

***mono-* ve *di-*NÜKLEER KOMPLEKSLERİN  
SPEKTROFOTOMETRİK, ELEKTROKİMYASAL  
ve FOTOVOLTAİK ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ**

**INVESTIGATION of SPECTROSCOPIC,  
ELECTROCHEMICAL and PHOTOVOLTAIC  
PROPERTIES of THE *mono-* and *di-*  
NUCLEAR COMPLEXES**

**Proje Yürütücüsü : Yrd.Doç.Dr. Hasan Nazır  
Yardımcı Araştırmacı : Mürsel Arıcı**

**PROJE NO: 10H4240002**

Ankara Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri  
ANKARA - 2011

## ÖZET

Bu proje kapsamında aşağıda belirtilen çalışmalar yapılmıştır;

- a) Mono- ve hetero di-nükleer komplekslerin sentezi ve yapılarının aydınlatılması,
- b) Sentezlenen bileşiklerin UV, elektrokimyasal özelliklerinin incelenmesi ve HOMO-LUMO enerjilerinin hesaplanması,
- c) Sentezlenen bileşiklerin güneş pili hücrelerinin hazırlanması ve akım-potansiyel ölçümlerinin yapılması.

**Anahtar Kelimeler:** Güneş pili, mono- ve hetero di-nükleer kompleks

## ABSTRACT

Within this project, the studies given below have been done;

- a) Synthesizing of mono- and hetero di-nuclear complexes and determination of their structures,
- d) Investigation of UV, electrochemical properties and calculation of HOMO-LUMO energies of synthesized compounds,
- e) Preparation of solar cells of synthesized compounds and measuring of their current-potentials properties

**Key words:** Solar cell, mono- and hetero di-nuclear complex

## 1. AMAÇ ve KAPSAM

Sunulan projenin amacı, *mono-* ve *di-*nükleer komplekslerin güneş pili uygulamalarında kullanılabilirliğini araştırmaktır. Güneş pilleri temel olarak bir elektron donörü (veya n-tipi) ve akseptöründen (veya p-tipi) oluşmaktadır. Güneş pilinin tasarımını da donör ve akseptörün özellikleri belirlemektedir. Dolayısıyla bütüne ait genel görünümü aynı olmakla beraber, tasarımı birbirinden farklı iki tip güneş pili *-i-*konvansiyonel p-n bağlantılı, *ii-*organik/metal-organik heterobağlantılı- vardır. Metal-organik heterobağlantılı güneş pilleri (“Solid state”, “Dye sensitive”) konvansiyonel güneş pillerine alternatif araştırmaları içermektedir. Halen yürütülmekte olan araştırmalar hem metali koordine eden ligandın yapısı ve sahip olduğu kromofor grupları hem de geçiş metalleriyle ilgilidir. *Sunulan projenin bir diğer amacı da*, sentezlenecek komplekslerin ışığın şiddetine karşı kaydedilecek potansiyel-akım karakteristiklerini, komplekslerin deneysel olarak gözlenen ultraviyole (UV), elektrokimyasal (CV) ve teorik olarak hesaplanacak HOMO-LUMO enerji değerleriyle karşılaştırmalı olarak incelemektir. Elde edilecek çıktıların ilişkisel olarak irdelenmesiyle komplekste, hem metalin hem de ligandın (veya ligandın fonksiyonlu grubunun) değiştirilmesiyle fotovoltajik parametrelerin nasıl etkilendiği (değişimi) tartışılacaktır. Proje kapsamında çalışmalar, birbiriyle ilişkili iki kısımdan oluşmaktadır.

Çalışmanın *birinci kısmı*; *mono-* ve *di-* nükleer komplekslerin sentezi:

- Temel hedef görünür bölge yakınında ve görünür bölgede (~300–700 nm) absorpsiyon yapabilen komplekslerin sentezlenmesi ve yapılarının aydınlatılması.
- Hazırlanan komplekslerin spektrofotometrik (Ultraviyole spektrofotometresi, UV) ve elektrokimyasal (Dönüşümlü voltametri, CV; kronoamperometrik) özelliklerinin incelenmesi. Teorik olarak hesaplanan veriler ile karşılaştırılması.

Çalışmanın *ikinci kısmı ise*, sentezlenen kompleksler ile güneş pili hücrelerinin hazırlanması ve fotovoltajik parametrelerinin ölçülmesidir.

