., Sun, X., Dou, J., & Wei, M. (2014). Metal–Organic Frameworks at Interfaces in Dye-Sensitized Solar Cells. *ChemSusChem*, 7(9), 2469–2472.

Li, Y. F., Sun, Q. Q., & Wei, M. D. (2016). *Application of Metal-Organic Frameworks in Dye-Sensitized Solar Cells. Journal of Electrochemistry*, 22.

Li, Y., Pang, A., Wang, C., & Wei, M. (2011). Metal–organic frameworks: promising materials for improving the open circuit voltage of dye-sensitized solar cells. *Journal of Materials Chemistry*, 21(43), 17259–17264. <https://doi.org/10.1039/C1JM12754C>

Linfort, C. L., Richardson, P., McCall, K. L., Durrant, J. R., Morandeira, A., & Robertson, N. (2011). A nickel-complex sensitizer for dye-sensitised solar cells. *Solar Energy*, 85(6), 1195–1203. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.solener.2011.02.023>

Lü, X., Mou, X., Wu, J., Zhang, D., Zhang, L., Huang, F., ... Huang, S. (2010). Improved-performance dye-sensitized solar cells using Nb-doped TiO₂ electrodes: efficient electron injection and transfer. *Advanced Functional Materials*, 20(3), 509–515.

Maheswari, D., & Venkatachalam, P. (2014). Fabrication of high efficiency dye-sensitized solar cell with zirconia-doped TiO₂ nanoparticle and nanowire composite photoanode film. *Australian Journal of Chemistry*, 68(6), 881–888.

Mathew, S., Yella, A., Gao, P., Humphry-Baker, R., Curchod, B. F. E., Ashari-Astani, N., ... Grätzel, M. (2014). Dye-sensitized solar cells with 13% efficiency achieved through the molecular engineering of porphyrin sensitizers. *Nature Chemistry*, 6(3), 242–247.

Mehmood, U., Rahman, S., Harrabi, K., Hussein, I. A., & Reddy, B. V. S. (2014). Recent advances in dye sensitized solar cells. *Advances in Materials Science and Engineering*, 2014(1), 974782.

Momeni, M. M. (2017). Dye-sensitized solar cells based on Cr-doped TiO₂ nanotube photoanodes. *Rare Metals*, 36(11), 865–871.

Nazeeruddin, M K, Kay, A., Rodicio, I., Humphry-Baker, R., Mueller, E., Liska, P., ... Graetzel, 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, Md K, Baranoff, E., & Grätzel, M. (2011). Dye-sensitized solar cells: A brief overview. *Solar Energy*, 85(6), 1172–1178.

Neale, N. R., Kopidakis, N., Van De Lagemaat, J., Grätzel, M., & Frank, A. J. (2005). Effect of a coadsorbent on the performance of dye-sensitized TiO₂ solar cells: shielding versus band-edge

movement. *The Journal of Physical Chemistry B*, 109(49), 23183–23189.

O'Regan, B., & Grätzel, M. (1991). A low-cost, high-efficiency solar cell based on dye-sensitized colloidal TiO₂ films. *Nature*, 353(6346), 737–740. <https://doi.org/10.1038/353737a0>

Ozel, K., Atilgan, A., & Yildiz, A. (2024). Multi-layered blocking layers for dye sensitized solar cells. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 448, 115297.

Peng, S., Shi, J., Pei, J., Liang, Y., Cheng, F., Liang, J., & Chen, J. (2009). Ni_{1-x} Pt_x (x= 0–0.08) films as the photocathode of dye-sensitized solar cells with high efficiency. *Nano Research*, 2, 484–492.

Roberts, M. W., Thomas, J. M., & Bickley, R. I. (1978). Photo-induced reactivity at oxide surfaces.

Sayama, K., Sugihara, H., & Arakawa, H. (1998). Photoelectrochemical properties of a porous Nb₂O₅ electrode sensitized by a ruthenium dye. *Chemistry of Materials*, 10(12), 3825–3832.

Sharma, G. D., Daphnomili, D., Gupta, K. S. V, Gayathri, T., Singh, S. P., Angaridis, P. A., ... Coutsolelos, A. G. (2013). Enhancement of power conversion efficiency of dye-sensitized solar cells by co-sensitization of zinc-porphyrin and thiocyanate-free ruthenium (II)-terpyridine dyes and graphene modified TiO₂ photoanode. *Rsc Advances*, 3(44), 22412–22420.

Shen, D., Pang, A., Li, Y., Dou, J., & Wei, M. (2018). Metal–organic frameworks at interfaces of hybrid perovskite solar cells for

enhanced photovoltaic properties. *Chemical Communications*, 54(10), 1253–1256. <https://doi.org/10.1039/C7CC09452C>

Shin, S. S., Kim, J. S., Suk, J. H., Lee, K. D., Kim, D. W., Park, J. H., ... Kim, J. Y. (2013). Improved Quantum Efficiency of Highly Efficient Perovskite BaSnO₃-Based Dye-Sensitized Solar Cells. *ACS Nano*, 7(2), 1027–1035. <https://doi.org/10.1021/nn305341x>

Snaith, H. J. (2010). Estimating the maximum attainable efficiency in dye-sensitized solar cells. *Advanced Functional Materials*, 20(1), 13–19.

Sun, S., Gao, L., & Liu, Y. (2010). Enhanced dye-sensitized solar cell using graphene-TiO₂ photoanode prepared by heterogeneous coagulation. *Applied Physics Letters*, 96(8), 083113–083116.

Sun, X., Dou, J., Xie, F., Li, Y., & Wei, M. (2014). One-step preparation of mirror-like NiS nanosheets on ITO for the efficient counter electrode of dye-sensitized solar cells. *Chemical Communications*, 50(69), 9869–9871.

Tan, B., Toman, E., Li, Y., & Wu, Y. (2007). Zinc Stannate (Zn₂SnO₄) Dye-Sensitized Solar Cells. *Journal of the American Chemical Society*, 129(14), 4162–4163. <https://doi.org/10.1021/ja070804f>

Tang, B., Yu, H., Peng, H., Wang, Z., Li, S., Ma, T., & Huang, W. (2018). Graphene based photoanode for DSSCs with high performances. *RSC Advances*, 8(51), 29220–29227.

Tennakone, K., Kumara, G. R. R. A., Kottegoda, I. R. M., & Perera, V. P. S. (1999). An efficient dye-sensitized

photoelectrochemical solar cell made from oxides of tin and zinc. *Chemical Communications*, (1), 15–16.

Thomas, S., Deepak, T. G., Anjusree, G. S., Arun, T. A., Nair, S. V., & Nair, A. S. (2014). A review on counter electrode materials in dye-sensitized solar cells. *Journal of Materials Chemistry A*, 2(13), 4474–4490. <https://doi.org/10.1039/C3TA13374E>

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.

Uğur, A., Gencer Imer, A., & Gülcan, M. (2022). Enhancement in the photovoltaic efficiency of dye-sensitized solar cell by doping TiO₂ with MIL-101 MOF structure. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 150, 106951.

Uğur, A., Gencer Imer, A., Kaya, E., Karataş, Y., & Gülcan, M. (2022). Improved efficiency in dye sensitized solar cell (DSSC) by nano-MIL-101(Cr) impregnated photoanode. *Zeitschrift Für Naturforschung A*, 77(1), 93–104. <https://doi.org/10.1515/zna-2021-0175>

Wang, H., & Hu, Y. H. (2012). Graphene as a counter electrode material for dye-sensitized solar cells. *Energy & Environmental Science*, 5(8), 8182–8188. <https://doi.org/10.1039/C2EE21905K>

Wang, S., Ye, B., An, C., Wang, J., Li, Q., Guo, H., & Zhang, J. (2019). Exploring the coordination effect of GO@MOF-5 as

catalyst on thermal decomposition of ammonium perchlorate. *Nanoscale Research Letters*, 14(1), 345.

Wu, M., Lin, X., Wang, T., Qiu, J., & Ma, T. (2011). Low-cost dye-sensitized solar cell based on nine kinds of carbon counter electrodes. *Energy & Environmental Science*, 4(6), 2308–2315.

Wu, W.-Q., Xu, Y.-F., Su, C.-Y., & Kuang, D.-B. (2014). Ultra-long anatase TiO₂ nanowire arrays with multi-layered configuration on FTO glass for high-efficiency dye-sensitized solar cells. *Energy & Environmental Science*, 7(2), 644–649.

Xie, Y., & Hamann, T. W. (2013). Fast Low-Spin Cobalt Complex Redox Shuttles for Dye-Sensitized Solar Cells. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 4(2), 328–332. <https://doi.org/10.1021/jz301934e>

Zaban, A., Ferrere, S., & Gregg, B. A. (1998). Relative energetics at the semiconductor/sensitizing dye/electrolyte interface. *The Journal of Physical Chemistry B*, 102(2), 452–460.

Zhang, Y.-N., Li, B., Fu, L., Li, Q., & Yin, L.-W. (2020). MOF-derived ZnO as electron transport layer for improving light harvesting and electron extraction efficiency in perovskite solar cells. *Electrochimica Acta*, 330, 135280.

Zhao, Y. L., Yao, D. S., Song, C. B., Zhu, L., Song, J., Gu, X. Q., & Qiang, Y. H. (2015). CNT–G–TiO₂ layer as a bridge linking TiO₂ nanotube arrays and substrates for efficient dye-sensitized solar cells. *RSC Advances*, 5(54), 43805–43809.

Zhou, Q., Ji, Z., Hu, B. Bin, Chen, C., Zhao, L., & Wang, C. (2007). Low resistivity transparent conducting CdO thin films

deposited by DC reactive magnetron sputtering at room temperature. *Materials Letters*, 61(2), 531–534.

Zhu, G., Pan, L., Lu, T., Xu, T., & Sun, Z. (2011). Electrophoretic deposition of reduced graphene-carbon nanotubes composite films as counter electrodes of dye-sensitized solar cells. *Journal of Materials Chemistry*, 21(38), 14869–14875.

Zhu, S., Shan, L., Tian, X., Zheng, X., Sun, D., Liu, X., ... Zhou, Z. (2014). Hydrothermal synthesis of oriented ZnO nanorod–nanosheets hierarchical architecture on zinc foil as flexible photoanodes for dye-sensitized solar cells. *Ceramics International*, 40(8), 11663–11670.

BÖLÜM III

Organik Molekül (PR) Arakatmanlı Hibrit Aygıtın I-V ve C-V Karakteristikleri

A GENCER İMER¹

1. Giriş

Organik bileşenli elektronik, optoelektronik ve fotonik aygıtlar üzerine yapılan çalışmalar, Alferov'un geliştirdiği heteroyapı optoelektronik aygıt ile 2000 yılında Nobel ödülü almasından sonra ivme kazanmıştır (Alferov, 2001). Organik yarıiletkenler geniş HOMO-LUMO aralığı, nispeten daha düşük sentez maliyetleri, geniş yüzey alanlarına uygulanabilirlik ve esnek alttaş üzerine kaplanabilirlik gibi önemli avantajları nedeniyle inorganik yarıiletken muadillerine alternatif olarak optoelektronik alanında kendilerine yer bulmuştur (Gencer Imer, Korkut, et al., 2019; Kocyigit et al., 2023; Tataroglu et al., 2018). Bunun yanısıra organik yarıiletkenlerin stabilite, düşük iletkenlik, düşük mobilité gibi bazı dezavantajları mevcuttur. Bu yüzden, son zamanlarda yapılan çalışmalarda amaca uygun olarak organik, inorganik veya her ikisini de içeren katmanlı hibrit yapılar kullanılmaktadır. Bu

¹ Prof. Dr., Arife Gencer İmer, Van Yüzüncü Yıl Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Van/Türkiye, Orcid: 0000-0002-8147-9169, gencerimerarife@gmail.com

tarzda üretilen organik/inorganik hibrit yapılar fotodiyot (Gencer Imer et al., 2023; Karadeniz et al., 2022; Karataş & Berk, 2022), güneş pili (Brown et al., 2011; İkrâm et al., 2015), ışık yayan diyot (Liu et al., 2010) gibi farklı aygıt tasarımlarında kullanılmaktadır. Bu hibrit aygıtlarda entegre cihazın performansını iyileştirmek, modifiye etmek ya da optimize etmek için her iki yarı iletkenin avantajlarından faydalandığı rapor edilmiştir.

Literatürde farklı metaller kullanılarak metal/yarıiletken aygıtların karakteristik parametrelerine ilişkin birçok çalışma bildirilmiştir (Çaldıran et al., 2021; Deniz et al., 2022; Imer & Ocak, 2016; Sevgili et al., 2020; Yılmaz et al., 2020). Bu çalışmalar, engel yüksekliğinin üst kontak metalin iş fonksiyonuna büyük ölçüde bağlı olduğunu ve Φ_b değerinin farklı kontak metalleri kullanılarak değişebileceğini bildirmiştir. Ek olarak, doğrultma oranının da metal kontak tipinden etkilendiği için üst metal değiştirilerek kontrol edildiğini bildirilmiştir (Çaldıran, 2021; Deniz et al., 2018; Omarbli & Gencer Imer, 2023). MS aygıtın engel yüksekliği değerini modüle etmenin alternatif bir yolu, fabrikasyon sırasında üst kontak metali ile yarı iletken altlık malzeme arasına yerleştirilen arayüzey tabakası tarafından yarı iletken yüzeyin passivasyonudur (Baturay et al., 2016; Gencer Imer et al., 2018; Mahmood et al., 2021; Omarbli & Gencer Imer, 2023; Tombak et al., 2018; Ugur et al., 2015). Aygıt yapısında arayüz tabakası olarak doğal oksit veya fonksiyonel organik malzeme kullanılması, daha yüksek Φ_b değeri ve hibrit cihazın daha iyi performansı ile sonuçlanmıştır. Bu amaçla, çeşitli arayüzey malzemeleri kullanılarak Φ_b değerinin kontrol edilmesi üzerine birçok çalışma yapılmıştır (Gencer Imer, Dere, et al., 2019; Karabulut et al., 2022; Karadeniz et al., 2022; Sevgili et al., 2019). Dolayısıyla, hem üst metalinin iş fonksiyonu hem de üst metal ile yarı iletken arasındaki arayüzey tabakasının varlığının, üretilen cihazın mikroelektronik parametrelerini modüle ettiği/değiştirdiği açıktır.

Bu bağlamda, çalışmanın birincil amacı, organik/inorganik malzemelerin farklı özelliklerinden yararlanarak, organik boya phenol-red (PR) arayüzey katmanı içeren hibrit aygıtların üretilmesidir. İkincil amaç ise, arayüzey bileşeni olarak kullanılan

organik boyanın elektronik aygıtın önemli parametreleri olan idealite faktörü (n), engel yüksekliği (Φ_b) ve seri direnç (R_s) gibi mikroelektronik parametrelere etkisini incelemektir. Aygıtın mikroelektronik parametrelerini ve performansını iyileştirmek için, metal/yarıiletken arayüzeyde olası boş bağların pasivasyonunun sağlanması amacıyla organik molekül PR arakatman olarak kullanılmıştır. Bu çalışmada, PR arayüzeyin Ni/PR/p-Si/Al hibrit aygıtın mikroelektronik parametrelere etkisini araştırmak için karanlık ortamda akım-gerilim (I-V), kapasitans-gerilim (C-V) ölçümleri alınmış, ve arayüzey varlığının mikroelektronik parametrelere etkisi incelenmiştir.

2. Yöntem

Çalışmada kullanılan PR; ($C_{19}H_{14}O_5S$ moleküler ağırlığı 354.38 g/mol) ve temizleme işleminde kullanılan tüm kimyasallar Sigma-Aldrich firmasından temin edildi. Hibrit aygıt tasarımında kullanılan p-Si ((100); 1-10 Ω -cm; University Wafer) altlıklar RCA işlemi ile istenmeyen organik/inorganik safsızlıklarından arındırıldı. Ohmik kontak oluşturmak için önceden temizlenmiş p-Si altlığın mat yüzeyine yüksek saflıkta Al metali termal buharlaştırma ile kaplandı, ardından kuartz tüp fırında 570 °C sıcaklıkta 3 dk tavlandı. Daha sonra, PR molekülün 10^{-2} M'lık metanol çözeltisi Si altlığın parlak yüzeyine dönel kaplama yöntemi ile (1000 rpm, 1 dk) ince bir film şeklinde kaplandı. Sonra arayüzey üzerine termal buharlaştırma yardımıyla maske yardımıyla Ni metali kaplanarak Ni/PR/p-Si/Al hibrit aygıtların fabrikasyonu tamamlandı.

Oda sıcaklığında I-V ölçümleri, Keithley 6487 pikoammetre/gerilim kaynağı ile ± 2 V aralığında karanlıkta gerçekleştirildi. Hazırlanan aygıtların C-V ölçümü Agilent 4294 A-empedans analizörü ile 500 kHz frekansta gerçekleştirildi. Yapılan ölçümlerden elde edilen (I-V) verileriyle termiyonik emisyon teori, Cheungs ve Norde fonksiyonları kullanılarak mikroelektronik karakteristikler belirlendi. C-V verileri kullanılarak etkin Fermi enerjisi (E_f), alıcı konsantrasyonu (N_d), built-in potansiyeli ve engel yüksekliği değerleri hesaplandı.

3. Bulgular-Tartışma

Bu çalışmada seçilen organik molekül PR ile öncelikle Ni/PR/p-Si/Al hibrit aygıtların I-V ölçümleri kullanılarak ln(I)-V grafiklerinden mikroelettronik parametreleri termiyonik emisyon teorisi, Cheungs fonksiyonları ve modifiye Norde fonksiyonu yardımıyla hesaplandı. İkinci aşamada C-V ölçüm verileri kullanılarak temel karakteristik parametreler yeniden hesaplandı.

3.1 Akım-gerilim ölçümü yardımıyla mikroelettronik parametrelerin tayini

3.1.1. Termiyonik Emisyon Teori

Termiyonik Emisyon (TE) teoriye göre, Φ_m iş fonksiyonuna sahip bir metal, Φ_s iş fonksiyonuna sahip p tipi yarı iletkenle bir araya getirildiğinde, $\Phi_m < \Phi_s$ koşulu altında metal/yarıiletken (M/S) doğrultucu kontağın oluştuğu iyi bilinmektedir (Ozerden et al., 2022). Yarıiletkenin Fermi seviyesi, kontakdan önce metalin Fermi seviyesinden daha düşüktür. TE teorisine göre, aygıtın Fermi seviyesi hizalanana kadar taşıyıcı geçişiyle termal denge kurulduğu bilinmektedir (Altındal et al., 2021). MS kontağın oluşmasından sonra metal ve yarı iletken arasında difüzyon potansiyeli (V_{bi}) olarak bilinen potansiyel farkı oluşur. Bu potansiyel, termal denge durumunda herhangi bir voltaj uygulanmadığında daha fazla taşıyıcının yarı iletkenle metal tarafa geçişini önler. Öte yandan, holler yarı iletkenle metal tarafa geçmek için bariyer yüksekliğini (Φ_b) aşmak durumundadır. Bu bariyer yüksekliği, metalin Φ_m değeri ve yarı iletkenin elektron ilgisi (χ_s) ile güçlü bir şekilde ilişkilidir (Simon M. Sze, 2006).

Bir mikroelettronik aygıtın temel karakteristiklerini tanılamak için akım-gerilim (I-V) ölçümleri en yaygın kullanılan yöntemidir. TE teorisine göre üretilen Ni/PR/p-Si hibrit eklemden geçen akım (Altındal et al., 2022),

$$= I_0 \exp \left[\frac{q(V - IR_s)}{nkT} \right] \quad (1)$$

şeklinde tanımlanır. Burada q , T , k ve I_0 sırasıyla birim yükü (1.619×10^{-19} C), mutlak sıcaklığı (300 K), Boltzman sabitini (1.38×10^{-23} JK⁻¹) ve saturasyon (doyma) akımını temsil eder. Bu akım aşağıdaki eşitlikle ifade edilir.

$$I_0 = SA^* \exp \left[-\frac{q\Phi_b}{kT} \right] \quad (2)$$

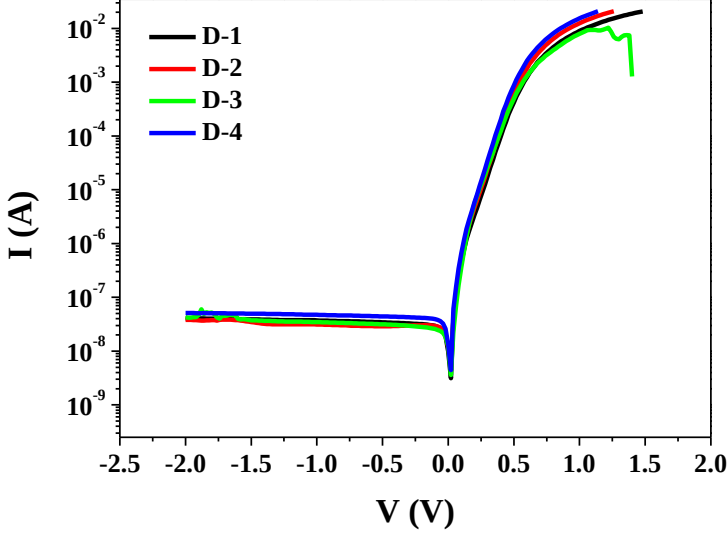
Burada S aygıtın etkin kontak yüzey alanını temsil eder ve $A^*=32$ A/cm²K² Richardson sabitine eşittir. Bir mikroelettronik aygıtın n değeri (Altındal et al., 2021),

$$n = \frac{q}{kT} \frac{dV}{d \ln(I)} \quad (3)$$

eşitliği ile belirlenir. Ölçüm sonrası çizilen $\ln(I)$ - V grafiği ve Eş. (3) kullanılarak idealite faktörü değeri hesaplanır. Hibrit aygıta ait engel yüksekliği $\ln(I)$ - V eğrisinin akım eksenini kesim noktasından elde edilen I_0 değeri yerine yazılarak (Demirezen et al., 2022),

$$\Phi_b = \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{SA^*T^2}{I_0} \right) \quad (4)$$

eşitliği ile hesaplanabilir. Yapılan hesaplamalar sonucunda Ni/PR/p-Si hibrit aygıtların karakteristik parametre değerleri Tablo 1’de verilmiştir.



Şekil 1: Ni/PR/p-Si hibrit aygıtların yarılogaritmik I-V eğrileri

Tablo 1'de görüldüğü gibi, engel yüksekliği değerleri farklı aygıtlar için 0.707 ile 0.738 eV arasında değişmektedir. PR arayüzünün varlığında sahip tüm aygıtlar için bariyer yüksekliğinin büyüklüğü Ni/p-Si MS aygıtın 0.56 eV olan engel yüksekliği değerinden daha yüksektir. Φ_b değerindeki bu artış, PR tabakası tarafından MS eklem arayüzündeki arayüzey yükleriyle ve Si yüzeyinin pasifleştirilmesiyle ilişkilendirilebilir (Altındal et al., 2022; Benhaliliba et al., 2022; Deniz et al., 2018; İkrâm et al., 2015). Ayrıca, tüm hibrit aygıtlarda engel yüksekliği değerinin farklı olmasının nedeni arayüzeyin homojen olmaması, taşıyıcıların tünellenmesi, tükenim bölgesinde rekombinasyon olayları, deplasyon bölgesinde seri direncin varlığı ile ilişkilendirilebilir (Akin et al., 2022). Aygıtın engel yüksekliği, beslem sırasında akım taşıma mekanizmasını kontrol eder. Organik arayüzey varlığında en önemli mikroelektronik karakteristik olan Φ_b değerinin modifikasyonu kaynaklarda rapor edilmiştir (Ben Ahmed et al., 2022; Benhaliliba et al., 2022; Güllü & Türüt, 2010; Karabulut et al.,

2019, 2022; Sevgili et al., 2019, 2020). Bariyer yüksekliğindeki bu değişim, üretilen aygıtların mikroelektronik parametrelerinin ve performansının, metal-yarı iletken arayüzünde arayüzey katmanı olarak PR gibi uygun bir fonksiyonel malzeme kullanılarak ayarlanabileceğini ve kontrol edilebileceğini doğrulamaktadır.

Bir diğer önemli mikroelektronik parametre, I-V verilerinden Eş. 3 kullanılarak hesaplanan idealite faktörüdür. Tablo 1'de, idealite faktörü değerlerinin 1'den büyük olması ideallikten uzaklığın göstergesidir. Aygıtların n değerleri, seri direnç, arayüzey yük yoğunluğu ve arayüzey katmanının varlığı gibi ideal olmayan etkiler nedeniyle ideal bir diyotun değerinden ($n > 1$) daha büyüktür. Spin kaplama ile hazırlanan PR tabakasının varlığında Ni/PR/p-Si hibrit aygıtlarının n değerleri, sırasıyla 1.011, 1.039, 1.053 ve 1.237 olarak hesaplanmıştır. PR arayüzey varlığında, idealite faktörü değeri, taşıyıcı enjeksiyonunun teşvik edilmesi nedeniyle azalmıştır. Böylece, PR arayüzey tabakası boyunca verimli yük taşınması gerçekleşmiştir. Bu sonuçlar, PR arayüzey katmanının aygıtın elektriksel parametreleri üzerinde olumlu bir etkiye sahip olduğunu doğrulamaktadır (Karadeniz et al., 2013).

3.1.2. Norde Fonksiyonu

Alternatif bir yöntem olarak, hem mikroelektronik parametreleri (Φ_b ve R_s) hesaplamak hem de seri direnç etkisini anlamak için modifiye Norde fonksiyonu kullanılabilir (Dayan et al., 2020; Norde, 1979)

$$F(V) = \frac{V}{\gamma} - \frac{kT}{q} \left(\frac{I(V)}{I_{SA} T^2} \right) \quad (5)$$

Burada γ bir tamsayıdır. Bu değeri idealite faktörünü sınırlar. Bu çalışmada tasarlanan heteroeklemlerin $1 < n < 2$ olduğundan dolayı $\gamma=2$ alındı. Φ_b değeri aşağıda verilen eşitlikle hesaplanır (Abdel-Khalek et al., 2018),

$$\Phi_b = F(V)_0 + \frac{V_{min}}{\gamma} - \frac{kT}{q} \quad (6)$$

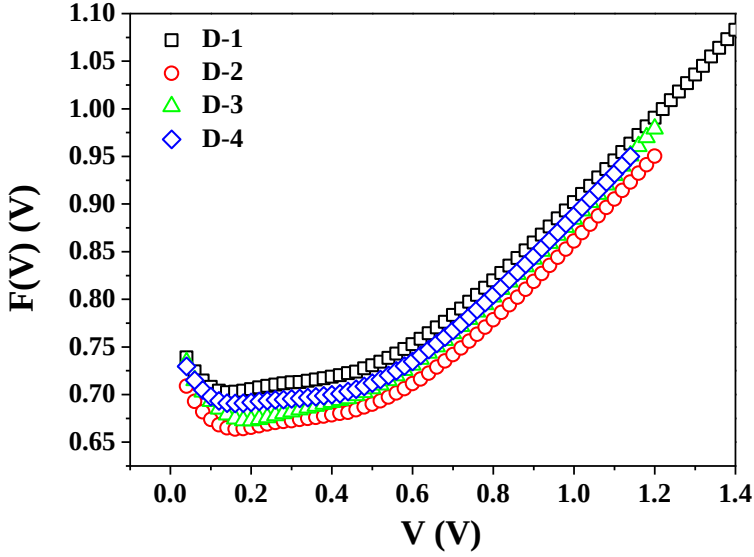
Bu eşitlikte Norde fonksiyonun extremum noktası yardımıyla $F(V_0)$ ve V_0 değerleri belirlenir. Şekil 2’de organik arayüzeylere sahip heteroeklemlerin $F(V)$ - V grafiklerini gösterilmektedir. Bir aygıt için I - V verilerinden minimum gerilime (V_0) karşılık gelen akım değeri bulunduğundan sonra, Norde fonksiyonu ile R_s metodunda seri direnç değerleri (Benhaliliba, 2020),

$$R_s = \frac{kT(\gamma-n)}{qI} \quad (7)$$

eşitliği ile hesaplanır. Şekil 2’de Ni/PR/p-Si aygıtların bariyer yüksekliği değerleri farklı kontak noktaları için 0.718 eV’den 0.768 eV’ye değişmiştir. PR arayüz katmanına dayalı hibrit aygıtların Φ_b değeri D-1, D-2, D-3 ve D-4 için sırasıyla 0.768, 0.718, 0.747 ve 0.745 eV olarak hesaplanmıştır. Norde yönteminden Al/PR/p-Si hibrit aygıtlar için elde edilen Φ_b değeri, Tablo 1’de listelenmiştir, ve TE yönteminden elde edilen bariyer yüksekliği değerleri ile tutarlıdır. Tüm aygıtlar arasında, hesaplanan en küçük R_s değeri 4.444 k Ω ile D-3, en yüksek değer ise 10.77 k Ω ile D-2 kontağı için kaydedilmiştir.

Tablo 1: Ni/PR/p-Si hibrit aygıtların I-V parametreleri

Numune	$\ln(I)$ - V		$F(V)$ - V	
	n	Φ_b (eV)	Φ_b (eV)	R_s (k Ω)
Ni/PR/p-Si-D-1	1.110	0.727	0.768	9.354
Ni/PR/p-Si-D-2	1.039	0.731	0.718	10.77
Ni/PR/p-Si-D-3	1.054	0.738	0.747	4.444
Ni/PR/p-Si-D-4	1.237	0.707	0.745	7.030



Şekil 2: Ni/PR/p-Si hibrit aygıtların $F(V)$ - V eğrileri

Üretilen aygıtların elektriksel parametrelerinin, metalin işlevine ve PR arayüz katmanının varlığına büyük ölçüde bağlı olduğu sonuçlardan açıkça anlaşılmaktadır.

3.1.3. Cheungs Fonksiyonları

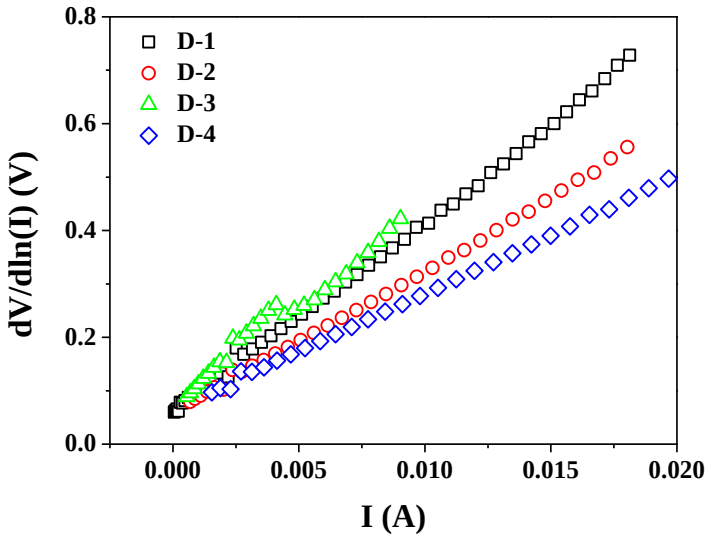
Hibrit aygıtların I-V grafiklerinde yüksek gerilim bölgesinde görülen lineerlikten sapmanın kaynağı olarak bilinen seri direnç etkisini tanılamak için alternatif bir metod olarak Cheungs fonksiyonları kullanılabilir (İkram et al., 2015),

$$\frac{dV}{d\ln(I)} = IR_s + n\left(\frac{kT}{q}\right) \quad (8)$$

$$H(I) = V - \left(\frac{nKT}{q}\right) \ln\left(\frac{I}{SA^*T^2}\right) \quad (9)$$

$$H(I) = IR_s + n\Phi_b \quad (10)$$

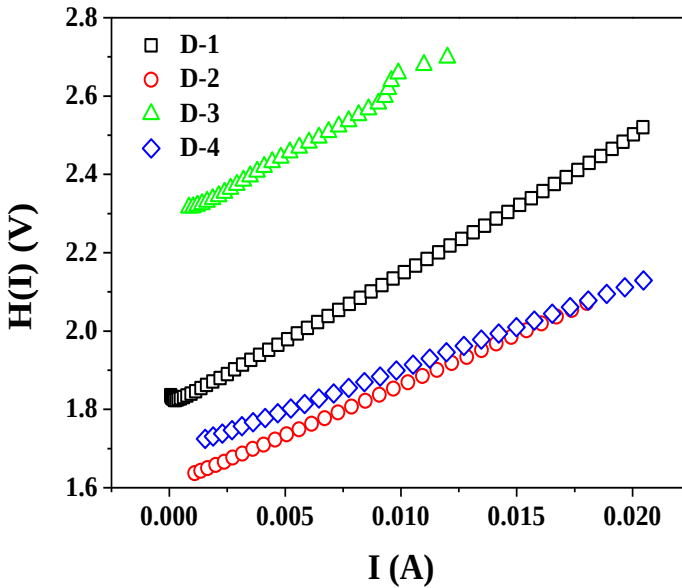
Eşitlik 8'e göre $dV/d\ln(I)$ - I ilişkisi lineer olup, bu eğrinin eğiminden R_s ve kesim noktasından n değeri değeri belirlenir. Benzer şekilde Eş. 10'a göre $H(I)$ - I ilişkisi lineer olup, bu eğriye yapılan fit sonrası elde edilen fit parametrelerinden eğim R_s değerini verirken, extrapolasyon değeri yardımıyla Φ_b değeri bulunur. Şekil 3 ve 4'te PR organik arayüzey ile hazırlanan hibrit yapıların sırasıyla $dV/d\ln(I)$ - I ve $H(I)$ - I grafikleri çizilmiş ve Cheungs fonksiyonları yardımıyla belirlenen karakteristik parametreler Tablo 2'de verilmiştir.



Şekil 3: Ni/PR/p-Si hibrit aygıtların $dV/d\ln(I)$ – I eğrileri

Tablo 2'den anlaşıldığı gibi Cheungs fonksiyonları ile Şekil 3 ve Şekil 4'de verilen grafiklerin eğiminden elde edilen en düşük direnç $21.361 \, \Omega$ değeri ile D-4 nolu aygıt ve en yüksek direnç $33.716 \, \Omega$ değeri ile D-2 nolu aygıt için kaydedilmiştir. Cheung I ve Cheung II fonksiyonları kullanılarak her bir hibrit aygıt için elde edilen seri direnç değerleri birbiri ile uyumludur. Bunun yanı sıra önceki bölümde listelenen değerler Norde fonksiyonu ile elde edilen seri direnç değerlerinden farklıdır. Bu farklılığın nedeni literatürde her

iki metodun doğasına atfedilmiştir (Gencer Imer, Tombak, et al., 2016; Gencer Imer et al., 2018; Güllü & Türüt, 2010; Tombak et al., 2014, 2018). Bunun yanı sıra, önceki bölümde TE teoriye göre $\ln(I)$ - V eğrilerinden hesaplanan n değerlerinin, Şekil 3'te verilen $dV/d\ln(I)$ - I grafiğinden elde edilen değerler ile oldukça uyumlu olduğu görülmektedir. Ek olarak, Şekil 4'te verilen $H(I)$ - I grafiğinden elde edilen engel yüksekliği değerleri, TE teoriye göre hesaplanarak Tablo 1'de listelenen Φ_b değerleri ile uyumlu olduğu anlaşılmaktadır.



Şekil 4: Ni/PR/p-Si hibrit aygıtların $H(I)$ – I eğrileri

Kaynaklarda Cheungs fonksiyonları yardımıyla farklı organik arayüzey bileşenli aygıtların elektronik parametreleri rapor edilmiştir. Örneğin Ru kompleks arayüzeyli Si tabanlı fotodetektörde engel yüksekliği değerinin iyileştiğinin raporlandığı çalışmada arayüzey içeren ve içermeyen aygıt için Cheungs metoduyla elde edilen seri direnç değerleri 143 ve 1112 Ω olarak elde edilmiştir. (Karabulut et al., 2019). Metilen mavisi türevli arayüzey katmanın

p-Si üzerine kaplanarak fabrikasyonu yapılan diyotun, $dV/d\ln(I)-I$ ve $H(I)-I$ grafiğinden elde edilen elektronik parametreleri ve n , R_s ve Φ_b sırasıyla 5.8, 100.5 k Ω ve 0.77 eV olarak hesaplanmıştır (Soylu et al., 2013). Bu çalışmada elde edilen sonuçlar ve literatürde bildirilen benzer sonuçlar, aygıt performansının arakatman varlığında iyileştirilebileceğini göstermektedir.

Tablo 2: Ni/PR/p-Si hibrit aygıtların I-V parametreleri

Numune	$d(V)/d\ln I - I$		$H(I) - I$	
	n	R_s	Φ_b	R_s
Ni/PR/p-Si-D-1	2.760	33.716	0.655	33.658
Ni/PR/p-Si-D-2	2.563	25.315	0.627	25.357
Ni/PR/p-Si-D-3	2.294	35.933	0.695	29.957
Ni/PR/p-Si-D-4	2.626	21.361	0.643	21.436

Yine benzer bir çalışmada, kalay üst kontaklı p-Si tabanlı Schottky diyotunun Norde fonksiyonu ile hesaplanan seri direnç değeri 56 Ω olduğu bildirilmiştir (Karataş & Berk, 2022). Kinolin sarısının arakatman olarak kullanıldığı Al/p-Si heteroeklemin $F(V)$ fonksiyonu yardımıyla analizinden elde edilen Φ_b ve R_s değerleri sırasıyla 0.91 eV ve 1.8 k Ω olarak raporlanmıştır (Ugur et al., 2015). Farklı kalınlıklarda kaplanan gün batımı sarısı boyar maddesinin organik arakatman olarak kullanıldığı çalışmada, TE teoriye göre n , ve Φ_b değerleri sırasıyla 3.57 ve 0.75 eV olarak hesaplanmış, aynı mikroelektronik parametreler Cheung's metodu yardımıyla sırasıyla 3.93 ve 0.78 eV olarak rapor edilmiştir. Aynı çalışmada seri direnç değerleri Cheungs (1156 Ω) ve Norde (2875 Ω) gibi farklı metodlar kullanılarak hesaplanmış, ve farklı değerler eldesinin nedeni uygulanan yöntemlerin doğasında varolan farklılığa atfedilmiştir (Gencer Imer, Karaduman, et al., 2016). İncelenen Ni/PR/p-Si hibrit aygıtların mikroelektronik karakteristikleri kaynaklarda raporlanan değerler ile kıyaslandığında özellikle engel yüksekliği modifikasyonu oldukça iyidir. Üretilen aygıtların doğru beslem $\ln(I)-V$ (Tablo 1), Cheungs fonksiyonları (Tablo 2) ve Norde fonksiyonları verilerinden hesaplanan mikroelektronik parametre değerleri iyi bir uyum içindedir.