## 2. MATERYAL ve YÖNTEM

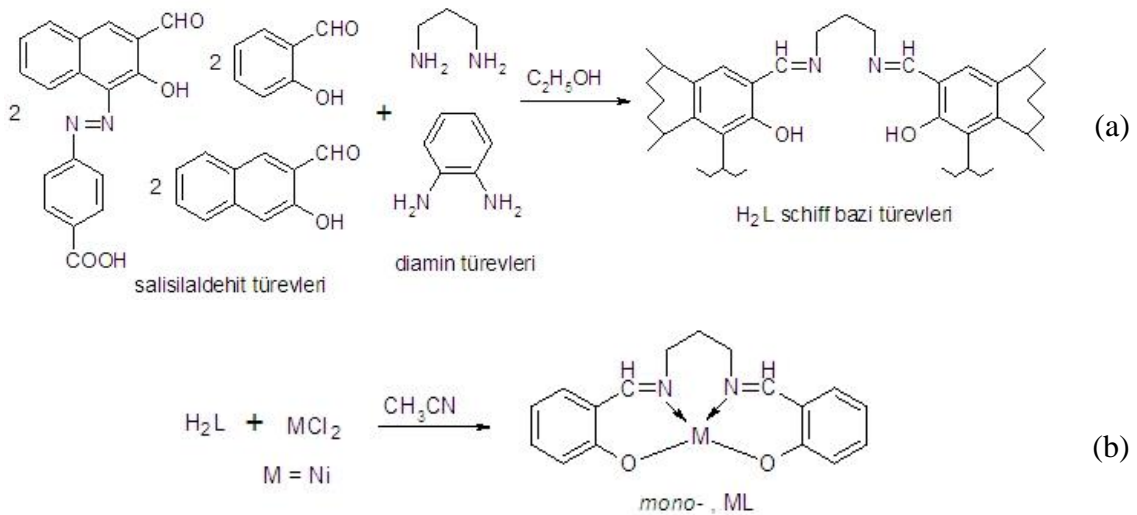
### 2.1. MATERYAL

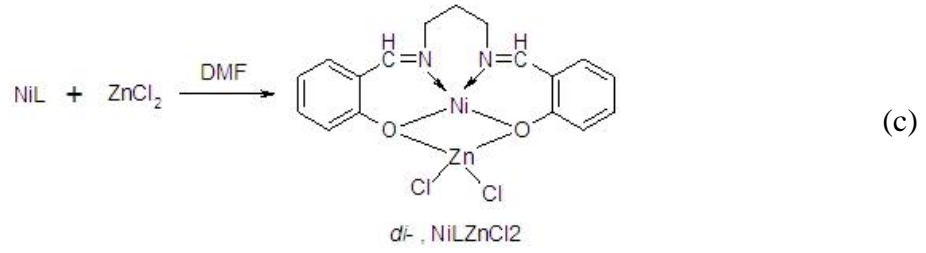
**Kullanılan Kimyasallar:** Bu proje çalışmasında *mono-* (Ni) ve *di-nükleer* (Ni-Zn) kompleksleri, ligant ve metalin etkisini tartışmaya imkân verecek biçimde sentezlenerek kullanılmıştır.

**Kullanılan Cihazlar:** UV spektrofotometre (Hitachi, Japan), Floresans spektrometre (Perkin-Elmer, UK), CompactStat (Ivium, Netherland) ve CHI1230A (CH Instruments, USA) potansiyostat, Proje desteğiyle alınan “Ivium Modulight” (Ivium, Netherland).

### 2.2. YÖNTEM

Bu çalışmada kullanılan ligantlar ( $H_2L$ ) ve metal-ligant (*mono-*, *di-nükleer*) (ML) kompleksleri aşağıdaki reaksiyonlara göre hazırlanmıştır (Şekil 1). *Birinci adımda* aldehit türevleri ile diamin türevlerinin etanoldeki reaksiyonundan  $H_2L$  ligandı; *ikinci adımda*  $H_2L$ 'nin  $NiCl_2$  ile reaksiyonundan bir metal merkezli  $NiL$  kompleksleri sentezlendi. Devamla,  $NiL$  kompleksi dimetil formamid'de (DMF) çözüldü ve  $ZnCl_2$  ile etkileştirilerek, hetero *di-nükleer*  $NiLZnCl_2$  kompleksi elde edildi.





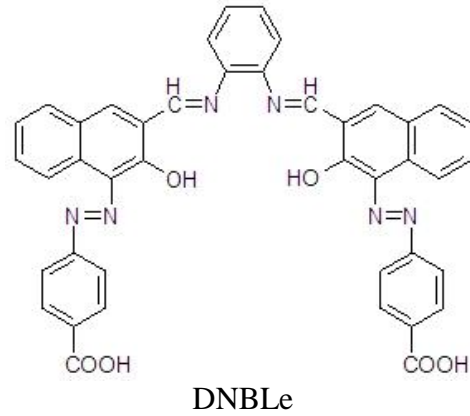
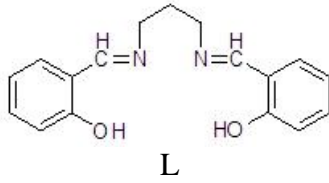
Şekil 1 – (a) H<sub>2</sub>L ligantları, (b) NiL ve (c) NiLZnCl<sub>2</sub> komplekslerinin sentezi.

### 3. ANALİZ ve BULGULAR

Bu proje kapsamında sentezlenen ligant ve komplekslerin yapıları ve yazım sırasında kullanılan kodları Çizelge 1’de, sentezlenen NiLZnCl<sub>2</sub> kompleksinin X-ışınları kristalografisiyle elde edilen yapısı ise Şekil 2’de verilmiştir.

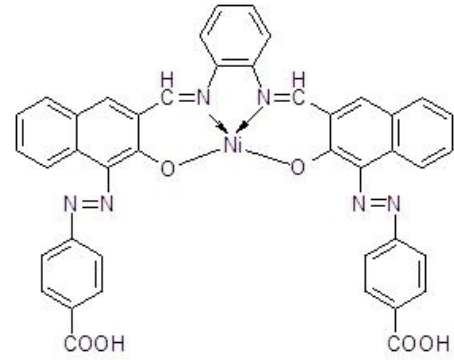
Çizelge 1 – Sentezlenen ligant ve komplekslerin yapıları ve kodları