3.2 Kapasitans-gerilim ölçümü yardımıyla mikroelektronik parametrelerin tayini

Ni/PR/p-Si aygıtlarının kapasitans-gerilim (C-V) ölçümleri, 500 kHz frekansında ± 2 V gerilim aralığında gerçekleştirildi. Şekil 5’de Ni/PR/p-Si hibrit aygıtlarının oda sıcaklığında 500 kHz frekansta C-V grafikleri gösterilmektedir. Kapasitansın gerilim bağımlılığını inversiyon rejiminde zayıf olsa da, kapasitans değeri akümülayon rejiminde tüm numuneler için gerilimle birlikte artmaktadır (Şekil 5). Kapasitenin artması da yük yoğunluğunun düzgün davranmasına neden olmuştur. C-V ölçümleri yardımıyla mikroelektronik parametrelerin değerleri, üretilen hibrit aygıtların deplasyon katmanının kapasitansı Schottky-Mott teoriye göre Eş. (11) ile belirlenir.

$$\frac{1}{C^2} = \frac{2(V_{bi}+V)}{q\epsilon_s\epsilon_0 A^2 N_a} \quad (11)$$

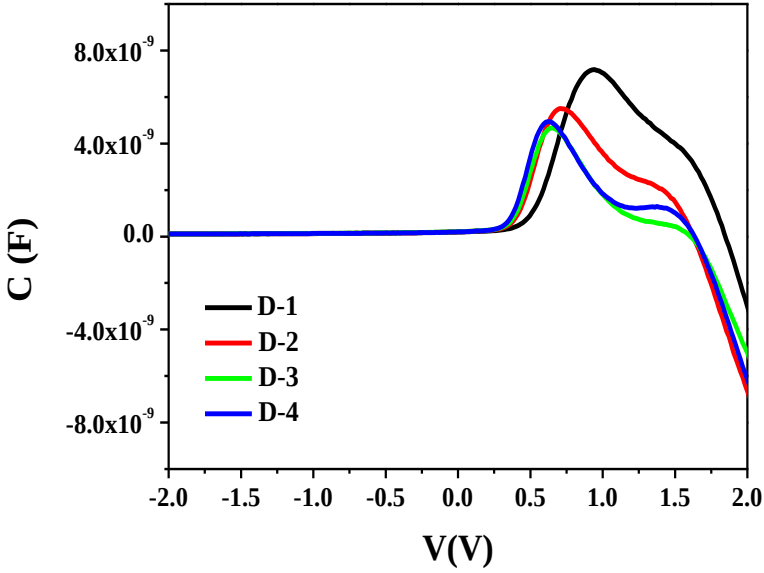
Burada N_a alıcı katkı yoğunluğudur, ϵ_0 boşluğun dielektrik geçirgenlik katsayısıdır ($\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-14}$ F/cm), ϵ_s yarı iletken Si’nin relatif dielektrik sabitidir ($\epsilon_s=11.9$) ve V_{bi} sıfır beslemde built-in potansiyelini sembolize eder. Şekil 6’da ters beslem bölgesinde farklı hibrit cihazların C^{-2} -V eğrilerini göstermektedir. Eğrilerin düz kısmının eğimi ve gerilim eksenine ekstrapolasyonu sırasıyla N_a ve V_{bi} ’yi verir (Çaldıran & Taşyürek, 2021). C^{-2} -V eğrilerinin eğim parametrelerinden, belirlenen aygıtlar için Φ_b değerleri Eş. (12) kullanılarak elde edilebilir (Benhaliliba, 2020),

$$\Phi_b = V_{bi} + \frac{kT}{q} + V_n \quad (12)$$

Burada V_n , p-Si için etkin Fermi seviyesidir ve V_n aşağıdaki gibi hesaplanabilir,

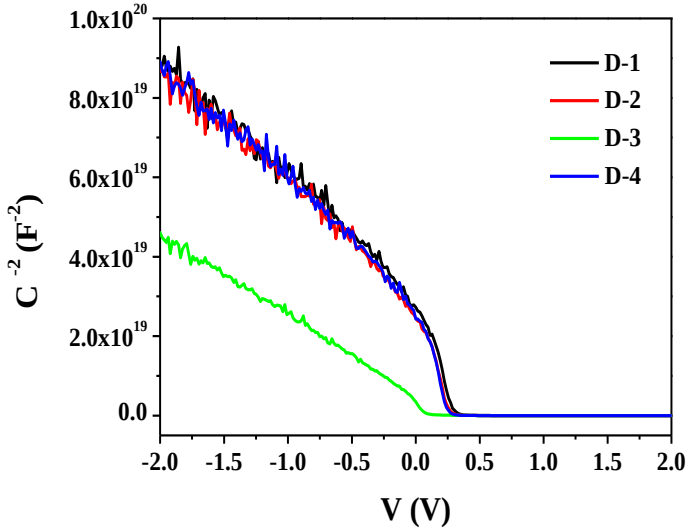
$$V_n = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{N_v}{N_a}\right) \quad (13)$$

Bu eşitlikte N_v p-Si’nin valans bandındaki etkin durum yoğunluğunu göstermektedir.



Şekil 5: Ni/PR/p-Si hibrit aygıtların C-V eğrileri

Şekil 5’de görüldüğü gibi, çalışılan Ni/PR/p-Si hibrit yapının kapasitansı uygulanan gerilim ile değişmiştir. Doğru beslem bölgesi için, arayüz durumlarıyla ilgili grafikte bir tepe noktası vardır. Bu tepe noktasının maksimum değeri, farklı hibrit aygıtlar için farklı değerdedir. Çünkü, yeterince yüksek farklı aygıtlarda, arayüzey yükleri farklı olabilir ve bu arayüzey yükleri yeterince yüksek frekansta alternatif akım sinyalinin takipte yeterince duyarlı değildir, bu da kapasitans değerinde azalmaya neden olmuştur (Dayan et al., 2021) (Salem et al., 2022). Dahası, doğru beslemde negatif kapasitans adı verilen negatif kapasitans davranışı gözlemlenmiştir. Bu, iyonizasyon işlemi nedeniyle arayüzeydeki arayüzey durum yüklerinin kaybına atfedilebilir (Gencer Imer, Tombak, et al., 2016). Literatürde Schottky diyotları için negatif kapasitans davranışı üzerinde benzer sonuçlar bildirilmiştir (Yahia et al., 2018). Bu nedenle, arayüzey durum yükleri diyotun kapasitif özelliği üzerinde büyük öneme sahiptir.



Şekil 6: Ni/PR/p-Si hibrit aygıtların C^2 -V eğrileri

Aygıtların mikroelektronik parametreleri C-V verilerinden hesaplanmış ve Tablo 3'te gösterilmiştir. Hazırlanan hibrit Ni/PR/p-Si D-1, D-2, D-3 ve D-4 aygıtlarının Φ_b değeri sırasıyla 0.802, 0.779, 0.948 ve 0.772 eV olarak elde edilmiştir. Tablo 3'den görüldüğü üzere, PR ara katmanlı hibrit aygıtların en yüksek engel yüksekliği değeri 0.948 eV değeri ile D-3, en düşük değer ise 0.772 eV ile D-4 aygıtında elde edilmiştir. En düşük N_a değeri $1.220 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ D-3 hibrit aygıtında, en yüksek değeri $4.546 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ D-2 hibrit aygıtında elde edilmiştir. Bu sonuçlar, Ni/PR/p-Si hibrit aygıtların I-V sonuçlarıyla tutarlıdır. Bu fark, arayüzey katman kalınlığının inhomojenliğine, bariyerin homojen olmamasına, seri direncin varlığına ve PR/p-Si arayüzündeki arayüz yüklerinin yoğunluğuna atfedilebilir (Çaldıran, 2021).

Tablo 3: Ni/PR/p-Si hibrit aygıtların C-V parametreleri

Numune	C-V			
	V_{bi}	E_f	Φ_b	N_a
Ni/PR/p-Si-D-1	0.600	0.201	0.802	4.340×10^{15}
Ni/PR/p-Si-D-2	0.579	0.200	0.779	4.546×10^{15}
Ni/PR/p-Si-D-3	0.774	0.175	0.948	1.220×10^{15}
Ni/PR/p-Si-D-4	0.571	0.201	0.772	4.373×10^{15}

4. Sonuç

Farklı kontaklar kullanılarak Ni/PR/p-Si hibrit yapıları, p-Si altlık üzerine spin kaplama yöntemi ile PR tabakası biriktirilerek hazırlanmıştır. PR tabakası olan aygıtların I-V ve C-V ölçümleri, cihazların oda sıcaklığında elektriksel ve empedans özelliklerini belirlemek için gerçekleştirilmiştir. Cihazların n , Φ_b ve R_s gibi elektriksel parametreleri TE yöntemi, Cheungs ve Norde fonksiyonları ve empedans analizleri kullanılarak hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlar, elektriksel parametrelerin ve cihaz performansının büyük ölçüde PR arayüzey tabakasının varlığına bağlı olduğunu göstermiştir. Tüm cihazlar için engel yüksekliği değeri, metal ve yarı iletken arasında PR arayüzünün varlığıyla artmıştır. Bu artış, Si yüzeyindeki sarkan bağların pasifleşmesi nedeniyle arayüzey durum yüklerinin değişmesi yoluyla PR arayüzey tabakası ile metal/p-Si'nin modifikasyonu ile ilişkili olabilir. Ayrıca, doğru beslemde negatif kapasitans adı verilen gözlenen negatif kapasitans davranışının nedeni, iyonizasyon işlemi sırasında arayüzey durum yüklerinin kaybına atfedilebilir. Elde edilen sonuçlar, PR'nin elektronik cihazın performansını değiştirmek için bir arayüzey katmanı olarak kullanılabileceğini doğrulamıştır. PR arakatmanlı üretilen aygıtların bu özellikleri, PR malzemesine hızla gelişen organik malzeme tabanlı aygıt endüstrisinde potansiyel bir uygulama alanı açmaktadır.

Teşekkür: Bu çalışmanın her aşamasında çok kıymetli destekleri için Av. Mehmet İMER'e teşekkür ederim.

Kaynakça

Abdel-Khalek, H., Shalaan, E., Abd-El Salam, M., & El-Mahalawy, A. M. (2018). Effect of illumination intensity on the characteristics of $\text{Cu}(\text{acac})_2/\text{n-Si}$ photodiode. *Synthetic Metals*, 245, 223–236.

Akin, B., Farazin, J., Altındal, Ş., & Azizian-Kalandaragh, Y. (2022). A comparison electric-dielectric features of Al/p-Si (MS) and Al/(Al_2O_3 :PVP)/p-Si (MPS) structures using voltage–current (V–I) and frequency–impedance (f–Z) measurements. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 33(27), 21963–21975.

Alferov, Z. I. (2001). The double heterostructure: The concept and its applications in physics, electronics, and technology (Nobel lecture). *ChemPhysChem*, 2(8-9), 500–513.

Altındal, Ş., Barkhordari, A., Pirgholi-Givi, G., Ulusoy, M., Mashayekhi, H., Özçelik, S., & Azizian-Kalandaragh, Y. (2021). Comparison of the electrical and impedance properties of Au/(ZnOMn:PVP)/n-Si (MPS) type Schottky-diodes (SDs) before and after gamma-irradiation. *Physica Scripta*, 96(12), 125881.

Altındal, Ş., Özdemir, A. F., Aydoğan, Ş., & TÜRÜT, A. (2022). Discrepancies in barrier heights obtained from current–voltage (IV) and capacitance–voltage (CV) of Au/PNoMPhPPy/n-GaAs structures in wide range of temperature. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 33(15), 12210–12223.

Baturay, S., Tombak, A., Kaya, D., Ocak, Y. S., Tokus, M., Aydemir, M., & Kilicoglu, T. (2016). Modification of electrical and optical properties of CuO thin films by Ni doping. *Journal of Sol-Gel Science and Technology*, 78(2), 422–429.

Ben Ahmed, A., Benhaliliba, M., Ocak, Y. S., Ayeshamariam, A., & Benouis, C. E. (2022). Photovoltaic parameters and computational spectroscopic investigation of third order nonlinear optical of CuPc/Si organic diode. *Optical Materials*, 126, 112071.

Benhaliliba, M. (2020). A growth of A–Z phthalocyanine layers onto Si by thermal evaporation process to achieve organic heterojunction diodes. *Optik*, 217, 164832.

Benhaliliba, M., Ben Ahmed, A., Kaleli, M., & Meftah, S. E. (2022). Structural, optical, nonlinear optical, HUMO-LUMO properties and electrical characterization of Poly(3-hexylthiophene) (P3HT). *Optical Materials*, 132, 112782.

Brown, M. D., Suteewong, T., Sai, R., Kumar, S., D’innocenzo, V., Petrozza, A., Lee, M. M., Wiesner, U., & Snaith, H. J. (2011). Plasmonic Dye-Sensitized Solar Cells Using Core-Shell Metal-Insulator Nanoparticles. *Nano Lett*, 11, 438–445.

Çaldıran, Z. (2021). Modification of Schottky barrier height using an inorganic compound interface layer for various contact metals in the metal/p-Si device structure. *Journal of Alloys and Compounds*, 865, 158856.

Çaldıran, Z., Deniz, A. R., Sevim, M., & Aydoğan, Ş. (2021). The heterojunction diode application of mesoporous graphitic carbon nitride (mpg-C₃N₄). *Superlattices and Microstructures*, 157, 106991.

Çaldıran, Z., & Taşyürek, L. B. (2021). The role of molybdenum trioxide in the change of electrical properties of Cr/MoO₃/n-Si heterojunction and electrical characterization of this

device depending on temperature. *Sensors and Actuators A: Physical*, 328, 112765.

Dayan, O., Gencer Imer, A., Al-Sehemi, A. G., Özdemir, N., Dere, A., Şerbetçi, Z., Al-Ghamdi, A. A., & Yakuphanoglu, F. (2020). Photoresponsivity and photodetectivity properties of copper complex-based photodiode. *Journal of Molecular Structure*, 1200, 127062.

Dayan, O., Gencer Imer, A., Tercan, M., Dere, A., Al-Sehemi, A. G., Al-Ghamdi, A. A., & Yakuphanoglu, F. (2021). Dye sensitized solar cell-based optoelectronic device using novel [Ru(L1)(L2)(NCS)2] complex. *Journal of Molecular Structure*, 1238, 130464.

Demirezen, S., Altındal, Ş., Azizian-Kalandaragh, Y., & Akbaş, A. M. (2022). A comparison of Au/n-Si Schottky diodes (SDs) with/without a nanographite (NG) interfacial layer by considering interlayer, surface states (N_{ss}) and series resistance (R_s) effects. *Physica Scripta*, 97(5), 055811.

Deniz, A. R., Çaldıran, Z., Biber, M., İncekara, Ü., & Aydoğan, Ş. (2018). Investigation of electrical properties of Ni/Crystal Violet ($C_{25}H_{30}ClN_3$)/n-Si/Al diode as a function of temperature. *Journal of Alloys and Compounds*, 763, 622–628.

Deniz, A. R., Taş, A. İ., Çaldıran, Z., İncekara, Ü., Biber, M., Aydoğan, Ş., & Tüüt, A. (2022). Effects of PEDOT:PSS and crystal violet interface layers on current voltage performance of Schottky barrier diodes as a function of temperature and variation of diode capacitance with frequency. *Current Applied Physics*, 39, 173–182.

Gencer Imer, A., Dere, A., Al-Sehemi, A. G., Dayan, O., Serbetci, Z., Al-Ghamdi, A. A., & Yakuphanoglu, F. (2019). Photosensing properties of ruthenium(II) complex-based photodiode. *Applied Physics A*, 125(3), 204.

Gencer Imer, A., Dere, A., Kaya, E., Al-Sehemi, A. G., Dayan, O., Al-Ghamdi, A. A., & Yakuphanoglu, F. (2023). The photodetection properties of a ruthenium electro-optic device for organic material-based device industry. *Optical Materials*, 142, 114085.

Gencer Imer, A., Karaduman, O., & Yakuphanoglu, F. (2016). Controlling of the photosensing properties of Al/DMY/p-Si heterojunctions by the interface layer thickness. *Synthetic Metals*, 221, 114–119.

Gencer Imer, A., Korkut, A., Farooq, W. A., Dere, A., Atif, M., Hanif, A., & Karabulut, A. (2019). Interface controlling study of silicon based Schottky diode by organic layer. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 30(21), 19239–19246.

Gencer Imer, A., Syan, R. H. B., Gülcan, M., Ocak, Y. S., & Tombak, A. (2018). The novel pyridine based symmetrical Schiff base ligand and its transition metal complexes: synthesis, spectral definitions and application in dye sensitized solar cells (DSSCs). *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 29(2), 898–905.

Gencer Imer, A., Tombak, A., & Korkut, A. (2016). Electrical and photoelectrical characteristic investigation of a new generation photodiode based on bromothymol blue dye. *Journal of Physics: Conference Series*, 707(1).

Güllü, Ö., & Türüt, A. (2010). Electrical analysis of organic dye-based MIS Schottky contacts. *Microelectronic Engineering*, 87(12), 2482–2487.

İkram, O., Turut, A., & Toprak, M. (2015). The comparison of electrical characterizations and photovoltaic performance of Al/p-Si and Al/Azure C/p-Si junctions devices. *Synthetic Metals*, 200, 66–73.

Imer, A. G., & Ocak, Y. S. (2016). Effect of Light Intensity and Temperature on the Current Voltage Characteristics of Al/SY/p-Si Organic–Inorganic Heterojunction. *Journal of Electronic Materials*, 45(10), 5347–5355.

Karabulut, A., Dere, A., Dayan, O., Al-Sehemi, A. G., Serbetci, Z., Al-Ghamdi, A. A., & Yakuphanoglu, F. (2019). Silicon based photodetector with Ru(II) complexes organic interlayer. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 91, 422–430.

Karabulut, A., Yıldız, D. E., Köse, D. A., & Yıldırım, M. (2022). Photosensing performances of heterojunctions-based photodiodes with novel complex interlayers. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 146, 106647.

Karadeniz, S., Barış, B., Yüksel, O. F., & Tuğluoğlu, N. (2013). Analysis of electrical properties of Al/p-Si Schottky contacts with and without rubrene layer. *Synthetic Metals*, 168(1), 16–22.

Karadeniz, S., Yıldız, D. E., Gullu, H. H., Kose, D. A., Hussaini, A. A., & Yıldırım, M. (2022). Dark and illuminated electrical characteristics of Schottky device with Zn-complex interface layer. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 33, 18039–18053.

Karataş, Ş., & Berk, N. (2022). Performance of the illumination dependent electrical and photodiode characteristic of the Al/(GO:PTCDA)/p-Si structures. *Optical Materials*, 126, 112231.

Kocyigit, A., Yıldız, D. E., Hussaini, A. A., Kose, D. A., & Yıldırım, M. (2023). Cu and Mn centered nicotinamide/nicotinic acid complexes for interlayer of Schottky photodiode. *Current Applied Physics*, 45, 53–63.

Liu, H., Avrutin, V., Izyumskaya, N., Özgr, Ü., & Morkoç, H. (2010). Transparent conducting oxides for electrode applications in light emitting and absorbing devices. *Superlattices and Microstructures*, 48(5), 458–484.

Mahmood, O. H., Gencer Imer, A., Ugur, A., & Korkut, A. (2021). The investigation of the fundamental electrical parameters of Ag/n-Si hybrid structure based on functional organic dye. *Materials Today: Proceedings*, 46, 6966–6970.

Norde, H. (1979). A modified forward I-V plot for Schottky diodes with high series resistance. *Journal of Applied Physics*, 50, 5052. <https://doi.org/10.1063/1.325607>

Omarbli, S. A., & Gencer Imer, A. (2023). Modification in the electronic parameters of M/p-Si hybrid device by PSP functional dye interface with different contact metals (M:Ag, Cu, Pd, Sn). *Synthetic Metals*, 297, 117396.

Ozerden, E., Ozden, P., Kariper, I. A., & Pakma, O. (2022). The electrical characterization of metal-insulator-semiconductor device with b-naphthol orange interface. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 33, 20900–20910.

Salem, M. S., Wassel, A. R., Fedawy, M., Shaker, A., Al-Bagawia, A. H., Aleid, G. M., & El-Mahalawy, A. M. (2022). Integration of biocompatible Coomassie Brilliant Blue dye on silicon in organic/Inorganic heterojunction for photodetection applications. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 169,

Sevgili, Ö., Lafzi, F., Karabulut, A., Orak, İ., & Bayındır, S. (2019). The synthesis of new bola-amphiphile TPEs and the comparison of current transformer mechanism and structural properties for Al/Bis(HCTA)-TPE/p-Si and Al/Bis(HCOA)-TPE/p-Si heterojunctions. *Composites Part B: Engineering*, 172, 226–233.

Sevgili, Ö., Yıldırım, M., Azizian-Kalandaragh, Y., & Altındal, Ş. (2020). A comparison study regarding Al/p-Si and Al/(carbon nanofiber–PVP)/p-Si diodes: current/impedance–voltage (I/Z – V) characteristics. *Applied Physics A*, 126(8), 634.

Simon M. Sze, K. K. N. (2006). Metal-Semiconductor Contacts. In *Physics of Semiconductor Devices* (pp. 134–196).

Soylu, M., Al-Hartomy, O. A., Farha Al Said, S. A., Al-Ghamdi, A. A., Yahia, I. S., & Yakuphanoglu, F. (2013). Controlling of conduction mechanism and electronic parameters of silicon–metal junction by mixed Methylene Blue/2'-7'-dichlorofluorescein. *Microelectronics Reliability*, 53(12), 1901–1906.

Tataroglu, A., Ocaya, R., Dere, A., Dayan, O., Serbetci, Z., Al-Sehemi, A. G., Soylu, M., Al-Ghamdi, A. A., & Yakuphanoglu, F. (2018). Ruthenium(II) Complex Based Photodiode for Organic Electronic Applications. *Journal of Electronic Materials*, 47(1), 828–833.

Tombak, A., Gencer Imer, A., Syan, R. H. B., Gülcan, M., Gümüş, S., & Ocak, Y. S. (2018). Synthesis, characterization, DFT studies, and photodiode application of azo-azomethine-based ligand and its transition-metal complexes. *Journal of Electronic Materials*, 47(12), 7240–7250.

Tombak, A., Ocak, Y. S., Asubay, S., Kilicoglu, T., & Ozkahraman, F. (2014). Fabrication and electrical properties of an organic–inorganic device based on Coumarin 30 dye. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 24, 187–192.

Ugur, A., Gencer Imer, A., & Ocak, Y. S. (2015). Electrical and photoelectrical characterization of an organic–inorganic heterojunction based on quinoline yellow dye. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 39, 569–574.

Yahia, I. S., Zahran, H. Y., Alamri, F. H., Aslam Manthrammel, M., AlFaify, S., & Ali, A. M. (2018). Microelectronic properties of the organic Schottky diode with pyronin-Y: Admittance spectroscopy, and negative capacitance. *Physica B: Condensed Matter*, 543, 46–53.

Yilmaz, M., Kocyigit, A., Aydogan, S., Incekara, U., Sahin, Y., & Kacus, H. (2020). Influence of illumination intensity on electrical characteristics of Eosin y dye-based hybrid photodiode: comparative study. *Applied Physics A*, 126, 1–12.

BÖLÜM IV

İlköğretim Okullarında Gürültü Kirliliğinin Belirlenmesi: Uşak İli Örneği

Engin TEKİN¹
Sena Ünzile AYPAZ²
İrem Nur YEĞİN³, Ayşe OKYAY⁴

Giriş

İlköğretim kurumları, ülkelerinin geleceğinde söz sahibi olacak olan çocuklara eğitim-öğretim ortamlardır. Eğitim ortamlarının özel olarak tasarlanması gerekmektedir. İlköğretimde yapılan eğitim-öğretimin amacına ulaşması için, eğitim öğretim faaliyetinin nitelikli olmasının yanında, fiziksel koşullarının ve etmenlerinin de nitelikli olması gerekmektedir. Bu nedenle, okullarda etkili, kaliteli iletişimi sağlayacak fiziki alt yapının sağlanması büyük önem arz eder

¹ Öğr. Gör., Dr., Uşak Üniversitesi Sağlık Hizmetleri Meslek Yüksekokulu, Tıbbi Hizmetler ve Teknikler Bölümü

² Uşak Üniversitesi Sağlık Hizmetleri Meslek Yüksekokulu, Tıbbi Görüntüleme Teknikleri Programı

³ Uşak Üniversitesi Sağlık Hizmetleri Meslek Yüksekokulu, Tıbbi Görüntüleme Teknikleri Programı

⁴ Uşak Üniversitesi Sağlık Hizmetleri Meslek Yüksekokulu, Tıbbi Görüntüleme Teknikleri Programı

(Merkit & Bulunuz, 2019).

Eğitim kurumlarındaki eğitim-öğretim faaliyetleri, çoğunlukla dinleme ve konuşma temelindedir ve iletişim ön plana çıkmaktadır. Bu sebeple, ses-gürültü düzeylerinin kabul edilebilir seviyelerde olması gerekir. Okullardaki gürültü eğitim öğretim ortamını bozmaktadır. Öğretimin kalitesini düşürür. Çevresel ve sınıf ortamındaki gürültü öğrencileri olumsuz yönde etkilemekte, başarılarını düşürmektedir. Gürültü ayrıca çocukların bilişsel algılamalarını da bozmaktadır (Abakay & Bulunuz, 2018). Yüksek gürültü düzeyi öğretmen ve öğrencilerin dikkatini dağıtmakta, zihin dağınıklığı ve yorgunluğuna neden olmakta ve öğrenmeyi zorlaştıran istenilmeyen davranışlara sebep verebilmektedir (Güremen, 2012).

Okullarda yüksek gürültü düzeyinin iki temel nedeni vardır. Birinci neden olarak öğrencilerden kaynaklı gürültüler, bozulmuş lambaların çıkardığı gürültüler, zil seslerinin yüksek oluşu ve anonslar gösterilebilir. İkinci neden ise gürültü için akustik tedbirlerin alınmamasıdır. Akustik konfor “genel olarak konuşmaların anlaşılabilir olduğu, seslerden ötürü sıkıntı yaratmayan ve zihni oyalayan, uygun bir konsantrasyona imkan veren çevre özelliği” olarak tanımlanmaktadır. Okul binalarının tasarımında akustik konfor ön planda tutulmalıdır (Bulunuz, Bulunuz & Tuncal, 2017).

Gürültü, Latince “yüksek ses, hoş olmayan ya da beklenmedik ses anlamına gelen “nausea” kelimesinden türemiştir” (Singh & Davar, 2004). Gürültü diğer bir tanım olarak, “insanların işitme sağlığını ve algılamasını negatif yönde etkileyen, fizyolojik ve psikolojik dengesini bozabilen, iş yerindeki performansını azaltan, çevrenin kendine has sakinliğini ortadan kaldırarak niteliğini değiştiren ciddi bir çevresel kirlilik türü” olarak tanımlanmıştır (Merkit & Bulunuz, 2019).

Gürültünün geçici veya kalıcı sağlık problemlerine yol açtığı bilinmektedir. Gürültü sinir ve dolaşım sistemimizi, hormon dengelerini bozabilmektedir, uyku bozukluğuna, huzursuzluğa, konsantrasyon bozukluğuna yol açabilmektedir. Sinirlilik, baş

dönmesi ve kalıcı işitme kaybı gürültünün diğer olumsuz etkileridir (Kılıç, Adalı & Kılıç, 2021). Gürültü ani kızgınlığa ve öfkeye yol açmakta, bu durum da odaklanamamayı ortaya çıkarmaktadır (Bulunuz & Akyün, 2019). Gürültü düzeylerinin etkileri, farklı dB aralıkları için aşağıdaki gibi gruplanmıştır:

- 0-35 dB aralığı: Zararsız gürültü.
- 36-65 dB aralığı: Uyku düzenini ve dinlenmeyi bozan, rahatsızlık veren gürültü.
- 66-85 dB aralığı: Ruhsal açıdan zararlı, işitme bozukluğuna sebep olan gürültü.
- 86-115 dB aralığı: Psikomatik rahatsızlıklara sebebiyet verebilen gürültü.
- 131-150 dB aralığı: Önemli hasarlar verebilen, çok tehlikeli gürültü.

Ülkemizde Çevre ve Şehircilik Bakanlığı tarafından çıkarılan “Binaların Gürültüye Karşı Korunması” adlı yönetmelikte eğitim-öğretimin verildiği derslikler, gürültü için birinci derecede hassas kategori içerisine alınmıştır. bu yönetmelikte derslikler ve okuma alanları hassasiyet derecelendirmesinde “gürültüye karşı çok hassas bina ve kullanım” sınıfındadır. Yönetmelikle binalar A’dan F’ye kadar Akustik Performans sınıflandırmasında belirtilmiştir. A sınıfı gürültüye karşı yüksek korumalı sessiz ortamı, F sınıfı gürültüye karşı korumasız ortamı temsil eder. Yönetmelik, yeni yapılacak veya tadilata girecek okul binalarına en az C sınıfı akustik performansı sağlama zorunluluğu getirmiştir. Gürültü üst sınırları;

- A sınıfı için 31 dB,
- B sınıfı için 35 dB,
- C sınıfı için 39 dB,
- D sınıfı için 43 dB,
- E sınıfı için 47 dB,
- F sınıfı için 51 dB dir (Bulunuz & Akyün, 2019).

Yönetmelikte gürültü düzeyi sınır değerleri derslikler için 39 dB, okul bahçeleri için 49 dB olarak belirlenmiştir (Merkit & Bulunuz, 2019).

Türkiye’de okullarda gürültü seviyelerinin ölçüldüğü araştırmalarda, gürültü seviyeleri yönetmelikle belirlenen sınır değerlerin üzerinde ölçülmüştür. İzmir İli Çiğli İlçesindeki bir İlköğretim okulunda okul bahçesinde ve koridorlarda ses düzeyleri ölçülmüş ve değerlerin 39 ve 49 dB değerlerinin üzerinde olduğu bildirilmiştir (Merkit & Bulunuz, 2019). Bursa Orhangazi İlçesinde üç ilkokul, üç ortaokul ve dört lisede gürültü düzeyleri ölçülmüş, bir okul haricinde, dersliklerdeki gürültü değerleri yönetmeliğin üzerinde ölçülmüştür (Abakay & Bulunuz, 2018). Diğer bir çalışmada da dört okulda ders esnasında ve teneffüste koridorlar ve okul bahçesindeki gürültü seviyelerinin yasal sınır değerlerin üzerinde olduğu belirtilmiştir (Orbak & Aydın, 2020). Sinop İl Merkezindeki okullarda ve bir köy okulunda gürültü ölçümlerinin yapıldığı araştırmada, ölçüm sonuçları yasal sınır değerler olan 39 ve 49 dB’in üzerindedir (Şahin, Şahin & Bağcı, 2014). Amasya İlindeki İlköğretim okullarındaki gürültü ölçüm seviyeleri de dış ortam için 54-77 dB, iç ortam için 67-74 dB aralığında bulunarak yine yasal sınırların üzerindedir (Güremen, 2012).

İlköğretim çağındaki çocuklarımızın, zamanlarının önemli bölümlerini geçirdikleri okullarındaki gürültü düzeylerinin belirlenmesi, çocukların sağlığı açısından büyük önem arz etmektedir. Çocuklarımız, yetişkinlerden daha fazla, gürültüye karşı savunmasız durumdadır. Bu nedenle, bu araştırmanın amacı, Uşak İlindeki İlköğretim okullarındaki gürültü düzeylerini belirlemek, yasal sınır değerlerle karşılaştırmak ve iş sağlığı ve güvenliği yönünden değerlendirmektir.

Materyal ve Yöntem

Bu araştırma TÜBİTAK 2209/A Üniversite Öğrencileri Araştırma Projesinden türetilmiştir (Proje No: 1919B012308050). Araştırma için Uşak Üniversitesi Fen ve Mühendislik Bilimleri Etik Kurulu’ndan izin alınmıştır (Karar No: 2023/33). Uşak İl Milli Eğitim Müdürlüğü’nden de kurum onayı alınmıştır. Gürültü ölçümleri proje bütçesi ile satın alınan “ET-956 FLUS” marka gürültü ölçüm cihazı ile gerçekleştirilmiştir. Ölçümler 2024 yılı Mart-Haziran ayları arasında yapılmıştır. Uşak Merkezde 14

İlköğretim okulunda gürültü düzeylerinin ölçümleri gerçekleştirilmiştir.

Gürültü ölçümleri ders ve teneffüs esnasında, koridorlarda ve okul bahçelerinde gerçekleştirilmiştir. Koridorlardaki ölçümler için, koridor başında, koridor ortasında ve koridor sonunda, 3 ölçüm noktasında 30'ar saniye aralıklarla 3'er ölçüm alınmıştır. Bu 9 ölçümün ortalaması o koridorun gürültü seviye değeri olmuştur.

Okul bahçelerindeki ölçümler için, 10'ar metre aralıklı 3 ölçüm noktasında 3'er gürültü ölçümü yapılmıştır. Bu 9 ölçümün ortalaması okul bahçesi için gürültü düzeyi olarak alınmıştır.

Bulgular

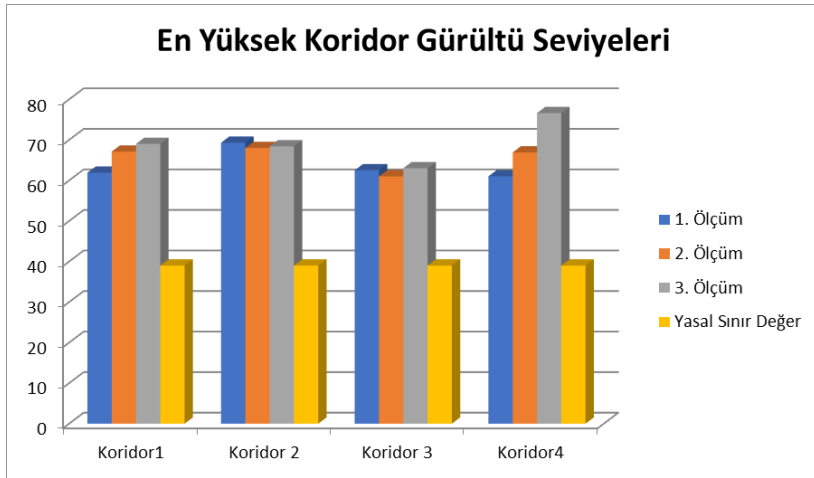
Bu araştırmada, Uşak İli Merkez İlçesindeki 14 İlköğretim okulunda gürültü seviyesi ölçümleri gerçekleştirilmiştir. Ölçümler ders esnasında ve teneffüs esnasında dersliklerin olduğu koridorlarda ve okul bahçelerinde yapılmıştır. Ders esnasında, koridor gürültü ölçümlerinde en yüksek gürültü düzeyi belirlenen okulun gürültü değerleri Tablo 1'de verilmiştir:

Tablo 1. Ders esnasında, koridorlarda en yüksek gürültü seviyesi ölçülen okulun gürültü değerleri.

OKUL 4				
	Koridor başı dB(A)	Koridor ortası dB(A)	Koridor sonu dB(A)	Ortalama dB(A)
Koridor 1 (Ders)	61,93	67,1	69	66
Koridor 1 (Teneffüs)	77,3	76,4	77,4	77
Koridor 2 (Ders)	69,3	68	68,4	68,5
Koridor 2 (Teneffüs)	74,8	77,4	73,2	75,1
Koridor 3 (Ders)	62,5	61	63	62,1

Koridor 3 (Teneffüs)	74	71,5	76,5	74
Koridor 4 (Ders)	61	66,9	76,6	68,2
Koridor 4 (Teneffüs)	71,7	69,2	67,8	69,6

Ortalama koridor gürültü değeri en yüksek olan OKUL 4 için, koridor gürültü ölçüm değerleri, yasal sınır değer olan 39 dB ile birlikte grafik olarak Şekil 1’de gösterilmiştir:



Şekil 1. En yüksek koridor gürültü değeri ölçülen okulun yasal sınır değeri ile birlikte gürültü düzeyleri.

Ders esnasında, koridor gürültü ölçümlerinde en düşük gürültü düzeyi belirlenen okulun gürültü değerleri Tablo 2’de verilmiştir:

Tablo 2. Ders esnasında, koridorlarda en düşük gürültü seviyesi ölçülen okulun gürültü değerleri.

OKUL 7				
	Koridor başı dB(A)	Koridor ortası dB(A)	Koridor sonu dB(A)	Ortalama dB(A)
Koridor 1 (Ders)	58,1	59,8	52,5	56,8
Koridor 1 (Teneffüs)	71,7	72,7	74,2	72,8
Koridor 2 (Ders)	55,5	58,3	48,1	54
Koridor 2 (Teneffüs)	74	70	72,6	72,2

Teneffüs esnasında, koridor gürültü ölçümlerinde en yüksek gürültü düzeyi belirlenen okulun gürültü değerleri Tablo 3’de verilmiştir:

Tablo 3. Teneffüs esnasında, koridorlarda en yüksek gürültü seviyesi ölçülen okulun gürültü değerleri.

OKUL 1				
	Koridor başı dB(A)	Koridor ortası dB(A)	Koridor sonu dB(A)	Ortalama dB(A)
Koridor 1 (Ders)	61,5	68,4	65,3	65
Koridor 1 (Teneffüs)	80	76	83,5	79,8
Koridor 2 (Ders)	65,3	64,8	68,4	66,2
Koridor 2 (Teneffüs)	81,8	88,8	82,6	84,4
Koridor 3 (Ders)	68,4	61,7	61,9	64

Koridor 3 (Teneffüs)	85,9	81,9	85,4	84,4
Koridor 4 (Ders)	64,9	67,3	65,6	65,9
Koridor 4 (Teneffüs)	87,4	80,4	80,6	82,8

Teneffüs esnasında, koridor gürültü ölçümlerinde en düşük gürültü düzeyi belirlenen okulun gürültü değerleri Tablo 4’de verilmiştir:

Tablo 4. Teneffüs esnasında koridorlarda en düşük gürültü seviyesi ölçülen okulun gürültü değerleri.

OKUL 10				
	Koridor başı dB(A)	Koridor ortası dB(A)	Koridor sonu dB(A)	Ortalama dB(A)
Koridor 1 (Ders)	67,9	62,3	61,8	64
Koridor 1 (Teneffüs)	75	76,2	74,5	75,2
Koridor 2 (Ders)	59,2	53,1	56,6	56,3
Koridor 2 (Teneffüs)	60,6	62	62,3	61,6
Koridor 3 (Ders)	56	57,1	54,1	55,7
Koridor 3 (Teneffüs)	61	60,9	61,4	61,1
Koridor 4 (Ders)	53,1	55,2	53,9	54,1
Koridor 4 (Teneffüs)	63,1	62,5	66	63,8

Okul bahçelerinde yapılan ölçümler için, ders ve teneffüs esnasında okul bahçesinde en yüksek gürültü ortalama değerine sahip okulun gürültü değerleri Tablo 5’de verilmiştir:

Tablo 5.Okul bahçesinde en yüksek gürültü seviyesi ölçülen okulun gürültü değerleri.

OKUL 2				
	Ölçüm Noktası-1 dB(A)	Ölçüm Noktası-2 dB(A)	Ölçüm Noktası-3 dB(A)	Ortalama dB(A)
Bahçe (Ders)	83,4	78,2	79,1	80,2
Bahçe (Teneffüs)	83,9	87,7	93	88,2

Okul bahçelerinde yapılan ölçümler için, ders ve teneffüs esnasında okul bahçesinde en düşük gürültü ortalama değerine sahip okulun gürültü değerleri Tablo 6’de verilmiştir:

Tablo 6.Okul bahçesinde en düşük gürültü seviyesi ölçülen okulun gürültü değerleri.

OKUL 7				
	Ölçüm Noktası-1 dB(A)	Ölçüm Noktası-2 dB(A)	Ölçüm Noktası-3 dB(A)	Ortalama dB(A)
Bahçe (Ders)	56,4	51,1	51,7	53,1
Bahçe (Teneffüs)	61,4	58,6	65,3	61,8

Araştırmada gürültü ölçümleri yapılan 14 okulun ders esnasında koridor, teneffüs esnasında koridor, ders esnasında bahçe, teneffüs esnasında bahçe ortalama gürültü değerleri Tablo 7’de verilmiştir:

Tablo 7. Tüm Okulların koridor ve bahçe ortalama gürültü değerleri.

OKUL	Koridor Ders dB(A)	Koridor Teneffüs dB(A)	Bahçe Ders dB(A)	Bahçe Teneffüs dB(A)
1	65,2	82,8	72,8	82,3
2	58,9	77,4	80,2	88,2
3	60,3	65,6	59,1	70,1
4	66,2	73,9	71,1	83,3
5	65,4	71	62,2	80,5
6	65,3	73,5	56,4	69,6
7	55,4	72,5	53,1	61,8
8	58,6	81	61,7	86,7
9	58,3	78,7	68,2	76
10	57,5	65,4	74,3	84,5
11	58,5	75,9	65,4	78
12	60,5	67,6	73	73,8
13	65	71,7	66	69,4
14	62,1	77	73	75,2

Sonuç ve Değerlendirme

Bu araştırma sonuçlarına göre, Uşak İli Merkezdeki İlköğretim okullarında gürültü düzeyleri, Çevre ve Şehircilik Bakanlığı'nın belirlediği sınır değerlerin üzerindedir. Ders esnasında koridorlardaki gürültü değerleri 55,4-66,2 dB arasında değişmektedir. Ders sırasında koridor gürültü ölçümlerinin ortalaması 61,2 dB'dir. Ders esnasında okul bahçelerindeki gürültü düzeyleri 53,1-80,2 dB arasındadır. Ders sırasında bahçe gürültü ölçümlerinin ortalaması 73,8 dB olarak bulundu. Teneffüs esnasında koridor gürültü düzeyleri 65,4-82,8 dB arasında ölçülmüştür. Teneffüs sırasında koridor gürültü ölçümlerinin ortalaması 66,8 dB'dir. Teneffüs esnasında okul bahçesi gürültü değerleri 61,8-88,2 dB aralığındadır. Teneffüs sırasında okul bahçesi gürültü ölçümlerinin ortalaması 77,1 dB'dir. Araştırmamızdaki yönetmelik sınır değerini aşan gürültü değerleri, literatürdeki çalışmalar ile

uyumludur (Beyazıt, Küçükçiftçi & Şan, 2011), (Kılıç & Adalı, 2020).

Gürültünün sağlığa zararları bilinmektedir. Büyüme çağındaki İlköğretim okullarında öğrenim gören çocuklarımız gürültünün zararlı etkilerinden korunmalıdır. Çocuklarımız gürültüye karşı savunmasızdırlar. Bu amaçla;

- İlköğretim okullarının binalarında akustik iyileştirmeler yapılmalıdır. Akustik iyileştirmenin yapıldığı bir okulda gürültü düzeylerinin belirlendiği çalışmada, akustik iyileştirme ile gürültü düzeylerinin yaklaşık iki kat azaldığı belirlenmiştir (Bulunuz, Bulunuz & Tuncal, 2017).
- Çevre ve Şehircilik Bakanlığı Türkiye'deki tüm okullarda gürültü düzeyi kontrolleri yapabilir. Okulların akustik açıdan kontrollerini yapabilir.
- Okullarda gerekli ses yalıtımları yapılmalıdır.
- Gürültünün çocuklarımıza verebileceği zararlar Televizyon ve Sosyal medyadan duyurularak farkındalık oluşturulabilir.

Uşak İli Merkez İlçesindeki 14 İlköğretim okulunun dersliklerin olduğu koridor ve okul bahçelerindeki gürültü düzeylerinin yüksek bulunmasının, çocuklarımız sağlığı için endişe verici olduğu söylenebilir. Bu okullarımız için akustik iyileştirmelerin yapılması zaruridir. Uşak İli Merkezdeki diğer ilk ve ortaöğretim okulları için de gürültü seviyeleri belirlenmelidir. Okullardaki gürültü düzeylerini iki yılda bir periyodik olarak belirlenmesi önerilmektedir.

KAYNAKÇA

Akabay, H., & Bulunuz, M. (2018). Okul İçi ve Okul Dışı Gürültü Düzeylerinin Karşılaştırılması. *Academy Journal of Educational Sciences*, 2(1), 53-65. <https://doi.org/10.31805/acjes.364014>

Beyazıt, N.T., Küçükçiftçi, S., & Şan, B. (2011). İlköğretim okullarında gürültüden rahatsızlığın alan çalışmalarına bağlı olarak saptanması. *İTÜ Dergisi*, 10(2): 169-181.

Bulunuz, M., & Akyün, C. S. (2019). BURSA'DA BİR DEVLET OKULUNDAKİ GÜRÜLTÜ DÜZEYİ VE AKUSTİK ORTAMIN DEĞERLENDİRİLMESİ. *Milli Eğitim Dergisi*, 48(1), 535-552.

Bulunuz, M., Bulunuz, N., & Kelmendi Tuncal, J. (2017). AKUSTİK İYİLEŞTİRME YAPILMIŞ BİR OKULDA GÜRÜLTÜ DÜZEYİNİN DEĞERLENDİRİLMESİ. *Eğitimde Kuram ve Uygulama*, 13(4), 637-658. <https://doi.org/10.17244/eku.347793>.

Güremen, L. (2012). AMASYA KENTİNDE İLKÖĞRETİM OKULLARINDA İÇ VE DIŞ ÇEVRE GÜRÜLTÜ KOŞULLARININ DEĞERLENDİRİLMESİ. *Engineering Sciences*, 7(2), 415-435. <https://doi.org/10.12739/nwsaes.v7i2.5000066849>.

Yalılı Kılıç, M., & Adalı, S. (2020). İlkokul Çevresinde Gürültü Kirliliğinin Belirlenmesi: Bursa İli Örneği. *Journal of the Institute of Science and Technology*, 10(3), 1607-1615. <https://doi.org/10.21597/jist.692523>

Yalılı Kılıç, M., Adalı, S., & Kılıç, İ. (2021). Hastane Çevresinde Gürültü Kirliliğinin Belirlenmesi: Bursa Örneği. *Turkish*

Journal of Agricultural and Natural Sciences, 8(3), 847-856.
<https://doi.org/10.30910/turkjans.873675>

Merkit, M., & Bulunuz, M. (2019). İlkokul Örnekleminde Gürültü Düzeyi Ölçümü ve Öğretmen Görüşleri Açısından Değerlendirilmesi: İzmir Örneği. *Sakarya Üniversitesi Eğitim Fakültesi Dergisi*(37), 1-26.

Orbak, A. Y., & Aydın, F. U. (2020). Türkiye’de Bir Büyükşehirdeki Okullarda Gürültü Seviyesinin Tespiti ve Öğretmenlerin Görüşlerinin Veri Madenciliği ile Analizi. *MANAS Sosyal Araştırmalar Dergisi*, 9(3), 1375-1390.
<https://doi.org/10.33206/mjss.557570>

Singh, N., & Daver, S. C (2004), Noise pollution—sources, effects and control. *Journal of Human Ecology (Delhi, India)*, 16 (3), 181-187.

Şahin, K., Şahin, A., & Bağcı, H. R. (2014). SİNOP ŞEHİRİ VE YAKIN ÇEVRESİNDEKİ BAZI OKULLARDA GÜRÜLTÜ KİRLİLİĞİ. *Studies of The Ottoman Domain (Osmanlı Hakimiyet Sahası Çalışmaları)*, 4(6), 20-31.

BÖLÜM V

Hibrit İnce Film Üretim Teknolojileri: Yöntemler, Uygulamalar ve Gelecek Perspektifleri

İdris CANDAN¹

Gülcan AYDIN²

Didem AVCI KARAKURT³

Abeer ALEDRESİ⁴

Ezgi TANTOĞLU⁵

1. Giriş

İnce film teknolojisi, modern dünyanın pek çok alanında devrim yaratan bir buluştur. Elektronik cihazlardan enerji çözümlerine, optik sistemlerden tıbbi uygulamalara kadar geniş bir yelpazede kullanım bulan bu teknoloji, malzemelerin yapısal,

¹ Doç. Dr., Kocaeli Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Kocaeli/Türkiye, Orcid: 0000-0002-9950-713X, idris.candan@kocaeli.edu.tr

² Kocaeli Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Kocaeli/Türkiye, Orcid: No:0000-0003-4627-961X, gulcan.aydin@kocaeli.edu.tr

³ Öğr. Gör., İstanbul Arel Üniversitesi, Meslek Yüksekokulu Fakültesi, Tıbbi Görüntüleme Teknikleri Programı, Orcid: No: 0009-0003-9597-734X, didemavcikarakurt@arel.edu.tr

⁴ Kocaeli Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Kocaeli/Türkiye, Orcid: No: 0009-0005-7125-9153, abeer. aledresi@kocaeli.edu.tr

⁵ Kocaeli Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Kocaeli/Türkiye, Orcid: No: 0009-0009-4905-5735, ezgi.tantoglu@kocaeli.edu.tr

elektriksel, manyetik, optik ve mekanik özelliklerini kökten değiştiriyor. Entegre devreler, LED'ler, güneş hücreleri ve MEMS gibi cihazların performansını artırarak daha hızlı, güçlü ve verimli hale gelmelerine olanak tanıyor (Alasağ, 2014; Oke & Tien-Chien, 2022).

İnce filmler, benzersiz özellikleriyle birçok sektörde fark yaratır. Örneğin, güneş panellerinin daha geniş yüzey alanlarında daha verimli enerji üretmesini sağlar, optik filtrelerde net ve hassas görüntüler sunar, biyomedikal cihazlarda yüzey biyoyumluluğunu artırır ve otomotiv endüstrisinde maliyeti düşürürken araç ömrünü uzatır.

Bu teknolojinin tarihi, antik uygarlıklardan modern sanayi devrimine kadar uzanır. İlk ince film örnekleri, 7000 yıl öncesine kadar dayanmaktadır. Metal cevherlerini azaltmak amacıyla kullanılan sıcak kömür ateşlerini çevreleyen seramik kaplar ve kayalar üzerinde kazara biriken metal kaplama katmanları olarak karşımıza çıkmaktadır. Antik Mısır'da mücevher ve dini eserlerin altın filmlerle kaplanması, Roma döneminde cam üzerine altın veya gümüş tozları kullanılması ve Peru'nun Moche halkının kimyasal biriktirme teknikleri bu tarihsel gelişimin örnekleridir. 19. yüzyılın sonlarında vakum teknolojilerinin gelişmesiyle modern ince film üretimi hız kazanmış ve günümüzdeki ileri düzey uygulamalara temel oluşturmuştur.

İnce film teknolojisi, her geçen gün daha fazla alanda hayatımıza girmekte ve geleceğin yenilikçi çözümlerinin temelini oluşturmaktadır. Bu eşsiz teknolojiyi anlamak ve kullanmak, çağımızın en önemli bilimsel ve endüstriyel adımlarından biridir.

2. Hibrit İnce Film Üretim Teknolojileri

Yüzey, maddeyi çevreleyen, dış ortamla temas eden ve maddenin geometrisini oluşturan tabaka olarak tanımlanır (Senirget, 2021). Malzemelerin dış ortamla etkileşimi yüzeyleri aracılığıyla gerçekleşir ve bu nedenle malzemenin birçok özelliği yüzeyin özelliklerine bağlıdır. Yüzey analizi yaparak malzemenin sürtünme, tribolojik durumları, yüzeye yakın mekanik durumlar, yüzey

morfolojileri, yapısal özellikler, ısı elektron yayılma durumları, elektrik kontak durumları, yüzey direnci, dış görünüm ve renkler, kimyasal aşınma, fotoelektrik, difüzyon, yapışma ve optik gibi özellikleri belirlenebilir (Keleşoğlu, 2011).

Bazı durumlarda malzemenin tamamında değişim yapmak yerine yüzeyinde değişim yapmak yeterli olabilir. Örneğin, metal bir malzemenin kimyasal reaksiyonlardan korunması için vernikle kaplanması yeterlidir (Keleşoğlu, 2011). Kaplama, atom veya moleküllerin bir alttaş yüzeyi üzerinde biriktirilmesi işlemidir (Bilgin, 2003). Malzemelerin istenilen özelliklere sahip olabilmesi için genellikle çok ince bir film şeklinde kaplanması gerekmektedir.

İnorganik-organik hibrit ince filmler hem inorganik hem de organik bileşenler içerir. Bu malzemeler, tipik kompozitlerden farklı olarak nanometre ölçeğinde bileşenlerin etkileşim içinde olduğu bir yapıya sahiptir. İki farklı malzemenin birleşimi, her bileşenin özelliklerinin entegre edilerek yeni hibrit malzemenin özelliklerinin oluşmasını sağlar. İnorganik bileşenler, hibrit malzemeye elektrik iletkenliği, mekanik dayanıklılık ve termal stabilite kazandırırken, organik bileşenler esneklik, şeffaflık ve ayarlanabilir dielektrik özellikler sağlar. Bu sayede, hibrit malzemeler saf malzemelerle karşılaştırıldığında yeni ve üstün özellikler sunabilir.

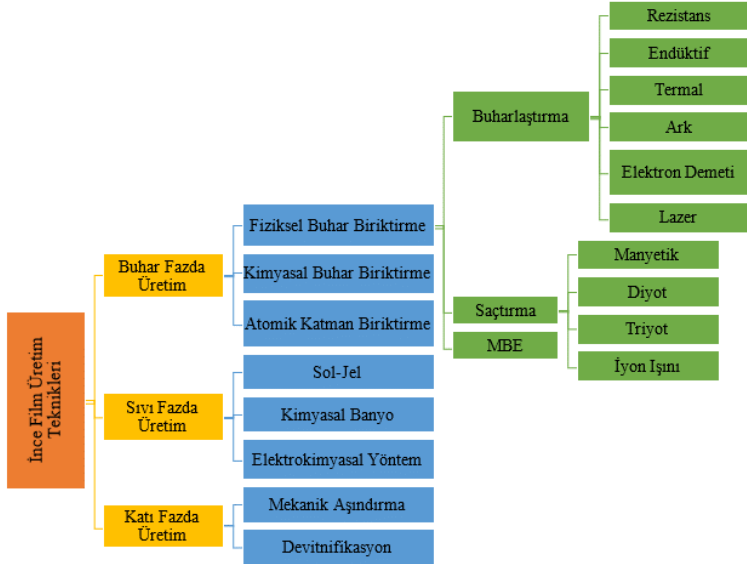
İnce film üretim teknolojileri, uygulama alanlarına bağlı olarak farklı yöntemler gerektirir. Üç ana fazda kaplama işlemi bulunmaktadır: katı, sıvı ve gaz fazı.

Katı Fazda Üretim: Malzemenin alttaş üzerinde katı hâlde ince film olarak oluşturulmasıdır. Bu yöntem, mekanik aşındırma ve devitrifikasyon olmak üzere ikiye ayrılır (Sigmund & Foulger, 1999; Ohring, 2002).

Sıvı Fazda Üretim: Kaplanacak malzemenin bir sıvı çözelti içinde çözünmesi veya dağılması yoluyla elde edilen çözelti kullanılarak malzeme üzerine uygulanmasıdır (Vayssieres, 2003; Capper & Mauk, 2007).

Buhar Fazda Üretim: Malzemelerin yüksek sıcaklıkta buharlaşması ve daha sonra alttaş üzerine kontrollü bir şekilde

yoğunlaşması yoluyla ince film üretilmesidir. Bu yöntem, yüksek kaliteli ve homojen filmlerin üretilmesine olanak tanır (Bohringer, 2000). Buhar fazda üretim yöntemleri, fiziksel buhar biriktirme, kimyasal buhar biriktirme ve atomik katman biriktirme olarak üçe ayrılır (Senirget, 2021). Şekil 1’de ince film kaplama teknikleri gösterilmiştir (Holmberg & Matthews, 1994; Mahan, 2000; Gerhard, 2009).



Şekil 1: İnce film üretim tekniklerinin sınıflandırılması verilmiştir.

İnorganik-organik hibrit malzemelerin kökeni binlerce yıl öncesine dayanır. Antik çağlarda bu tür karışımlar renkli boyaların üretiminde kullanılmıştır. Örneğin, 8. yüzyılda Mayalar, bitki yaprakları ile inorganik bir kil olan Palygorskite'yi birleştirerek günümüzde Maya Mavisi olarak bilinen pigmentleri üretmişlerdir. Bu boyalar, zorlu orman koşullarına ve çeşitli kimyasal maddelere karşı dayanıklıdır (Doménech & ark., 2009; Doménech & ark., 2013).

Endüstriyel düzeyde inorganik-organik malzemelere olan ilgi, 1930'larda sol-jel işleminin geliştirilmesiyle artmıştır. Bu yenilikçi yöntem, hafif reaksiyonlarla hibrit malzemelerin üretimini mümkün kılarak önemli bir kilometre taşı olmuştur (Kickelbick, 2007). Günümüzde bu malzemeler, kozmetik, otomotiv, tıp, optik ve elektronik gibi birçok alanda kullanılmaktadır (Sanchez & ark., 2011).

Hibrit ince filmlerin üretiminde, inorganik ve organik bileşenlerin farklılıkları zorluklar yaratabilir. Örneğin, organik bileşenler için uygun çözücüler genellikle inorganik bileşenler için verimli olmayabilir. Ayrıca, organik malzemeler genellikle termal olarak hassastır, bu nedenle vakum buharlaştırma teknikleri kullanılırken organik bileşen zarar görebilir. Ancak, hibrit ince filmler üretmek için çeşitli yöntemler geliştirilmiştir (Mitzi, 2001). Bu yöntemler, sıvı ve gaz fazında biriktirme olarak iki ana başlık altında incelenebilir ve her birinin avantajları, dezavantajları ve uygulama alanları detaylı bir şekilde ele alınmıştır.

2.1 Sıvı Fazda Üretim Tekniği

İnorganik-organik hibrit ince film üretiminde kullanılan sıvı faz yöntemleri, genellikle kolaylık ve pratiklik açısından avantaj sağlar. Bu süreçler, özel vakum sistemleri veya eldiven kutuları gibi ekipmanlara ihtiyaç duymaz, bu da maliyetleri azaltır. Ayrıca, gaz fazındaki öncül maddelerle çalışmak yerine, gaz olmayan öncüllerle çalışmak işlemi daha kolay ve güvenli hale getirir. Ancak, sıvı faz yöntemleriyle üretilen filmlerin kalitesi genellikle gaz fazı yöntemleriyle karşılaştırıldığında daha düşük olabilir ve kullanılan teknikler malzeme seçiminde bazı sınırlamalara neden olabilir. Bu bölümde, sol-jel ve kaplama metotları gibi sıvı fazda üretim tekniklerine odaklanılacaktır.

2.1.1 Sol-Jel Tekniği

Sol-jel tekniği, geniş bir uygulama alanına sahip olup özellikle inorganik-organik hibrit malzemelerin üretiminde yaygın olarak kullanılmaktadır (Mitzi, 2001; Gómez-Romero & Sanchez, 2004; Kickelbick, 2007). Bu teknik, Şekil 2'de gösterildiği gibi üç

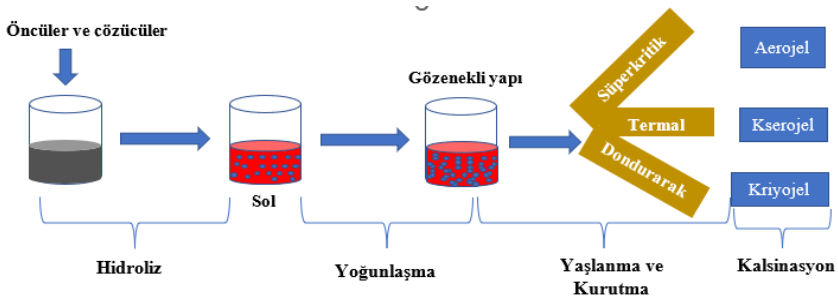
ana aşamadan oluşur: sol hazırlama, jel oluşturma ve jelin yoğunlaştırılması.

Sol Hazırlama: Sol-jel süreci, bir solun hazırlanmasıyla başlar. Sol, içinde dağılmış nanoparçacıkları içeren bir sıvıdır. Genellikle, alkoksitler, su, asit veya baz içeren çözelti ve gerekirse organik bileşenler kullanılarak homojen bir sol elde edilir.

Jel Oluşturma: Jelleşme aşamasında, sol içindeki bileşenler hidroliz ve kondensasyon reaksiyonları geçirerek bir jel oluşturur. Bu süreçte, nanoparçacıklar birbirine bağlanarak üç boyutlu bir ağ yapısı meydana getirir. Jel, genellikle belirli bir süre yaşlanma sürecine tabi tutularak dayanıklılığı artırılır.

Jelin Yoğunlaştırılması: Jelleşme sürecinden sonra, jelin içindeki sıvı çıkarılarak hibrit ince film elde edilir. Bu aşama, genellikle dehidrasyon veya kimyasal stabilizasyon adıyla anılır ve jel, yüksek sıcaklıklarda ısıtılarak yoğunlaştırılır.

Sol-jel tekniği, hibrit ince filmlerin üretiminde esneklik sağlar ve farklı malzeme kombinasyonlarıyla çeşitli özelliklere sahip filmler oluşturulmasına imkân tanır. Bu yöntem, sensörler, kaplamalar, optik cihazlar ve enerji depolama cihazları gibi çeşitli alanlarda kullanılan hibrit malzemelerin üretiminde yaygın olarak tercih edilir (Pierre, 2020).



Şekil 2: Öncüden aerojele kadar sol-jel işleminin farklı aşamalarının şeması verilmiştir, kalsinasyon adımıdan sonra son ürünler oluşmaktadır (Bokov & ark., 2021).

Sol-jel tekniğinin avantajları aşağıda verilmiştir (Bokov &

ark., 2021):

- Düşük sıcaklıkta sentez yapabilme yeteneği, malzemelerin özel gereksinimlerini karşılamada önemli bir avantaj sağlar.
- Yüksek üretim verimliliği sunarak, büyük ölçekli üretimlerde ekonomik ve hızlı bir süreç sağlar.
- Karmaşık şekillere sahip optik bileşenlerin üretimi, geniş bir uygulama yelpazesi için olanak tanır.
- Kompozit oksitler şeklinde homojen bileşiklerin sentezi, malzemelerin istenilen özelliklere sahip olmasını sağlar.
- Kimyasal bileşimin tasarlanabilir olması ve homojen bir bileşim elde etme imkânı, özel ihtiyaçlara uygun malzemelerin üretilmesini sağlar.
- Bu sürecin esnekliği, malzemelerin amorf yapıda sentezlenip ince tabakalara uygulanabilmesine olanak tanır.
- Düşük termal genleşme katsayısı, düşük UV Emilimi ve yüksek optik şeffaflık gibi modifiye fiziksel özelliklere sahip malzemelerin üretilmesi, özel endüstriyel ihtiyaçlara hitap eder.

Sol-jel yöntemi, birçok avantaja sahip olmasına rağmen bazı dezavantajları da bulunmaktadır. Bu dezavantajlar aşağıda verilmiştir (Modan & Plăiaşu, 2020):

- Sol-jel süreci genellikle zaman alıcı olabilir, özellikle jel oluşturma ve yaşlanma aşamaları uzun sürebilir, bu da üretim süresini uzatır.
- Bazı durumlarda sol-jel süreci karmaşık olabilir ve daha fazla işçilik ve deneyim gerektirebilir.

- Yüksek saflıkta malzemelerin kullanımı ve uzun süren işlemler, sol-jel yönteminin maliyetini artırabilir.
- Sol-jel yöntemi genellikle ince filmler veya küçük ölçekli malzeme üretimi için uygundur; büyük yüzey alanlarına kaplama yapmak için uygun olmayabilir.
- Sol-jel sürecinde kontrollü difüzyon zor olabilir, bu da malzeme özelliklerinin istenildiği gibi ayarlanmasını zorlaştırabilir.
- Jel oluşturma ve yaşlanma aşamalarında düşük sıcaklıklarda çalışılsa da son aşamalarda yüksek sıcaklıklar gerekebilir, bu da enerji tüketimini artırabilir.
- Yüksek kontrol ve optimizasyon gerektiren bir süreçtir; reaksiyon şartları, bileşen oranları ve diğer faktörlerin dikkatlice ayarlanması gerekebilir.

2.1.2 Kaplama Teknikleri

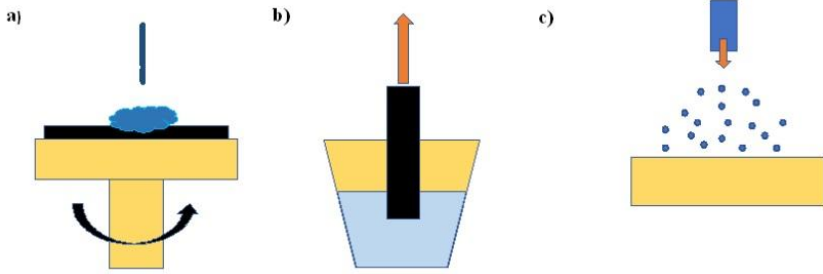
İnce filmlerin bir alt tabakaya uygulanması genel olarak daldırma, döndürme veya püskürtme yoluyla yapılabilir. Bu üç yöntem Şekil 3'te gösterilmiştir.

Daldırma ile Kaplama (Dip-Coating): Bu yöntemde, altlık çözeltiye daldırılır ve ardından sabit bir hızla sıvı banyosundan çekilir (Brinker & ark., 1991; Brinker & ark., 1996). Filmlerin yapısı, öncüler, yoğunlaşma ve buharlaşma hızları, kılcal basınç ve alt tabaka çekilme hızından etkilenir.

Döndürme ile Kaplama (Spin-Coating): Bu yöntemde, alttaşa az miktarda çözelti uygulanır ve ardından alt katman yüksek hızda çevrilir. Santrifüj ivmesi nedeniyle çözelti dışarı doğru yayılır ve bazı kısımları kenarlardan düşerken, yüzeyde ince bir film bırakır. Bu yöntem, kullanılan malzemenin israfına neden olabilir (Blankenburg & ark., 2009). Film kalınlığı, kullanılan çevirme hızı ve süresine bağlıdır. Bu yöntemle 10 nm veya daha ince filmler elde

edilebilir.

Püskürtme Kaplama (Spray Pyrolysis): Bu yöntemde, kaplama malzemesi altlığa püskürtülür. Bu teknik, özellikle boyaların karmaşık topografik yapılar üzerine uygulanması gibi büyük alanlara kaplama yapmak için uygundur.



Şekil 3: (a) döndürme, (b) daldırma ve (c) püskürtme kaplamanın şematik diyagramları verilmiştir (Biswas & Su, 2017).

Tablo 1’de kaplama tekniklerinin avantajları ve dezavantajları açıklanmıştır.

Tablo 1: Kaplama tekniklerinin avantaj ve dezavantajları verilmiştir (Karakuş, & Koç, 2023).

	Daldırma ile Kaplama	Döndürme ile Kaplama	Püskürtme ile Kaplama
Avantajlar	-Oldukça iyi bir düzenliliğe sahiptir. -Birkaç nm büyüklüğünde ince film üretimi yapılabilir. -Verimliliği yüksek, maliyeti düşüktür.	-Homojenliği ve düzenliliği yüksek ince filmler üretilebilir. -Maliyeti düşüktür.	-Film kalınlığı kolayca ayarlanabilir. -Geniş yüzey alanlarına uygulanabilir. -Düşük maliyetlidir.
Dezavantajlar	-Malzeme israfı olabilir. -Yavaş bir yöntemdir. -Alt tabakanın her iki tarafında kaplama bulunur.	-Geniş alanlara kaplama yapmak için uygun değildir. -Kaplama yapılan ortamın kirlenmesine neden olabilir. -İnce filmin kalınlığının kontrolü zordur.	-Homojenliği zayıftır. -Her malzemeye uygulanamaz. -İnce filmin kalınlığının kontrolü zordur.

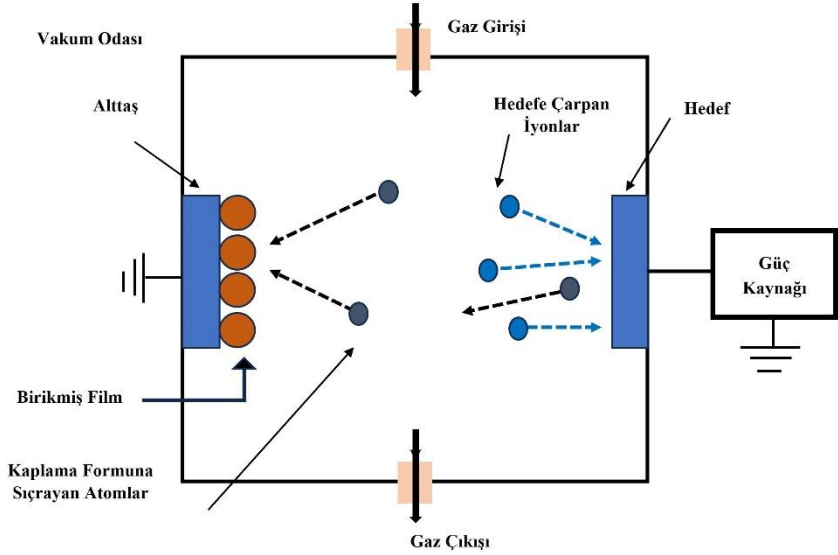
2.2 Buhar Fazda Üretim Tekniđi

Sıvı faz teknikleri her zaman hibrit ince film üretimi için uygun olmayabilir. Örneđin, gaz kirliliđinin en aza indirilmesi gerektiđinde vakum teknikleri kullanılması gerekebilir. Bu durumlarda, gaz fazı teknikleri tercih edilir. Gaz fazı teknikleri genellikle fiziksel buhar biriktirme ve kimyasal buhar biriktirme olarak iki ana gruba ayrılır. Atomik katman biriktirme tekniđi ise kimyasal buhar biriktirme tekniđinin bir alt kümesidir.

2.2.1 Fiziksel Buhar Biriktirme

Fiziksel Buhar Biriktirme (PVD) tekniđi, vakum altında malzemelerin buharlaştırılması veya sıçratılmasıyla gerçekleştirilen bir yüzey kaplama işlemidir. Bu süreçte, malzeme kaynağından kopan atomlar veya iyonlar, kaplanacak yüzeye yönlendirilir ve burada atomsal veya iyonik düzeyde biriktirilir. Şekil 4'te sunulan PVD tekniđinin işleyişı şu şekilde özetlenebilir:

- Vakumlu ortamda, kaplama malzemesi bir ısıtıcı aracılığıyla buharlaştırılır ve kaplanacak yüzeyde ince bir film tabakası halinde biriktirilir.
- Katı haldeki hammadde, yüksek enerji ile iyonlaştırılmış ve aktifliđi yüksek gazlarla plazma haline getirilir ve kontrollü bir şekilde kaplanacak malzemenin yüzeyine yapıştırılır (Sönmezođlu, Koç & Akın, 2012).



Şekil 4: Fiziksel buhar biriktirme (PVD) sisteminin şematik gösterimi (Pinto & ark., 2018).

PVD tekniği, kaplanan ince filmin kalitesini; altlık yüzeyinin durumu, yüzeye yapılan ön temizleme işlemi, kaplama işleminin parametreleri ve kaplanacak altlığın geometrisi belirler (Alasağ, 2014). Kaplanan ince filmin kalitesini ise katmanların yapısı ve kalınlığı, kaplanan malzemenin elementel bileşim dağılımı ile bu elementler arasındaki atomik düzeydeki etkileşimleri ve iç gerilmeler belirler. Bu teknik, kimyasal buhar biriktirme (CVD) tekniğine göre, düşük sıcaklıklarda sert metallerin ve yüksek hız çeliklerinin özelliklerini kaybetmeden uygulanabilir (Mattox, 1998; Mattox, 2003).

PVD biriktirme işlemi sırasında, malzemenin yüzeyine ince bir film veya kaplama uygulama sürecinde, sıcaklık 100 ila 1000 °C arasında önemli bir artış gerçekleşebilir (Achanta, Drees & Celis, 2011). Ayrıca bu yöntem kullanılarak, seramik nitelikli sert karbon, metal oksitler (Al_2O_3 , ZnO , SnO , TiO_2 vb.), aşınmaya dayanıklı nitrürler (TiN , TiAlN , CrN , ZrN vb.), borürler (TiB_2 , ZrB vb.), kabronitrürler, karbürler (TiC vb.), hidrojen katkılı elmas, elmas

benzeri karbon kaplamalar, srtnme zelliđini geliřtirmeye ynelik MoS₂ gibi kaplamalar retilir (řafak, 2008).

PVD tekniđinin bazı avantajları ařađıdaki řekilde sıralanabilir (Savař, 2004);

- Hemen hemen her kaplama, altlık (taban) malzemelerin zerine biriktirilebilir, metal, seramik, alařım, polimer gibi.
- Kaplamalar yksek yapıřma zelliđine sahiptir.
- Geniř bir biriktirme hız aralıđı vardır ve ok yksek hızlarda retim yapılabilir.
- Kaplanan yzey neredeyse kaplandıđı řekilde kaldıđından kaplama sonrası zımparalama iřlemine gerek yoktur.
- Vakumlu ortamda ve kontroll bir řekilde saf kaynaklar kullanarak iřlem yapıldıđından yksek saflıkta ince film katmanları elde edilir.
- Ařınmıř veya ařınma riski tařıyan malzemelerde bu yntem kullanarak malzeme dayanıklılıđı artırılabilir.

PVD tekniđinin bazı dezavantajları ise ařađıdaki řekilde sıralanabilir;

- Kompleks geometrik řekillere sahip yzeylerde tamamen kaplama yapılması zordur.
- Yksek sıcaklıklarda alıřmalar yapıldıđından sođutucu bir sistem gereklidir.
- Arařtırmacılar, kendilerine ve evreye zarar vermeden dzenli olarak alıřması iin retim esnasında ve sonrasında dikkatli olması gerekir.

Fiziksel buhar biriktirme tekniđi, temelde iki řekilde

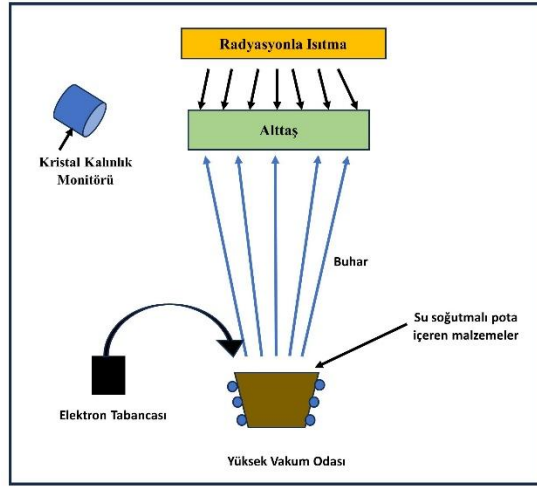
uygulanır: Altlık malzemesi vakum altında bir tutucuya sabitlenir ve bir kaynaktan gelen yüksek enerjili iyonlarla bombardıman edilirse sıçratma (sputtering) tekniği, kaynak veya kaynaklar yeterince ısıtılıp gaz haline getirilirse buharlaştırma tekniği olarak adlandırılır (Senirget, 2021).

2.2.1.1 Buharlaştırma Temelli Teknikler

Fiziksel buharlaştırma tekniğiyle ince film üretmek için, bir veya birden fazla kaynak malzeme yüksek sıcaklıklara kadar ısıtılır ve buharlaştırılır. Buharlaşan malzeme molekülleri daha sonra kaplanacak olan alt malzemenin üzerine yerleşir (Alasağ, 2014). Bu kaplama yönteminde, kaynak malzemesinin gaz hale geçmesi için pota veya kaynağın ısıtılması gerekmektedir. Isıtma işlemi farklı teknikler kullanılarak gerçekleştirilebilir ve bu teknikler genellikle kullanılan ısıtma yöntemine göre isimlendirilir.

2.2.1.2 Elektron Demeti ile Buharlaştırma

Vakum ortamında bulunan malzemelerin bulunduğu potanın üzerine manyetik alan kullanılarak yönlendirilen elektronlar bombardıman edilir. Bu elektronların artan yüzey sıcaklığı ile malzemeler buharlaştırılır. Yüksek ergime noktasına sahip malzemelerin, örneğin 4000 °C gibi, buharlaştırılması mümkündür. Elektronların yönlendirilmesi, buharlaştırma işleminin düzenli ve kontrol edilebilir olmasını sağlar (Sönmezoğlu, Koç & Akın 2012). Bu yöntem, homojen bir buharlaştırma sağlayabilir. Elektronlar, buharlaştırma için elektron tabancası ve oyuk katot kullanılarak üretilir. Elektron demeti ile buharlaştırma yönteminin işleyiş mekanizması Şekil 5'te gösterilmiştir.



Şekil 5: Elektron demeti ile buharlaştırma (e-beam evaporation) sisteminin şematik gösterimi (Xu & Huq, 2005).

Elektron tabancası, akım geçirilen flamanın ısınması ve elektron yaymasıyla çalışır. Üretilen elektronlar, odaklama için kullanılan bir mıknatıs tarafından hızlandırılır ve buharlaştırılacak malzemeye yönlendirilirler. Bu aşamada, kaynak malzemesinin yüzeyi taranarak buharlaştırma gerçekleştirilir (Doğan, 2001). Kaplamanın kalınlığı, vakum içerisinde alttaşın yanına yerleştirilen bir kalınlık ölçer (Thickness monitör) cihazıyla kontrol altında tutulur, böylece homojen bir kaplama sağlanır.

Oyuk katot ise, aktif olmayan gazların yardımıyla plazma oluşturarak buharlaştırma işlemi yapabilen bir silindir yapısıdır. Genellikle tungsten (W) gibi malzemeler kullanılır ve flaman üzerine uygulanan voltaj 4 kV ile 35 kV aralığında olabilir (Demiroğlu, 2019). Potaya yerleştirilen kaynak malzemesi buharlaştırıldığında, sadece malzeme ısıtılır ve potadan kaynaklanabilecek istenmeyen kirlilik azaltılır. Bu yöntem, yüksek bir biriktirme oranına ve malzeme kullanım verimliliğine sahiptir. Ancak, potadaki safsızlıkları azaltmak ve kontrolsüz büyümeyi engellemek için soğutma işlemi gerektirir.

Elektron demeti ile buharlaştırma yönteminin avantajları

şunlardır (Tracton, 2006);

- Elektron ışın tabancaları, biriktirilecek malzemeyi içeren büyük bir potada ayrı bekleme sürelerine sahip bir dizi noktayı tarayabilecek şekilde programlanabilir.
- Elektron ışın teknolojisi muhtemelen bugün en mevcut olan en hızlı biriktirme kaynağıdır, 12 m/s ve üzeri hızlara ulaşır.
- Teorik olarak en ekonomik süreçtir.
- Yüksek ergime noktasına sahip olanlar da dahil olmak üzere çoğu saf metal işlenebilir.

Elektron demeti ile buharlaştırma yöntemin dezavantajları ise şunlardır (Tracton, 2006);

- Bazı malzemelerin karmaşık yapısı sebebiyle katman boyunca eşit olmayan bir film üretilebilir.
- Bu yöntem aşınmaya karşı dayanıklılık gerektiren ve sert olması istenen malzemelerde kullanılır.

Elektron ışını demeti ile buharlaştırma yönteminin alanları, havacılık ve uzay endüstrisinden gaz türbini gibi termal bariyer kaplamalara, elektronik devre aygıtlardan, optik alanına kadar geniş bir yelpazede bulunmaktadır.

2.2.1.3 Termal Buharlaştırma

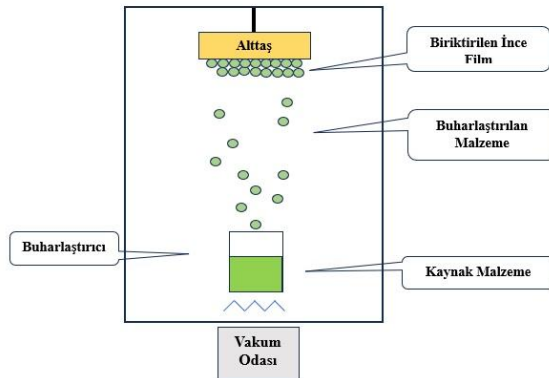
Termal buharlaştırma, vakum ortamında kaynak malzemenin ısıtılarak buhar basıncının yükselmesi sonucunda ısınan ve eriyen malzemenin yüzeyinden ayrılan atom ve moleküllerin bir alttaş yüzeyine tutunması işlemi olarak tanımlanabilir. Buharlaşma işlemi sıvı ya da katı bir malzeme yüzeyden olabilir. Bu yöntem, çok sayıda malzeme aynı vakum çemberi içerisinde buharlaştırılarak kaplama işlemi yapılmasına imkân sağlamakta ve yüksek vakum altında kaplama yapıldığından dolayı malzemelerin normal şartlar altındaki

buharlařma sıcaklıęının ok altındaki sıcaklıklarda buharlařmakta ve bylece kaplanan ince film katmanında kirlilik oranı minimum dzeyde olmaktadır.

Fiziksel bir kaplama yntemi olan termal buharlařtırmada, malzemeyi eritmek ve buhar basıncını kullanıřlı bir seviyeye getirmek iin elektrikli rezistans ısıtıcılar kullanılır. Bu iřlem sırasında, malzeme bir alttařın zerine atomik dzeyde birikir. Kaplanacak alttařın ve kaynak malzemenin yerleřtirildięi emberin 10^{-6} Torr'a kadar dřrlr ve bu řekilde termal buharlařtırma iřlemi yksek vakum altında gerekleřtirilir.

Buharlařtırılacak malzeme, iletken bir tekneye veya direnli bir bobine yerleřtirilir ve yksek bir elektrik akımı geirilerek ısıtılır. Malzeme ısındıka nce erir ve sonra buharlařır. Malzemenin sıcaklıęı ve buharlařma hızı, uygulanan akım miktarı ve bir kalınlık ler aracılıęıyla kontrol edilir.

Bu yntemde kullanılan kaplama malzemelerinin yerleřtirildięi potalar, tungsten (W), molibden (Mo) ve tantalum (Ta) gibi yksek erime noktasına sahip malzemelerden yapılır. Bazı durumlarda, 1700°C 'nin zerindeki sıcaklıklarda su soęutmalı bakır potalar da kullanılabilir (Aydın, 2011; Anonim, 2023). Termal buharlařtırma ynteminin iřleyiř mekanizması řekil 6'da gsterilmiřtir.



řekil 6: Termal buharlařtırma (thermal evaporation)

sisteminin şematik gösterimi (Sharma & ark., 2012).

Termal buharlaştırma işleminin avantajları şunlardır:

- Diğer yöntemlere göre film yoğunluğu düşüktür ve kirlenme seviyesi daha yüksektir.
- Düşük maliyetlidir ve yüksek kaplama hızına sahiptir.
- Buharlaştırılan parçacık enerjileri yaklaşık 1500 K değeri ile son derece hassas bir yöntemdir.
- Bu yöntemde gaz gönderimine ihtiyaç duyulmaması, yüksek vakum koşulları altında işlem yapılmasını sağlar ve kaplanan filmler yüksek saflıkta olur.
- Birçok malzemenin aynı anda kaplanabilmesi gibi pratik avantajlar sunar.

Termal buharlaştırma işleminin dezavantajları şunlardır:

- Büyük miktarlardaki üretimler, karmaşık geometrik yapıları nedeniyle son derece zorlayıcı olabilir.
- Bu yöntem, sadece düşük erime noktasına sahip malzemeler için uygundur.