#### Ligantlar

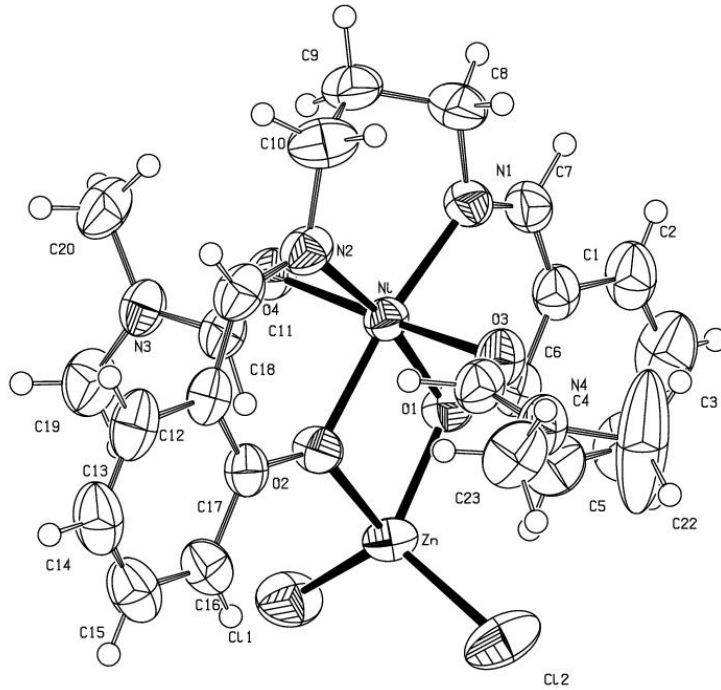


#### Bir Metal Merkezli Kompleksler





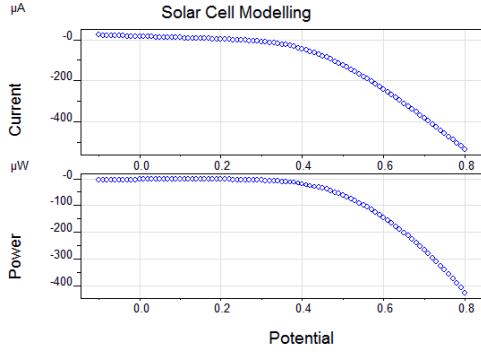
İki Metal Merkezli Kompleks



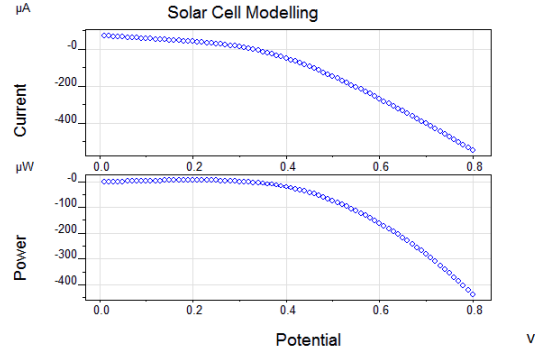
Şekil 2 – NiLZnCl<sub>2</sub>'nin X-ışınları kristalografisiyle elde edilen yapısı.

### 3.1. Ligant ve Komplekslerin Akım-Voltaj (I-V) Ölçümleri

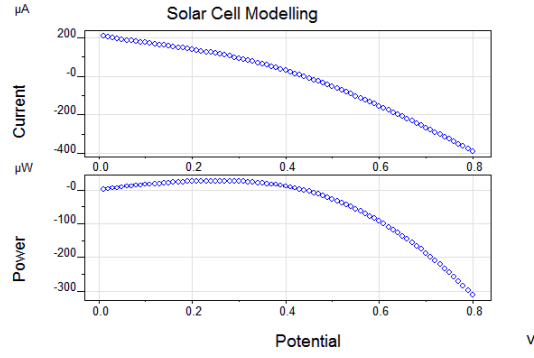
#### Ligantlar



BL

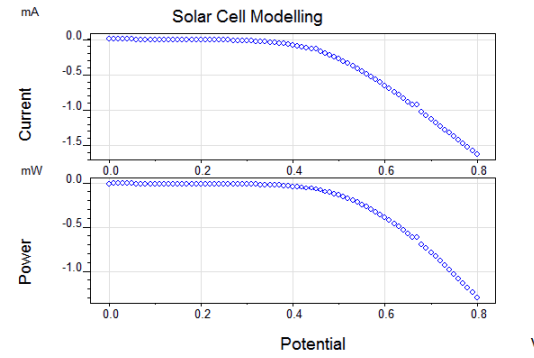


NBLe

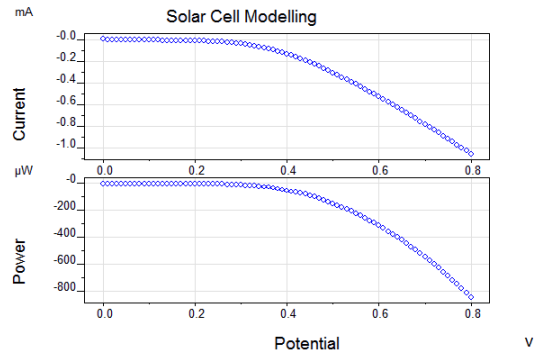


DNBL

#### Bir Metal Merkezli Kompleksler

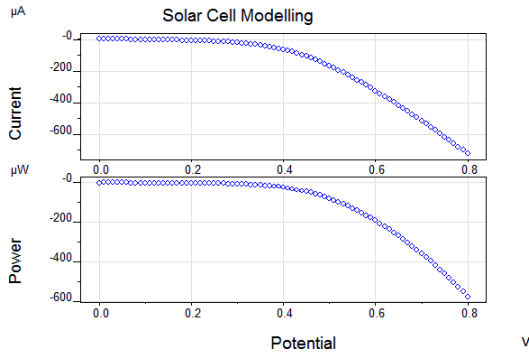


NiBL



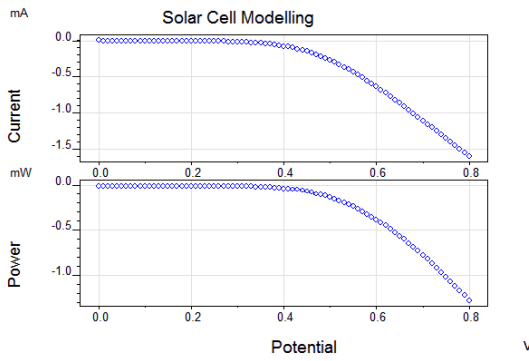
NiNBLe





NiDNBLe

İki Metal Merkezli Kompleks



NiLZnCl<sub>2</sub>

### 3. SONUÇ

Bu proje çalışması kapsamında, mono- ve hetero di-nükleer komplekslerin güneş pillerinin hazırlanması ve akım-potansiyel (I-V) karakteristiklerinin ölçülmesi hedeflenmiştir.