2.2.1.4 Endüktif Buharlaştırma

Endüktif buharlaştırma yöntemi, bilimsel araştırmalarda ve endüstride yaygın olarak kullanılan bir yöntemdir. Yüksek sıcaklıklarda hızlı, hassas ve verimli bir ısıtma sağlar. Bu yöntem, 2100°C sıcaklığa kadar buharlaşabilen tüm malzemelere uygulanabilir; örneğin Al ve Ti gibi malzemeler buna örnek verilebilir. Literatürde, bu yöntem sıcak yüzeyden atom veya moleküllerin yayılması olarak da tanımlanır. PVD biriktirme kaynağı olarak kullanılan yayılan atom veya moleküller buhar oluşturur (Sönmezoğlu, Koç & Akın, 2012).

Bu buharlaştırma yönteminde, potanın içerisinde hedef malzeme bulunur ve etrafında su soğutmalı bakır tellere sahip bir bobin sarılıdır. Potanın elektrik akımını etkili bir şekilde iletebilmesi için genellikle elektriksel özellikleri yüksek olan malzemeler tercih edilir. Biriktirme işlemi, bobinlere uygulanan yüksek frekanslı alternatif akım (AC) ile beslenir ve bu akım, elektromanyetik bir alanın oluşturulmasına neden olur. Elektromanyetik alan, pota içindeki hedef malzemeyle etkileşime girer ve eddy akımlarını (eddy current) oluşturur. Bu etkileşim sonucunda, hedef malzeme ısınır.

Eddy akımları, hedef malzemedeki Joule ısısı üreterek malzemenin ısınma süresini artırır. Bu ısınma süreci sonunda buharlaşma sıcaklığına ulaşılır ve hedef malzeme buharlaşır. Buharlaşan malzemenin atomları veya molekülleri daha sonra altta malzemesi üzerine biriktirilir (Bunshah, 2001; Ürgen, 2005; Türküz, 2006). Endüktif buharlaştırma yönteminin işleyiş mekanizması, Şekil 7’de gösterilmiştir.

Endüktif buharlaştırma yöntemi, gıda, metal, yarıiletken, optik kaplamalar ve nanoparçacık üretimi gibi geniş bir uygulama yelpazesine sahiptir (Kuzmichev & Tsybulsky, 2011).

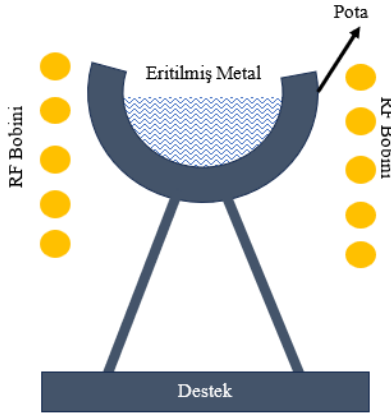
Endüktif buharlaştırma yönteminin avantajları şunlardır (Karakuş & Koç, 2023):

- Endüktif buharlaştırma işlemi, malzeme içinde eddy akımlarının oluşturulmasıyla doğrudan ısı transferini sağlayan bir yöntemdir. Bu sayede, malzemeyi taşıyan bir potanın önceden ısıtılmasına ihtiyaç duyulmaz.
- Bu yöntem, hızlı ısı transferi ve hassas sıcaklık kontrolü sağlama avantajına sahiptir.

Endüktif buharlaştırma yönteminin dezavantajları şunlardır (Karakuş & Koç, 2023):

- Maliyeti yüksektir.

- Biriktirme işleminde kullanılan bobinlerin kullanım ömürleri düşük olabilir.
- Sistem verimliliği düşüktür çünkü eddy akımının Joule ısısına dönüşmesi, potanın yüksek elektrik iletkenliği nedeniyle enerji kaybına yol açar.
- Bobinlerin ısınmasını önlemek için soğutma sistemi kullanılabilir, ancak bu fazladan enerji tüketimine neden olabilir.



Şekil 7: Endüktif yöntemi ile buharlaştırma işlemi görülmektedir (Türküz, 1997).

2.2.1.5 Lazer Yöntemiyle Buharlaştırma

Lazer yöntemiyle buharlaştırma işleminde, yoğun lazer ışını kullanılarak biriktirme işlemi gerçekleştirilir. En yaygın tercih edilen lazer türü Nd:YAG lazeridir.

Lazer yöntemiyle buharlaştırma işlemi, hedef malzemenin vakum ortamına yerleştirilmesiyle başlar. Buharlaştırılması amaçlanan malzeme, bir platform üzerine konur ve lazerin hedef malzemeye doğru yönlendirilmesi sağlanır.

Lazer ışını, hedef malzemeye çarptığında malzeme yüksek sıcaklıklara ulaşarak buharlaşma noktasına erişir. Bu süreçte, hedef

malzemenin atomları veya molekülleri buharlaşır. Bu buharlaşma işlemi sırasında, hedef malzemenin iyonize olmuş plazma bulutu da oluşabilir. Buharlaşan veya plazmaya dönüşen hedef malzemenin atomları veya molekülleri yoğunlaşarak alttaş üzerinde birikir (Karakuş & Koç, 2023). Bu işlemde, hedef malzemenin ısınım soğurma spektrumu, kullanılacak lazerin dalga boyunu belirler. Lazer yöntemiyle buharlaştırma yönteminin işleyiş mekanizması, Şekil 8’de gösterilmiştir.

Lazer yöntemiyle buharlaştırma işleminin avantajları şunlardır:

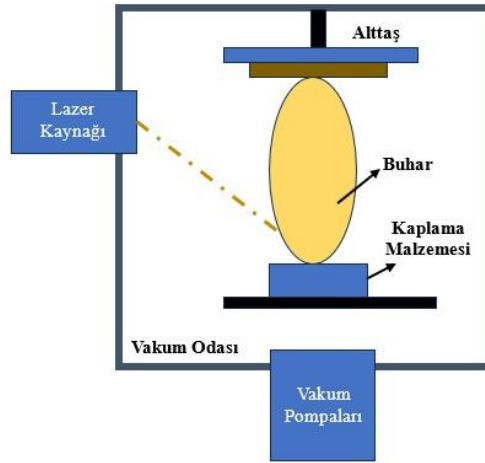
- Belirli malzemeler, lazer ışınlarını çok verimli bir şekilde absorbe edebilir. Bu, hedef malzemenin hızlı ve etkili bir şekilde buharlaşmasını sağlar (Karakuş & Koç, 2023).
- Lazer ışınlarının yoğunluğu ve odaklanması ayarlanabilir. Bu da hedef malzemenin hassas bir şekilde işlenmesini ve istenilen sıcaklık ve buharlaştırma hızlarının elde edilmesini sağlar.
- Kontrol edilebilir biriktirme parametreleri, çeşitli morfoloji, yapı ve işlevlere sahip ince filmlerin elde edilmesine olanak tanır (Papadopoulou & ark., 2009).
- Lazer ışını, doğrudan hedef malzemeye yönlendirilir, böylece enerji kayıpları en aza indirilir.

Lazer yöntemiyle buharlaştırma işleminin dezavantajları şunlardır (Sönmezoğlu, Koç, & Akın, 2012; Karakuş & Koç, 2023; Papadopoulou & ark., 2009; Popescu, Dorcioman & Popescu, 2016).

- Düşük erime sıcaklığına sahip malzemelerde bu yöntem daha sık tercih edilir.
- Hedef malzemenin lazer ışını ile buharlaştırılması sırasında, malzemenin bulunduğu platformun ısınması ve

buharlařması, alttař üzerinde kirlenmelere neden olabilir.

- Organik malzemeler iin uygun deęildir ünkü lazer ışını uygulandıęında malzeme zincirleri kırılabilir ve biriktirilen malzeme hedef malzemedenden farklı bir yapıya dönüřebilir.
- Hassasiyet gerektiren uygulamalarda, paracık ve damlacık oluřumu bu yöntemin kullanımını kısıtlayabilir.



řekil 8: Lazer yöntemi ile buharlařtırma işleminin diyagramı verilmiřtir (Türküz, 1997).

2.2.1.6 Rezistans Yöntemiyle Buharlařtırma

Rezistans ile buharlařtırma yönteminde, hedef malzeme rezistans aracılığıyla buharlařtırılır. İşlem vakum ortamında gerekleřtirilir. Hedef malzeme, pota ierisine yerleřtirilir ve rezistans telleri potanın etrafına veya altına yerleřtirilir.

Pota genellikle paslanmaya ve yüksek sıcaklıęa dayanıklı malzemelerden yapılır, örneęin alüminyum ieren seramik veya tungsten gibi. Pota, sistemin iinde kullanılacak rezistans gibi faktörlere baęlı olarak farklı řekil ve boyutlarda tasarlanabilir. Ayrıca, potalar dıřarıdan ısıtıldıęında erime veya buharlařma olmayacak řekilde üretilir (Karakuř & Ko, 2023).

Rezistans, tel veya levha şeklinde olabilir. Elektrik enerjisiyle beslenen rezistanslar, elektrik akımı geçirerek ısı üretir. Hedef malzeme, rezistans yüzeyine temas ettiğinde ısınır ve buharlaşmaya başlar. Buharlaşan malzeme yüzeyden uzaklaşarak alttaş üzerinde birikir. Rezistans ile buharlaştırma yönteminin işleyişi, Şekil 9'da gösterilmiştir.

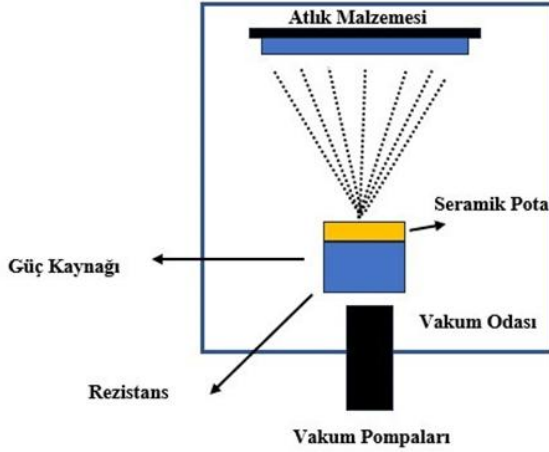
Rezistans ile buharlaştırma yöntemi, optoelektronik, elektronik, koruyucu kaplamalar ve optik filtreler gibi çeşitli uygulamalara sahiptir (Suthar & ark., 2022).

Rezistans ile buharlaştırma işleminin avantajları şunlardır (Sönmezoğlu, Koç, & Akın, 2012; Karakuş & Koç, 2023; Okay, 2006).

- Düşük potansiyel gerilim uygulanır, bu da işlemi daha güvenli hale getirir.
- Yüksek akım akışı sağlanır.
- Maliyet düşük ve işlem basittir.
- Yüksek güçteki rezistanslar sayesinde biriktirme hızı artar.
- Vakum ortamında gerçekleştirildiğinden, gaz molekülleri ve kirleticiler bulunmaz.

Rezistans ile buharlaştırma işleminin dezavantajları şunlardır (Sönmezoğlu, Koç, & Akın, 2012; Karakuş & Koç, 2023; Okay, 2006).

- Birçok element ve bileşik buharlaştırılmayacak niteliktedir.
- Düşük erime sıcaklığına sahip malzemelerin buharlaşmasında tercih edilir.
- Buharlaşan atom veya moleküller iyonlaşmazlar, bu da yüzeye yapışma derecesini azaltır.



Şekil 9: Rezistans yöntemi ile buharlaştırma diyagramı gösterilmiştir (Oktay, 2006).

2.2.1.7 Ark Yöntemiyle Buharlaştırma

Ark ile buharlaştırma yöntemi, hedef malzemenin bir ark kaynağı kullanılarak buharlaştırılmasıyla gerçekleşir (Sönmezoğlu, Koç & Akın, 2012). Ark, elektriksel olarak iyonlaşmış bir gazın oluşturduğu yüksek enerjili elektrik deşarjı olarak tanımlanır.

Ark ile buharlaştırma işlemi, vakum ortamında gerçekleşir. Bu, ortamdaki kirleticilerin ve gaz moleküllerinin temizlenmesini sağlar. Kaplama malzemesini oluşturacak hedef malzeme katot olarak adlandırılırken, alttaş malzemesi anot olarak işlev görür (Okay, 2006). Hedef malzemenin bulunduğu katot elektrodu, 2000-2500 dereceye kadar ısınabilir. İki elektrot arasında yüksek bir voltaj uygulanarak elektrik arkı oluşturulur. Bu ark, hedef malzemeden atom veya molekülleri kopararak buharlaştırır ve iyonize olmasını sağlar. Sonuç olarak, buharlaşan hedef malzemenin atom veya molekülleri alttaş üzerinde biriktirilir (Karakuş & Koç, 2023). Ark ile buharlaştırma yönteminin işleyişi, Şekil 10'da gösterilmiştir.

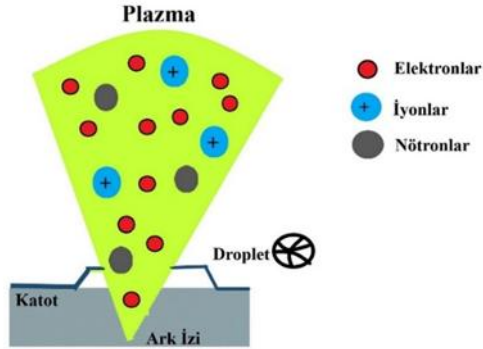
Ark yöntemiyle buharlaştırma işleminin avantajları şunlardır (Sönmezoğlu, Koç & Akın, 2012; Karakuş & Koç, 2023).

- Elektronların iyonlaşması, yüzeylere yapışma yeteneğini artırır.
- Aynı zamanda, elektronların iyonlaşması kaplama tabakasının hedef yüzeye güçlü ve yüksek kalitede bağlanmasına yardımcı olur. Bu durum, ek bir tavlama işlemine gerek olmadığı için işlemi daha basit hale getirir.
- Bu yöntemle çoklu bileşenli filmler üretilebilir.

Ark yöntemiyle buharlaştırma işleminin dezavantajları şunlardır (Sönmezoğlu, Koç & Akın, 2012; Karakuş & Koç, 2023).

- Kaplama işlemi sırasında yüksek enerjili kaynaklar kullanıldığında, örneğin ark deşarjı gibi, bu kaynakların kararsızlığı malzeme buharlaştırma sürecinde dalgalanmalara neden olabilir. Bu dalgalanmalar, ince film kaplamanın kalitesini olumsuz etkileyebilir ve filmde homojen olmayan alanlar oluşmasına yol açabilir.
- Malzeme buharlaştırma sırasında, hedef yüzeyinin belirli bölgelerinde yoğun bir malzeme birikimi veya damlacıklar oluşabilir.
- Yüksek enerjiye sahip elektronlar veya iyonlar katot elektrot yüzeyini aşındırabilir.
- Bu yöntem, karmaşık cihaz gereksinimlerine sahiptir. Gerekli ekipmanlar arasında vakum odası, elektrotlar, elektrik kaynağı, gaz besleme sistemi, soğutma sistemi, izleme ve kontrol sistemleri ile güvenlik önlemleri bulunur.
- Arkın kararsızlığı, üretim hızını olumsuz etkileyebilir. Aynı zamanda, film kalınlığının kontrolü önemlidir ve bu kontrol, üretim hızını etkileyen faktörlerden biridir.
- Elektrik arkında meydana gelebilecek dalgalanmalar,

buharlaşan malzemenin altına yönlendirilmesini etkileyen sürecin karmaşıklığı film kalınlığının kontrolünü zorlaştırabilir.



Şekil 10: Ark yöntemi ile buharlaşma mekanizması verilmiştir (Smallman & Ngan, 2007).

2.2.2 Saçırma ile Biriktirme Yöntemi

Sıçratma (Sputtering) yöntemi hızlandırılmış iyonlar ve bir kaynak malzeme hedefi arasındaki momentum transferine dayanan bir ince film biriktirme tekniğidir. Bu işlem düşük basınçta ve buhar fazda üretimin gerçekleştirildiği fiziksel buhar biriktirme yöntemlerinden biridir (Maissel & Glang, 1970).

Saçırma ile biriktirme yönteminin temelleri 1800'lerin ilk yarısında yapılan çalışmalar ile başlamış olup ilk olarak sürekli ışıma deşarjı ile ark arasındaki geçişi, DC ışıma deşarjlarının elektriksel yapısını ve konfigürasyonunu ve katottan (hedef) püskürtülen metal atomları doğasını araştırmak için optik emisyonun kullanımı üzerine birkaç makale yayınlandı. Michael Faraday 1838 yılında kızdırma deşarjlarının elektriksel ve optik karakterizasyonu hakkında bir makale yayınladı. Sonraki yıllarda ise saçırma yöntemi bu çalışmalar temel alınarak 1852'de William Grove tarafından bulundu ve daha sonra Langmuir ve Kingdon tarafından sputtering (saçırma) olarak adlandırıldı.

İnorganik-organik hibrit kaplama sürecinde, örneğin, Nunes ve diğerleri (2012) (Nunes& ark., 2012) tarafından, SiO₂ ve polipropilenin nanokompozit ince filmleri üretmek için saçtırma yöntemi kullanılmıştır. Bu filmler, nöral implantları inceledikleri zaman gümüş dispersiyonu için bir matris görevi görmüştür.

Saçtırma ile biriktirme uygulamasının en etkili uygulama alanı, katı yüzeyler üzerinde ince film oluşumudur. Saçtırma yönteminin uygulamalarında film oluşum hızı düşük ve yetersiz vakumdan dolayı gazın tutulması problemlidir. Ancak saçtırma yöntemindeki bu kusurlar, magnetron püskürtme yöntemi gibi saçtırma tekniğinin geliştirilmesi ve vakum teknolojisinin ilerlemesi ile ortadan kaldırıldı (Fukushima& Hosokawa, 1985; Anonim, 2023).

Saçtırma ile biriktirme yöntemi hedef (target) malzemenin yüzeyinde plazma oluşumuna ve bunun saçtırılarak alttaş üzerine kaplanmasına dayalı bir tekniktir. Plazma, yüksek enerjili gaz fazıdır ve iyonize olmuş atom veya moleküllerden oluşur. Plazma oluşturmak için elektrostatik ve elektromanyetik bir alanın oluşması gerekir. Saçtırma işleminin analizi ve tasarımı için kritik olan, iyonlar yüzeylerle çarpıştığında ne olduğunun anlaşılmasıdır. Bu yöntemde etkileşimlerin her biri iyon tipine (kütle, yük), ilgili yüzey atomlarının doğasına ve daha da önemlisi iyon enerjisine bağlıdır. İyonlar yüzeylerle çarpıştığında transfer edilen enerji miktarı Denklem 1’de verilmiştir (Tavşanoğlu, 2001).

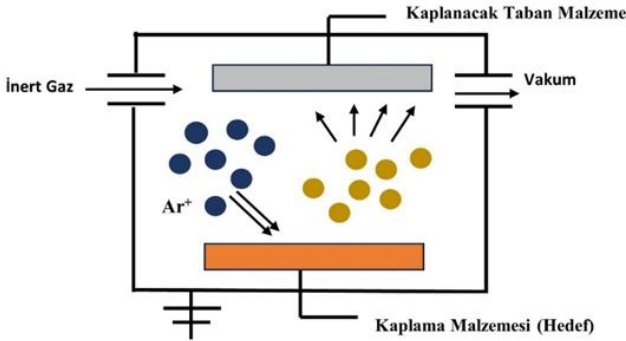
$$\varepsilon = \frac{4M_i M_t}{(M_i + M_t)} \quad (1)$$

Burada, ε = Transfer edilen enerji miktarı, M_i =Çarpışma öncesinde kütle miktarı ve M_t = Çarpışma sonrasındaki kütle miktarıdır.

Saçtırma ile ince film biriktirme işlemi düşük basınçlı vakum ortamında gerçekleşir. Bu işlem, hazırlık olarak adlandırılmaktadır. İnce film oluşturulacak vakum odasının havası alınır ve bir veya birden fazla vakum pompası yardımıyla atmosfer basıncının altında düşük basınç ortamı oluşturulur. Vakum odasında ince film

oluşturmak için seçilecek hedef (target) ve alttaş malzeme seçimi kritik öneme sahiptir.

Şekil 11’de gösterildiği gibi vakum ortamı içerisinde hedef (target) olarak adlandırılan malzeme negatif gerilime sahiptir, bu nedenle yüksek enerjili iyonize gaz iyonları (plazma içerisindeki argon gaz iyonlarıyla) elektrik alanının etkisiyle hedef malzeme üzerine sürüklenerek hedef malzemeyi iyon bombardımana tutar. Bu işlem sonrasında hedef malzemeden atom veya moleküller koparılır ve alttaş üzerine biriktirilerek ince film yapısı oluşturulur (Pauleau, 1994).



Şekil 11: Saçtırma işleminin şematik gösterimi (Şafak, 2008).

Saçtırma ile ince film biriktirme yönteminde işlemin etkinliği, saçtırma verimi ile ölçülmektedir. Saçtırma verimi S ile ifade edilir ve gelen iyon başına bir hedef yüzeyden saçtırılan atom sayısı olarak tanımlanır. Saçtırma verimi (S), iyonlaştırılmış gazların enerjisine, iyon ve hedef atomlarının kütlelerine, katıdaki bağ enerjilerine ve iyonların saçılma açısına bağlıdır (Orloff, Utlaut & Swanson, 2003). Saçtırma yöntemi ince film biriktirme ile, genellikle yüzey temizleme, yüzey aşındırma ve yüzey analiz işlemlerinde de kullanılmaktadır (Wasa & Hayakawa, 1992).

$$S = \frac{\text{Kopan atom ya da iyonlar}}{\text{Geri dönen iyonlar}} = \alpha \frac{Mm}{(M + m)^2} \frac{E_m}{U_M} \quad (2)$$

Burada, M =Hedef atomun kütlesi, m = Bombardıman iyonu kütlesi, E_m = Bombardıman edilen iyonun kinetik enerjisi, U_M = Hedef metalin bağlanma enerjisi ve α = Çarpma/gelme açısıdır.

Vakum değeri, gaz basınç değeri, elektrik akımı, saçırma gücü, işlem süresi, ışığın yoğunluğu, ışın açısı, hedef malzeme miktarı ve alttaş sıcaklığı gibi parametrelere göre saçırma ile biriktirme yöntemi kontrol edilebilmektedir. Bu yöntem esnasında kullanılan sistem bileşenleri aşağıda verilmiştir (Smith, 1995; Mattox, 1998; Martin, 2009; Basaran & ark., 2018).

Işın Kaynağı: Hedef malzeme üzerine yüksek enerjili iyonlar göndermek için kullanılır. Argon gazını hedefe göndermek amacıyla ışın kaynağı olarak iyon tabancaları kullanılmaktadır.

Alttaş (Substrate): Hedef malzeme üzerinden kopartılan atom veya moleküllerin biriktirildiği cam, ITO/FTO veya ince filmler kaplanmış cam veya silikon yoncaları gibi farklı yapılardır.

Vakum Çemberi (Chamber): İnce film biriktirme yönteminin gerçekleştiği alandır. Çember içerisindeki hava vakum pompaları aracılığı ile alınarak biriktirme işlemi sırasında malzeme yüzeyinin kirlenmesini ve kaynaklarda plazma deşarjını önlenmektedir.

Vakum Pompası: Vakum odasındaki havayı boşaltarak vakum ortamı oluşturmaya yarayan ihtiyaç duyulan vakum seviyesine göre seçilen ve mekanik ve turbo moleküler gibi çeşitli yapıdaki pompalardır.

Güç Kaynağı: DC (doğru akım) veya RF (yüksek frekans) kaynaklarını içeren bir elektrik devresidir. Işın kaynağından gelen yüksek enerjili ve gaz fazdaki iyonlarının hedef malzemeyi bombardıman edilmesini sağlamak için gerekli olan enerjiyi sağlayan kaynaklardır.

Alttaş Tutucu (Substrate Holder): Alttaş üzerine yerleştirilen ve alttaşın vakum odasındaki pozisyonunu sabitlemek için kullanılan alettir.

Kalınlık Ölçer (Thickness Monitor): İnce film biriktirme işlemi esnasında filmi kaplama hızının ve kalınlığının kontrollü bir

şekilde biriktirmesini takip etmek için kullanılan üzerine kaplanan film tabakasının kütlesi ve alanı ölçülerek biriktirilen kalınlığı kalınlık belirleyen sistem içerisine bütünleşmiş bir aygıttır.

Çevreleyen Gazlar: Vakum çemberi içerisinde hedef malzeme üzerinden atom ve molekülleri koparmak amacıyla genellikle argon gibi inert gazlar kullanılmaktadır.

Işık Kaynağı: Alttaş tutucunun ısıtılmasını sağlayan ısıtma aygıtıdır. Isı kaynağı olarak genellikle halojen lamba kullanılmaktadır.

Sıcaklık Ölçer: Film kaplanacak olan malzemenin yerleştirildiği alttaş tutucunun yüzeyindeki sıcaklığı ölçmek için kullanılan sıcaklık ölçüm aparatıdır.

2.2.1.1 Diyet Saçtırma

Diyot saçtırma sisteminde (diode sputtering), kaplama malzemesi yani hedef (target) malzeme katoda yerleştirilir ve kaplanacak malzeme (alttaş) ise anoda yerleştirilir. Hedef malzemenin yerleştirildiği katot bölmesi, hedef malzemesinin zarar görmesi engellenmek için su soğutmalı bir hazne yerleştirmiş şekilde tasarlanmıştır. Anot bölmesi ise kaplanacak malzemeye göre ısıtılmalı ya da soğutmalı olabilmektedir.

Diyotla saçtırma yapılacak vakum çemberinin havası alınarak çember içerisindeki atmosfer ile kirlilik oluşturacak yabancı gaz atomları vakum pompaları yardımı ile ortamdan uzaklaştırılır ve sonrasında vakum çemberi içerisine argon gazı gibi bir inert gaz enjekte edilir. İntert gazının (genellikle argon) basınç değeri yaklaşık olarak 13.3 Pa civarındadır. Elektrotlar arasına birkaç kV'luk DC veya RF gerilim uygulandığında hedef yüzeyinde bir plazma oluşturulur. Gerilim kaynağının seçiminde hedef malzemenin türüne bağlıdır. Hedef malzeme iletken ise doğru akım (DC), yalıtkan ise radyo frekansı (RF) uygulanır. Doğru akım uygulanan saçtırma sistemi, DC diyot saçtırma, radyo frekansı uygulanan saçtırma sistemi ise RF diyot saçtırma olarak adlandırılmaktadır. Çember içerisindeki argon gazı iyonları, hedef malzemeye doğru sürüklenerek hedef malzemedan atomları veya molekülleri sıçratır.

Bu şekilde anoda yerleştirilen kaplanacak malzeme (alttaş) üzerinde ince film oluşturulur (Wasa & Hayakawa, 1992).

Diyot ile saçtırma sistemi basit bir tasarıma sahiptir ve bu nedenle maliyeti düşük ve kolay kullanılabilir bir sistemdir. Ayrıca, yüksek saçtırma verimine sahip olup pek çok hedef malzeme kolaylıkla ve etkin bir şekilde kullanılabilir. Ancak, bu sistemde genellikle yüksek enerjiye sahip iyonlarla hedef malzeme bombardıman edildiğinden hedef malzemenin aşınmasına neden olabilmekte ve iyon bombardımanı sırasında istenmeyen bileşenlerin (kirlilik) ince film tabakası içerisine yerleşmesine ya da ince film içerisinde çok küçük deliklerin (pinhole) oluşmasına sebep olabilmektedir. Bunlara ek olarak, bu sistemlerde yüksek gerilim uygulanma ihtiyacı durumunda maksimum düzeyde güvenlik önlemlerinin alınması gerekmektedir (Totten, 1992). En büyük dezavantajı ise ikincil elektronların etkin olarak kullanılmamasıdır. Diğer saçtırma yöntemlere kıyasla düşük çalışma basınçlarında ($<0.67\text{Pa}/5.10^{-3}$ torr) ve daha düşük biriktirme hızına sahiptir (Vossen & Kerner, 1991).

2.2.2.2 Triyot Saçtırma

Triyot saçtırma sisteminde (triode sputtering), düşük basınçlarda iyonlaşmayı arttırmak ve plazmayı sürdürmek için diyot saçtırma sistemine ek olarak ısıtıcı ve pozitif gerilime sahip bir elektrot bulunmaktadır. Bu saçtırma sistemi, DC veya RF güç kaynağı tarafından beslenmektedir. Sisteme ilave edilen ek elektrot, saçtırma işlemini kontrol etmek için kullanılmaktadır ve elektrotlar arasındaki potansiyel farkı değiştirerek bir elektrik alanı oluşturur ve iyon akışını ve hareketini kontrol eder. Ayrıca, saçtırma sürecini etkiler ve saçtırma veriminin artmasını sağlar.

Triyot sistemlerinde sıcak katot saçtırma, daha yüksek parlaklık, verimlilik ve uzun ömür gibi avantajları nedeniyle en çok tercih edilen yöntemdir. Bu sistemlerde ek elektrot olarak genellikle ısıtılmış tungsten filaman kullanılmaktadır ve bu katot emisyon işlemi süreci boyunca elektron yayar ve böylece plazmanın sürdürülmesine sağlamış olur ve dolayısıyla iyonizasyon etkinliğini artırır. Böylece parlama deşarjı daha düşük basınçlarda (~ 6.6 Pa ile

0.13 Pa arasında) ve daha düşük voltaj değerleri (~50 V ile 100 V aralığında) uygulanarak oluşmaktadır. Bu sayede triyot saçtırma ile ince film biriktirme hızı (dakikada birkaç yüz nanometre seviyesinde) diyot saçtırma ile biriktirme hızına göre daha fazla olmaktadır. Bu yöntemin en önemli dezavantajı ise sıçratma sisteminde reaktif gazın varlığından dolayı filamanların ömrünün kısa olmasıdır (Wasa & Hayakawa, 1992; George, 1992; Sönmezoğlu, Koç & Akın, 2012).

2.2.2.3 İyon Işınli Saçtırma

Gaz basıncının parlama boşalması sırasında yükselmesinden dolayı gaz moleküllerinin saçılan parçacıklar ile ısınmasına ve üretilen ince filmlerin yapısına girmesine dolayısıyla yapının bozulmasına sebep olmaktadır. İyon ışınli saçtırma yöntemi (ion beam sputtering), iyon kaynağı olarak bir iyon tabancası kullanılır ve yüksek basınç ortamında çalışma imkânı veren bir yöntemdir. Püskürtme odasının gaz basıncı tipik olarak 10^{-5} - 10^{-4} Torr aralığındadır. İyon ışını akımı, kaynağın boyutlarına bağlı olarak 10mA ile birkaç amper arasında, iyon enerjisi ise 0,5 kV ile 2,5 kV arasında değişebilir değişebilmektedir. İyon tabancasından elde edilen yüksek enerjili iyonlarla hedef malzeme bombardıman edilir ve bu iyon bombardımanı sonucunda hedef malzemeden atomların veya moleküllerin saçtırılmasıyla alttaş üzerinde bir ince film tabakası oluşturulur. Bu sistemde iyon kaynağı, vakum odasından ayrı bir odada bulunmaktadır. Bu sayede iyon akım yoğunluğu ve iyon enerjisi sistemden bağımsız olarak kontrol edilmektedir. Alttaş malzeme iyon kaynağından ayrı bir odada bulunmasından dolayı hedef malzeme fazla ısınmamaktadır. Ancak, iyon kaynağından elde edilen iyon demetinin çapı küçük küçüktür ve bu nedenden dolayı ince film biriktirme hızı da düşüktür. Ayrıca, geniş yüzey alanına sahip malzemeler üzerine homojen dağılıma sahip bir ince film oluşturulamamaktadır (George, 1992; Sönmezoğlu, Koç & Akın, 2012).

2.2.2.4 Manyetik Alanda Saçtırma

Magnetron saçtırma olarak da adlandırılan manyetik alanda saçtırma yöntemi (magnetic field sputtering), düşük basınçlı

saçtırma yöntemi olup ince film cihazlarının üretimi için en umut verici tekniklerden biridir. Manyetik alanda saçtırma tekniği düşük basınçlı bir saçtırma tekniği olmasından dolayı filmlerdeki kirlilik oranı minimum düzeydedir ve yüksek bir biriktirme oranında çok çeşitli ince filmler yapılabilir (Adachi & ark., 2012). Manyetik alanda saçtırma yönteminde pozitif yüklü iyonları kontrol etmek için manyetik alan uygulanmaktadır. Bu saçtırma sisteminde de ilk olarak düşük basınçlı ve yüksek vakum ortamı oluşturulur ve sonra plazmayı oluşturmak amacıyla ortama argon gibi bir inert gaz enjekte edilir. Argon gazının iyonlaşması için katot ve anot arasına negatif bir gerilim uygulanır. Bu işlemde doğru akım DC (DC Magnetron Sputtering) ve radyo frekansı RF (RF Magnetron Sputtering) gibi farklı frekanslarda gerilimler uygulanabilmektedir. Manyetik alan serbest elektronları yakalayarak elektronların hedef malzemenin etrafında dönmesini sebep olur. Plazma içerisinde bulunan pozitif argon iyonları, hedef yüzeyindeki elektronları sıçratarak hedef malzemeden atom veya moleküllerin koparılmasını sağlar ve manyetik alan içerisinde saçtırılan yükler nötrdür ve bu nedenle manyetik alandan etkilenmezler (Shi, 2018).

Manyetik alanda saçtırma sistemlerinde, elektrik alan (E) ve manyetik alan (B) aynı anda uygulanmaktadır. Manyetik alan oluşturan mıknatısın bir kutbu hedef malzemenin (kaplama malzemesi, target) merkezine diğer kutbu ise köşelerine yerleştirilir ve böylece elektrik alan ile manyetik alanın birbirine dik olması sağlanır (Wasa & Hayakawa, 1992; Cansever, 2001). Bu tasarım sayesinde elektronlar elektrik ve manyetik alan varlığından dolayı spiral hareket yapacaklardır. Bu hareket sonucunda pozitif yüklü iyonlarla hedef malzeme etrafında dönen elektronların çarpışma olasılıklarını arttırarak ince film kaplama hızını ve kalitesini arttırmaya yardımcı olur. Manyetik alanda saçılma yöntemi düşük gerilim ve düşük basınç altında gerçekleşmesi en büyük avantajlarından biridir (Vossen & Kerner, 1991). Bunlara ek olarak, manyetik alanda saçtırma yöntemi, yüksek biriktirme oranı, ince filmlerin yüksek saflığı, düşük sıcaklık gibi avantajlara sahiptir. Manyetik alanda saçtırma yöntemi veri depolamada DVD'ler, lazer

diskler, sabit diskler, disketler, mikro-elektrik flash bellek ve CD'ler üretmek için kullanılmaktadır (Green, 2023).

Saştırma sistemlerinin avantajları şunlardır (Mattox, 1998; Türküz, 2006; Wender & ark., 2013):

- Bu sistemler sayesinde çok çeşitli metaller, yalıtkanlar, alaşımları ve kompozitler kaplanabilir.
- Elektrotlar üzerindeki potansiyeli tersine çevirerek film biriktirmeden önce yerinde temizleme özelliğine sahiptirler.
- Bu sistemlerde atomların kısmen daha enerjik olması, filmin iyon bombardımanı ile "yoğunlaştırılması" ve yüksek sıcaklıklara kadar ısıtmanın vakumda olan buharlaştırmadan daha kolay olmasından dolayı buharlaşma yöntemlerine göre saçırma sistemleri daha iyi ince film kalitesine sahiptirler.
- Tekrarlanabilir biriktirme işlemini kontrolünü sağlamak için, aynı işlem parametreleri altında sabit bir biriktirme hızı mevcuttur. Bu şekilde, zaman içinde film kullanımını kontrol etmek daha kolay hale gelir.
- Çok geniş bir yelpazedeki malzemeler biriktirme yapmak için hedef malzemesi olarak kullanılabilir. Bu yöntem ile üretilen malzemelerde X-ışını hasarı gözlenmez.
- Biriktirme, düşük sıcaklıklarda bir alttaş üzerine gerçekleştirilebilir ve dolayısıyla alt tabaka mikro yapısı ve özellik değişikliği ile ilgili sorunları bu yöntem sayesinde en aza indirgenir.
- Bu teknikte, saçırılan malzemeler alttaş yüzeyine iyi bir yapışma imkânı sunmaktadır.
- Saştırma teknikleri ayrıca endüstriyel olarak ölçeklenebilmekte olup çevre dostu süreçlere sahiptirler.

Saştırma sistemlerinin dezavantajları şunlardır (Mattox, 1998; Türküz, 2006):

- Saştırma sistemlerinde hedef üzerinde oluşan plazma tarafından üretilen iyonların bombardımanı sırasında alttaş hasarı oluşabilmektedir.

- Vakum çemberi içerisinde ultra temiz gazlar, yüksek saflıkta hedefler ve yüksek basınçlar $10^{-3} - 10^{-2}$ Torr (buharlaşmada $<10^{-5}$ Torr) kullanılmadıkça daha fazla kirlilik oluşabilir.
- Saçtırma sistemleri her malzeme için yüksek biriktirme oranına sahip değildir ve organik benzeri malzemeler iyon bombardımanı nedeniyle çok çabuk bozular.
- Hedefe gelen enerjinin büyük bir kısmı sistemin ısınmasına sebep olur ve ısınmanın önlenmesi için soğutma sistemlerine ihtiyaç duyar.
- Vakumda uygulanması gerektiğinden kurulum maliyetleri yüksektir ve sisteme verilen enerjisinin %70 veya daha fazlası hedefin ısıtılması sırasında harcadığından dolayı enerji verimliliği düşük seviyededir.

Saçtırma ile ince film üretme yönteminin birçok uygulaması vardır ve bu uygulamalardan bazıları Şekil 15'te verilmiştir (Lee & ark., 1994; Hishmeh & ark., 1996; Lu & ark., 1997; Jaydeep & ark., 2002; Lee & ark., 2014; Nur-E-Alam & ark., 2014; Chen & ark., 2016; Surmenev & ark., 2017; Lee & ark., 2018; Stognij & ark., 2019; Sakthivel & ark., 2019; Rydosz & ark., 2019).

2.3 Kimyasal Buhar Biriktirme Yöntemi

Kimyasal buhar biriktirme (Chemical vapor deposition, CVD) yöntemi, katı bir malzemenin doğrudan gaz halindeki bir fazından (çoğunlukla taşıyıcı gazlar ile seyreltilmiş) ısı, ışık, plazma veya kimyasal faktörler gibi çeşitli yollarla aktive edilebilen yüzey reaksiyonlarını kullanarak katı ince filmler oluşturmak için kullanılan bir ince film kaplama yöntemidir. Bu yöntem, katı kaynaklar kullanarak bu kaynakların buharlaştırılması esasına dayanan PVD işleminden farkı kaynakların gaz formunda olması ve bu gazların hedeflenen bir alttaş üzerine biriktirilmesi işlemine dayanmasıdır. CVD yönteminde, gaz fazda bulunan kimyasal bileşik, taşıyıcı gaz tarafından taşınarak taban malzeme üzerine difüzyon yolu ile birikir.

Kimyasal buhar biriktirme yönteminin geliştirilmesi, ilk olarak 1880 yılında ampullerdeki karbon filamentleri güçlendirmek amacıyla ortaya çıktı (Mattox, 2003). Aynı dönemde, Ludwig Mond

ve diğerk arařtırmacılar, CVD'nin öncüsü olan karbonil iřlemi gibi teknikleri geliřtirerek saf nikel üretimi için çalıřmalarda bulundular. Bu on yıl boyunca, CVD'nin temelleri hakkında bir dizi patent çalıřması gerçekleřtirildi (Pierson, 1999). Sonraki elli yıl içinde CVD yöntemi yavař bir geliřme gösterdi ve çoğunlukla tantal, titanyum ve zirkonyum gibi yüksek saflıkta refrakter metallerin üretimi için ekstraksiyon ve pirometalurjik iřlemlerle sınırlı kaldı (Pierson, 1999; Lau, 2016). Bu dönemde, CVD için temel oluřturan birçok klasik reaksiyon geliřtirildi, örneğın karbonil döngüsü (Mond iřlemi), iyodürün ayrıştırılması (de Boer-Van Arkel iřlemi) ve magnezyum indirgeme reaksiyonu (Kroll iřlemi) gibi (Pierson, 1999). İkinci Dünya Savařı'nın sona erdiğı dönemde, arařtırmacılar CVD'nin kaplama üretimi ve serbest formdaki nesnelerin üretimi için sağıladığı avantajları fark ettiler ve bu nedenle CVD yöntemi hızla yayılmaya bařladı. Bu tarihten itibaren CVD'nin önemi sürekli olarak arttı. 1960 yılında, CVD yöntemi tanıtıldı ve PVD yönteminden farklar ayrıntılı bir řekilde açıklandı. Aynı yıl, yarıiletken malzeme üretiminde de kullanılmaya bařlandı. 1963 yılında, plazma CVD yöntemi tanıtıldı. 1968 yılında, CVD kaplamalı semente karbürlerin endüstriyel kullanımı bařladı. 1980'lerde, CVD elmas kaplamalarının geliřtirilmesi önemli bir adımdı. 1990'ların bařlarında, metal-organik CVD'nin (MOCVD) seramik ve metal biriktirme için hızla geniřlemesi bařladı. Bu dönemde ayrıca CVD, PVD ve diğerk iřlemleri tek bir araçta birleřtiren küme araçların geliřtirilmesine yönelik çalıřmalar yapıldı ve bu yöntem, özellikle optik ve optoelektronik uygulamalarda hızla yaygınlařtı (Pierson, 1999).