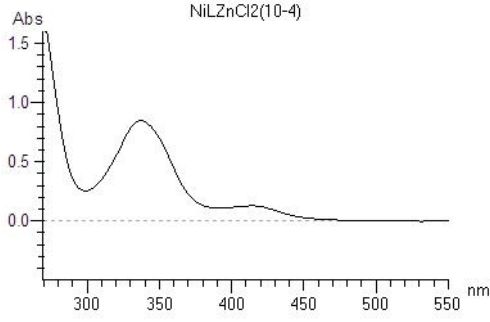


**Şekil 3-** BLe ligandının ölçülen potansiyelinin voltmetre ile gösterimi.

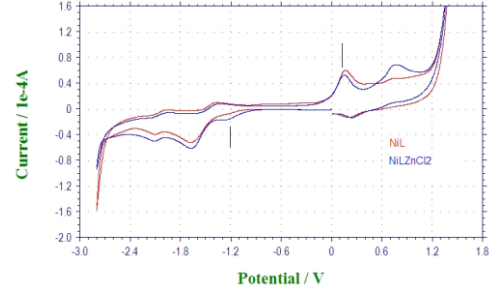
Hazırlanan BLe, NBLe ve DNBLLe ligantları bir molekülde elektron delokalizasyonunu artıran grupların (aromatik) ve elektron donorü sübstitüentlerin (-N=N-, -COOH) eklenmesiyle güneş pili veriminin nasıl değiştiğini göstermektedir. Ölçülen değerler (**3.1.**) BLe: 230 mV, 15 µA; NBLe: 320 mV, 73 µA; DNBLLe: 440 mV, 207 µA olarak değişmektedir.

Dikkat edilirse potansiyeldeki artış yaklaşık 100 mV (1/2 kadar) iken akım katları (~5 ve ~3) olarak artmaktadır. Bunun nedeni, aromatik halkanın eklenmesi molekülde düşük enerjili  $\pi \rightarrow \pi^*$  geçişlerini artırırken, elektron donorü sübstütientlerinin eklenmesi ise, daha düşük enerjili olan  $n \rightarrow \pi^*$  geçişlerini artırır ve molar absorsiyon katsayısı yükselir. Her iki durumda da floresans kuantum verimi artar. Ayrıca elektron donörü sübstütientlerin varlığı ışınım yarı ömrünü de uzatır. NiBLE, NiNBLE ve NiDNBLE komplekslerinde ise ligantların aksine verim düşüktür. Ni'in doymamış d- alt tabakaları ve d- orbitallerindeki ortaklanmamış elektronlar,  $M \rightarrow L$ ,  $L \rightarrow M$  geçişlerini kolaylaştırır ve elektronik geçişlerin kolaylığı floresans verimini düşürür.

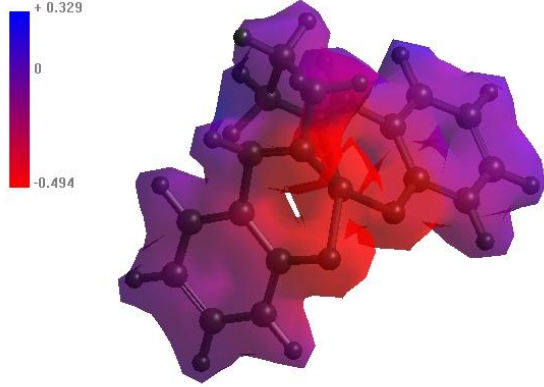
NiLZnCl<sub>2</sub> için kaydedilen UV spektrumu ve CV voltamogramı sırasıyla Şekil 4a ve Şekil 4b'de verilmiştir. L ligandı için kaydedilen UV spektrumunda (bu raporda verilmemiştir) okunan  $\lambda_{\text{onset}} = \sim 365$  nm iken NiLZnCl<sub>2</sub> kompleksi için  $\lambda_{\text{onset}} = \sim 475$  nm dir. Yapıya metallerin girmesiyle absorpsiyon daha düşük enerjili/uzun dalga boylarına (görünür bölge) kaymaktadır. Bu sonuç kompleksin güneş pili hücresi hazırlanması halinde, pil hücresinin güneş ışınmasını absorplayabileceğini göstermektedir. Ayrıca NiLZnCl<sub>2</sub>'nin voltamogramında da ikinci hetero atom katkısı belirgin olarak görülmektedir. Zn'nun ikinci hetero atom olarak yapıya girmesiyle, molekülün LUMO enerji seviyesi biraz daha yükselmiş, dolayısıyla hesaplanan band aralığı enerjisi de L ve NiL'ye göre düşmüştür. Bundan başka, NiL'nin ve NiLZnCl<sub>2</sub>'nin X-ışınları yapısı verilerinin kullanılmasıyla teorik olarak hesaplanan elektrostatik yük yoğunluğu haritaları Şekil 5'de verilmiştir. Şekil 5'den görüleceği gibi, Zn'nun moleküle ikinci hetero atom olarak katılması, molekülün floresans emisyonu verimini dolayısıyla kuantum verimini artırmıştır. NiLZnCl<sub>2</sub> için ölçülen I-V eğrisi **3.1.**'de verilmiştir (Voc= 212 mV, I = 65µA). Hetero di-nükleer kompleksler için çalışmalar devam ettirilmektedir.



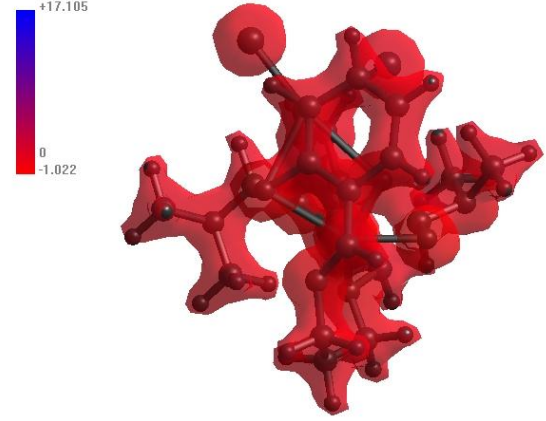
**Şekil 4a** - NiLZnCl<sub>2</sub>'nin UV spektrumu { $\lambda$  (nm); 337, 416}, { $E_g^{op}$  = 2.61 eV}.



**Şekil 4b** - Kırmızı NiL, mavi NiLZnCl<sub>2</sub>'nin CV grafikleri, {CV'den hesaplanan:  $E_g^{el}$  = 1.35 eV}.



**Şekil 5a** – NiL'nin elektrostatik yük yoğunlu haritası.



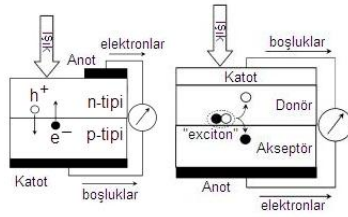
**Şekil 5b** – NiLZnCl<sub>2</sub>'nin elektrostatik yük yoğunluğu haritası

#### 4. KAYNAKLAR

Kullanımı sınırlı hidrokarbon temelli enerji kaynaklarına alternatif arayışı, her zaman ilgi duyulan ve çalışılan bir alan olmuştur. En çok rağbet edilen çalışmalar ise, yüksek teknolojiyi gerektiren nükleer enerji üretimi ve çok basit teknolojilerle enerji üretimine olanak sağlayan rüzgâr ve güneş enerjisi olmuştur. Özellikle güneş enerjisi sürekli ve ucuz bir kaynak olarak görülmektedir. Yakın tarihli çalışmalar, ilk üretilen silisyum esaslı güneş pillerine alternatif organik/polimer, plastik, metal organik (vb.) güneş pilleri hazırlanmasına yönelik olarak artmıştır. Çalışma sayısının çokluğuna rağmen, günümüzde kullanılan organik veya metal-organik güneş pillerinin verimi (% 3-3.5) inorganik benzerlerinden (% 20) daha düşüktür. Ancak bu dezavantajlı durum onların yüksek soğurma katsayıları ve şarjlı hallerinin uzun ömürlü olmasıyla

dengelenmektedir. Kimyasal yapılarıyla ilişkili olan bu özellikleriyle ilgili araştırmalar; ince film transistörler (TFT), sıvı kristaller (LCD) veya ışık yayan organik diyotlar (OLED) gibi alternatif kullanım alanlarını da birlikte getirmiştir.

Alternatif enerji kaynağı olarak güneş enerjisinin kullanılabilmesine dair ilk önemli adım, Chapin ve arkadaşlarının<sup>1</sup> 1954 yılında silikon esaslı fotovoltaiklerin güneş enerjisini %6 verimle elektrik enerjisine dönüştürebildiğini gösterdikleri çalışma sayılır. Günümüze kadar gelen süreçte ise, güneş pilleri, hem silikon veya inorganik yarı iletken esaslı olarak yüksek verimle (%24) hazırlanmış hem de güneş pili hücrelerinin çok farklı materyallerle -polimer<sup>2</sup>, plastik<sup>3</sup>, organik<sup>4</sup> ve metal-organik<sup>5</sup>- hazırlanabilecekleri gösterilmiştir. Çalışma prensipleri ve mimarisi de farklı bu hücre tiplerinin silikon veya inorganik yarı iletken esaslı olanları “geleneksel güneş pili” (conventional solar cell) diğerleri ise, “organik heterobağlantılı güneş pili” (organic heterojunction solar cell) olarak adlandırılmıştır<sup>4</sup> (Şekil 6).

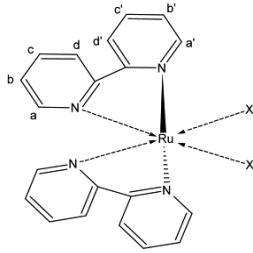


**Şekil 6** – (sol) geleneksel güneş pili, (sağ) heterobağlantılı güneş pili

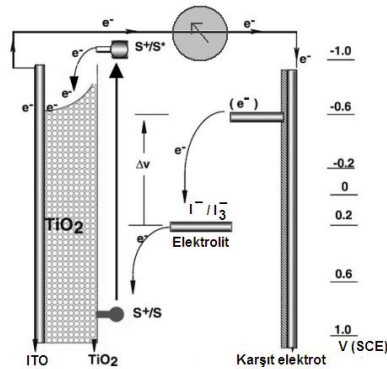
Geleneksel güneş pillerinde yük taşıyıcıları (elektronlar,  $e^-$  ve boşluklar,  $h^+$ ) p-tipi ve n-tipi pil maddesi içinde oluşturulurlar. Bu elektronlar ve boşluklar birbirine bağlı (kimyasal) olmayan yük taşıyıcılarıdır, pil hücresindeki elektrik alanı ile birbirinden

ayrılırlar, elektrotlara doğru hareket ederler ve yükü yarı iletken materyalin dışına taşırlar. Heterobağlantılı güneş pilleri ise bu şekilde çalışmazlar. Katot ve anot elektrotları arasında bir donör (organik/metal-organik) ve bir akseptörden oluşan bu hücrelerde, elektron-boşluk (exciton) çiftleri donör-akseptör arafazında birbirinden ayrışır ve donör fazda boşluklar akseptör fazda ise, elektronlar oluşturulur. Böylece foton ile indüklenmiş kimyasal potansiyel karşılıklı yönlere doğru hareket ettirilmiş olur. Çalışma prensibiyle geleneksel hücrelerden ayrılan heterobağlantılı hücrelerin (*i*-katı hal, *ii*-organik/metal-organik boya esaslı) mimarisi de dolayısıyla önemlidir. Günümüze kadar yapılagelen çalışmaların içerisinde en fazla ilgi çeken, hassas bir üretim teknolojisini gerektiren konvansiyonel güneş pillerinin yerine ikame edilebilecek olan organik güneş pilleriyle ilgili çalışmalardır. Ancak organik bileşiklerin

elektromagnetik ışımının çok dar bir bölgesinde (~230-350 nm) soğurma yapması nedeniyle, ilk zamanlarda organik güneş pillerinde istenen başarı yakalanamamıştır. Bununla birlikte, kolay işlenebilirliği, esnekliği, soğurma katsayılarının yüksekliği ve şarjlı hallerinin uzun ömürlü olması gibi özellikler, organik/metal-organik güneş pilleri üzerindeki çalışmalarda itici güç olmuştur.