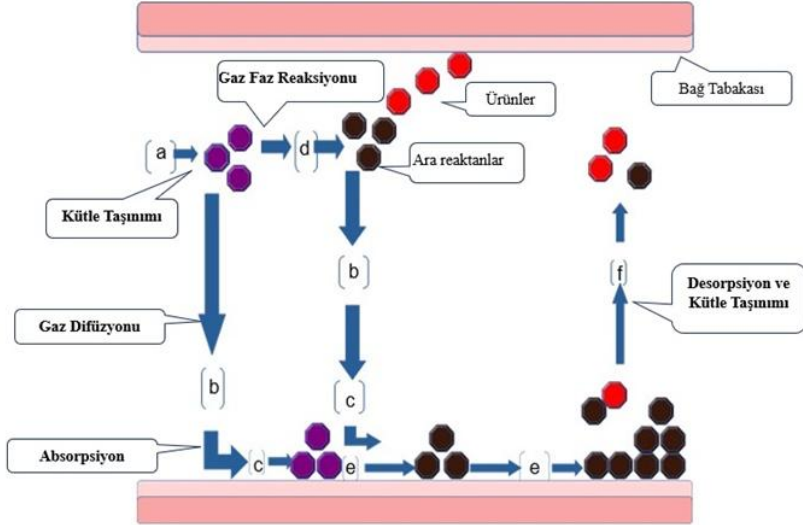
CVD yönteminde, kimyasal reaksiyonlar ile istenen film bileřimi ve kimyasal yapıyı oluřturmak için gerekli reaktif yapı tařlarının oluřturulması sağılanarak hem gaz fazı ařamasında hem de kaplama yapılan yüzeyde kimyasal reaksiyonlar gerçekleřir. Bu yöntem kullanılarak bařlangıçta seçilen öncülerin türüne bağılı olarak metaller, seramikler, organik maddeler, polimerler ve hatta sentetik peptitler de dahil olmak üzere çeřitli türlerde ince filmler sentezlenebilir ve biriktirilebilir. CVD yönteminde kaplama kalınlığı 10 mikrometreden daha incedir ve kaplama yapılan

malzemenin cinsine bağı olarak sıcaklık genellikle 1100 °C'ye kadar çıkabilmektedir. Kaplanan malzemenin stokiyometrisi, yüzey morfolojisi ve kristal yapısı kaplama parametreleri değiştirilerek kontrol edilebilmektedir. Kaplama işleminin süresi üretilmek istenen filmin kalınlığına bağıdır (Pierson, 1992).

CVD yönteminde, bir reaktif gaz ve bir taşıyıcı gaz kullanılmaktadır. Reaktif gaz, malzemenin yüzeyine film biriktirmek için kullanılırken; taşıyıcı gaz reaktif gazın doğru şekilde malzeme yüzeyine taşınmasını sağlamaktadır. CVD yöntemi, uygun bir buhar faz ortamı oluşturmak için düşük basınçlı bir ortamda gerçekleştirilir. Bu durum, reaktif gazın malzeme yüzeyine çarpmasını ve film oluşumuna imkân verir. CVD işlemi esnasında, reaktif gazın malzeme yüzeyine ulaşması ve film oluşturabilmesi için yeterli süre ve sıcaklık sağlanması çok önemli bir durumdur. Bu yöntem ile çeşitli filmler yüksek saflıkta ve farklı kalınlıklarında üretilmektedir.

CVD yöntemi uygulanırken süreç boyunca izlenen adımlar Şekil 12' de verilmiştir ve aşağıda verildiği gibi özetlenebilir (Choy, 2003; Yan & ark., 2013):

- İlk olarak, reaktif gazlar reaktör içerisine taşınır (adım a),
- İkinci aşamada, reaktan gazlar ya doğrudan sınır katmanından difüzyona uğrarlar (adım b) ya da alttaş üzerinde adsorpsiyona uğrarlar (adım c),
- Gaz fazı reaksiyonu yoluyla (adım d) reaktör içerisinde ara reaktanlar ve yan ürünler oluşur. Reaktörde oluşan reaktan ve yan ürünler, difüzyon (adım b) ve adsorpsiyon (adım c) yoluyla alttaş üzerinde birikme yaparlar.
- Yüzey difüzyonu ve heterojen reaksiyonlar (adım e), ince filmlerin veya kaplamaların oluşumundan önce alttaş yüzeyinde gerçekleşmektedir.
- Son aşamada ise, yan ürünler ve reaksiyona girmeyenler yüzeyden ve reaktörden uzaklaştırmak için egzoz sistemi kullanılarak dışarı atılır (adım f).



Şekil 12: Kimyasal buhar biriktirme (CVD) süreçlerinin şematik gösterimi (Sun, 2021).

Kimyasal buhar biriktirme işleminin avantajları şunlardır (Pierson, 1999):

- CVD işlemi, sıçratma, buharlaştırma ve diğer PVD işlemlerine kıyasla görüş hattı sınırlamasına tabi değildir, bu da onun yüksek atış gücüne sahip olduğu anlamına gelir. Karmaşık üç boyutlu şekiller genellikle sorunsuz bir şekilde kaplanabilir. Örneğin, yüzey/derinlik oranı 10:1 olan yapılar, CVD tungsten ile kolayca dolu hale getirilebilir.
- Kaplama hızı yüksektir ve kalın kaplamalar rahatlıkla elde edilebilir (bazı durumlarda santimetrelerce kalınlığa ulaşabilir). Bu işlem genellikle rekabetçi ve bazı durumlarda PVD işlemlerinden daha ekonomiktir.
- CVD ekipmanı genellikle ultra yüksek vakum gerektirmez ve genellikle birçok işlem varyasyonuna uyarlanabilir. Bu esneklik, biriktirme sırasında kompozisyon değişikliklerine ve elementlerin veya bileşiklerin kolayca bir arada biriktirilmesine olanak tanır.

Kimyasal buhar biriktirme işleminin dezavantajları şunlardır (Pierson, 1999):

- CVD yöntemi 600°C ve üzeri sıcaklıklarda en etkilidir. Ancak birçok alttaş malzemesi bu sıcaklıklarda kararlı bir yapıya sahip değildir. Plazma-CVD ve metal-organik CVD'nin geliştirilmesi, bu soruna kısmi bir çözüm sunmuştur.
- İşlemin gerçekleşmesi için yüksek buhar basıncına sahip kimyasal öncülere ihtiyaç vardır. Bu başlangıç öncüler son derecede tehlikeli malzemelerdir. Bu, işlemi uygularken güvenlik sorunlarına yol açabilir.
- CVD reaksiyonlarının yan ürünleri toksik ve aşındırıcıdır. Bu yan ürünler, nötralize edilmedir ve bu nedenle de işlem maliyeti artmaktadır.

2.3.1 Kimyasal Buhar Biriktirme Yöntemi Çeşitleri

Kimyasal buhar biriktirme yönteminde uygulanan koşullar kimyasal buhar biriktirme yönteminin türlerini belirlemektedir (Çoşğun, 2021). Bu türler, atmosferik basınçta kimyasal buhar biriktirme (APCVD), düşük basınçlı kimyasal buhar biriktirme (LPCVD), plazma destekli kimyasal buhar biriktirme (PECVD), lazer destekli kimyasal buhar biriktirme (LECVD) ve metal-organik kimyasal buhar biriktirme (MOCVD) olarak sıralanabilir.

2.3.1.1 Atmosfer Basıncında Kimyasal Buhar Biriktirme Yöntemi (APCVD)

Atmosfer basıncında kimyasal buhar biriktirme yöntemi (Atmospheric pressure chemical vapor deposition, APCVD), atmosfer basıncı altında gerçekleştirilen bir yöntemdir. İşlemden kullanılan gazlar, kaplanacak yüzey üzerinde bir gaz bulutu oluşturur ve biriken bu gazlar sayesinde ince film oluşturulur. Ortamda kullanılmayan atık gazlar ortamdan dışarı atılır. Bu yöntemin çalışma sıcaklığı 400 °C ile 1000°C aralığında olabilmektedir. Vakum gerektirmediği için CVD türleri içerisinde nispeten ucuz ve kolay bir yöntemdir. Fakat APCVD yönteminde biriktirme difüzyon ile sınırlıdır ve biriktirme sırasında yüzeyde pürüzlenmeler gerçekleşmektedir. APCVD yöntemi ile elde edilen ince filmler, transistör yapısı içindeki metal yüzeylerin kaplanacağı

yüzeye uygulanır ve metalin oturacağı bölgeye yerleştirme işleminde kullanılmaktadır.

2.3.1.2 Alçak Basıncılı Kimyasal Buhar Biriktirme Yöntemi (LPCVD)

Alçak basıncılı kimyasal buhar biriktirme yöntemi (Low-pressure chemical vapor deposition, LPCVD) atmosfer basının altındaki düşük basınçlarda gerçekleşen bir yöntemdir. LPCVD yöntemi genellikle 0.1 torr ile 2 torr basınç aralığında uygulanır.

LPCVD yönteminin diğer CVD türlerine göre avantajı alttaşıların reaktör içerisinde yatay pozisyonda yerleştirilmesi ile tek seferde daha fazla malzeme üretimi yapılmasına imkân sağlamasıdır. Tek bir işlem ile yaklaşık 200 tane alttaşı üzerine ince film kaplaması yapılabilmektedir. Ayrıca bu yöntemde alttaştın alt ve üst kısımlarında yer alan ısıtıcılar sayesinde ortamda homojen ısı sağlanabilmekte ve yüzeyde yüksek kalitede ince filmlerin birikmesine imkân sağlamaktadır (Xiao, 2012; Ohring, 2013).

2.3.1.3 Plazma Destekli Kimyasal Buhar Biriktirme Yöntemi (PECVD)

Plazma destekli kimyasal buhar biriktirme yöntemi (Plasma-enhanced chemical vapor deposition, PECVD), filmler üretilirken reaktif gazların ayrışması için plazma kullanılması ilkesine dayanmaktadır. Bu yöntemde, ince filmlerin üretilmesi için plazma aktivasyonu kullanılarak daha yüksek oranlarda ve daha düşük sıcaklıklarda biriktirme sağlanır. Plazma oluşturmak için bir radyo frekansı (RF) güç kaynağı kullanılmaktadır.

PECVD yönteminin diğer kimyasal buhar biriktirme yöntemleri ile karşılaştırıldığında avantajlarından biri, daha düşük sıcaklıklarda çalışma imkânı sunmasıdır. Ancak, bu yöntemin bir dezavantajı, iyon enerjisi dağılımı sırasında yayılan enerjinin kontrollü bir şekilde yüzey üzerinde malzeme biriktirmeye engel olması ve daha pürüzlü yüzey morfolojisine sahip filmlerin oluşmasıdır (Park & Sudarshan, 2001).

CVD kullanılarak yapılan hibrit örnekler arasında öne çıkanlar, heksametilsiloksan ve oksijen kullanılarak plazma ile geliştirilmiş CVD biriktirilmiş hibrit ince filmlerdir (Li & ark., 2013).

2.3.1.4 Lazer Destekli Kimyasal Buhar Biriktirme Yöntemi (LECVD)

Lazer destekli kimyasal buhar biriktirme yöntemi (Laser-enhanced chemical vapor deposition, LECVD), lazerin alttaşı tutucusuna odaklanması ile ısınması sonucunda termal bir enerji ortaya çıkarması ve reaktif gazların bu ısı ile ayrıştırılarak bir substrat üzerinde üretilecek olan malzemenin birikintilerinin oluşturması ilkesine dayanır. Alttaşın bölgesel olarak ısıtılması sebebiyle biriktirme sadece ısıtılan bölgede gerçekleşmektedir (Doppelbauer & Baeuerle, 1986). LECVD yöntemi, genel olarak yarı iletkenlerin, metallerin, seramiklerin ve dielektriklerin çeşitli alttaşlar üzerinde çökmesini sağlayan bir metottur. LECVD yöntemi ile geleneksel CVD tekniğinde gerçekleştirilmesi çok zor veya imkânsız olan düzlemsel ve düzlemsel olmayan yapılar üretilebilmektedir. LECVD yönteminde kimyasal reaksiyonun lazer demeti ile nasıl yönlendirildiğine bağlı olarak prolitik LECVD ve fotolitik LECVD olmak üzere iki temel mekanizma türü vardır. Prolitik LECVD yönteminde öncül olarak kullanılan gazdaki moleküller lazer fotonlarını soğurmaz ve odaklanan lazer spotundaki alttaşın yerel olarak ısıtılması ile kimyasal reaksiyon termal olarak başlatılır. Fotolitik LECVD yönteminde ise, lazer demetinin fotonları gaz molekülleri tarafından soğurulur ve gaz içerisindeki moleküllerin kimyasal bağları kırılır. Öncül gaz ve lazerin ürettiği fotonların enerjisinin seçimine bağlı olarak, fotoliz olayı tek-foton veya çoklu-foton işlemleri ile gerçekleşmektedir (Pierson, 1999).

2.3.1.5 Metal-Organik Kimyasal Buhar Biriktirme Yöntemi (MOCVD)

Metal-organik kimyasal buhar biriktirme yöntemi (Metal-organic chemical vapor deposition, MOCVD), epitaksiyel filmlerin büyütülmesi için geliştirilen ve alçak basınçlı kimyasal buhar biriktirme (LPCVD) yöntemine benzer bir mekanizmaya sahip bir

CVD yöntemidir. Bu yöntemde, malzemelerin fiziksel olarak birikmesinin gerçekleştiği MBE (Molecular Beam Epitaxy) sisteminden farklı olarak biriktirme, gaz fazı reaksiyonları yoluyla ilerler ve öncü gazların alttaş üzerinden akışıyla gerçekleşir. Bu yöntemde, metal içeren gazlar, organik yapıya sahip gazlar tarafından taşınır. Gazların, istenen filmi üretmek için ısıtılmış alttaş yüzeylerinde piroliz nedeniyle ayrışmasına olanak sağlanır. Metal-organik gaz bileşiklerin en büyük avantajı düşük sıcaklıklarda bile uçucu olmalarıdır. Bu yöntem kullanılarak homojen ve yüksek kaliteli film üretimi yapılabilmektedir. Öte yandan, kullanılan öncüllerin maliyeti çok yüksektir. MOCVD yönteminin bir diğer sorunu ise, kullanılan reaktan gazların zehirli olabilmeleri ve bu gazların havayla teması durumunda yanıcı olma özelliği taşımalarıdır (Yang, 2014).

2.4 Atomik Katman Biriktirme

Atomik katman biriktirme (Atomic layer deposition, ALD) tekniği, atomik seviye kontrolü ile üstün kalitede ince filmlerin biriktirilmesine olanak sağlayan oldukça hassas ve önemli bir buhar fazlı biriktirme tekniğidir (Elam & ark., 2003). ALD tekniğinin işleyiş mekanizması, kendi kendini sınırlayan yüzey reaksiyonlarına dayanmaktadır. Bu yöntemde, öncü moleküllerin bir alttaş yüzeyindeki ardışık adsorpsiyonu ve reaksiyonları, ince bir film tabakasının oluşumuna yol açar. Bu öncül moleküllerin, yüzeyde kimyasal olarak emilmesi için yeterli reaktivite sergileyebilmeli, yüzey reaksiyonlarına girebilmeli ve daha sonra tasfiye edilebilmelidir. Öncülerin seçimi, biriktirilen filmlerin bileşimini, yapısını ve özelliklerini belirlemede çok önemli bir rol oynamaktadır. Bu yöntemdeki sıralı büyüme mekanizması ise, karmaşık ve yüksek en-boy oranlı yapılarda bile tek tip ve konformal filmlerin oluşturulmasını sağlamaktadır (Knez, Niinistö & Leskelä, 2014). Film büyütülmesi esnasında film üzerindeki hassas kontrol, ALD'yi çok çeşitli uygulamalar için uygun hale getirerek film kalınlığı, tekdüzelik ve uygunlukta olağanüstü doğrulukta uygulanmasını sağlamaktadır. Sıcaklık, basınç ve maruz kalma süresi gibi işlem parametreleri, biriktirilen filmlerin büyüme davranışını ve özelliklerini belirler.

ALD tekniđi mikro ve nano-elektronik aygıtların üretimi, enerji depolama, güneş hücreleri, nano cihazlar, polimer yapılar, sensör, kataliz, optik, biyomedikal cihazlar ve malzeme bilimi gibi alanlar da dahil olmak üzere çeşitli alanlarda kullanılmaktadır. Mikroelektronikte ALD, transistör kapı oksitleri, kapasitör dielektrikler malzemeleri ve difüzyon bariyeri kaplamaları için ince film katmanları biriktirmek için de sıkça kullanılan bir yöntemdir. ADL yöntemi uygulanırken izlenen süreçler aşağıda verildiđi gibi özetlenebilir:

Yüzey Hazırlığı: İyi bir yapışma sağlamak ve düzgün film büyümesini desteklemek için uygun yüzey temizliđi ve hazırlığı birincil önceliđe sahiptir ve çok önemlidir. Yüzey hazırlığı, organik ve inorganik kirleticilerin kaplama yapılacak yüzeyden (alttaş) uzaklaştırılmasını içerir. Yüzeyin temizlenmesi süreci, solvent, plazma veya iyon bombardımanı gibi aşamaları içerir. Bunlara ek olarak, alttaş pişirme işlemi, yüzey üzerinde kalan nem ve film çekirdeklenmesini ve büyümesini etkileyebilecek kusurlara ve düşük kaliteye neden olabilecek safsızlıkları ortadan kaldırır. ALD tekniğinde, sıcaklık, basınç ve gaz akış hızı gibi parametrelerin hassas bir şekilde kontrolü ile alttaş hazırlığı birleştiiğinde, yüksek kaliteli ve homojen filmler elde edilebilir. Bu aşamada temizlenen alttaş, ALD reaktörüne yerleştirilir.

Öncü Dozlama: Birinci öncü gaz, kimyasal olarak emilmiş bir tabaka oluşturarak güzelce temizlenmiş olan alttaş yüzeyine verilir. Öncü, alttaş yüzeyinde adsorbe olur. Öncül olarak kullanılan yapılar şu şekilde özetlenebilir:

- **Metal Öncüler:** Metal organikler, organik ligandlara (organic ligand) bađlı metallerdir ve uçucudurlar. İnorganik metal öncüler arasında metal halojenürler, alkoksitler veya karboniller bulunur. Uçuculuk, reaktivite ve termal kararlılık gibi özellikler ALD için uygunluđu etkiler.

- **Oksijen Öncüleri:** Film yapısındaki oksijen bileşenini sađlayan öncüllerdir. Ozon, oksijen plazması veya su buharı gibi reaktif gazlar kullanılır ve film stokiyometrisini, kristalliđini ve kimyasal özelliklerini etkileyebilen öncüllerdir.

- Azot Öncüleri: Film yapısındaki azot bileşenini sağlayan öncüllerdir. Amonyak, nitröz oksit veya nitrojen plazma gibi organik veya inorganik bileşikler kullanılır ve film kararlılığını ve elektronik özelliklerini etkiler.

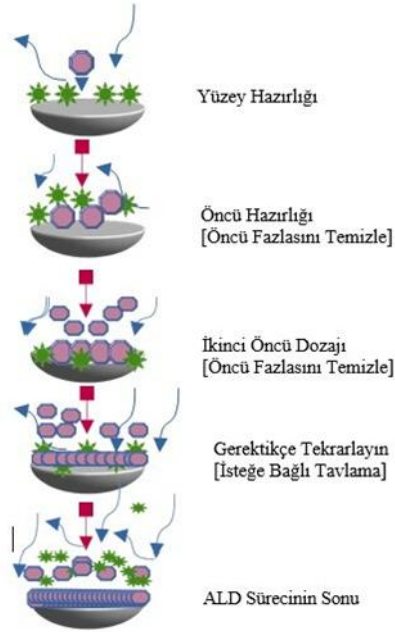
- Diğer Öncüler: Karbon, kükürt, fosfor ve silikon öncüllerini içerir. Karbon bazlı, metal sülfidler, metal fosfitler ve silikon bazlı filmler gibi çeşitli film türleri için kullanılmaktadır.

- Tasfiye: Öncü dozlamadan sonraki adımda temiz bir yüzey sağlamak için, fazladan biriken öncü gaz inert bir gaz yardımı ile tasfiye edilir.

İkinci Prekürsör Dozu: İşleme odasına ikinci bir prekürsör gaz verilir ve bu gaz kaplanacak yüzey üzerinde kalan kimyasal olarak emilmiş tabaka ile reaksiyona girerek yeni bir atomik tabaka oluşturur.

Tasfiye: Bir sonraki döngüye hazırlanmak için işleme odasındaki fazla ikinci bir prekürsör gaz tekrardan inert bir gaz yardımı ile tasfiye edilir.

Tekrar: İstenen film kalınlığını elde etmek ve sonraki atomik katmanları biriktirmek ve için öncü dozlama ve tasfiye adımları tekrarlanır. Ayrıca, yüzeyi doyurabilmek ve kendi kendini sınırlayan ALD sürecini elde etmek için öncü dozun, mevcut tüm yüzey bölgelerinin işgal edilmesini sağlayacak kadar büyük olması gerekir. Doygunluk için gereken dozun üzerinde, ne kadar büyük bir doz verilirse verilsin büyüme hızı sabit kalır. Bu aşamalara ek olarak, kaliteyi artırmak ve safsızlıkları ortadan kaldırmak için isteğe bağlı olarak filmler yüksek sıcaklıkta ısıtılma işlemi (annealing) tabi tutulabilir.



Şekil 13: Atomik katman biriktirme (ALD) sürecinin şematik gösterimi (Selvaraj, 2015).

Atomik katman biriktirme (ALD) yöntemini diğer biriktirme yöntemlerinden ayıran birkaç farklı ve çok önemli özelliği vardır. Bu farklılıklar, kendi kendini sınırlayan yüzey reaksiyonları, prekürsör kontrolü ve uygunluk olarak sıralanabilir.

Kendi Kendini Sınırlayan Yüzey Reaksiyonları: ALD, film kalınlığı ve homojenliği üzerinde hassas kontrol sağlayarak, sıralı, kendi kendini sınırlayan yüzey reaksiyonlarına dayalı olarak çalışmaktadır ve her reaksiyon döngüsü, atomik düzeyde kontrole izin veren tek bir atomik katman biriktirir.

Prekürsör Kontrolü: ALD, her prekürsörün bağımsız olarak eklendiği, kontrollü reaksiyonlar sağlayan ve istenmeyen yan reaksiyonlardan kaçınan ayrı prekürsör dozlama adımlarını şeklinde uygulanır.

Uygunluk: ALD, yüksek en boy oranlı özellikler ve nano gözenekler dahil olmak üzere karmaşık üç boyutlu yapılar üzerinde tekdüze filmlerin birikmesini sağlayan mükemmel uygunluk sağlar.

ALD sistemlerinin avantajları şunlardır:

- Hassas Kalınlık Kontrolü: Angstrom altı ölçekteki ince filmleri hassas bir şekilde biriktirilebilir ve çeşitli uygulamalar için ultra ince filmlerin üretilmesine imkân sağlar.
- Mükemmel Uyumluluk: ALD, düzgün olmaya zor denilebilecek geometrik yapılarda bile bile tek tip film kaplaması sağlayarak bu tür karmaşık yapılarda bile olağanüstü uyumluluk gösterir.
- Esneklik: ALD, metaller, oksitler, nitrürler, polimerler gibi çok çeşitli malzemeler ile istenen bileşim, yapı ve özelliklere sahip ince filmlerin oluşturulmasına olanak sağlar. Ayrıca, metaller, yarı iletkenler, seramikler, polimerler gibi çeşitli alt tabakalar üzerinde uygulamak, film bileşimi ve kristal yapısı üzerinde kontrol sağlamayı mümkün kılar.
- Tekdüzelik ve Kalite: ALD sistemleri ile yüksek kaliteli, güvenilir, düşük kusurlu ve tek biçimli filmler ince film üretilebilmekte ve ayrıca araştırma ve endüstriyel uygulamalar için ölçeklenebilir sistemlerdir.

ALD sistemlerinin dezavantajları şunlardır:

- Yüksek saflıkta öncüller: Tüm ince film kaplamalarında olduğu gibi ALD sistemlerinde kullanılan malzemelerdeki safsızlıklar üretilen filmlerin kalitesini etkiler. Dolayısı ile bu sistemlerde kullanılan öncü gazların saflık derecesi yüksek olmalıdır ve yüksek maliyet gerektirir.
- Düşük sıcaklıkta biriktirme: ALD sistemlerinde düşük sıcaklıklarda film üretimi yapılması bu sistemleri belirli malzemelerin üretimi ile sınırlar ve bazen de daha düşük kaliteli filmlerin elde edilmesine sebep olabilir.
- Yavaş biriktirme oranı: ALD sistemlerinde üretim esnasında kendi kendini sınırlayan bir özelliğe sahip olması süreci yavaşlatarak verimi düşürür ve üretim maliyetlerini artırır.

- Ölçeklenebilirlik: ALD sistemleri yavaş biriktirme hızlarına sahip olması nedeniyle zaman alıcıdır ve bu durum geniş alanlar üzerine film üretimini zorlaştırır.
- Yüksek maliyet: Özel ekipman ve yüksek saflıkta öncüler gerektirir ve bu durum ALD sistemlerini büyük ölçekli endüstriyel uygulamalar için maliyetli hale getirir.

2.5 Moleküler Katman Biriktirme (MLD)

Moleküler Katman Biriktirme (MLD) tekniği, Atomik Katman Biriktirme (ALD) ince film biriktirme yönteminin bir alt kümesidir. ALD tekniğinin işleyiş mekanizması, kendi kendini sınırlayan yüzey reaksiyonlarına dayanmaktadır. ALD'deki çalışmaların çoğu inorganik polimer malzemelere odaklanmıştır.

MLD süreci, her iki öncü kimyasalın organik malzemeler olduğu, sonucunda organik veya polimerik bir film malzemesi elde edilen moleküler seviyede gerçekleşen bir süreçtir (Yoshimura, Tatsuura & Sotoyama, 1991). MLD işleyiş süreci atomik katman biriktirme tekniğiyle aynıdır. Organik katmanlar birçok potansiyel kullanıma sahiptir ve çeşitli malzeme bileşimleri mümkündür. MLD tekniği diğer yöntemlere kıyasla literatürde oldukça az araştırılmıştır ve araştırmaların çoğunluğu hibrit organik-inorganik malzemelerle ilgilidir.

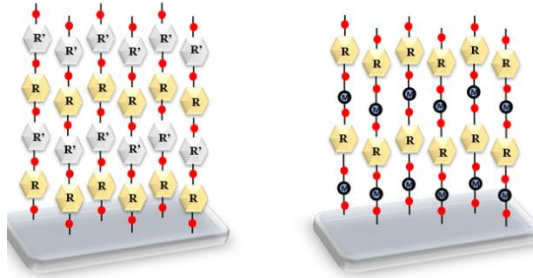
2.6 ALD/MLD Yöntemlerinin Birleştirilmesi

ALD ve MLD yöntemleri dört adımdan oluşur ve bu adımlar tekrar eden bir sıralamaya, yani bir döngüye sahiptir. Bu döngü, istenen kalınlığa ulaşıncaya kadar tekrarlanır. İlk adımda, inorganik prekürsör reaktöre gönderilir ve substrat yüzeyinde reaksiyona girer. İkinci adımda, muhtemel yan ürünler inert gaz aracılığıyla reaktörden uzaklaştırılır. Üçüncü adımda, organik prekürsör reaktöre gönderilir ve reaksiyona girer. Son adımda ise tekrar muhtemel yan ürünler inert gaz aracılığıyla reaktörden uzaklaştırılır. Bu döngü sonucunda substrat yüzeyinde tek katmanlı hibrit ince film oluşur.

Organik ve inorganik reaktanların bir arada kullanılması, MLD ve ALD teknolojilerinin birleştirilmesiyle gerçekleşir. Bu

sayede hibrit ince filmler, sadece iki ana malzemenin özelliklerine sahip olmakla kalmaz, aynı zamanda tamamen yeni özelliklere de sahip olabilir. Kendi kendini sınırlayan bir büyüme elde etmek için prekürsör gönderildiği süre ve temizleme adımlarındaki sürenin yeterince uzun olması gerekmektedir. Aksi takdirde, büyüme ideal olmayabilir ve tekdüzelik sağlanamayabilir (Elam & ark., 2002; Lee & ark., 2013; Niemelä & ark., 2020; Tanskanen & ark., 2021).

İnorganik bileşen, hibrit malzemeye mekanik, optik, kimyasal ve elektriksel özellikler katar, organik bileşen ise daha yüksek esneklik, azaltılmış yoğunluk ve düşük maliyet sağlayabilir. Hibrit malzemelerin yapısı genellikle "metalkon" olarak adlandırılan M-O-R formülüne sahiptir, burada M metal, O oksijen ve R küçük bir organik parçayı temsil eder. Metal kaynakları olarak trimetil alüminyum, dietil çinko gibi prekürsörler kullanılırken, organik parçalar genellikle organik alkoller ya da karboksilik asitlerdir.

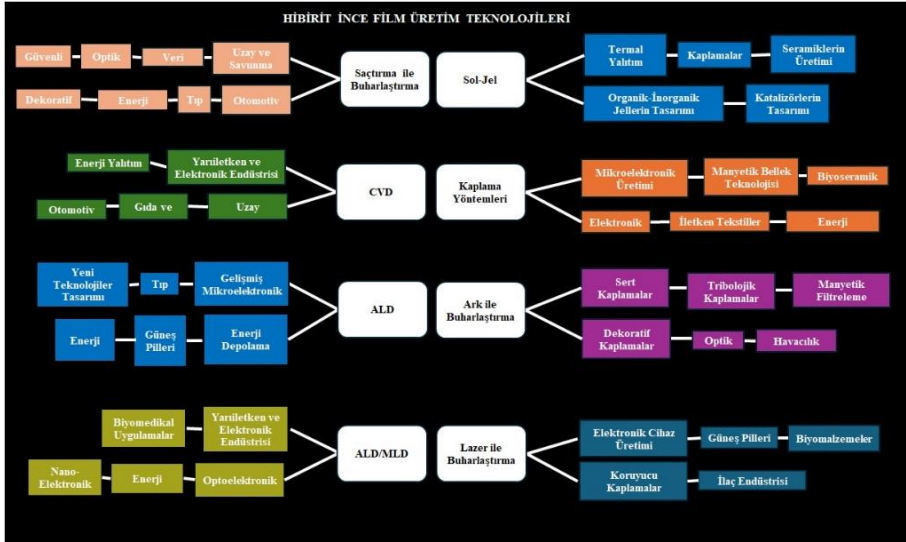


Şekil 14: MLD (sol) tarafından büyütülen tamamen organik ince filmlerin ve ALD/MLD (sağ) tarafından büyütülen hibrit inorganik-organik ince filmlerin şematik gösterimi (Sundberg & Karppinen, 2014).

ALD/MLD yönteminin avantajları şunlardır:

- Gaz fazlı yaklaşımlarda film kalınlığında tek düzelik sağlanması, atomik ve moleküler seviyede kontrollü bir film oluşumunu mümkün kılar.
- Bu teknikler, yüzey alanını maksimum seviyede kullanabilir ve yüksek verimlilik sağlayabilir (Lee & ark., 2013).

- Prekürsörlerin sırayla gönderilmesi, CVD yöntemine göre daha kontrollü bir kaplama imkânı sunar.
- CVD yöntemi yüksek sıcaklıklar gerektirirken, ALD/MLD yöntemleri düşük sıcaklıklarda bile üst düzey kalitede ince filmler üretebilme kapasitesine sahiptir (Oviroh & ark., 2019). ALD/MLD yönteminin dezavantajları şunlardır:
- İşlem yavaş olabilir ve daha karmaşık ekipmanlar gerekebilir.



Şekil 15: Hibrit ince film üretim teknolojilerinin uygulama alanları verilmiştir (Goodrich, 1996; Golombek, Dobrzański & Soković, 2004; Jung, Park & Kang, 2010; Popescu, Dorcioman & Popescu, 2016; Tang & Yan, 2017; Lux, 2019).

Tablo 2: Başlıca ince film biriktirme tekniklerinin karşılaştırılması yapılmıştır (Multone, 2009).

Özellikler	Sol-Jel	PVD	Sputtering	CVD	ALD
Biriktirme türlerinin üretimi	Kimyasal Reaksiyon	Termal enerji	Momentum transferi	Kimyasal reaksiyon	Kimyasal reaksiyon
Biriktirme oranı		Çok yüksek olabilir	Saf metal hariç düşük	Ortadan yükseğe	Düşük
Biriktirme türleri	Moleküller	Atomlar ve iyonlar	Atomlar ve iyonlar	Atomlar	Atomlar
Alt tabakanın bombardımanı	Hayır	Normalde hayır	Evet	Mümkün	Hayır
Alt tabaka ısıtma	Hayır	Normalde evet	Genellikle hayır	Evet	Evet
Birikim türlerinin enerjisi	Düşük	Düşük	Yüksek olabilir	Düşük, ancak PECVD'de yüksek olabilir	Düşük
Metal alaşımı biriktirme	Evet	Evet	Evet	Evet	Sınırlı
Bileşik biriktirme	Evet	Evet	Evet	Evet	Evet
Avantajlar	Esnek uygulama, yüksek biriktirme oranı	Basit	Geniş element aralığı	Geniş alan	Kalınlık kontrolü
Dezavantajlar	Yüksek maliyet	Çok yönlü	Vakum teknolojisi	Çok yönlü Yüksek oranlı	Düşük sıcaklık

3. Hibrit İnce Film Teknolojilerindeki Gelişmeler

Günümüzde, hibrit ince film teknolojileri, çeşitli endüstriyel ve bilimsel uygulamalarda önemli bir role sahiptir. Bu teknolojilerdeki gelişmeler, malzeme bilimi, elektronik, enerji

depolama, biyomedikal ve optoelektronik alanlarında çeşitli yeniliklere yol açmıştır.

Çoklu Teknoloji Entegrasyonu: Hibrit ince film üretimindeki önemli bir gelişme, farklı üretim tekniklerinin entegrasyonudur. Fiziksel buhar biriktirme (PVD), kimyasal buhar biriktirme (CVD), atomik katman biriktirme (ALD), ve diğer tekniklerin entegrasyonu, çoklu özelliklere sahip karmaşık hibrit yapıların oluşturulmasına imkân tanımaktadır.

Nanoteknoloji Uygulamaları: Hibrit ince film teknolojileri, nanoteknoloji alanındaki gelişmelerle birleşerek, nanometre ölçeğinde kontrol edilebilen özelliklere sahip malzemelerin üretilmesini sağlamıştır. Bu durum, sensörler, nano-elektromekanik sistemler (NEMS) ve nanomedikal uygulamalarda çığır açan ilerlemelere olanak tanımaktadır.

Enerji Depolama ve Dönüşüm: Enerji depolama ve dönüşüm uygulamalarında önemli bir rol oynamaktadır. Özellikle güneş hücreleri, elektrokimyasal depolama cihazları ve yakıt hücreleri gibi alanlarda kullanılan hibrit malzemeler, enerji verimliliğini artırma potansiyeli sunmaktadır (Zhu & ark., 2020).

Biyomedikal Uygulamalar: Hibrit ince filmler, biyomedikal alanda da önemli bir etki yaratmaktadır. Biyoyoumlu, esnek ve özelleştirilebilir özelliklere sahip hibrit malzemeler, implantlar, biyosensörler ve hücre taşıma sistemleri gibi birçok biyomedikal uygulamada kullanılmaktadır.

Optoelektronik Gelişmeler: Optoelektronik cihazlar için hibrit ince filmler, ışığı daha etkili bir şekilde yönlendirebilen ve optik özellikleri (Gabriel & Talghader, 2011) iyileştirebilen yapılar sağlamaktadır. Bu, LED'lerden lazerlere kadar geniş bir yelpazedeki optoelektronik uygulamalarda kullanım potansiyeli sunmaktadır.

Verimlilik ve Sürdürülebilirlik: Gelişen üretim teknikleri, hibrit ince film teknolojilerinin daha hızlı, daha verimli ve çevre dostu olmasına katkı sağlamaktadır. Düşük sıcaklıklarda çalışabilme, malzeme kullanımındaki verimlilik ve atık üretiminin

azaltılması, bu alandaki sürdürülebilirlik çabalarını desteklemektedir.

Hibrit ince film teknolojilerindeki bu gelişmeler, ilerleyen dönemde daha fazla uygulama ve keşif alanlarına yönelik umut vadetmektedir. Araştırma ve endüstri alanındaki devam eden çabalar, bu teknolojilerin gelecekteki potansiyelini daha da artırabilir.

SONUÇ VE ÖNERİLER

Hibrit ince film, genellikle birbirinden farklı özelliklere sahip organik ve inorganik malzemelerin birleştirilmesiyle oluşturulan ince bir tabakadır. Bu tür ince filmler, organik ve inorganik bileşenlerin özelliklerini birleştirerek, birçok uygulama alanında çeşitli avantajlar sağlayabilir.

Organik bileşenler, genellikle karbon temelli moleküllerdir ve esneklik, düşük yoğunluk gibi özelliklere sahip olabilirler. Öte yandan, inorganik bileşenler genellikle metal veya metal oksitleridir ve mekanik dayanıklılık, termal iletkenlik gibi özelliklere sahip olabilirler.

Hibrit ince filmler, birçok alanda kullanılabilmektedir, örneğin güneş hücreleri, yarıiletken cihazlar, sensörler, kaplama malzemeleri gibi uygulamalarda kullanılmaktadır. Bu malzemeler, her iki bileşenin avantajlarını birleştirerek, daha geniş bir uygulama yelpazesi ve özellikle istenen özelliklere uygun malzeme seçenekleri sunabilir.

Bu çalışma, hibrit ince film üretim teknolojileri üzerine kapsamlı bir analiz sunarak, malzeme bilimi ve nanoteknoloji alanlarına önemli bir katkı sağlamaktadır. İncelenen farklı üretim teknikleri arasındaki avantajlar ve sınırlamaların detaylı bir karşılaştırması, araştırmacılara bu teknolojilerin uygulanabilirlikleri konusunda kılavuzluk etmektedir.

Bu çalışmanın ana sonuçları şu şekildedir:

Sıvı Fazda Biriktirme Yöntemi: Sıvı fazda biriktirme yöntemleri, ekonomik ve basit olmalarıyla bilinir. Bu yöntemler,

çeşitli organik ve inorganik prekürsörleri kullanarak esnek malzeme seçenekleri sunar. Sıvı fazda biriktirme, farklı yüzeylere kolayca uygulanabilir ve ince film kalınlığı ile bileşen oranları kontrol edilebilir. Ancak, bu yöntemler genellikle buhar fazına kıyasla daha düşük film kalitesine ve daha yavaş üretim hızına sahiptir.

Fiziksel Buhar Kaplama (PVD): Fiziksel Buhar Biriktirme (PVD) tekniği, vakum altındaki bir ortamda bulunan malzemelerin farklı yöntemlerle buharlaştırılmasını veya sıçratılmasını içeren bir yüzey kaplama işlemidir. Bu yöntem, yüksek saflık, iyileştirilmiş yapışma ve ince film kalınlığı kontrolü gibi avantajlara sahiptir. Ancak sınırlamalar arasında kaplama hızının düşük olması ve karmaşık yapıların üretimini kısıtlaması yer almaktadır. PVD, optik kaplamalar, ayna üretimi ve kaplama tabakaları gerektiren diğer birçok uygulama için uygundur.

Atomik Katman Kaplama (ALD): ALD, malzeme katmanlarını atomik seviyede bir katman biriktirme işlemiyle üretir. Bu yöntem, kesin kalınlık kontrolü ve yüksek konformalite sağlar. Ancak ALD işlemi yavaş olabilir ve daha karmaşık ekipman gerektirebilir. ALD, yarıiletken cihazlar, enerji depolama sistemleri ve nanoteknoloji gibi uygulamalarda yaygın olarak kullanılır.

Kimyasal Buhar Kaplama (CVD): Kimyasal buhar kaplama, kimyasal reaksiyonlar aracılığıyla malzemenin bir altaşa kaplanmasını içerir. Bu yöntem, büyük yüzeylerin kaplanmasına ve kompleks yapıların üretilmesine olanak tanır. Ancak bu yöntem, yüksek sıcaklık ve kimyasal reaksiyonları içerdiği için bazı malzemeler için uygun değildir. CVD, yarıiletken üretimi, koruyucu kaplamalar ve kimyasal sensörler gibi bir dizi uygulamada kullanılır.

Bu çalışma, sıvı ve buhar fazda hibrit ince film üretim teknolojilerini detaylı olarak inceleyerek, her bir yöntemin avantajlarını, dezavantajlarını ve uygulama alanlarını ele almıştır. Sol-jel tekniği ve çeşitli kaplama yöntemleri, nanoteknoloji ve malzeme bilimi alanlarındaki potansiyel uygulamalar açısından kapsamlı bir değerlendirmeye tabi tutulmuştur. Fiziksel buhar biriktirme (PVD), kimyasal buhar biriktirme (CVD) ve atomik katman biriktirme (ALD) gibi buhar fazda kullanılan teknikler,

yüksek kaliteli ince filmlerin üretimindeki rol ve katkıları üzerine detaylı bir analiz sunmaktadır. Karşılaştırmalı bir yaklaşımla, her bir yöntemin avantajları ve dezavantajları ortaya konarak, araştırmacılara ve mühendislere bu teknolojileri daha iyi anlama ve uygulama fırsatı sunmaktadır. Bulgularımız, hibrit ince film üretim teknolojilerinin mevcut durumunu vurgulayarak, gelecekteki çalışmalara ışık tutabilecek niteliktedir. Bu alandaki ilerlemelerin, fotonik, mekanik ve kimyasal kaplamalardan yaşam bilimlerine kadar geniş bir uygulama yelpazesini kapsayabileceği öngörülmektedir.

Bu çalışmanın sonuçlarına göre, her bir hibrit ince film üretim teknolojilerinin kendine özgü avantajları ve sınırlamaları bulunmaktadır. Bu sınırlamaları ortadan kaldırmak için daha çok çalışma yapılması gerekmektedir. Örnek olarak daha hızlı kaplama, daha az enerji tüketimi ve daha fazla biriktirme oranı elde edilmesi gibi geliştirmeler yapılabilir. Fotonik, mekanik ve kimyasal kaplamalar, yaşam bilimleri dahil olmak üzere çok çeşitli alanlarda çalışmalar yapılarak uygulama alanları genişletilebilir. Film tabakalarının büyük miktarda üretilmesi gereken endüstriyel uygulamalarda, daha hızlı ve verimli üretim sağlamak için çalışmalar yapılabilir. Süreç optimizasyonu ve uygun ekipmanların kullanımının basitleştirilmesi için çalışmalar yürütülebilir. Daha geniş malzeme aralığında üretimi yapılabilir.

Bu çalışma, hibrit ince film üretim teknolojileri hakkında Türkçe kaynak bulma sıkıntısı yaşayan araştırmacılara rehber olacak, bu sayede literatürdeki boşluklar saptanabilecek, sınırlamalar incelenecek ve bu konu hakkında çalışmak isteyen araştırmacı ve mühendislere yol gösterecektir.

KAYNAKLAR

Achanta, S., Drees, D., & Celis, J. P. (2011). 12- Nanocoatings for tribological applications. In Makhoulouf A.S.H., Tiginyanu I. (Eds.), Nanocoatings and Ultra-Thin Films In Woodhead Publishing Series in Metals and Surface Engineering (pp.355-396), Woodhead Publishing. doi: 10.1533/9780857094902.2.355

Adachi H., Wasa, K., Kanno, I., & Kotera, H. (2012). Handbook of sputter deposition technology: fundamentals and applications for functional thin films, nano-materials and MEMS (2nd edition), Waltham, MA: Elsevier Inc.

Alasağ, S. G. (2014). Plazmonik Davranış Gösteren Metallo-Dielektrik Nano-Kompozit Filmlerin Atomik Kaplama Metodu ile Üretilmesi ve Karakterizasyonu. (Yüksek Lisans Tezi), Yıldız Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, İstanbul, Türkiye.

Anonim (2023). Sputtering, Wikipedia. <https://en.wikipedia.org/wiki/Sputtering> Erişim Tarihi: 10.06.2023.

Aydın, E. (2011). Notch Filtre Tasarımı. (Yüksek Lisans Tezi), Ankara Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, Türkiye.

Basaran, A., Cakmak, M., Guner, H., & Uzun, O. (2018). Sputtering Deposition for Thin Film Fabrication. ISBN: 978-3-319-74031-3.

Bilgin, V. (2003). ZnO Filmlerinin Elektrik, Optik, Yapısal ve Yüzeysel Özellikleri Üzerine Kalay Katkısının Etkisi. (PhD), Osmangazi Üniversitesi, Eskişehir, Türkiye.

Biswas, M., & Su, P.-C. (2017). Chemical Solution Deposition Technique of Thin-Film Ceramic Electrolytes for Solid Oxide Fuel Cells. InTech. doi: 10.5772/66125

Blankenburg, L., Schultheis, K., Schache, H., Sensfuss, S., Schrodner, M. (2009). Reel-to-reel wet coatings as an efficient up-scaling technique for the production of bulk-heterojunction polymer solar cells. Sol. Energy Mater. Sol. Cells, 93, 476–483.

Bohringer, K. F. (2000). Physical vapor deposition of thin films. Colorado, USA: John Wiley & Sons.

Bokov, D., Jalil, A. T., Chupradit, S., Suksatan, W., Ansari, M. J., Shewael, I. H., Valiev, G. H., Kianfar, E., (2021). Nanomaterial by Sol-Gel Method: Synthesis and Application. Advances in Materials Science and Engineering, 5102014, 21. <https://doi.org/10.1155/2021/5102014>

Bunshah, R. F. (1994). Handbook of Deposition Technologies for Films and Coatings: Science, technology and applications. 2nd Edition, New Jersey, USA: Noyes Publication, Park Ridge.

Bunshah, R. F. (2001). Handbook of Hard Coatings: Deposition Technologies, Properties, and Applications. USA: Noyes Publications.

Brinker, C., Frye, G., Hurd, A., & Ashley, C. (1991). Fundamentals of sol-gel dip coating. Thin Solid Films, 201, 97-108. doi: 10.1016/0040-6090(91)90158-T

Brinker, C.J., Ashley, C.S., Cairncross, R.A., Chen, K.S., Hurd, A.J., Reed, S.T., Samuel, J., Schunk, P.R., Schwartz, R.W., Scotto, C.S. (1996). Sol-gel derived ceramic films-fundamentals and

applications. In Metallurgical and Ceramic Protective Coatings; Stern, K.H., Ed.; Springer: Dordrecht, The Netherlands.

Cansever, N. (2001). Manyetik Alanda Sıçratma Yönteminde Son Gelişmeler. Mühendis ve Makina, 42(496), 18- 23.

Capper, P., & Mauk, M. (2007). Liquid Phase Epitaxy of Electronic, Optical, and Optoelectronic Materials. Southampton, UK: Wiley-Interscience.

Choy, K.L. (2003). Chemical Vapour Deposition of Coatings. Progress in Materials Science, 48(2), 57-170. doi: 10.1016/S0079-6425(01)00009-3

Chen, C., Cheng, Y., Dai, Q. & Song H. (2016). Radio Frequency Magnetron Sputtering Deposition of TiO₂ Thin Films and Their Perovskite Solar Cell Applications. Scientific Reports, 5, 17684. doi: 10.1038/srep17684

Çoşğun, A., Taşcıoğlu, A. & Yılmaz, G. (2021). İnce Film Üretiminde Kimyasal Buhar Biriktirme Yöntemi ve Çeşitleri. Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi, 12 (2), 351-363. doi: 10.29048/makufebed.861301

Demiroğlu, D. (2019). Organik Yarıiletken Tabanlı Fotovoltaik Aygıtlar için Şekilli İnce Film Altlıkların Kullanımı ve Etkilerinin İncelenmesi. (PhD), İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, İstanbul, Türkiye.

Doğan, H. (2001). İyon Beam İmplantasyon Tekniği ile Malzeme Yüzeyinin Modifikasyonu ve PVD ile Karşılaştırılması. (PhD), Sakarya Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Sakarya, Türkiye.

Doménech, A., Doménech-Carbó, M., Sánchez del Río, M., Vázquez de Agredos Pascual, M., & Lima, E. (2009). Maya Blue as a nanostructured polyfunctional hybrid organic-inorganic material: the need to change paradigms. *New Journal of Chemistry*, 33, 2371-2379. doi: 10.1039/B901942A

Doménech, A., Doménech-Carbó, M., Osete-Cortina, L., & Montoya, N. (2013). Application of solid-state electrochemistry techniques to polyfunctional organic-inorganic hybrid materials: The Maya Blue problem. *Microporous and Mesoporous Materials*, 166, 123-130. doi:10.1016/j.micromeso.2012.04.031

Doppelbauer, J., Baeuerle, D. (1986). Kinetic Studies of Pyrolytic Laser-Induced Chemical Processes. 1986 Editions de Physique, Conference Proceedings 53-56.

Elam, J. W., Groner, M. D., & George, S. M. (2002). Viscous flow reactor with quartz crystal microbalance for thin film growth by atomic layer deposition. *Review of Scientific Instruments*, 73(8), 2981. doi: 10.1063/1.1490410

Elam, J. W., Routkevitch, D., Mardilovich, P. P., & George, S. M. (2003). Conformal coating on ultrahigh-aspect-ratio nanopores of anodic alumina by atomic layer deposition. *Chemistry of Materials*, 15(16), 3507-3517. doi: 10.1021/cm0303080

Fukushima, S., & Hosokawa, N. (1985). Sputtering: history and applications. *Kinzoku Hyomen Gijutsu*, 36(6), 218-228.

Gabriel, N. T., & Talghader, J. J. (2011). Thermal conductivity and refractive index of hafnia-alumina nanolaminates. *Journal of Applied Physics*, 110(4), 043526. doi: 10.1063/1.3626462

George, J. (1992). Preparation of Thin Films. New York, USA: Marcel Dekker.

Gerhard, W. (Eds.) (2009). Nanostructured Materials. Oxford, UK: Elsevier.

Gołombek, K., Dobrzański, L. A., & Soković, M. (2004). Properties of the wear-resistant coatings deposited on the cemented carbide substrates in the cathodic arc evaporation process. *Journal of Materials Processing Technology*, 157–158, 341-347. doi: 10.1016/j.jmatprotec.2004.09.053

Gómez-Romero, P., & Sanchez, C. (2004). Hybrid materials, functional applications. An introduction. In Gómez-Romero, P., Sanchez, C. (Eds.), *Functional hybrid materials*. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co., Weinheim.

Goodrich, D. A. (1996). Physical Vapor Deposition of Decorative Coatings for Jewelry. 1996 Santa Fe Symposium, Albuquerque.

Greene, J. E. (2017). Review Article: Tracing the recorded history of thin-film sputter deposition: From the 1800s to 2017. *Journal of Vacuum Science & Technology A*, 35(5), 05C204. doi: 10.1116/1.4998940

Hishmeh, G.A., Barr, T.L., Sklyarov, A.V., & Hardcastle, S. (1996). Thin polymer films prepared by radio frequency plasma sputtering of polytetrafluoroethylene and polyetherimide targets. *Journal of Vacuum Science and Technology A*, 14, 1330-1338. doi: 10.1116/1.579950

Holmberg, K., & Matthews, A. (Eds.) (1994). Coatings Tribology: Properties techniques and applications in surface engineering. Netherlands: Elsevier. Tribology Series Vol. 28.

Jaydeep, S., Yadav, S., Malla, B. P., Kulkarni, A. R., & Venkatramani, N. (2002). Growth and dielectric behavior of radio frequency magnetron-sputtered lead magnesium niobate thin films. *Applied Physics Letters*, 81(20), 3840–3842. doi: 10.1063/1.1517175

Jung, D. S., Park, S. B., & Kang, Y. C. (2010). Design of particles by spray pyrolysis and recent progress in its application. *Korean Journal of Chemical Engineering*, 27, 1621–1645. <https://doi.org/10.1007/s11814-010-0402-5>

Karakuş, E. & Koç, M. M. (2023). Temel İnce Film Üretim Tekniklerine Bir Bakış. *Kırklareli Üniversitesi Mühendislik ve Fen Bilimleri Dergisi*, 9 (1), 213-236. doi: 10.34186/klujes.1286475

Keleşoğlu, E. (2011). Sert Kaplamalar Üretim Teknikleri ve Özellikleri (1st ed.). İstanbul, Türkiye: Ege Basım.

Kickelbick, G. (2007). Introduction to hybrid materials. In G. Kickelbick (Ed.), *Hybrid Materials: Synthesis, Characterization, and Applications*. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co., KGaA Weinheim. doi:10.1002/9783527610495

Knez, M., Niinistö, L., & Leskelä, M. (2014). *Handbook of Thin Film Deposition Techniques: Principles, Methods, Equipment, and Applications*. Santa New York, U.S.A.: Noyes Publications.

Kuzmichev, A., & Tsybulsky, L. (2011). Evaporators with Induction Heating and Their Applications. In S. Grundas (Ed.)

Advances in Induction and Microwave Heating of Mineral and Organic Materials (pp.269-302). InTech. doi: 10.5772/13934

Lau, K. K. S. (2016). Chemical Vapor Deposition. In David A. Glocker, Shrirang V. Ranade (Eds.), *Medical Coatings and Deposition Technologies* (pp.403-455), USA: Scrivener Publishing. doi: 10.1002/9781119308713.ch11

Lee, H., Huang, Y. T., Horn, M. W., & Feng, S. P. (2018). Engineered optical and electrical performance of rf-sputtered undoped nickel oxide thin films for inverted perovskite solar cells. *Scientific reports*, 8(1), 5590. Doi: 10.1038/s41598-018-23907-0

Lee, N. Y., Sekine, T., Ito, Y., & Uchino, K. (1994). Deposition profile of RF-magnetron-sputtered BaTiO₃ thin films. *Japanese Journal of Applied Physics*, 33(3), 1484-1488. doi: 10.1143/JJAP.33.1484

Lee, Byoung H., Yoon, B., Abdulagatov, A. I., Hall, R. A., & George, S. M. (2013). Growth and properties of hybrid organic-inorganic metalcone films using molecular layer deposition techniques. *Advanced Functional Materials*, 23(5), 532–546. doi: 10.1002/adfm.201200370

Lee, S., Kim, J. Y., Lee, T. W., Kim, W. K., Kim, B. S., Park, J. H., Bae, J. S., Cho, Y. C., Kim, J., Oh, M. W., Hwang, C. S., & Jeong, S. Y. (2014). Fabrication of high-quality single-crystal Cu thin films using radio-frequency sputtering. *Scientific reports*, 4, 6230. doi: 10.1038/srep06230

Li, Y.-S., Tsai, C.-H., Kao, S.-H., Wu, I.-W., Chen, J.-Z., Wu, C.-I., Lin, C.-F., & Cheng, I.-C. (2013). Single-layer organic-inorganic-hybrid thin-film encapsulation for organic solar cells.

Journal of Physics D: Applied Physics, 46(7), 435502.
doi:10.1088/0022-3727/46/43/435502

Lu, D.X., Wong, E.M.W., Pun, E.Y.B., Chung, P.S. & Jia, G.C. (1997). PZT Thin Films by Radio Frequency Magnetron Sputtering. In: Lampropoulos, G.A., Lessard, R.A. (Eds.), Applications of Photonic Technology (pp 51–54). Boston, MA: Springer. doi: 10.1007/978-1-4757-9250-8_9

Lux, H., Edling, M., Lucci, M., Kitzmann, J., Villringer, C., Siemroth, P., De Matteis, F., & Schrader, S. (2019). The Role of Substrate Temperature and Magnetic Filtering for DLC by Cathodic Arc Evaporation. Coatings, 9(5), 345. doi: 10.3390/coatings9050345

Mahan J. E. (2000). Physical Vapor Deposition of Thin Films. New York, USA: Wiley-Interscience.

Maissel, L. I., & Glang, R. (1970). Handbook of Thin Film Technology. New York: McGraw-Hill.

Martin, P. M. (2009). Handbook of Deposition Technologies for Films and Coatings: Science, Applications and Technology (3rd ed.). Liverpool, UK: Elsevier.

Mattox, D. M. (1998). Handbook of physical vapor deposition (PVD) processing: film formation, adhesion, surface preparation and contamination control. New Jersey, U.S.A: Noyes Publications.

Mattox, D. M. (2003). The Foundations of Vacuum Coating Technology. New York, USA: Noyes Publications.

Mitzi, D. (2001). Thin-film deposition of organic-inorganic hybrid materials. Chemistry of Materials, 13, 3283-3298.

Modan, E. M., & Plăiașu, A. G. (2020). Advantages and Disadvantages of Chemical Methods in the Elaboration of Nanomaterials. The Annals of "Dunarea de Jos" University of Galati. Fascicle IX, Metallurgy and Materials Science, 43(1), 53-60. <https://doi.org/10.35219/mms.2020.1.08>

Multone, X. (2009). High Vacuum Chemical Vapor Deposition (HV-CVD) of Alumina Thin Films. (PhD), École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Techniques de l'ingénieur, Lozan, Îsviçre.

Niemelä, J. P., Rohbeck, N., Michler, J., & Utke, I. (2020). Molecular layer deposited alucone thin films from long-chain organic precursors: From brittle to ductile mechanical characteristics. Dalton Transactions, 49(31), 10832–10838. doi: 10.1039/d0dt02210a

Nunes, J., Santos, R., Loureiro, V., & Piedade, A. (2012). Nanocomposite thin films with hybrid inorganic/organic matrix for the modification of silicon-based implants. Plasma Process. Polym., 9, 709-717.

Nur-E-Alam, M., Vasiliev, M., Kotov, V., & Alameh, K. (2014). Recent Developments in Magneto-optic Garnet-type Thin-film Materials Synthesis. Procedia Engineering, 76, 61-73. doi: 10.1016/j.proeng.2013.09.248

Ohring, M. (2002). Materials Science of Thin Films: Deposition and Structure (2nd ed.). Elsevier. doi: 10.1016/B978-012524975-1/50016-1

Ohring, M. (2013). The Materials Science of Thin Films. In The Materials Science of Thin Films. Elsevier.

Okay, F. (2006). PVD Yöntemi ile Kaplı Östemperlenmiş Küresel Grafitli Dökme Demirlerin Adhesiv Aşınma Davranışlarının İncelenmesi. (Yüksek Lisans Tezi), Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, Türkiye.

Oke, J. A., & Jen Tien-Chien. (2022). Atomic layer deposition and other thin film deposition techniques: From principles to film properties. *Journal of Materials Research and Technology*, 21, 2481-2514. doi: 10.1016/j.jmrt.2022.10.064

Oktay, G. (2006). Fiziksel Buhar Biriktirme (PVD) Yöntemi. Galvanoteknik. Oktay, Ürgen, M., Modern Surface Modif.Tech. Ders Notları, İ.T.Ü., İstanbul.

Orloff, J., Utlaut, M., & Swanson, L. (2003). High Resolution Focused Ion Beams: FIB and its Applications. New Yor, USA: Springer, NY.

Oviroh, P. O., Akbarzadeh, R., Pan, D., Coetzee, R. A. M., & Jen, T. C. (2019). New development of atomic layer deposition: processes, methods and applications. *İçinde Science and Technology of Advanced Materials* (C. 20, Sayı 1, ss. 465–496). Taylor and Francis Ltd. doi: 10.1080/14686996.2019.1599694

Papadopoulou, E. L., Zorba, V., Pagkozidis, A., Barberoglou, M., Stratakis, E., & Fotakis, C. (2009). Reversible wettability of ZnO nanostructured thin films prepared by pulsed laser deposition. *Thin Solid Films*, 518(4), 1267-1270. doi: 10.1016/j.tsf.2009.02.077

Park, J.H., & Sudarshan, T. S. (2001). Surface Engineering Series Volume 2: Chemical Vapor Deposition. Canada, USA: ASM International.

Pauleau, Y. (1994). *Materials and Processes for Surface and Interface Engineering*. Gers, France: Kluwer Academic Publishers.

Pierson, H. O. (1992). The Chemistry of CVD. In the *Handbook of Chemical Vapor Deposition Principles, Technology, and Applications* (pp.51-80.). New York, U.S.A.: Elsevier.

Pierson, H. O. (1999). *Handbook of Chemical Vapor Deposition (CVD): Principles, Technology, and Applications*. New York, U.S.A: Noyes Publications.

Pierre, A. C. (2020). *Applications of Sol-Gel Processing*. In *Introduction to Sol-Gel Processing*. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-030-38144-8_14

Pinto, G., Silva, F. J. G., Porteiro, J., Miguez, J. L., Baptista, A., & Fernandes, L. A. (2018). A Critical Review on the Numerical Simulation Related to Physical Vapour Deposition. *Procedia Manufacturing*, 17:860-869. doi: 10.1016/j.promfg.2018.10.138

Popescu, C., Dorcioman, G., & Popescu, A. C. (2016). Laser Ablation Applied for Synthesis of Thin Films: Insights into Laser Deposition Methods In D. Yang (Ed.), *Applications of Laser Ablation- Thin Film Deposition, Nanomaterial Synthesis and Surface Modification* (pp. 3-32). Rijeka, Croatia: IntecOpen.

Rydosz, A., Brudnik, A., & Staszek, K. (2019). Metal Oxide Thin Films Prepared by Magnetron Sputtering Technology for Volatile Organic Compound Detection in the Microwave Frequency Range. *Materials* (Basel, Switzerland), 12(6), 877. doi: 10.3390/ma12060877

Sanchez, C., Belleville, P., Popall, M., & Nicole, L. (2011). *Applications of advanced hybrid organic-inorganic nanomaterials:*

from laboratory to market. Chemical Society Reviews, 40, 696-753. doi: 10.1039/C0CS00136H

Sakthivel, P., Murugan, R., Asaithambi, S., Karuppaiah, M., Rajendran, S., & Ravi, G. (2019). Radio frequency magnetron sputtered CdO thin films for optoelectronic applications. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 126, 1-10. doi: 10.1016/j.jpcs.2018.10.031

Savaş, S. (2004). PVD Metodu ile TiN kaplanmış S 6-5-2 Yüksek Hız Çeliğinin Aşınma Davranışlarının İncelenmesi. (Yüksek Lisans Tezi), Erciyes Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Kayseri, Türkiye.

Selvaraj, S. K. (2015). Atomic Layer Deposition of Metal Oxides for Emerging Applications. (PhD), Illinois University, Chemical Engineering, Chicago, Illinois.

Senirget, E. (2021). Polimer Malzemelerin Fiziksel Buhar Biriktirme Yöntemiyle Alüminyum Kaplanması ve Parametrelerin Araştırılması. (Yüksek Lisans Tezi), Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, Türkiye.

Sharma, M. C., Tripathi, B., Kumar, S., Srivastava, S., & Vijay, Y. K. (2012). Low cost CuInSe₂ thin films production by stacked elemental layers process for large area fabrication of solar cell application. Materials Chemistry and Physics, 131(3), 600–604. doi: 10.1016/j.matchemphys.2011.10.023

Sharma P., Shehin V. P., Kaur N. & Vyas P. (2019). Application of edible coatings on fresh and minimally processed vegetables: a review. International Journal of Vegetable Science, 25:3, 295-314. doi: 10.1080/19315260.2018.1510863

Shi, F. (2018). Introductory Chapter: Basic Theory of Magnetron Sputtering. In F. Shi (Ed.) Magnetron Sputtering. IntechOpen. doi: 10.5772/intechopen.80550

Sigmund, W. M., & Foulger, S. H. (1999). Thin Film Processes II. Academic Press.

Smallman, R. E., & Ngan, A. H. W. (2007). Physical Metallurgy and Advanced Materials (Seven Edition). Burlington, MA: Elsevier. doi: 10.1016/B978-0-7506-6906-1.X5000-8.

Sönmezoğlu, S., Koç, M. & Akın, S. (2012). İnce film üretim teknikleri. Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fen Bilimleri Dergisi, 28 (5), 389-404.

Stognij, A. I., Sharko, S. A., Serokurova, A. I., Trukhanov, S. V., Trukhanov, A. V., Panina, L. V., Ketsko, V. A., Dyakonov, V. P., Szymczak, H., Vinnik, D. A. & Gudkova, S. A. (2019). Preparation and investigation of the magnetoelectric properties in layered cermet structures. Ceramics International, 45(10), 13030-13036. doi: 10.1016/j.ceramint.2019.03.234

Surmenev, R., Vladescu, A., Surmeneva, M., Ivanova, A., Braic, M., Grubova, I., & Cotrut, C. M. (2017). Radio Frequency Magnetron Sputter Deposition as a Tool for Surface Modification of Medical Implants. In Nikolay N. Nikitenkov (Ed.), Modern Technologies for Creating the Thin-film Systems and Coatings (pp. 213-248). Rijeka, Croatia: IntechOpen. doi: 10.5772/66396

Sun, L., Yuan, G., Gao, L., Yang, J., Chhowalla, M., Gharahcheshmeh, M. H., Gleason, K. K., Choi, Y. S., Hong, B. H., & Liu, Z. (2021). Chemical vapour deposition. Nature Reviews Methods Primers, 1(1), 5. doi: 10.1038/s43586-020-00005-y

Sundberg, P., & Karppinen, M. (2014). Organic and inorganic–organic thin film structures by molecular layer deposition: A review. *Beilstein Journal of Nanotechnology*, 5, 1104–1136. <https://doi.org/10.3762/bjnano.5.123>

Suthar, D., Chuhadiya, S., Sharma, R., Himanshu, & Dhaka, M. S. (2022). An overview on the role of ZnTe as an efficient interface in CdTe thin film solar cells: a review. *Materials Advances*, 3, 8081-8107. doi: 10.1039/d2ma00817c

Şafak, H. E. (2008). Yüzeyi PVD Yöntemiyle Kaplanmış Metallerde Tribolojik Özelliklerin Belirlenmesi. (Yüksek Lisans Tezi), Ege Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, İzmir, Türkiye.

Tang, X., & Yan, X. (2017). Dip-coating for fibrous materials: mechanism, methods and applications. *Journal of Sol-Gel Science and Technology*, 81, 378–404. <https://doi.org/10.1007/s10971-016-4197-7>

Tanskanen, A., Sundberg, P., Nolan, M., & Karppinen, M. (2021). Atomic/molecular layer deposition of Ti-organic thin films from different aromatic alcohol and amine precursors. *Thin Solid Films*, 736. doi:10.1016/j.tsf.2021.138896

Tavşanoğlu, T. (2001). Reaktif DC Manyetik Alanda Sıçratma/PECVD Hibrit Tekniğiyle Biriktirilen Ti/Ti_xCy/DLC İnce Film Kaplamaların Üretim Koşullarının Belirlenmesi ve Karakterizasyonu. (Yüksek Lisans Tezi), İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, İstanbul, Türkiye.

Totten, G. E. (1992). *ASM Handbook Volume 18: Friction, Lubrication, Coatings and Surface Treatments, PVD and CVD Coatings*. Materials Park, OH: ASM International.

Tracton, A. A. (2006). Coatings Technology. (3rd ed.). Boca Raton, USA: CRC Press. doi: 10.1201/9781420027327

Türküz, C. (1997). Ark PVD Yöntemi ile TiN Kaplanmış Kesici Takımların Karakterizasyonu ve Performanslarının İncelenmesi. (Yüksek Lisans Tezi), İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, İstanbul, Türkiye.

Türküz, M. C. (2006). Fiziksel Buhar Biriktirme Yöntemi ile Yapılan Zirkonyum Nitrür İnce Film Kaplamanın Kaplama Parametrelerinin İncelenmesi ve Optimizasyonu. (PhD), İstanbul Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, İstanbul, Türkiye.

Ürgen, M. (2005). Modern Surface Modification Techniques.Ders Notları, İstanbul Teknik Üniversitesi, İstanbul.

Vayssieres, L. (2003). Growth of Arrayed Nanorods and Nanowires of ZnO from Aqueous Solutions. Advanced Materials, 15: 464-466. doi: 10.1002/adma.200390108

Vossen, J. V., & Kerner, W. (1991). Thin Film Processes II. Boston, USA: Academic Press.

Wasa, K., & Hayakawa, S. (1992). Handbook of sputter deposition technology: principles, technology, and applications. Oxford, UK: Elsevir.

Wender, H., Migowski, P., Feil, A. F., Teixeira, S. R., & Dupont, J. (2013). Sputtering deposition of nanoparticles onto liquid substrates: Recent advances and future trends. Coordination Chemistry Reviews, 257(17–18), 2468-2483. doi: 10.1016/j.ccr.2013.01.013

Xiao, H. (2012). Introduction to semiconductor manufacturing technology 2nd edition, Washington, USA: SPIE Press.

Xu, N. S., & Huq, S. E. (2005). Novel cold cathode materials and applications. *Materials Science and Engineering: R: Reports*, 48(2-5), Pages 47-189. doi:10.1016/j.mser.2004.12.001

Yan, K., Fu, L., Peng, H., & Liu, Z. (2013). Designed CVD growth of graphene via process engineering. *Accounts of chemical research*, 46(10), 2263–2274. doi: 10.1021/ar400057n

Yang, F. H. (2014). 2-Modern metal-organic chemical vapor deposition (MOCVD) reactors and growing nitride-based materials, In Jian-Jang Huang, Hao-Chung Kuo, Shyh-Chiang Shen (Eds.). *Nitride Semiconductor Light-Emitting Diodes (LEDs)* (pp.27-65). Duxford, UK: Elsevier. doi: 10.1533/9780857099303.1.27.

Yoshimura, T., Tatsuura, S., & Sotoyama, W. (1991). Polymer films formed with monolayer growth steps by molecular layer deposition. *Applied Physics Letters*, 59(4), 482–484. doi: 10.1063/1.105415

Zhu, H., Aboonasr Shiraz, M. H., Yao, L., Adair, K., Wang, Z., Tong, H., et al. (2020). Molecular-layer-deposited Tincone: a New Hybrid Organic-Inorganic Anode Material for Three-Dimensional Microbatteries. *Chem. Commun.* 56 (86), 13221–13224. doi:10.1039/d0cc03869e

BÖLÜM VI

Yarıiletken İnce Filmlerin Kristal Yapı Ve Kusurları

Tuba ÇAYIR TAŞDEMİRCİ¹

Giriş

1.Yarıiletken İnce Film

Madde, doğadaki temel fiziksel varlıkları tanımlayan bir kavramdır ve çeşitli özellikler gösterebilir. Maddenin fiziksel hallerine baktığımızda katı, sıvı ve gaz olmak üzere üç ana durumda bulunduğu görülür. Her bir durum, moleküller arasındaki etkileşimlere ve hareket özgürlüğüne bağlıdır (Shockley, 1963).

Bunun yanı sıra, madde çeşitli termal ve elektriksel özelliklere sahiptir. Elektriksel açıdan incelendiğinde, maddeler **iletken**, **yalıtkan** ve **yarı iletken** olarak sınıflandırılabilir:

- **İletkenler:** Elektrik akımını kolayca iletebilen maddelerdir (ör. bakır, gümüş).

¹ Dr. Öğr. Üyesi, Erzincan Binali Yıldırım Üniversitesi, Mühendislik-Mimarlık Fakültesi, Biyomedikal Mühendisliği Bölümü, Erzincan/Türkiye, Orcid: 0000-0001-9519-8483, tcayir@erzincan.edu.tr

- **Yalıtkanlar:** Elektrik akımını iletemeyen maddelerdir (ör. plastik, kauçuk).
- **Yarı iletkenler:** Elektriksel iletkenliği, ortam koşullarına ve katkı maddelerine bağlı olarak değişen maddelerdir (ör. silikon, germanyum).

Termal açıdan bakıldığında ise maddeler, **ısıyı iyi iletenler (iletkenler)**, **ısıyı az iletenler (yarı iletkenler)** ve **ısıyı iletmeyenler (yalıtkanlar)** olarak sınıflandırılabilir (Mehta,2022). Örneğin:

- Metaller genellikle iyi birer ısı iletkenidir.
- Ahşap ve plastik, ısıyı zayıf iletir.
- Cam veya seramik gibi maddeler ise ısı yalıtkanlarıdır.

Bu özellikler, maddenin atomik ve moleküler yapısından kaynaklanır ve günlük hayatta birçok uygulamada kritik bir rol oynar. Örneğin, elektronik cihazlarda yarı iletkenler kullanılırken, ısı yalıtımı için yalıtkan maddeler tercih edilir.

1.1.Yalıtkanlar

Elektriksel açıdan bakıldığında, üzerinden akım geçmeyen tüm maddeler **yalıtkan** olarak adlandırılır. Yalıtkan maddeler, atomik düzeyde incelendiğinde, valans bandı ile iletim bandı arasında geniş bir enerji boşluğu bulunduğu görülür. Bu enerji boşluğu (band gap) oldukça büyük olduğundan, elektronlar valans bandından iletim

bandına geçemez ve dolayısıyla elektrik iletimi gerçekleşmez (Neamen, 2003).

Yalıtkan Maddelerin Özellikleri:

1. **Elektriksel Özellikler:** Elektrik akımını iletmezler. Bu nedenle elektrikli cihazlarda ve sistemlerde koruyucu malzeme olarak kullanılırlar. Örneğin, plastik kaplamalar kabloları izole etmek için tercih edilir.
2. **Atomik Yapı:** Valans bandı ile iletim bandı arasındaki enerji boşluğu çok geniştir. Bu boşluk nedeniyle elektronlar serbest hale geçemez ve elektrik iletimine katkıda bulunamaz.
3. **Isı İletimi:** Elektriği iletmedikleri gibi, çoğu yalıtkan madde aynı zamanda ısıyı da iletmez. Bu özellikleri nedeniyle ısı yalıtım malzemesi olarak da yaygın şekilde kullanılırlar.

Yalıtkan Maddelere Örnekler:

- **Doğal Malzemeler:** Taş, toprak, ahşap (tahta).
- **Endüstriyel Malzemeler:** Cam, plastik, seramik.

Plastik, yalıtkan malzemeler arasında en yaygın olarak kullanılanıdır. Hafif, dayanıklı ve kolay işlenebilir yapısı sayesinde elektrik kablolarından mutfak gereçlerine kadar birçok alanda kullanılır.

Yalıtkan maddelerin en önemli işlevi, elektrikle çalışan sistemlerde güvenliği sağlamak ve elektrik akımının istenmeyen alanlara geçişini önlemektir. Ayrıca ısı yalıtımı için kullanılan cam yünü ve köpük gibi malzemeler de bu özelliklerinden dolayı tercih edilir.

1.2.İletkenler

Elektriksel ve Termal Açıdan İletken Maddeler

Elektriksel ve termal özellikleri açısından incelendiğinde hem elektrik akımını hem de ısıyı iletebilen maddelere **iletken maddeler** denir. Bu maddeler, atomik düzeydeki yapılarından dolayı elektron hareketine izin veren bir yapıdadır.

İletken Maddelerin Özellikleri:

1. Elektriksel Özellikler:

- **Band Yapısı:** İletken maddelerde, **valans bandı** ile **iletim bandı** arasında enerji boşluğu bulunmaz. Bu durum, elektronların serbest hale geçmesine olanak tanır.
- Elektronlar, valans bandından iletim bandına geçmek için ek enerjiye ihtiyaç duymaz ve maddede serbestçe hareket eder. Bu nedenle elektrik akımını kolaylıkla iletirler.

2. Termal Özellikler:

- İletken maddeler, termal enerjiyi de çok iyi iletir. Bunun nedeni, serbest elektronların aynı zamanda ısı enerjisini taşımada da etkili olmasıdır.
- Isı iletkenliği, genellikle elektrik iletkenliği ile paralellik gösterir.

İletken Maddelere Örnekler:

• En İyi Elektriksel İletkenler:

- **Gümüş:** En iyi elektrik iletkenidir ancak yüksek maliyeti nedeniyle sınırlı kullanım alanına sahiptir.
- **Bakır:** Elektrik iletkenliği yüksek ve ekonomik olduğu için kablo üretimi ve elektrik devrelerinde yaygın olarak kullanılır.
- **Altın:** Yüksek iletkenliğinin yanı sıra korozyona dayanıklılığı ile bilinir, bu yüzden hassas elektronik cihazlarda tercih edilir.

• Diğer İletken Maddeler: Alüminyum, demir, çinko.

İletken Maddelerin Kullanım Alanları:

- Elektrik devrelerinde akım taşıma amacıyla (kablolar, iletken teller).

- Elektrik-elektronik cihazların temas noktalarında (ör. altın kaplamalı konnektörler).
- Termal iletkenlik gerektiren sistemlerde (ör. ısı eşanjörleri).

İletken maddelerin yalıtkanlardan en temel farkı, serbest elektronlara sahip olmaları ve bu elektronların serbestçe hareket edebilmesidir. Bu özellikler, günlük hayatta pek çok uygulamada iletken maddelerin kullanılmasını sağlar (Yacobi, 2003).

1.3.Yarı İletkenler

Yarı İletken Maddeler

Yarı iletken maddeler, elektriksel özellikleri bakımından iletkenler ile yalıtkanlar arasında bir yer tutar. Atomik düzeyde incelendiğinde, yarı iletkenlerde de **valans bandı** ile **iletim bandı** arasında bir enerji boşluğu bulunmaktadır. Ancak bu enerji boşluğu, yalıtkan maddelere göre çok daha küçüktür.

Yarı İletken Maddelerin Özellikleri:

1. Elektriksel Özellikler:

- Valans ile iletim bandı arasındaki boşluk (yasak enerji bandı) küçüktür, bu da elektronların valans bandından iletim bandına geçişini kolaylaştırır ancak tamamen serbest bırakmaz.
- **Oda sıcaklığında:** Yarı iletkenler genellikle yalıtkan gibi davranır. Ancak dış etkenlere (ışık, ısı, manyetik

alan) maruz kaldıklarında yasak enerji bandını aşan elektronlar iletim bandına geçerek elektriği iletebilir.

2. Dış Etkenlerin Etkisi:

- **Işık:** Işık enerjisi, elektronları harekete geçirerek yarı iletkenlerin iletkenliğini artırabilir (ör. fotodiyotlar).
- **Isı:** Artan sıcaklık, elektronların iletim bandına geçişini hızlandırır ve iletkenliği artırır.
- **Manyetik Alan:** Elektron hareketliliğini etkileyerek elektriksel özelliklerini değiştirir.

3. Kristal Yapı:

- Yarı iletkenler, belirli bir düzene sahip atomik yapılarında **kristal yapılar** oluştururlar.
- **Mono Kristal Yapı:** Atomlar düzenli bir dizilim içerisinde. (Örneğin, mikroçiplerde kullanılan silikon.)
- **Polikristal Yapı:** Farklı yönlerde sıralanmış birden fazla kristal içerir.

Yarı İletken Maddelere Örnekler:

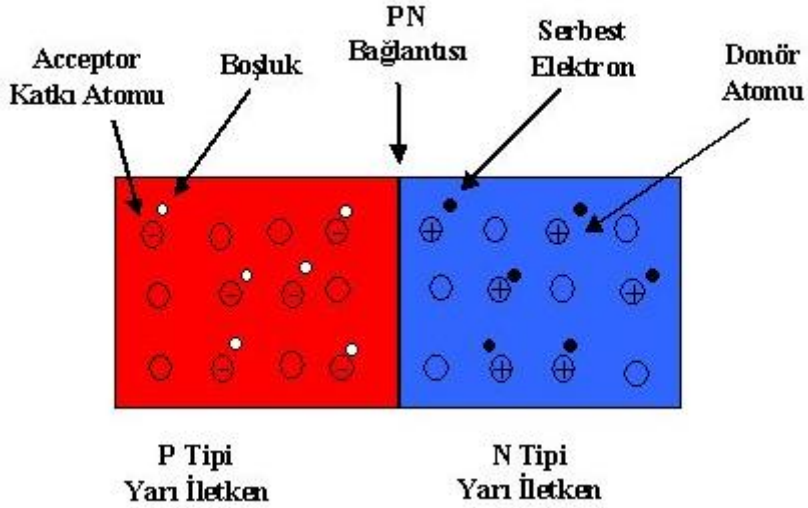
- **Element Yarı İletkenler:** Silikon (Si), Germanyum (Ge).

- **Bileşik Yarı İletkenler:** Galyum Arsenit (GaAs), Kadmiyum Tellür (CdTe).

Yarı İletkenlerin Kullanım Alanları:

- Elektronik cihazlarda (transistörler, diyotlar, güneş panelleri).
- Sensör ve dedektör sistemlerinde.
- Mikroçip üretiminde.

Yarı iletkenlerin, dış etkenlere bağlı olarak değişen elektriksel özellikleri, modern teknoloji için vazgeçilmez bir özellik taşır. Bu nedenle yarı iletkenler, elektronik cihazların temel yapı taşıdır (Peter,2010).



Şekil 1. P-tipi ve n-tipi yarı iletkenin gösterimi.

1.4. Yarı İletken Maddeler ve Kullanım Alanları

Yarı iletken maddeler, modern teknolojiye **elektrik, elektronik, fotovoltatik, fotokatalitik** ve **ince film teknolojisi** gibi pek çok alanda önemli bir yere sahiptir. Bu maddeler, elektriksel özellikleri sayesinde teknolojinin temel yapı taşlarından biri haline gelmiştir.