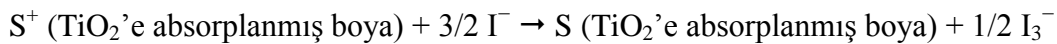
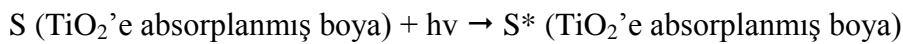
Şekil 7 – Rutenyum bipiridil, X=Cl

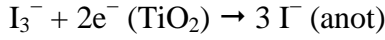
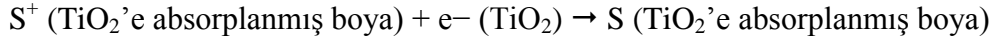
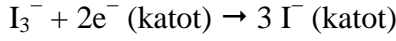


Şekil 8 – S boyarmadde, ITO indiyum-kalay oksit iletken cam

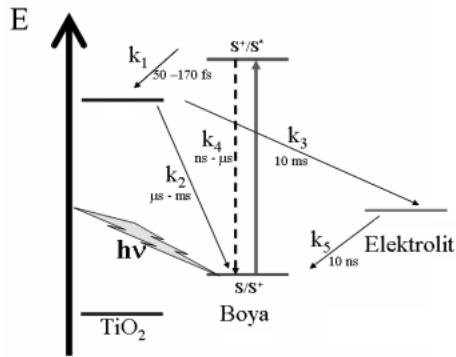
Bu alandaki en önemli çalışma ise, 1991 yılında Gratzel ve O'Reagan'in<sup>6</sup> organik boyarmadde esaslı güneş pilleriyle ilgili olan çalışması olmuştur. Bu çalışmada, TiO<sub>2</sub> nano-kristalleri ve rutenyum bipiridil kompleksi (Şekil 7) ile hazırlanan güneş pili hücresinden %11 verim elde etmiştir. Gratzel daha sonraki çalışmalarıyla birlikte TiO<sub>2</sub>+boyar madde esaslı güneş pillerinin çalışma prensibini de açıklamıştır<sup>6,5</sup> (Şekil 8). Güneş ışığının absorplanmasıyla, elektronlar boyar maddenin temel düzeyinden (HOMO, high occupied molecular orbital) uyarılmış düzeyine (LUMO, low unoccupied molecular orbital) geçer. Uyarılmış düzeydeki

elektronların bir kısmı TiO<sub>2</sub>'in daha düşük enerjili iletkenlik bandına geçer. İletkenlik bandına geçen elektronlar TiO<sub>2</sub> nano-kristaller ile ITO'ya ulaşır ve dış devreye aktarılır. Elektronların iletkenlik bandına aktarılmasıyla oluşan boya kationları da redoks çifti içeren elektrolit tarafından nötral hale getirilir. Yükseltgenmiş olan elektrolit ise dış devre üzerinden tekrar indirgenir. Böylece güneş pili hücresinin çalışması sırasında net yük her zaman sıfırdır ve boyar madde de bir kimyasal değişme meydana gelmemektedir. Gratzel'in önerdiği reaksiyonlar aşağıda verilmiştir.





Elektronların dış devre üzerinden aktarılması (foto-akım meydana getirilmesi) gerçekte, elektronların aktarım süreçleriyle ilgilidir (Şekil 8) ve bu şekilde hazırlanmış güneş pillerinde sürekli akım elde etmek için bu redoks reaksiyonlarının sürekli tekrar etmesi gerekir. Pilin verimiyle ilişki olan bu tekrar sayısını, Gratzel rutenyum kompleksiyle yaptığı bir çalışmada  $10^7$  tekrar olarak ölçmüştür<sup>7</sup>.



Şekil 9 – Elektron transfer kinetiği

Şekil 9'den de görüleceği gibi foto-akımın sürekliliği  $\text{TiO}_2$ 'in iletkenlik bandına olan elektron transfer hızının ( $k_1$ ), elektronların temel hale dönme hızından ( $k_4$ ) çok daha yüksek hızda (kısa sürede) olması gereklidir. Genel olarak  $k_4$  nano-saniye ( $10^{-6}$ ) – mikro-saniye ( $10^{-9}$ ) aralığında ifade edilmekte iken  $k_1$  femto-saniye ( $10^{-15}$ ) olarak verilmektedir<sup>8-10</sup>. Ancak  $k$  değerleriyle ilgili yapılan

çalışmalarda henüz büyük farklılıklar vardır. Bununla birlikte güneş pillerini daha yüksek verimle (power conversion efficiency) ve daha kolay hazırlayabilme isteği araştırmacıları, kullanılan donör ve akseptörün HOMO-LUMO enerji bandları arasındaki enerji farklarını dikkate alarak, farklı mimarilere sahip heterobağlantılı güneş pilleri hazırlamaya ve araştırmaya yöneltmiştir<sup>2,4,11</sup>. Ayrıca kullanılan elektrolit çözeltisi ( $I/I_3^-$ ) çözücüsünün zaman içerisinde uzaklaşmasıyla ortaya çıkabilecek verim düşmesinden dolayı,  $I/I_3^-$  yerine iletken polimerler {poli(3,4-etilendioksitiyofen)/poli(stirensülfonat), (PEDOT/PSS) vd.} kullanılması çalışmaları da yapılmaktadır<sup>4</sup> (katı hal heterobağlantılı güneş pilleri).