Yarı İletken Maddelerin Türleri:

1. Kendiliğinden Yarı İletken Maddeler:

- Doğal olarak yarı iletken özellik gösteren elementler ve bileşiklerdir.
- Örnekler:

- **Germanyum (Ge):** İlk transistörlerin yapımında kullanılmıştır.
- **Selenyum (Se):** Fotokatalitik özellik gösterir.
- **Silisyum (Si):** Günümüzde mikroçiplerin temel malzemesi olup, en yaygın kullanılan yarı iletkenlerdir.

2. Katkılandırılmış (Dopantlı) Yarı İletkenler:

- Kendiliğinden yarı iletken olan maddelere belirli miktarda farklı atomların eklenmesiyle (katkılandırma/doping) iletkenlik özellikleri artırılabilir.
- Katkılandırma, yarı iletkenlerin **n-tipi** (elektron zengin) veya **p-tipi** (elektron eksik) hale gelmesini sağlar.
- Bu süreç, yarı iletkenlerin elektronik devrelerde kullanılabilirliğini artırır.

3. Oksit Yarı İletkenler:

- Bazı oksit bileşikler de yarı iletken özellik gösterir ve farklı teknolojik uygulamalarda kullanılır.
- Örnekler:

- **Bakır Oksit (CuO):** Fotovoltaik uygulamalarda kullanılır.
- **Kalay Oksit (SnO₂):** Gaz sensörlerinde tercih edilir.
- **Çinko Oksit (ZnO):** Fotokatalitik ve optoelektronik uygulamalarda önemli bir rol oynar.

Kullanım Alanları:

- **Elektronik:** Transistör, diyot, entegre devreler ve sensörlerde temel yapı taşıdır.
- **Fotovoltaik:** Güneş panellerinde enerji üretiminde yararlanır.
- **Fotokatalitik Uygulamalar:** Çevresel temizleme ve enerji dönüşüm sistemlerinde etkili bir çözümdür.
- **İnce Film Teknolojisi:** Optik kaplamalar, esnek ekranlar ve ışık algılayıcılar için kullanılır.

Yarı iletken maddelerin farklı türleri ve katkılandırma yöntemleri, bu malzemelerin uygulama yelpazesini genişleterek teknolojik gelişmelerde önemli bir rol oynamaktadır. Özellikle silisyumun mikroçip endüstrisindeki baskın rolü, yarı iletkenlerin önemini

ortaya koyar. Diğer yandan oksit yarı iletkenler, yenilikçi enerji ve çevre teknolojilerinde giderek daha fazla kullanılmaktadır.

1.4.1.Silisyumun n-Tipi Yarı İletkene Dönüşümü

Silisyum (Si), yarı iletken özelliklere sahip bir elementtir ve son yörüngesinde 4 elektron bulundurur. Bu elektronlar, komşu silisyum atomlarıyla kovalent bağlar oluşturarak düzenli bir kristal yapı meydana getirir. Ancak saf silisyum, düşük elektriksel iletkenliğe sahiptir. Elektriksel iletkenliğini artırmak için **katkılandırma (doping)** işlemi uygulanır.

n-Tipi Yarı İletkenin Oluşumu:

1. Katkı Maddesi Seçimi:

- Silisyumu n-tipi yarı iletken yapmak için **periyodik cetvelin 5. grup elementleri** kullanılır.
- Örneğin, fosfor (P), arsenik (As) veya antimon (Sb) gibi elementler tercih edilir. Bu elementlerin son yörüngelerinde 5 elektron bulunur.

2. Katkılendirme İşlemi:

- Saf silisyuma, **fosfor** gibi bir katkı maddesi yaklaşık 1/1000 oranında eklenir.
- Fosfor atomu, kovalent bağlar için 4 elektronunu komşu silisyum atomlarıyla paylaşır. Ancak, 5.

elektron fazla kalır ve serbest elektron olarak hareket eder.

3. Sonuç:

- Fosforun fazla olan 5. elektronu, serbest halde hareket edebilir ve bu durum silisyumun elektriksel iletkenliğini önemli ölçüde artırır.
- Bu yapı, elektron bakımından zengin hale geldiğinden **n-tipi yarı iletken** olarak adlandırılır.

n-Tipi Yarı İletkenin Özellikleri:

- **Taşıyıcılar:** Ana yük taşıyıcılar **elektronlardır** (negatif yüklü).
- **Elektron Yoğunluğu:** Katkılandırma işlemi ile serbest elektron sayısı artar ve böylece elektrik akımı daha kolay taşınır.
- **Uygulama Alanları:** n-tipi yarı iletkenler, transistörler, diyotlar ve diğer yarı iletken cihazların üretiminde kullanılır.

Silisyumun fosfor gibi elementlerle katkılandırılması, modern elektronik cihazların temelini oluşturan yarı iletken teknolojisinin ana bileşenlerinden biridir. Bu tür işlemler, yarı iletken malzemelerin istenen özelliklere göre şekillendirilmesine olanak tanır.

1.4.2. p-Tipi Yarı İletkenin Oluşumu:

1. Katkı Maddesi Seçimi:

- Silisyumu p-tipi yarı iletken yapmak için son yörüngelerinde **3 elektron** bulunduran elementler seçilir.
- Örneğin: **Alüminyum (Al), İndiyum (In), Bor (B), veya Baryum (Ba)** gibi elementler.

2. Katkılandırma İşlemi:

- Silisyum kristaline, 3 değerlik elektrona sahip bir element belli bir oran (ör. 1/1000) eklenir.
- Bu katkı atomu, kovalent bağlar oluşturmak için komşu 4 silisyum atomuyla bağ yapmaya çalışır. Ancak 3 elektron yeterli olmadığı için bir bağ eksik kalır.
- Bu eksiklik bir **elektron boşluğu** ya da **hol** (pozitif yük gibi davranan bir bölge) olarak adlandırılır.

3. Sonuç:

- Elektron eksikliği nedeniyle, bu yarı iletken **p-tipi yarı iletken** olarak adlandırılır.
- Hol, kristal yapıda serbestçe hareket ederek elektrik akımının taşınmasını sağlar.

1.4.3.p-Tipi ve n-Tipi Elektrotların Birleştirilmesi:

- **p-Tipi Elektrot:**

- Ana yük taşıyıcılar **hol** (pozitif yük taşıyan boşluklardır).
- Elektron boşluğu sayısı fazladır ve atomlar **negatif** yüklüdür.

- **n-Tipi Elektrot:**

- Ana yük taşıyıcılar **elektronlardır**.
- Elektron sayısı fazladır ve atomlar **pozitif** yüklüdür.

- **p-n Eklem Yapısı:**

- p ve n tipi yarı iletken malzemeler birleştirildiğinde, aralarındaki yük taşıyıcılar karşılıklı hareket eder:
 - n-tipi malzemedan elektronlar, p-tipi malzemeye geçerek buradaki hol boşluklarını doldurur.
 - Bu hareket, bir **nötr bölge** (deplesyon bölgesi) oluşmasına neden olur.
- Nötr bölge, elektriksel iletimi kontrol eden bir bariyer oluşturur.

p-n Eklem Teknolojisi ve Kullanım Alanları:

1. **Diyotlar:** Elektrik akımını bir yönde iletmek için kullanılır.
2. **Transistörler:** Elektronik sinyalleri yükseltmek veya anahtarlama için temel bileşenlerdir.
3. **Fotodiyotlar ve Güneş Panelleri:** Işığı elektrik enerjisine dönüştürmek için kullanılır.
4. **LED'ler:** Işığı elektrik enerjisinden üretir (Feynman,1963).

2.İnce Film Teknolojisi

İnce Film Nedir?

İnce filmler, **metal** ya da **ametal** elementlerden oluşturulan, kalınlıkları **birkaç mikrondan 2-3 nanometreye kadar değişebilen** kaplamalardır. Ergime sıcaklıkları yüksek olan (1500-2000 °C) maddeler üzerine ince katmanlar halinde kaplanarak oluşturulurlar. Bu filmler, kristal örgü yapısına sahip olabilir ve opak ya da şeffaf özellik gösterebilirler.

Tarihi ve Gelişimi:

- **1950'ler:** İnce film teknolojisi üzerinde yoğun araştırmaların başladığı dönemdir.
- **Günümüz:** Elektrik ve elektronik endüstrisinin temel yapı taşlarından biri haline gelmiştir.

İnce Filmlerin Üretiminde Kullanılan Malzemeler:

İnce filmler, farklı **metal oksitler** ve **kimyasal katkılar** kullanılarak üretilir. Yaygın olarak kullanılan ince film türleri şunlardır:

1. **Saf Kalay Oksit İnce Filmleri (SnO_2):** Yüksek elektriksel iletkenlik ve şeffaflık sağlar.
2. **İndiyum Katkılı Kalay Oksit İnce Filmleri (ITO):** LCD ve LED ekranlarda kullanılan en yaygın ince film türlerinden biridir.
3. **Antimon Katkılı İnce Filmler (ATO):** Termal ve elektriksel özellikleri iyileştirilmiştir.
4. **Flor Katkılı İnce Filmler (FTO):** Güneş pilleri ve optoelektronik cihazlarda kullanılır.
5. **Çinko Oksit İnce Filmleri (ZnO):** Yarı iletken ve fotokatalitik uygulamalarda öne çıkar.
6. **Titanyum Dioksit İnce Filmleri (TiO_2):** Antibakteriyel yüzeyler ve fotokatalitik uygulamalar için kullanılır.

İnce Film Teknolojisinin Kullanım Alanları:

İnce film kaplamalar, çok çeşitli sektörlerde yenilikçi çözümler sunar. Öne çıkan kullanım alanları:

1. **Elektronik ve Optoelektronik:**
 - **LCD ve LED TV ekranları:** Şeffaf ve iletken ince filmler sayesinde yüksek çözünürlük.
 - **Cep telefonu ekranları:** İnce filmler, dokunmatik ekranların temel bileşenidir.

2. Enerji:

- **Güneş panelleri:** İnce filmler, ışık enerjisini elektrik enerjisine dönüştüren katmanlar olarak kullanılır.
- **LED ampuller:** Verimli ışık üretimi için ince film kaplamaları içerir.

3. Otomotiv:

- **Araba camları:** Opak ya da şeffaf ince filmler, termal koruma ve yansımaya kontrolü sağlar.

4. Transistörler ve Elektronik Bileşenler:

- Küçük boyutlu transistörlerin üretiminde kullanılır.

5. Organik Güneş Pilleri:

- Hafif, esnek ve maliyet etkin enerji üretimi sağlar.

İnce Film Teknolojisinin Avantajları:

- **Yüksek Performans:** İletkenlik, optik şeffaflık ve dayanıklılık sağlar.
- **Esneklik:** Nano ölçekli kaplamalar sayesinde mikro ve makro boyutlarda uygulamalar mümkündür.
- **Çevre Dostu:** Daha az malzeme kullanımı ile sürdürülebilirlik sağlar.

İnce film teknolojisi, modern cihazların performansını artırmakla kalmaz, aynı zamanda daha sürdürülebilir bir üretim yaklaşımı sunar. Teknolojinin gelişimiyle birlikte, yeni ince film türleri ve uygulama alanları ortaya çıkmaya devam etmektedir.

3.Kristal Yapı Nedir?

Kristal yapı, **malzeme bilimi** ve **kristalografi** alanlarında, katı bir malzemenin atomlarının, iyonlarının veya moleküllerinin düzenli ve tekrarlı bir örüntü oluşturduğu yapıyı ifade eder (Onaran, 2006).

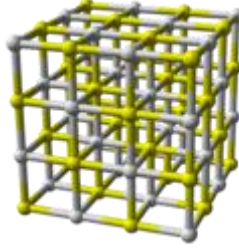
- **Makroskopik olarak:** Kristalli minerallerin yüzey düzlemleri arasındaki düzenli yapı.
- **Mikroskopik olarak:** Atomlar veya iyonlar arasında gözlemlenen düzenli dizilim. Bu düzenli örüntü, hem **mineralojide** hem de **yoğun madde fiziğinde** incelenir ve anlaşılır.

3.1.Kristal Yapının Önemi:

- **Simetri ve Yapı:** Bir kristalin simetri ve düzeni, malzemenin fiziksel ve kimyasal özelliklerini belirler.
- **Uygulamalar:**
 - Malzeme bilimi
 - Elektronik ve yarı iletken teknolojisi
 - Mineralojide doğal kristallerin sınıflandırılması
 - Nanoteknoloji ve ince film uygulamaları

Kristal yapılar, malzemelerin mekanik dayanıklılığı, elektriksel iletkenliği, optik özellikleri ve termal davranışları gibi birçok

özelliđi doğrudan etkiler. Bu nedenle, kristalografide yapılan çalışmalar, modern teknolojilerin temel taşlarından biridir(



Şekil.2. Kalsiyum sülfürün (CaS) kristal yapısı

3.3.Kristal Yapının Uygulamaları:

Kristal yapıların anlaşılması;

- **Malzeme bilimi:** Yeni malzemelerin geliştirilmesi,
- **Elektronik:** Yarı iletken teknolojisi,
- **Mineraloji:** Doğal minerallerin sınıflandırılması ve analizi, gibi alanlarda büyük önem taşır.

3.4.Kristal Sistemleri ve Nokta Grupları:

Kristal yapılar, geometrik düzenlerine ve simetri özelliklerine göre sınıflandırılır.

1. Nokta Grupları:

- Kristalografi alanında, kristaller yüzey düzlemlerinin düzenlenişine göre **32 nokta grubundan** birine dahil edilir.

2. Kristal Sistemleri:

- Nokta grupları, daha genel bir sınıflandırma olan **7 kristal sistemi** altında toplanır.
- Kristal sistemleri, düzenli yapılarının simetri özelliklerine göre ayrılır.

7 Kristal Sistemi:

1. Kübik Sistem:

- En yüksek simetriye sahip sistemdir.
- **Özellikler:** Tüm kenar uzunlukları ve iç açıları eşittir.

2. Hekzagonal Sistem:

- Altıgen bir düzenleme ile karakterizedir.
- **Özellikler:** Bir düzlemde üç eşit kenar, diğer ekseninde farklı bir uzunluk.

3. Tetragonal Sistem:

- Kübik sisteme benzer ancak bir eksenindeki uzunluk diğerlerinden farklıdır.

4. Ortombik Sistem:

- Tüm kenar uzunlukları farklıdır ancak iç açılar 90° 'dir.

5. Rombotrigonal (Trigonal) Sistem:

- Üçgen simetri içerir ve belirli kristal yapılarda bulunur.

6. Monoklinik Sistem:

- İki açısı 90° iken, bir açı farklıdır.

7. Triklinik Sistem:

- En düşük simetriye sahip kristal sistemidir.
- Tüm kenar uzunlukları ve açıları farklıdır.

3.4. Kristal Kafesi ve Birim Hücre:

Kristal yapıya sahip katılarda, atomlar düzenli ve tekrarlı bir dizilim içerisinde yer alır ve bu koordinatlar, bir **kristal kafesi** oluşturur.

- **Kristal Kafesi:**

- **Tanım:** Tekrarlayan nokta kümelerinden oluşan üç boyutlu bir düzen.
- **Özellik:** Kristal kafesi, atom merkezlerinin uzayda oluşturduğu düzenli bir ağıdır.
- **Birim Hücre:**
 - **Tanım:** Kristal kafesin tekrarlayan en temel elemanıdır.
 - **Geometri:** Bir yapı için birden fazla geometrik şekilde birim hücre olabilir. Ancak **en fazla simetriye sahip olan** yapı birim hücre olarak kabul edilir.
 - **Kriterler:** Birim hücreler, azami simetriye ve uzun mesafeli düzenliliğe sahip olmalıdır.

Simetri ve Örüntü Özellikleri:

- Eğer kristal **kübik** bir yapıya sahipse, kenar uzunlukları ve birleşim açıları eşit olur. Bu durumda, yapı yüksek bir simetri gösterir.
- Simetri özelliklerinin minimum olduğu durumlarda, kristal sistemi **triklinik** olarak adlandırılır.
- **Örnek:** Cam gibi amorf yapılar, kristal kafes modeliyle tanımlanamaz, çünkü atom yerleşimleri düzensizdir.

3.5.Bravais kafesi ve Özellikleri

Bravais kafesi, bir kristalin atomik yapısının tekrarlı bir düzen içinde bulunduğu ve üç boyutlu olarak sürekli bir yapıya sahip olduğu bir matematiksel yapıdır. Bu düzen, tüm kristalin temel birim yapısını temsil eden bir **birim hücre** üzerinden tanımlanır.

Bravais Kafesinin Temel Özellikleri

1. **Tekrarlanabilirlik:** Bir Bravais kafesi, birim hücrenin uzayda üç boyutlu tekrarlanmasıyla oluşturulur.
2. **Simetri:** Her kafes belirli bir simetriye sahiptir ve bu simetri, kristalin fiziksel ve kimyasal özelliklerini etkiler.
3. **Kafes Parametreleri:**
 - Birim hücrenin kenar uzunlukları (**a, b, c**)
 - Kenarları arasındaki açılar (**α , β , γ**)
4. **Atomların Yerleşimi:** Kafes noktaları, atomların veya moleküllerin yerleşim pozisyonlarını belirtir.

7 Kristal Sistemi ve 14 Bravais Kafesi

Bravais kafesleri, **7 temel kristal sistemi** altında toplanan toplam **14 farklı tipte** sınıflandırılır.

1. Kübik (Cubic)

- **Basit Kübik (SC):** Her köşede bir atom.
- **Vücut Merkezli Kübik (BCC):** Köşelerde ve merkezde bir atom.
- **Yüzey Merkezli Kübik (FCC):** Köşelerde ve yüzey merkezlerinde bir atom.

2. Heksagonal (Hexagonal)

- **Basit Heksagonal:** Altıgen prizma düzeninde atomlar.

3. Tetragonal

- **Basit Tetragonal:** Köşelerde atomlar.
- **Vücut Merkezli Tetragonal:** Köşelerde ve merkezde atomlar.

4. Ortorombik (Orthorhombic)

- **Basit Ortorombik**
- **Vücut Merkezli Ortorombik**
- **Yüzey Merkezli Ortorombik**
- **Taban Merkezli Ortorombik**

5. Monoklinik (Monoclinic)

- **Basit Monoklinik**
- **Taban Merkezli Monoklinik**

6. Triklinik (Triclinic)

- **Basit Triklinik**

7. Romboderal (Rhombohedral)

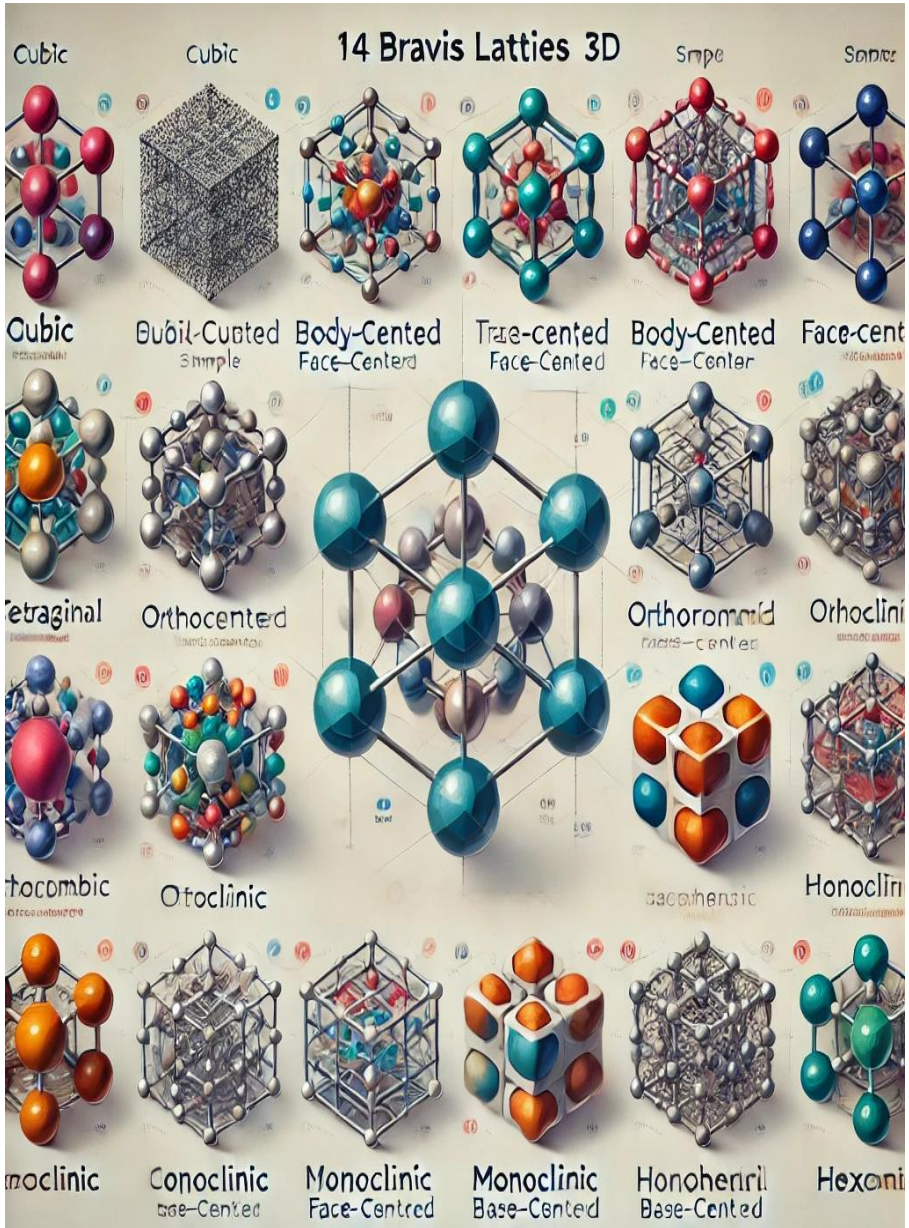
- **Basit Romboderal**

Bravais Kafesinin Kullanım Alanları

- **Malzeme Bilimi:** Kristal yapılarının analizinde ve özelliklerin tahmin edilmesinde.
- **Fizik:** Yoğun madde fiziğinde kristal yapıların modellenmesinde.
- **Kimya:** Katıların bağ yapılarının ve özelliklerinin açıklanmasında.
- **Elektronik:** Yarı iletkenlerin ve kristal tabanlı cihazların üretiminde.

Bravais Kafesinin Önemi

- **Kristal Yapıyı Tanımlama:** Bir kristalin geometrik ve atomik düzenini açıklar.
- **Fiziksel Özellikler:** Elektriksel, manyetik ve optik özelliklere doğrudan etki eder.
- **Malzeme Üretimi:** Mikroelektronik ve nanoteknoloji gibi alanlarda kritik rol oynar.



Şekil.3. Kristal Yapı Çeşitleri.

4.Kristal Kusurları Ve Etkileri

Kristal yapılar, atomlar veya moleküller arasında düzenli bir dizilim içerir, ancak pratikte bu dizilimde çeşitli **kusurlar** bulunabilir. Bu kusurlar, kristalin özelliklerini önemli ölçüde etkileyebilir. Kusurlar, dört ana kategoride sınıflandırılabilir:(Ehrhart, 1991), (Watkins, 1997)

4.1. Noktasal Kusurlar (Point Defects):

Noktasal kusurlar, kristaldeki bir atom ya da molekülün eksikliği veya fazlalığına bağlıdır. Bu tür kusurlar, genellikle bir atomun kristal kafesindeki belirli bir noktada yer değiştirmesiyle ortaya çıkar.

- **Çeşitleri:**

- **Valans (Vacancy):** Bir atomun ya da iyonun eksikliği.
- **İyonik Yer Değiştirme (Interstitial Defect):** Bir atom ya da iyonun normal pozisyonu dışında, kristalin içinde başka bir yerde yer alması.
- **Katkı (Substitutional Defect):** Bir atomun başka bir tür atom ile yer değiştirmesi.

4.2. Çizgisel Kusurlar (Line Defects):

Çizgisel kusurlar, kristaldeki atom sırasının bir çizgi boyunca bozulduğu noktalarlardır. Bu kusurlar, **dislokasyonlar** olarak adlandırılır ve malzemenin mekanik özelliklerini (özellikle şekil değiştirme ve gerilme özelliklerini) etkiler.

- **Çeşitleri:**

- **Yivli Dislokasyonlar (Edge Dislocations):** Bu kusurda, dislokasyon çizgisi, kristalin düzlemine dik olarak yer alır.
- **Süreksiz Dislokasyonlar (Screw Dislocations):** Dislokasyon çizgisi, kristalin düzlemi boyunca yer değiştirir.
- **Melez Dislokasyonlar (Mixed Dislocations):** Her iki tür dislokasyonun birleşiminden oluşur.

4.3. Düzlemsel Kusurlar (Planar Defects):

Düzlemsel kusurlar, kristalin düzleminde meydana gelen hatalardır ve genellikle **katman kaymaları** veya **eşleşmemiş atom dizileri** ile ilişkilidir. Bu kusurlar, kristalin yüzeyine paralel olan bölgesinde yer alır.

- **Çeşitleri:**

- **Yüzey Kusurları (Surface Defects):** Kristalin yüzeylerinde meydana gelen kusurlar, genellikle atomların düzgün dizilmemesiyle ortaya çıkar.
- **Yığınlar (Stacking Faults):** Katmanların doğru sırayla dizilmemesi nedeniyle oluşan bozukluklar.
- **Kısımlar (Grain Boundaries):** Kristalin iki farklı bölgesinin birleşiminde meydana gelen sınırlar.

4.4. Hacimsel Kusurlar (Volume Defects):

Hacimsel kusurlar, kristalin hacminde meydana gelen büyük ölçekteki hatalardır. Bu tür kusurlar genellikle kristalin büyük bölgelerinde düzensizlik yaratır.

- **Çeşitleri:**

- **İç Boşluklar (Void Defects):** Kristalin içinde büyük, boş alanların olması.
- **İç Enkapsülasyonlar (Inclusions):** Yabancı maddelerin kristal yapısında bulunması.
- **İç Gerilmeler (Strain Defects):** Kristalin içinde büyük gerilmeler ve deformasyonlar (Crawford & Slifkin, 1975), (Siegel & Takamura, 1982)

5. Sonuç

Kristaldeki kusurların biçimi, boyutu, miktarı ve yeri, malzemenin **fiziksel ve kimyasal özelliklerini** doğrudan etkiler. Örneğin:

- **Mekanik Özellikler:** Dislokasyonlar, kristalin plastisite ve şekil değiştirme özelliklerini etkiler.
- **Elektriksel Özellikler:** Noktasal kusurlar, yarı iletken malzemelerde elektriksel iletkenliği etkileyebilir.
- **Termal Özellikler:** Kusurlar, kristalin ısı iletkenliği üzerinde de değişikliklere yol açabilir.
- **Kimyasal Özellikler:** Kusurlar, kimyasal reaksiyon hızlarını ve malzemenin korozyon dayanıklılığını değiştirebilir.

Sonuç olarak, kristal yapılarındaki kusurlar, malzemenin performansını optimize etmek veya zayıflatmak için dikkatlice incelenmeli ve yönetilmelidir.

KAYNAKLAR

Crawford, J. H. ve Slifkin, L. M., (Ed.) (1975). *Point Defects in Solids*. New York: Plenum Press.

Ehrhart, P. (1991). *Properties and interactions of atomic defects in metals and alloys*. Landolt-Börnstein, New Series III. Berlin: Springer.

Feynman, R. (1963). *Feynman Lectures on Physics*. Basic Books.

Mehta, V. K. (2022). *Principles of Electronics*. New Delhi:S. Chand.

Neamen, D. (2003). *Semiconductor Physics and Devices (PDF)*. New Jersey:McGraw-Hill.

Onaran, K. (2006). *Malzeme Bilimi*. Bilim Teknik Yayınevi.

Peter, Y. (2010). *Fundamentals of Semiconductors*. Berlin: Springer-Verlag.

Shockley, W. (1950). *Electrons and holes in semiconductors: with applications to transistor electronics*. New Jersey: Princeton.

Siegel, R. W. (1982). J.-I. Takamura (Ed.). *Atomic Defects and Diffusion in Metals*. Point Defects and Defect Interactions in Metals. Amsterdam.

Watkins, G. D. (1997). *Native defects and their interactions with impurities in silicon*. Bethlehem: Springer.

Yacobi, B.G. (2003) *Semiconductor Materials: An Introduction to Basic Principles*, New York: Springer

BÖLÜM VII

Bakır (II)-Sulfamethazin kompleksinin Hesaplamalı Kimya Metodu ile spektroskopik özelliklerinin incelenmesi: Moleküler Docking Çalışması ve ADME

Filiz ÖZTÜRK¹
Tuğba AYCAN²

Giriş

Farklı fonksiyonel grupların eklenmesi ile -SO₂NH- kısmı değişmeden yeni sulfonamid grubu içeren ilaçların elde edilebilmesi mümkündür. Böylece çeşitli farmakolojik etkinliğe sahip farklı sulfonamid türevleri olan ilaç gruplarına ulaşılabilir (Medina et al., 1999; Toth et al., 1997). Biyolojik etkinliği göz önüne alındığında metal-sulfonamid grubu bileşiklerin etkinlikleri farmakolojik ve toksikolojik etkinlikleri göz önüne alındığında serbest sulfo gruplarından daha iyi bir aktiviteye sahip olduğu görülmektedir. Aromatik sulfonamid grupları ve metal-sulfo kompleksleri özellikle etkin antibakteriyel aktiviteye sahip olduğunu bilinmekte ve birçok

¹ Doç. Dr., Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Karadeniz İleri Teknoloji ve Araştırma Merkezi, Samsun/Turkey, Orcid: 0000-0002-0493-0446 filiz.ozturk@omu.edu.tr

² Doç. Dr., Sinop Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi,, Fizik Bölümü, Sinop/Turkey, Orcid: 0000-0002-5313-7807, tugba.aycan84@gmail.com

uygulamaya sahiptir. Bunlar diüretik, antiglokom, antiepileptik veya antifungal ilaçlar olarak kullanılmaktadır (Baenziger et al., 1983; Ferrer et al., 1990; Scozzafava et al., 1999; Supuran et al., 1998).

Sulfamethazin (Hsmz), çeşitli bakteriyel hastalıkların tedavisi için insan ve veterinerlikte yaygın olarak kullanılan bir sülfonamid grubu ilaçtır (Giuseppetti et al., 1994). Hsmz, metal iyonuna üç farklı şekilde koordine edilebilen bir liganddır: tek dişli, iki dişli veya üç dişli (pirimidin, sülfonamid azot atomları ve sülfonamid oksijen kullanılarak) (Mansour, 2013). Ayrıca, H-bağ etkileşimine katılım yoluyla komplekslerin ikincil koordinasyon bölgesinde bir karşı anyon olarak da tutulabilir (Bulut ve ark., 2015). Ayrıca bu ligandın metal komplekslerinin yanıkların tedavisinde hızlı bir şekilde iyileştirdiği bilinmektedir (Baenziger & Struss, 1976; Cook & Turner, 1975).

Öztürk (2015) tarafından deneysel olarak incelenen $[Cu(HydEt-en)_2] \cdot (smz)_2 \cdot 3H_2O$ kompleksinin hesaplamalı titreşim frekansları (FT-IR), optimize edilmiş moleküler geometrik parametreler, HOMO-LUMO analizleri araştırılmıştır (Öztürk, 2015). Teorik hesaplamalar LanL2DZ baz kümesi ve DFT yöntemindeki B3LYP fonksiyoneli kullanılarak yapılmıştır. Teorik hesaplamalar sonucunda elde edilen HOMO ve LUMO enerji değerleri göz önüne alınarak iyonizasyon potansiyeli, elektron afinitesi, elektronegatiflik, kimyasal sertlik, kimyasal yumuşaklık, kimyasal potansiyel ve elektrofilik indeks parametreleri gibi sonuçlar hesaplandı. Tüm bu etkileşimler Hirshfeld yüzey analizi kullanılarak görselleştirildi ve doğrulandı. Moleküler docking çalışmaları Auto Dock Vina yazılımı ile DHPS of *Yersinia pestis* enzimlerine karşı gerçekleştirildi

Metot

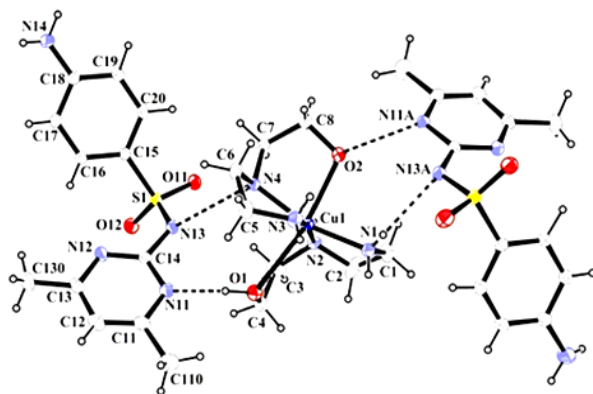
$[Cu(HydEt-en)_2] \cdot (smz)_2 \cdot 3H_2O$ kompleksinin teorik hesaplaması için Gaussian-09 and GaussView-5.0 yazılımları and YFT (Yoğunluk Fonksiyon Teorisi)-B3LYP hibrit metodu kullanıldı (Becke, 1993; Dennington II et al., 2009; Frisch et al., 2014; Lee et al., 1988). Kompleksin optimizasyonu ve IR titreşim hesaplamaları

için LanL2DZ baz seti kullanıldı (Check et al., 2001; Chiodo et al., 2006). Bakır kompleksinin elektronik geçişlerini hesaplamak için TD-SCF metodu 6-311G baz seti kullanıldı. Orbital enerjileri, titreşim enerjileri ve geçiş enerjileri GaussSum yazılımı yardımı ile görüntülendi (O'boyle et al., 2008). Hirshfeld yüzey analizi tek kristal CIF dosyası ile çalıştırıldı. Bu analizler için Crystal Explorer 17.5 yazılımı kullanıldı (Turner et al., 2017). DHPS of Yersinia pestis enzimi PDB (Protein Veri Bankası) (PDB ID: 3TZF <http://www.rcsb.org/pdb>)'dan indirildi. Moleküler modelleme çalışmaları AutoDock Tool (ADT) v1.5.6 ve AutoDock Vina docking yazılımları kullanıldı (Trott & Olson, 2010). Polar hidrojen atomları, ADT yazılımıyla enzimlerin suları göz ardı edilerek eklendi. Grid 1Å aralıklarla oluşturuldu. Kompleks ve enzimler arasındaki etkileşimler DS (Discovery Studio) yazılımı (D. S. BIOVIA) kullanılarak listelendi ve görselleştirildi. Bileşiklerin ilaç benzerliği özellikleri SwissADME web sunucusu tarafından gerçekleştirildi. Etkili ilaç araştırması, ADME parametrelerinin (Adsorpsiyon, Dağıtım, Metabolizma, Atılım) ve ilaç benzerliği gibi küçük bileşiklerin farmakokinetik özelliklerinin incelenmesini gerektirir (Daina et al., 2017). OpenBabelGui ve SwissADME programları bileşiğin farmokinetik özelliklerini Analiz etmek için kullanıldı (Norinder & Bergström, 2006).

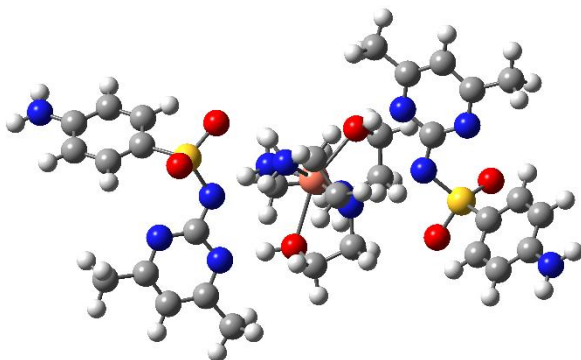
Sonuç ve Tartışma

Geometrik Optimizasyon

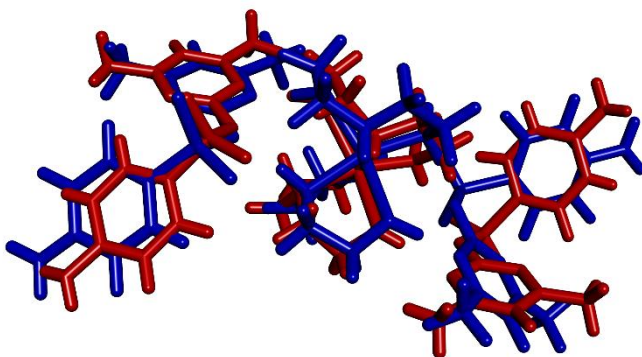
Şekil 1.a.b'de $[Cu(HydEt-en)_2] \cdot (smz)_2 \cdot 3H_2O$ kompleksinin X-ışını kırınımı görünümü (Öztürk, 2015) ve optimize edilmiş yapı görünümü verilmiştir. Çalışılan molekülün bazı seçilmiş geometrik parametrelerinin teorik DFT/B3LYP/LANL2DZ ve X-ışını kırınımı verileri (Öztürk, 2015) Tablo 1'de karşılaştırmalı olarak verilmiştir.



(a)



(b)



(c)

Şekil 1: Kompleksin a) X-ışını kırınımı (Öztürk, 2015) and b) optimize yapı ve c) üstüste binmiş görüntüsü

Tablo 1: Kompleksin bağ uzunluğu (Å) ve bağ açısı (°)

Bağ Uzunluğu	XRD (Öztürk, 2015)	DFT
Cu1—N1	2.003 (4)	2.059
Cu1—N2	2.035 (4)	2.100
Cu1—N3	1.988 (4)	2.042
Cu1—N4	2.036 (4)	2.106
Cu1—O1	2.580 (4)	2.505
Cu1—O2	2.422 (4)	2.341
S1—O12	1.444 (3)	1.654
S1—O11	1.447 (3)	1.633
S1—N13	1.587 (3)	1.788
S2—N13A	1.581 (3)	1.783
N11—C11	1.343 (6)	1.386
N11—C14	1.347 (5)	1.373
N13—C14	1.379 (5)	1.367
N11A—C14A	1.351 (5)	1.387
N11A—C11A	1.345 (5)	1.374
N13A—C14A	1.375 (5)	1.366
Bağ Açısı		
N1—Cu1—N2	84.62 (17)	84.58
N3—Cu1—N4	84.37 (16)	83.61
N2—Cu1—N4	98.82 (15)	99.89
N11—C14—N13	117.3 (4)	123.05
S1—N13—C14	121.3 (3)	118.81
C11—N11—C14	113.4 (4)	114.40

Bakır metali Hydet-en'in dört azot atomu ve su moleküllerinin iki oksijen atomu ile oktahedral bir koordinasyon geometrisi oluşturur (Öztürk, 2015). DFT sonuçları, eksenel pozisyondaki azot atomlarının bağ uzunluklarının XRD sonuçlarına göre uzadığını (Cu1—N1/N2/N3/N4; deneysel: 2.003 (4) Å/2.035 (4) Å/1.988 (4) Å/2.036 (4) Å; hesaplanan: 2.059 Å/2.100 Å/2.042 Å/2.106 Å

gösterirken, apikal pozisyondaki oksijen atomlarının bağ uzunlukları kısalmıştır (Cu1—O1/O2; deneysel: 2.580 (4) Å/2.422 (4) Å; hesaplanan: 2.505 Å/2.341 Å) (Tablo 1). Şekil 1c’de gösterildiği gibi hidrojen atomları ihmal edilmiş deneysel ve optimize edilmiş yapı üst üste bindirilerek çizilmiştir. Bağ uzunluklarındaki en büyük değişimin S atomu etrafında gözlemlendiği belirlenmiştir. Kompleksteki smz'nin S1—O12, S1—O11, S1—N13, S2—N13A bağ uzunlukları sırasıyla 1.444 (3) Å (hesaplanan: 1.654 Å), 1.447 (3) Å (hesaplanan: 1.633 Å), 1.587 (3) Å (hesaplanan: 1.788 Å) ve 1.581 (3) Å (hesaplanan: 1.783 Å) olarak bulunmuştur. Bu değerlerdeki sapmanın sebebi hidrojen bağı yapan grupların DFT hesaplamasında dikkate alınmamasından kaynaklanmaktadır. RMSE değeri 0.1343 olarak bulunmuştur. Bu sapma değeri bir sulfamethazin anyonunun sulfa grubundan kaynaklanmaktadır.