## Kaynaklar

- [1] Gerald P., Calvin F., and Daryl C., A new silicon p-n junction photocell for converting solar radiation into electrical power, Journal of Applied Physics, 25:676-677, (1954).
- [2] Harald H., Sariciftci N. S., Polymer Solar Cells, Adv. Polym. Sci., 214, 1-86, (2008).
- [3] By Christoph J. B., Sariciftci N. S., and Hummelen J. C., Plastic Solar Cells, Adv. Funct. Mater. 11, 15-26, (2001).

- [4] Travis L. B., Venkataraman D., Organic solar cells: An overview focusing on active layer morphology, *Photosynthesis Research* 87, 73–81, (2006).
- [5] Nazeeruddin M. K., Grätzel M., Transition Metal Complexes for Photovoltaic and Light Emitting Applications, *Struct. Bond*, 123, 113–175, (2007).
- [6] O'Regan B., and Gratzel M., A Low-Cost, High-Efficiency Solar-Cell Based on Dye-Sensitized Colloidal TiO<sub>2</sub> Films, *Nature*, 353, 737-740, (1991).
- [7] Nazeeruddin M. K., Kay A., Rodicio I., Humphry-Baker R., Mueller E., Liska P., Vlachopoulos N., Graetzel M., Conversion of light to electricity by cis-X<sub>2</sub>Bis(2,2'-bipyridyl-4,4'-dicarboxylate)ruthenium(II) charge-transfer sensitizers (X=Cl-, Br-, I-, CN- and SCN-) on nanocrystalline titanium dioxide electrodes, *J. Am. Chem. Soc.* 115, 6382-6390, (1993).
- [8] Tachibana Y., Moser J. E., Grätzel M., Klug D. R., and Durrant J. R., Subpicosecond interfacial charge separation in dye sensitised nanocrystalline titanium dioxide films, *J. Phys. Chem.* 100(51), 20056-20062, (1996).
- [9] Asbury J. B., Ellingson R. J., Ghosh H. N., Ferrere S., Nozik A. J., and Lian T., Femtosecond IR study of excited-state relaxation and electron-injection, dynamics of Ru(dcbpy)<sub>2</sub>(NCS)<sub>2</sub> in solution and on nanocrystalline TiO<sub>2</sub> and Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> thin films, *J. Phys. Chem. B*, 103, 3110-3119, (1999).
- [10] Benkő G., Kallioinen J., Korppi-Tommola J. E. I., Yartsev A. P., and Sundström V., Photoinduced ultrafast dye-to-semiconductor electron injection from nonthermalized and thermalized donor states, *J. Am. Chem. Soc.* 124(3), 489-493, (2002).
- [11] Coakley K. M., McGehee M. D., Conjugated polymer photovoltaic cells, *Chem. Mater.* 16, 4533-4542, (2004).

## **EK A**

### **MALİ BİLANÇO ve AÇIKLAMALARI**

**Proje Bedeli : 7.328 TL**

**Gider : 7.328 TL**

**Kalan : 0 TL**

**Proje kapsamında aşağıdaki modül cihaz alınmıştır.**

<b>Sıra No</b>	<b>Malzemenin Cinsi</b>	<b>Miktarı</b>	<b>Ölçü Birimi</b>
1	Ivium Modulight “Ivium marka potansiyostat cihazının bir modülü”	1	adet



## EK B

### PROJE KAPSAMINDA GERÇEKLEŐTİRİLEN SUNUMLAR

Mürsel Arıcı, Hasan Nazır, "[N,N'-Bis(2-Hidroksinaftaliden)fenilen-1,2-diaminato]Ni(II), Co(II) Komplekslerinin sentezi, Optik, Elektrokimyasal ve Fotovoltaik Özellikleri", III. Ulusal Anorganik Kimya Kongresi, s. 232, 19-22 Mayıs 2011, Çanakkale.

Mürsel Arıcı, Hasan Nazır, "ONNO Tipi Schiff Bazlarının Sentezi, Optik ve Fotovoltaik Özelliklerinin İncelenmesi", III. Ulusal Anorganik Kimya Kongresi, s. 233, 19-22 Mayıs 2011, Çanakkale.

T.C.  
ÇANAKKALE ONSEKİZ MART ÜNİVERSİTESİ  
FEN EDEBİYAT FAKÜLTESİ  
KİMYA BÖLÜMÜ

### III. ULUSAL ANORGANİK KİMYA KONGRESİ

19-22 Mayıs 2011

ÇANAKKALE

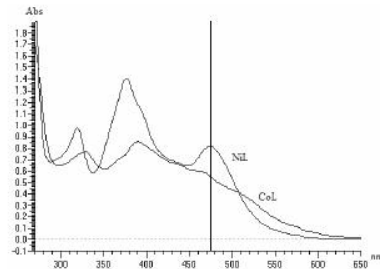


[N,N'-BIS(2-HİDROKSİNAFTALİDEN)FENİLEN-1,2-DİAMİNATO]Ni(II), CO(II) KOMPLEKSLERİNİN SENTEZİ, OPTİK, ELEKTROKİMYASAL VE FOTOVOLTAİK ÖZELLİKLERİ

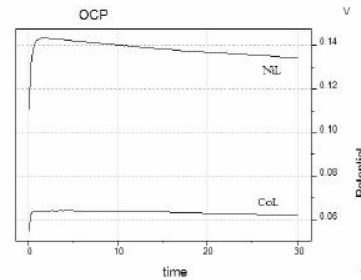
Mürsel ARICI, Hasan NAZIR

Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi Kimya Bölümü Tandoğan 06100 Ankara  
arici\_murse1086@hotmail.com

Schiff bazları metallerle kararlı kompleksler verebildikleri için kordinasyon kimyasında önemli bir yer tutar. Özellikle, Schiff bazı metal kompleksleri gösterdikleri katalitik aktivite, antibakteriyel, antifungal<sup>[1]</sup> ve DNA'ya etki<sup>[2]</sup> ve fotokromik<sup>[3]</sup> özelliklerinden dolayı yoğun olarak çalışılmaktadır. Sunulan bu çalışmada, ONNO tipi bir Schiff bazının Ni, Co komplekslerinin sentezi, yapılarının aydınlatılması, optik ve fotovoltaik özelliklerinin incelenmesi hedeflenmiştir. Yapılan çalışmada, naftaldehit ile fenilendiamin reaksiyonundan N,N'-bis(2-hidroksinaftaliden)fenilen-1,2-diamin (H<sub>2</sub>L) Schiff bazı hazırlandı. Hazırlanan Schiff bazı ligandının nikel(II), kobalt(II) asetat ile etanoldeki reaksiyonundan [N,N'-bis(2-hidroksinaftaliden)fenilen-1,2-diamin]metal(II) (ML) (M=Ni, Co) kompleksleri sentezlendi ve yapıları spektroskopik olarak aydınlatıldı. Sentezlenen komplekslerin DMF'de UV-absorpsiyonu (Şekil 1) ve dönüşümlü voltamogramları (CV) kaydedildi ve Grätzel<sup>[4]</sup> tipi güneş pili hücresi hazırlanarak, absorpsiyon yaptıkları en yüksek dalga boyunda açık devre potansiyelleri (Şekil 2), akım-potansiyelleri (I-V) ölçüldü ve fotovoltaik parametreleri hesaplandı.



Şekil 1 - Ni ve Co Schiff bazı kompleks-lerinin UV absorpsiyonu, (5x10<sup>-5</sup> M).



Şekil 2 - Ni ve Co Schiff bazı kompleks-lerinin açık devre potansiyeli, 475 nm.

**Not:** Bu çalışmayı 10H4240002 no.lu proje ile destekleyen Ankara Üniversitesi Araştırma Fonuna teşekkür ederim.

**Kaynaklar:**

1. El-Masry, H., Fahmy, H. H., Abdelwahed, S. H. A., Molecules **5**, 1429-1438, 2000.
2. Arıcı, M., Nazır, H., SDÜ Fen Dergisi (E-Dergi), **5** (1): 67-74, 2010.
3. Margerum, J.D., Miller, L.J., Photochromism, Interscience, Wiley, NewYork, 1971.
4. O'Regan, B., Grätzel, M., Nature, **353**, 737-740, 1991.

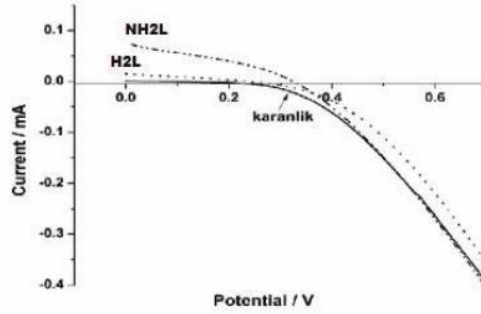


## ONNO TİPİ SCHIFF BAZLARININ SENTEZİ, OPTİK VE FOTOVOLTAİK ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

Mürsel ARICI, Hasan NAZIR

Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi Kimya Bölümü Tandoğan 06100 Ankara  
[arici\\_murse1086@hotmail.com](mailto:arici_murse1086@hotmail.com)

Kullanımı sınırlı hidrokarbon temelli enerji kaynaklarına alternatif arayışı, her zaman ilgi duyulan ve çalışılan bir alan olmuştur. Bu alternatif kaynaklardan bir tanesi de en bol bulunan ve dünyaya yıllık 178.000 TW enerji sağlayan güneş enerjisidir. Son yıllarda, bu enerjinin yüksek verimle kullanılmasına yönelik birçok araştırma yapılmaktadır. Özellikle rutenyum bipiridil kompleksleri<sup>[1]</sup>, polimerler<sup>[2]</sup> ve organik boyar maddeler<sup>[3]</sup> gibi bir çok madde güneş pili veriminin yükseltilmesine yönelik yapılan çalışmalarda kullanılmaktadır. Bu çalışmada, molekül yapısına elektron delokalizasyonunu artıran bir grup eklenmesiyle fotovoltaik verimin değişimi incelenmiştir. Bunun için N,N'-bis(salisiliden)fenilen-1,2-diamin (H<sub>2</sub>L) ve N,N'-bis(2-hidroksinaftaliden)fenilen-1,2-diamin (NH<sub>2</sub>L) Schiff bazları sentezlendi ve yapıları aydınlatıldı. Sentezlenen Schiff bazlarının UV absorpsiyon spektrumları kaydedildi ve absorpsiyon dalga boylarından HOMO-LUMO band aralığı (E<sub>g</sub>) enerjileri hesaplandı. H<sub>2</sub>L ve NH<sub>2</sub>L Schiff bazlarının akım-voltaj (I-V) eğrileri kaydedilerek fotovoltaik parametreleri (açık devre potansiyeli, kısa devre akımı, maksimum güç, dolun faktörü) hesaplandı. Şekil 1'de verilen akım-voltaj (I-V) eğrilerinden de görüldüğü gibi beyaz ışık altında NH<sub>2</sub>L Schiff bazının fotovoltaik verimi (η) H<sub>2</sub>L'ye göre daha yüksek bulundu.



Şekil 1 – H<sub>2</sub>L ve NH<sub>2</sub>L Schiff bazlarının karanlık ve beyaz ışık (AM 1.5) altındaki akım-voltaj (I-V) eğrileri

Not: Bu çalışmayı 10H4240002 no.lu proje ile destekleyen Ankara Üniversitesi Araştırma Fonuna teşekkür ederim.

### Kaynaklar:

1. O'Regan, B., Gratzel, M., Nature, **353**, 737-740, 1991.
2. Qiao, F., Hou, X., Lu, Y., Chen, H., Liu, A., Hu, X., Choon, N. S., Solar Energy Materials & Solar Cells, **94**, 442-445, 2010.
3. Millington, K. R., Fincher, K. W., King, A. L. Solar Energy Materials & Solar Cells, **91**, 1618-1630, 2007.