Titreşim Spektroskopisi

Cu(II)-smz kompleksinin ve Hsmz ligantının teorik hesaplamaları sonucu elde edilen titreşim frekansları sonuçları deneysel değerler ile karşılaştırılarak Tablo da verilmektedir. Hesaplamalar DFT/B3LYP yöntemi ve LANL2DZ baz seti kullanılarak elde edilmiştir. Deneysel ve hesaplanan değerler birbirleriyle ve literatürle uyumlu olduğu görülmektedir. Hesaplanan titreşim frekansları 0,940 ile ölçeklendirilmiştir, hesaplanan Hsmz ligantının bu değeri literatürde 0,918 olarak verilmiştir (Öztürk, 2023). Kompleksin amino grubuna ait $\nu_{as}(\text{NH}_2)$ ve $\nu_s(\text{NH}_2)$ bantları IR spektrumunda 3443 cm^{-1} , 3428 cm^{-1} ve 3347 cm^{-1} , 3330 cm^{-1} de gözlenmiştir (Öztürk, 2015). Serbest Hsmz ligandı ile karşılaştırıldığında daha yüksek frekanslara (3442 cm^{-1} ve 3342 cm^{-1}) kaydığı görülmektedir (Öztürk et al., 2019). Kompleks oluşumunda amino gruplarının azot atomlarıyla hidrojen bağı etkileşimlerinden kaynaklanır. Serbest Hsmz ligantının 3245 cm^{-1} civarında gözlenen NH titreşim piki, kompleksin oluşumunda deprotona ($-\text{SO}_2\text{NH}-$) olması nedeni ile gözlenmemiştir (Tablo 2).

Teorik olarak NH₂ asimetrik ve simetrik titreşim bantları 3780 cm⁻¹, 3779 cm⁻¹ ve 3641 cm⁻¹, 3640 cm⁻¹ olarak hesaplanmıştır.

HydEt-en ligantının karakteristik titreşim pikleri sırasıyla $\nu(OH)$, $\nu(NH)$, $\nu(CH)$, $\delta(NH)$, $\delta(CH)$ ve $\nu(CO)$ için 3325 cm⁻¹, 1616 cm⁻¹, 1469 cm⁻¹ ve 1067 cm⁻¹ olarak belirtilmiştir (Öztürk, 2023). Teorik hesaplamalar sonucunda HydEt-en NH₂ asimetrik ve simetrik titreşim bantları ve NH titreşim bantları 3260-3123 cm⁻¹ aralığında hesaplanmıştır. Bu, kompleks oluşumunda smz'nin azot atomlarıyla olan hidrojen bağı etkileşiminden kaynaklanmaktadır (Curtis & Powell, 1968). X-ışını sonuçları incelendiğinde, kompleksin S2-O11 ve S2-O12 bağ uzunluklarının 1.447 Å ve 1.444 Å olduğu belirtilmiştir (Öztürk, 2015). Kompleksteki -SO₂ grubunun simetrik ve asimetrik gerilme bantları sırasıyla 1377 cm⁻¹, 1302 cm⁻¹ ve 1131 cm⁻¹'de gözlenmiştir. Korelasyon değerinin teorik hesaplama sonucunda 0,918 olduğu görülmektedir. Kompleksin SO₂ asimetrik ve simetrik titreşim değerlerinin daha yüksek frekanslarda olması beklenmektedir. Teorik hesaplamalar sonucunda bağ uzunlukları sırasıyla 1.64650 Å ve 1.63520 Å olarak hesaplanmıştır. Teorik olarak hesaplanan titreşim pikleri değerlerin sırasıyla 906 cm⁻¹ ve 793 cm⁻¹'de olduğu görülmektedir. Deneysel ve teorik olarak elde edilen SO₂'nin asimetrik ve simetrik titreşim piklerindeki farkın nedeninin, teorik hesaplamaların gaz fazındaki moleküller arası etkileşimlerin göz ardı edildiği izole bir molekül olması olduğu göz önüne alındığında anlamak mümkündür. Bağ uzunluklarında gözlenen bu uzama dikkate alındığında titreşim frekanslarının daha düşük frekanslara kayması anlaşılabilir (Al-Dawood et al., 2016; Öztürk, 2023). IR spektrumunda Cu(II)-N titreşiminin tepe noktası 518 cm⁻¹'de gözlenmektedir. Teorik hesaplama sonucunda 553 cm⁻¹ olarak elde edilmiştir.

Tablo 2. Bakır kompleksinin gözlenen ve hesaplanan titreşim frekansı

	Hsmz (Den.)	Hsmz (Teo.)	Kompleks	Skala edilen titreşim
v_{as}(NH₂)(smz)	3442s	3748	3443 sh, 3428m	3780.28, 3779.01
v_s(NH₂)(smz)	3342s	3620	3347sh, 3330s	3641.12, 3640.18
v(NH)(smz)	3245s	3571	-	-
v_{as}(NH₂)(hydeten)	-	-	3260ş,	3543.30, 3488.99
v_s(NH₂)(hydeten)	-	-	3242ş,	3384.87
v(NH)(hydeten)	-	-	3224om 3145ş, 3123om	3504.30
v(CH)(phenyl) + v(CH)(pyrimidine)	3094m, 3067m, 3059m, 3039m	3228- 3173	3066w, 3054w, 3031w	3254.69-3192.49
v(CH₃)	3003w, 2963w, 2922w	3117- 3029		3160.92-3155.04 3132.42-3125.51
v(CH) (hydeten)	-	-	2979w- 2898w	3153.03-3140.54, 3116.28-3106.90
δ(NH₂)(hydeten)	1640vs	1710		1739.09, 1711.74
δ(NH) (hydeten)	-	-	1643w, 1631w	1620.46
δ(NH₂) (smz)				1690.09, 1689.02
Ring str(phenyl)	1597s	1634	1599s, 1577vs, 1562s	1650.69, 1650.43
v(C=C)	1571s, 1561s, 1549s	1604	1562s, 1554sh	1626.81, 1626.05
δ(OH)				1585.61, 1579.22, 1569.36, 1554.44
δ(CH₂) (hydeten)				1537.41, 1536.54, 1531.84
δ_{as}(CH₃)	1507s	1571- 1514	1500s	
δ(NH)	1477s	1474, 1317	-	-

$\delta(\text{CH})(\text{hydeten})$	-	-	1481w, 1463vw	1523.60, 1521.14, 1515.72, 1502.17
$\nu_{\text{as}}(\text{SO}_2)$	1386ç,1 303s	889	1377s, 1302s	906.82
$\nu(\text{CN})(\text{smz})$ sulfo				1455.58, 1393.33, 1237.71
$\delta_{\text{s}}(\text{CH}_3)$	1341s	1457- 1447	1344s	1439.83, 1433.11
$\gamma(\text{NH})$	1326s	1013	-	-
$\gamma(\text{NH})(\text{dien})$	-	-		1424.24, 1422.05
$\nu(\text{CN})(\text{dien})$	-	-	1238z, 1218s	1398.05
$\nu(\text{CN})(\text{smz})$	-	-		1334.81,
$\delta(\text{NH})$	1189s		-	-
$\nu_{\text{s}}(\text{SO}_2)$	1146s	742	1131s	793.74
$\nu(\text{CN})$	1092s,1 072s		1075s	1110.05
$\nu(\text{SN})$	974s	977	973s, 958s	1051.71
$\nu(\text{MO})$			513	
$\nu(\text{MN})$	-		475	553.96

s, simetrik; as, asimetrik; ν , gerilme; δ , düzlem içi bükülme; τ , torsiyon; γ , düzlem dışı bükülme; δ_{s} , makaslama; ρ , sallanma.

Hirshfeld Yüzey Analizi

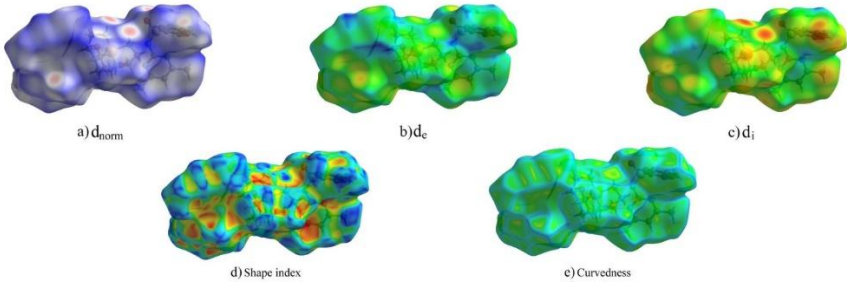
Kristal yapı elektron dağılımı gözönüne alınarak Hirshfeld yüzey analizi yapılır. Hirshfeld yüzey analizi, moleküller arası etkileşimleri görselleştirir. Geliştirilen bileşiklerin biyolojik aktivitelerini anlamak için hedef molekül ile karşılık gelen reseptör arasındaki moleküller arası etkileşimleri incelemek çok önemlidir. Hidrojen bağları ve diğer moleküller arası etkileşimler gibi kovalent olmayan etkileşimlerin anlamamızı sağlar (Clausen et al., 2010; McKinnon et al., 2007; McKinnon et al., 1998; Shit et al., 2016; Spackman & Byrom, 1997; Spackman & Jayatilaka, 2009; Spackman et al., 2008).

Biyolojik aktivitelerin anlaşılması açısından çok önemlidir. X-ışını kristal yapı analizi sonucu elde edilen CIF dosyası kullanılarak Crystal Explorer 17.5 programı yardımıyla Hirshfeld yüzeyi ve iki boyutlu parmak izi grafikleri hesaplanır. Böylece moleküller arası etkileşimlerini görsel olarak ortaya koyabilmektedir (Clausen et al.,

2010; Hirshfeld, 1977; Parkin et al., 2007; Rohl et al., 2008; Spackman & Jayatilaka, 2009; Spackman & McKinnon, 2002; Wolff et al., 2012) (Clausen et al., 2010; Spackman & Jayatilaka, 2009; Spackman & McKinnon, 2002).

Hirshfeld yüzeyindeki her nokta için iki mesafe ifade edilmiştir: Bunlar d_i ; en yakın iç çekirdeğin ve d_e ; en yakın dış çekirdeğin Hirshfeld yüzeyine olan uzaklığını gösterir (Parkin et al., 2007; Spackman & McKinnon, 2002). Hirshfeld yüzeyi analizinde d_{norm} kırmızı, beyaz ve mavi olarak oluşabilir. Moleküller arası etkileşim var ise kırmızı renktir (Van der Waals (vdW) yarıçaplarından daha kısa) d_{norm} değeri negatiftir. Hirshfeld yüzey analizinde etkileşim mavi renkte (van der Waals (vdW) yarıçaplarından daha uzun) görülmektedir ve d_{norm} değeri pozitiftir. Beyaz alanlar van der Waals etkileşimine yakın temasları temsil etmektedir (McKinnon et al., 2004; Sreenatha et al., 2020).

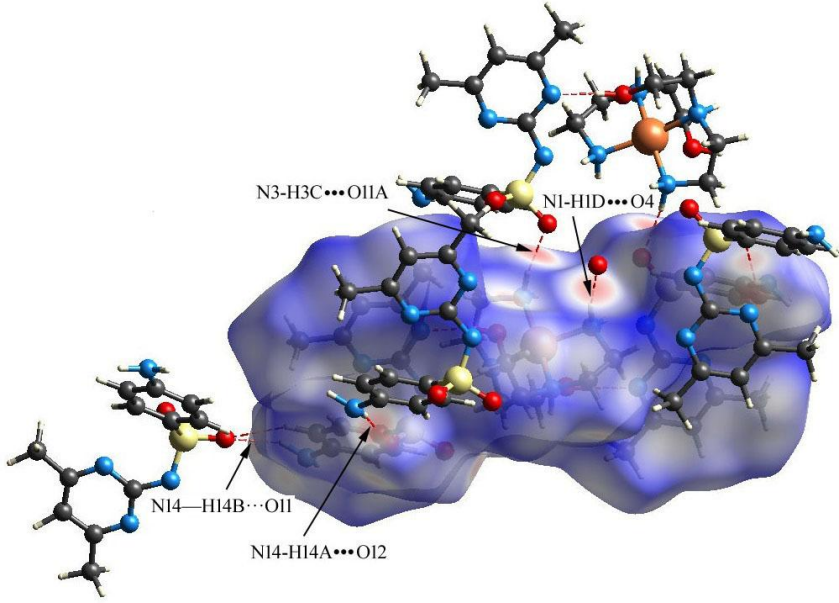
Kompleksin moleküller arası etkileşimleri Hirshfeld yüzey analizi kullanılarak araştırılır. d_i , d_e , d_{norm} , şekil indeksi ve eğriliğin haritalanması Şekil 2’de gösterildiği gibidir.



Şekil 2: Kompleksin d_{norm} (sol üst), d_e (orta üst), d_i (sağ üst), şekil indeksi (sol alt) ve eğrilik (sağ alt) ile haritalanmış Hirshfeld yüzeyleri.

Kompleksin d_{norm} yüzeyi üzerinde moleküler arası etkileşimler Şekil 3’de görüldüğü gibidir.. Şekil 3’ü incelediğimizde kırmızı noktalar N1—H1D···O4, N3—H3C···O11A, N14—H14B···O11, N14—H14A···O12 verici alıcı etkileşimlerini göstermektedir.

kompleksin XRD ve Hirshfeld sonuçlarına göre moleküller arası etkileşimleri Tablo 3’de verildiği gibidir.

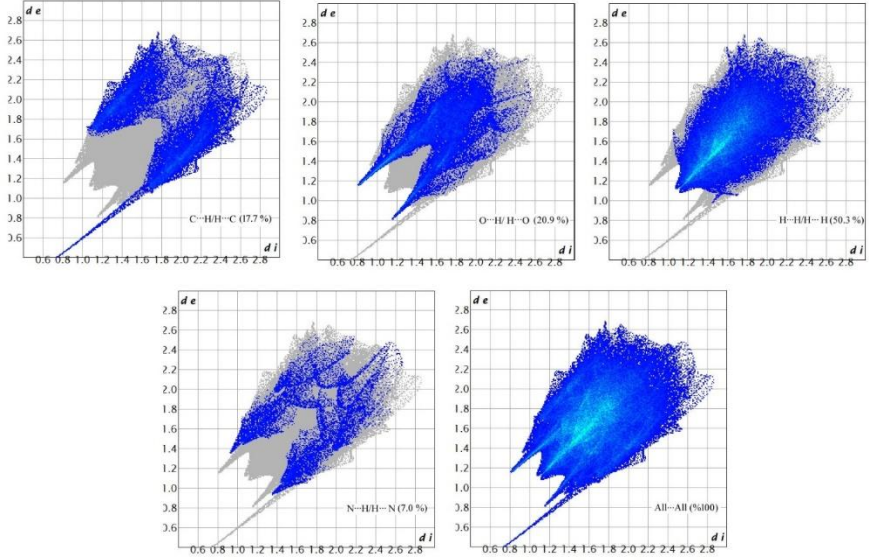


Şekil 3: Kontakların saçılma noktalarına sahip Cu(II) kompleksinin parmak izi

Tablo 3: Komplekste XRD ve Hirshfeld sonuçlarına göre kısa moleküller arası etkileşimler

Etkileşimler	H···A (XRD) Å	H···A (Hirshfeld) Å
N1—H1D···O4	2.24	2.012
N3—H3C···O11A	2.16	1.979
N14—H14B···O11	2.39	2.319
N14—H14A···O12	2.25	2.100

2 boyutlu parmak izinin gösterimi Şekil 4’de verilmiştir. Toplam Hirshfeld yüzeyinin katkıları C···H/H···C (%17,7,6), O···H/H···O (%20,9), N···H/H···N (%7) ve H···H/H···H (%50,3) etkileşimlerine aittir.



Şekil 4: (a) $C\cdots H$, (b) $O\cdots H$, (c) $H\cdots H$, (d) $N\cdots H$ ve (e) $S\cdots H$ temaları, toplam Hirshfeld yüzey alanına katkıda bulunan temaların yüzdeleri göstermektedir.

Sınır Moleküler Orbitalleri (FMO's)

Kompleks ve serbest ligandın kuantum kimyasal verileri karşılaştırmalı olarak Tablo 4'te verilmiştir. Cu(II) kompleksi için 4.37 eV (α), 3.42 eV (β) E_{GAP} değerleri bulunmuştur. Öztürk (2024) ile karşılaştırıldığında bu çalışmadaki kompleks daha düşük sertliğe, daha az yumuşaklığa sahiptir. Yani kompleks daha yüksek kimyasal aktiviteye ve daha düşük kinetik kararlılığa sahiptir. Kompleksin elektronegatifliği refere edilen kompleksten daha düşüktür (Öztürk, 2024). Bu nedenle kompleksin elektron alma yeteneği daha düşük ve daha karardır. Cu(II) kompleksi ve daha önceki çalışmanın (Öztürk, 2024) biyolojik aktiviteleri karşılaştırıldığında bu çalışmanın biyolojik aktivitesinin daha yüksek olduğu belirlenmiştir. Çünkü (Öztürk, 2024) de belirtilen kompleksin bu çalışmadaki Cu(II) kompleksine göre daha yüksek elektrofilik indekse, ΔN_{MAX} , S' 'ye ve daha düşük nükleofilik indekse sahiptir.

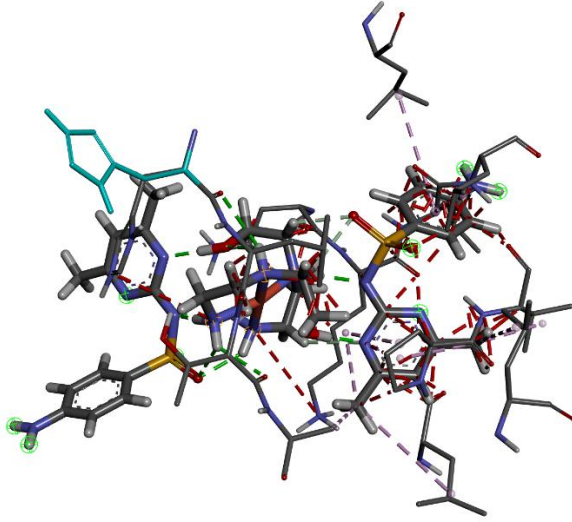
Kompleksin enerji ve kimyasal reaktivitesini açıklamak için kimyasal sertlik (η) (Koşar et al., 2012), kimyasal yumuşaklık (σ) (Asiri et al., 2016), elektronegatiflik (χ) (Parr et al., 1978), Elektrofilik indeksi (ω) (Parr et al., 1999), kimyasal potansiyel (μ) (Ökten et al., 2021), maksimum yük transfer parametresi ($\Delta N_{\max}$), nükleofilik indeksi (N) (Chattaraj et al., 2003), küresel yumuşaklık (S), gibi bazı özellikler HOMO ve LUMO enerjileri kullanılarak hesaplanmıştır.

Tablo 4: Kompleksin kuantum kimyasal tanımları

	DFT-B3LYP/LanL2DZ	
	α	β
$E_{\text{HOMO}}(\text{eV})$	-5.45	-5.45
$E_{\text{LUMO}}(\text{eV})$	-1.08	-2.03
$E_{\text{GAP}}(\text{eV}) (E_{\text{HOMO}} - E_{\text{LUMO}})$	4.37	3.42
$I(\text{eV}) (-E_{\text{HOMO}})$	5.45	5.45
$A(\text{eV}) (-E_{\text{LUMO}})$	1.08	2.03
$\eta(\text{eV}) \left(\frac{(I-A)}{2} \right)$	2.19	1.71
$\sigma(\text{eV}^{-1}) \left(\frac{1}{\eta} \right)$	0.46	0.58
$\chi(\text{eV}) \left(\frac{(I+A)}{2} \right)$	3.27	3.74
$\mu(\text{eV}) - \left(\frac{(I+A)}{2} \right)$	-3.27	-3.74
$\omega(\text{eV}) \left(\frac{\mu^2}{2\eta} \right)$	2.44	4.08
$N(\text{eV}^{-1}) \left(\frac{1}{\omega} \right)$	1.56	0.25
$\Delta N_{\text{MAX}} \left(-\frac{\mu}{\eta} \right)$	1.49	2.19
$S(\text{eV}^{-1}) \left(\frac{1}{2\eta} \right)$	0.23	0.29

Moleküler Yerleştirme Çalışması

Farmasötik ve tıpta, moleküler yerleştirme çalışmaları boşluktaki ideal protein, DNA veya RNA bağlanma bölgelerindeki etkileşimleri tahmin etmek için önemli bir hesaplama tekniğidir. Sülfonamidler PABA'nın (antimetabolit) analoglarıdır ve dihidropteroat sentaz (DHPS) enzimi için onunla rekabet ederek folik asit sentezine girerler. Folik asit sentezini inhibe ederler. Sonuç olarak, bakterilerde RNA ve DNA sentezi bozulur (Hussein, 2018; Sahua et al., 2017). Bu nedenle, *Yersinia pestis*'in DHPS'sinin sülfonamid bağlı kristal yapısı PDB'den indirildi (PDB Kimliği: 3TZF, <https://www.rcsb.org/structure/3TZF>) (Yun et al., 2012). Kompleksin minimum enerjiye sahip optimize edilmiş yapısı DFT yöntemi ile hesaplandı. Docking çalışması, dihidropteroat sentaz (DHPS) ile kompleksin en olası bağlanma modunu tahmin etmek için Autodock 4.2.6 ve Autodock Tool 1.5.6 (Sanner, 1999; Trott & Olson, 2010) ve BIOVIA (Discovery Studio Visualizer) yazılımı 2024 kullanılarak gerçekleştirildi (Biovia). GLY225, ASN229, PHE28, GLN149, SER222, GLN226, ARG235, PRO232, ARG63 ve PRO64, on amino asit kalıntısı olan aktif bölgelerdir (Tablo 5). Kompleksin yedi amino asidi (GLY225, ASN229, PHE28, GLN149, SER222, GLN226, ARG235) toplamda dokuz hidrojen bağı oluşturur (Şekil 5). Kompleksin protein-ligand bağlanma enerjisi - 8,3 kcal.mol⁻¹ olarak bulunmuştur.



Şekil 5: 3-boyutlu *Yersinia pestis*'in DHPS'li bakır kompleksinin (PDB ID: 3TZF)

Tablo 5: Kompleks-protein etkileşimi için en kararlı etkileşimlerin ayrıntıları

Uzaklık (Å)	Bağlanma Tipi	Reseptör bağlanma bölgesi	Bileşiğin bağlanma bölgesi	Bağlanma Modu
2.3714	H-Bağ ₁	A:GLY225:O	Kompleks: H	H-D→ H-A
2.70229	H-Bağ ₁	A:ASN229:OD1	Kompleks: H	H-D→ H-A
2.98728	H-Bağ ₁	A:ASN229:OD1	Kompleks: H	H-D→ H-A
2.95762	H-Bağ ₁	A:PHE28:O	Kompleks: H	H-D→ H-A
2.47975	H-Bağ ₁	A:GLN149:HE22	Kompleks: O	H-D→ H-A
2.55622	H-Bağ ₁	A:SER222:HG	Kompleks: N	H-D→ H-A
2.11416	H-Bağ ₁	A:SER222:HG:B	Kompleks: N	H-D→ H-A

2.80606	H-Bağı	A:GLN226:HE21	Kompleks:	H-D→ N H-A
2.27964	H-Bağı	A:ARG235:HH12	Kompleks:	H-D→ O H-A
2.54091	H-Bağı	A:ARG235:HH21	Kompleks:	H-D→ O H-A
3.6109	Karbon H-Bağı	A:PRO232:CD	Kompleks:	H-D→ O H-A
4.98182	π -Alkil	A:ARG63	Kompleks	π - orbital→ Alkil
4.95645	π -Alkil	A:PRO64	Kompleks	π - orbital→ Alkil
4.74128	π -Alkil	A:PRO232	Kompleks	π - orbital→ Alkil

H-D: H-Verici; H-A:H-Alıcı

İlaç benzerliği ve ADME çalışmaları

Kompleksin fizikokimyasal verileri OpenBabel Gui yazılımı ve SwissADME kullanılarak hesaplandı, (Norinder & Bergström, 2006). İlaç benzeri özellikleri Lipinski'nin aşağıda verilen beş kuralına göre ayırt edebiliriz (Lipiński, 2001).

- MW < 500 g/mol,
- MLogP < 4.15,
- H-A (H-bağı alıcılarının sayısı) < 5,
- H-D (H-bağı donörlerinin sayısı) < 10,
- 40 < MR (Molar kırılma) < 130.

Bu kurallardan 2 veya daha fazlasına uyan moleküllerin yüksek ilaç benzeri özelliklere sahip olduğu söylenebilir. Bu özelliklerin araştırılması erken klinik öncesi gelişmelere yardımcı olabilir ve maliyetli geç klinik öncesi ve klinik başarısızlıkları önleyebilir. İlaç

benzeri özellikleri bulmak için Hsmz, kompleks hariç, Lipinski'nin beş kuralı kullanılarak değerlendirildi. Sonuçlar Tablo 6'da verilmiştir. Kompleksin çözünürlük ve lipofilisite özellikleri sırasıyla Log S ve WLog P biçiminde sunulmuştur. Sonuçlara göre, kompleks düşük gastrointestinal geçirgenliğe sahipken, Hsmz yüksek gastrointestinal geçirgenliğe sahip olduğu bulunmuştur. Sulfametazin TPSA değerleri komplekse göre yaklaşık 5 katından daha iyi hücre internalizasyonunu öngörmüştür. Sentezlenen komplekte 3 Lipinski ihlalleri olduğu bulunmuştur. Dolayısıyla, 2 kurala uyduğundan dolayı bu kompleksin ilaç yeteneği özelliklerine/ilâç benzeri özelliklere sahip olabileceği anlamına gelir. Ancak Tablo 6'a bakıldığında Hsmz'nin kompleksten daha fazla ilâç benzeri özelliklere sahip olabileceği sonucuna varılabilir.

Tablo 6: Bileşiklerin fizikokimyasal özellikleri ve ilâç benzerliği

	Kompleks	Hsmz
Moleküler Ağırlık (g/mol)	830.52	279.34
Hidrojen bağı alıcı sayısı	10	4
Hidrojen bağı verici sayısı	10	2
LogS (Çözünürlük)	-1.16	-0.50
TPSA (Toplam polar yüzey bölgesi)	277.70	50.57
Dönebilen bağlar	8	2
MR (Molar yansıma)	239.57	83.94
Atom sayısı	53	19
Lipinski ihlali	3	0
WLogP (Lipofilisiti)	-4.55	-0.04
Sentetik Erişilebilirlik	6.08	2.80
Gastrointestinal	Düşük	Yüksek
BBB (Kan-beyin bariyeri)	Hayır	Hayır
P-gp (P-glikoprotein)	Evet	Hayır
CYP1A2 inhibitör	Hayır	Hayır
CYP2D6 inhibitör	Hayır	Hayır
LogK _p (Cilt geçirgenliği (cm/s))	-15.27	-9.33

CYP2D6= cytochrome P450 family 2 subfamily D member 6 (PDB:5TFT); CYP1A2= cytochrome P450 family 1 subfamily A member 2 (PDB: 2HI4)

Sonuç

[Cu(HydEt-en)₂](smz)₂·3H₂O kompleksinin tüm teorik hesaplamaları DFT/B3LYP/LANL2DZ ile yapıldı. İncelenen kompleksin, bir komplekse kıyasla teorik geometrik verilerle oldukça uyumlu olduğu bulundu. Optimize edilmiş kompleks $\Delta E = -4.37$ (alfa) -3.42 (beta) eV enerji aralığında olduğu bulunmuştur. Kompleksin iyi bir kimyasal ve biyolojik aktivite gösterdiği gözlemlendi. Hirshfeld yüzey analiz yöntemi ile moleküller arası etkileşimler, atomların birbirleriyle etkileşimlerinin % katkısı, parmak izi tayini ve toplam yüzey haritalarının gösterilmesi yapıldı. Moleküler şelasyon analizinde, kompleksin ve *Yersinia pestis* proteininin DHPS'sinin en iyi şelasyon modülü ve bağlanma enerjisinin -8.3 kcal/mol olduğu bulundu. Kompleks ile protein arasındaki etkileşimlerin çoğu konvansiyonel hidrojen bağıdır. Moleküler şelasyon analizinin sonucu oldukça yüksek bulunmuştur, ilaç üretiminde zorluklar olmasına rağmen metal kompleksinin biyolojik aktivitesi serbest sulfametazin ligandından daha yüksektir. ADME sonuçlarına göre kompleksin ilaç üretiminin oldukça zor olmasına rağmen ilaç özelliği gösterdiği de söylenebilir.

Referans

Al-Dawood, A. Y., El-Metwaly, N. M., & El-Ghamry, H. A. (2016). Molecular docking and DFT studies on some nano-meter binuclear complexes derived from hydrazine-carbothioamide ligand, synthesis, thermal, kinetic and spectral characterization. *Journal of Molecular Liquids*, 220, 311-323.

Asiri, A. M., Ersanlı, C. C., Şahin, O., Arshad, M. N., & Hameed, S. A. (2016). Molecular structure, spectroscopic and quantum chemical studies of 1', 3', 3'-trimethylspiro [benzo [f] chromene-3, 2'-indoline. *Journal of Molecular Structure*, 1111, 108-117.

Baenziger, N., Modak, S., & Fox, C. (1983). Diamminebis (2-sulfanilamidopyrimidinato) zinc (II), [Zn (C₁₀H₉N₄O₂S)₂ (NH₃)₂]. *Acta Crystallographica Section C: Crystal Structure Communications*, 39(12), 1620-1623.

Baenziger, N., & Struss, A. W. (1976). Crystal structure of 2-sulfanilamidopyrimidinesilver (I). *Inorganic Chemistry*, 15(8), 1807-1809.

Becke, A. D. (1993). Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. *The Journal of Chemical Physics*, 98(7), 5648-5652. <https://doi.org/10.1063/1.464913>

Biovia, D. S. V. Version 19.1. 0.18287 Software; 2019. Available from: <http://www.3dsbiovia.com/>. [Last accessed on 2019 Jul 20].

Chattaraj, P. K., Maiti, B., & Sarkar, U. (2003). Philicity: a unified treatment of chemical reactivity and selectivity. *The Journal of Physical Chemistry A*, 107(25), 4973-4975.

Check, C. E., Faust, T. O., Bailey, J. M., Wright, B. J., Gilbert, T. M., & Sunderlin, L. S. (2001). Addition of Polarization and Diffuse Functions to the LANL2DZ Basis Set for P-Block Elements. *The Journal of Physical Chemistry A*, 105(34), 8111-8116. <https://doi.org/10.1021/jp011945l>

Chiodo, S., Russo, N., & Sicilia, E. (2006). LANL2DZ basis sets recontracted in the framework of density functional theory. *The Journal of Chemical Physics*, 125(10), 104107. <https://doi.org/10.1063/1.2345197>

Clausen, H. F., Chevallier, M. S., Spackman, M. A., & Iversen, B. B. (2010). Three new co-crystals of hydroquinone: crystal structures and Hirshfeld surface analysis of intermolecular interactions. *New Journal of Chemistry*, 34(2), 193-199.

Cook, D. S., & Turner, M. F. (1975). Crystal and molecular structure of silver sulphadiazine (N 1-pyrimidin-2-ylsulphanilamide). *Journal of the Chemical Society, Perkin Transactions 2*(10), 1021-1025.

Curtis, N., & Powell, H. (1968). Some complexes of diethylenetriamine with nickel (II), copper (II), and zinc (II). *Journal of the Chemical Society A: Inorganic, Physical, Theoretical*, 3069-3073.

Daina, A., Michielin, O., & Zoete, V. (2017). SwissADME: a free web tool to evaluate pharmacokinetics, drug-likeness and medicinal chemistry friendliness of small molecules. *Scientific Reports*, 7(1), 42717. <https://doi.org/https://doi.org/10.1038/srep42717>

Dennington II, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView 5.0, Wallingford, CT.

Ferrer, S., Borrás, J., & Garcia-España, E. (1990). Complex formation equilibria between the acetazolamide ((5-acetamido-1, 3, 4-thiadiazole)-2-sulphonamide), a potent inhibitor of carbonicanhydrase, and Zn (II), Co (II), Ni (II) and Cu (II) in aqueous and ethanol-aqueous solutions. *Journal of inorganic biochemistry*, 39(4), 297-306.

Frisch, M., Trucks, G. W., Schlegel, H. B., Scuseria, G. E., Robb, M. A., Cheeseman, J. R.,...Petersson, G. e. (2014). Gaussian~ 09 Revision D. 01.

Giuseppetti, G., Tadini, C., & Bettinetti, G. (1994). 1: 1 Molecular complex of trimethoprim and sulfametrole. *Acta Crystallographica Section C: Crystal Structure Communications*, 50(8), 1289-1291.

Hirshfeld, F. (1977). Synthesis, Crystal structure, and Hirshfeld Surface Analysis of a New Mixed Ligand Copper (II) Complex. *Theor. Chim. Acta*, 44, 129-138.

Hussein, M. F. (2018). New sulfonamide hybrids: synthesis, in vitro antimicrobial activity and docking study of some novel sulfonamide derivatives bearing carbamate/acyl-thiourea scaffolds. *Mediterranean Journal of Chemistry*, 7(5), 370-385.

Koşar, B., Albayrak, Ç., Ersanlı, C. C., Odabaşoğlu, M., & Büyükgüngör, O. (2012). Molecular structure, spectroscopic investigations, second-order nonlinear optical properties and intramolecular proton transfer of (E)-5-(diethylamino)-2-[(4-propylphenylimino) methyl] phenol: A combined experimental and

theoretical study. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 93, 1-9.

Lee, C., Yang, W., & Parr, R. G. (1988). Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. *Physical Review B*, 37(2), 785-789. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.37.785>

Lipiński, E. (2001). *Semitic languages: outline of a comparative grammar* (Vol. 80). Peeters Publishers.

Mansour, A. M. (2013). Molecular structure and spectroscopic properties of novel manganese (II) complex with sulfamethazine drug. *Journal of Molecular Structure*, 1035, 114-123.

McKinnon, J. J., Jayatilaka, D., & Spackman, M. A. (2007). Towards quantitative analysis of intermolecular interactions with Hirshfeld surfaces. *Chemical Communications*(37), 3814-3816.

McKinnon, J. J., Mitchell, A. S., & Spackman, M. A. (1998). Hirshfeld surfaces: a new tool for visualising and exploring molecular crystals. *Chemistry–A European Journal*, 4(11), 2136-2141.

McKinnon, J. J., Spackman, M. A., & Mitchell, A. S. (2004). Novel tools for visualizing and exploring intermolecular interactions in molecular crystals. *Acta Crystallographica Section B: Structural Science*, 60(6), 627-668.

Medina, J. C., Roche, D., Shan, B., Learned, R. M., Frankmoelle, W. P., Clark, D. L.,...Jaen, J. C. (1999). Novel halogenated sulfonamides inhibit the growth of multidrug resistant MCF-7/ADR cancer cells. *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*, 9(13), 1843-1846.

Norinder, U., & Bergström, C. A. (2006). Prediction of ADMET properties. *ChemMedChem: Chemistry Enabling Drug Discovery*, 1(9), 920-937. <https://doi.org/https://doi.org/10.1002/cmdc.200600155>

O'boyle, N. M., Tenderholt, A. L., & Langner, K. M. (2008). Cclib: a library for package-independent computational chemistry algorithms. *Journal of computational chemistry*, 29(5), 839-845.

Ökten, S., Demircioğlu, Z., Ersanli, C. C., & Çakmak, O. (2021). Novel methoxyquinoline derivative: Synthesis, characterization, crystal structure, Hirshfeld surface, thermodynamic properties, and quantum chemical calculation of 3, 6, 8-trimethoxyquinoline. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 714(1), 37-58.

Öztürk, F. (2015). *Sulfonamid Türevlerinin Metal Komplekslerinin Sentezi, Yapı Analizi, Spektroskopik Ve Elektrokimyasal Özelliklerinin İncelenmesi* [Ondokuz Mayıs Üniversitesi]. Samsun.

Öztürk, F., Aycan, T., & Özdemir, N. (2019). Cu (II)-sulfamethazine complex with N-(2-hydroxyethyl)-ethylenediamine: synthesis, spectroscopic, structural characterization and antimicrobial activity. *Journal of Coordination Chemistry*, 72(19-21), 3359-3370.

Öztürk, F. A., Tuğba. (2023). Investigation of Structural, Spectroscopic and Hirshfeld Surface Properties of Cobalt(II)-Ciprofloxacin with H₃PO₄ Complex: Molecular Docking Study and ADMET. ASES International Ordu Scientific Research Conference, Ordu, Türkiye.

Öztürk, F. A., Tuğba. (2024). Investigation of spectroscopic properties of Cu(II)-Acetazolamide/Nicotinamide complex by computational chemistry method: Molecular Modelling Study, ADME and Toxicology. In B. Tütüncü (Ed.), *Advances in Molecular Physics and Mathematical Spaces*. Bidge.

Parkin, A., Barr, G., Dong, W., Gilmore, C. J., Jayatilaka, D., McKinnon, J. J.,...Wilson, C. C. (2007). Comparing entire crystal structures: structural genetic fingerprinting. *CrystEngComm*, 9(8), 648-652.

Parr, R. G., Donnelly, R. A., Levy, M., & Palke, W. E. (1978). Electronegativity: the density functional viewpoint. *The Journal of chemical physics*, 68(8), 3801-3807.

Parr, R. G., Szentpály, L. v., & Liu, S. (1999). Electrophilicity index. *Journal of the American Chemical Society*, 121(9), 1922-1924.

Rohl, A. L., Moret, M., Kaminsky, W., Claborn, K., McKinnon, J. J., & Kahr, B. (2008). Hirshfeld surfaces identify inadequacies in computations of intermolecular interactions in crystals: pentamorphic 1, 8-dihydroxyanthraquinone. *Crystal Growth and Design*, 8(12), 4517-4525.

Sahua, N., Mondala, S., Naskara, K., Guptab, S., Kaleeswaranc, D., & Sinha, C. (2017). Structure, antimicrobial activity and molecular docking study of novel o-vaniline based sulfamethoxazolyl derivatives. *J. Indian Chem. Soc*, 94, 1387-1401.

Sanner, M. F. (1999). Python: a programming language for software integration and development. *J Mol Graph Model*, 17(1), 57-61.

Scozzafava, A., Menabuoni, L., Mincione, F., Briganti, F., Mincione, G., & Supuran, C. T. (1999). Carbonic anhydrase inhibitors. Synthesis of water-soluble, topically effective, intraocular pressure-lowering aromatic/heterocyclic sulfonamides containing cationic or anionic moieties: is the tail more important than the ring? *Journal of medicinal chemistry*, 42(14), 2641-2650.

Shit, S., Marschner, C., & Mitra, S. (2016). Synthesis, crystal structure, and Hirshfeld surface analysis of a new mixed ligand copper (II) complex. *Acta Chimica Slovenica*, 63(1), 129-137.

Spackman, M. A., & Byrom, P. G. (1997). A novel definition of a molecule in a crystal. *Chemical physics letters*, 267(3-4), 215-220.

Spackman, M. A., & Jayatilaka, D. (2009). Hirshfeld surface analysis. *CrystEngComm*, 11(1), 19-32.

Spackman, M. A., & McKinnon, J. J. (2002). Fingerprinting intermolecular interactions in molecular crystals. *CrystEngComm*, 4(66), 378-392.

Spackman, M. A., McKinnon, J. J., & Jayatilaka, D. (2008). Electrostatic potentials mapped on Hirshfeld surfaces provide direct insight into intermolecular interactions in crystals. *CrystEngComm*, 10(4), 377-388.

Sreenatha, N., Chakravarthy, A. J., Suchithra, B., Lakshminarayana, B., Hariprasad, S., & Ganesha, D. (2020). Crystal, spectral characterization, molecular docking, Hirshfeld computational studies and 3D-energy framework analysis of a novel puckered compound (C₁₄H₁₅Cl O): 2-Chloro-3-phenyl-5, 5-

dimethylcyclohex-2-en-1-one. *Journal of Molecular Structure*, 1210, 127979.

Supuran, C. T., Mincione, F., Scozzafava, A., Briganti, F., Mincione, G., & Ilies, M. A. (1998). Carbonic anhydrase inhibitors—part 52. Metal complexes of heterocyclic sulfonamides: a new class of strong topical intraocular pressure-lowering agents in rabbits. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 33(4), 247-254.

Toth, J. E., Grindey, G. B., Ehlhardt, W. J., Ray, J. E., Boder, G. B., Bewley, J. R.,...Schultz, R. M. (1997). Sulfonimidamide Analogs of Oncolytic Sulfonylureas, 1. *Journal of medicinal chemistry*, 40(6), 1018-1025.

Trott, O., & Olson, A. J. (2010). AutoDock Vina: improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization, and multithreading. *Journal of computational chemistry*, 31(2), 455-461. <https://doi.org/https://doi.org/10.1002/jcc.21334>

Turner, M., McKinnon, J., Wolff, S., Grimwood, D., Spackman, P., Jayatilaka, D., & Spackman, M. (2017). *CrystalExplorer17*. In The University of Western Australia Perth, WA, Australia.

Wolff, S., Grimwood, D., McKinnon, J., Turner, M., Jayatilaka, D., & Spackman, M. (2012). Crystal explorer. In: University of Western Australia Crawley, Australia.

Yun, M.-K., Wu, Y., Li, Z., Zhao, Y., Waddell, M. B., Ferreira, A. M.,...White, S. W. (2012). Catalysis and sulfa drug resistance in dihydropteroate synthase. *Science*, 335(6072), 1110-1114.