ATIK ISIYI ELEKTRİK ENERJİSİNE DÖNÜŞTÜREN YENİ POLİMER-BOROFEN NANOKOMPOZİT ESASLI TERMOELEKTRİK JENERATÖR MODÜL

Rumeysa Ayşenur TOKER
231421101

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Disiplinlerarası Yenilenebilir Enerji Teknolojileri ve Yönetimi
Enerji Etkin Yapılar Tezli Yüksek Lisans Programı
Danışman: Prof. Dr. Nevin TAŞALTIN

İstanbul
T.C. Maltepe Üniversitesi
Lisansüstü Eğitim Enstitüsü
Mayıs, 2025

ATIK ISIYI ELEKTRİK ENERJİSİNE DÖNÜŞTÜREN YENİ POLİMER-BOROFEN NANOKOMPOZİT ESASLI TERMOELEKTRİK JENERATÖR MODÜL

Rumeysa Ayşenur TOKER
231421101
ORCID: 0009-0001-2492-8597

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Disiplinlerarası Yenilenebilir Enerji Teknolojileri ve Yönetimi
Enerji Etkin Yapılar Tezli Yüksek Lisans Programı
Danışman: Prof. Dr. Nevin TAŞALTIN

İstanbul
T.C. Maltepe Üniversitesi
Lisansüstü Eğitim Enstitüsü
Mayıs, 2025



JÜRİ VE ENSTİTÜ ONAYI

RUMEYSA AYŞENUR TOKER'ın "Atık Isıyı Elektrik Enerjisine Dönüştüren Yeni Polimer-Borofen Nanokompozit Esaslı Termoelektrik Jeneratör Modül Hazırlanması" başlıklı tezi 06.05.2025 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından değerlendirilerek "Maltepe Üniversitesi Lisansüstü Eğitim ve Öğretim Yönetmeliği" nin ilgili maddeleri uyarınca Disiplinlerarası Yenilenebilir Enerji Teknolojileri ve Yönetimi Yüksek Lisans/Doktora/Sanatta Yeterlik tezi oy birliğiyle/oy çokluğuyla, başarılı/başarısız olarak kabul edilmiştir.

	Unvanı. Adı ve Soyadı	İmza
Üye (Tez Danışmanı)	Prof.Dr. Nevin TAŞALTIN Maltepe Üniversitesi	.....
Üye	Dr.ÖğrÜyesi Gamze GÜRSU Maltepe Üniversitesi	.....
Üye	Doç.Dr. Selcan KARAKUŞ İstanbul - Cerrahpaşa Üniversitesi	.....

Prof. Dr. Selva ERSÖZ KARAKULAKOĞLU
Enstitü Müdürü

ETİK İLKE VE KURALLARA UYUM BEYANI

Bu belge, Yükseköğretim Kurulu tarafından 19.01.2021 tarihli "Lisansüstü Tezlerin Elektronik Ortamda Toplanması, Düzenlenmesi ve Erişime Açılmasına İlişkin Yönerge" ile bildirilen 6698 Sayılı Kişisel Verilerin Korunması Kanunu kapsamında gizlenmiştir.

TEŞEKKÜR

Tez danışmanım ve değerli hocam Sn. Prof. Dr. Nevin TAŞALTIN'a sonsuz teşekkürlerimi sunarım. Ayrıca, Türkiye-İran İkili İşbirliği Programı kapsamında danışman hocamın proje yürütücüsü olduğu "Atık Isıyı Elektrik Enerjisine Dönüştüren Yeni Polimer-Borofen Nanokompozit ve Polimer-Silisen Nanokompozit Esaslı Termoelektrik Jeneratör Panellerinin Hazırlanması" başlıklı projenin bir kısmı olarak hazırladığım tezime desteği için TÜBİTAK'a teşekkür ederim.

Rumeysa Ayşenur TOKER

Mayıs, 2025

ÖZET

ATIK ISIYI ELEKTRİK ENERJİSİNE DÖNÜŞTÜREN YENİ POLİMER-BOROFEN NANOKOMPOZİT ESASLI TERMOELEKTRİK JENERATÖR MODÜL

Rumeysa Ayşenur Toker
Yüksek Lisans Tezi
Disiplinlerarası Yenilenebilir Enerji Teknolojileri ve Yönetimi
Enerji Etkin Yapılar Tezli Yüksek Lisans Programı
Danışman: Prof. Dr. Nevin Taşaltın
Maltepe Üniversitesi Lisansüstü Eğitim Enstitüsü, 2025

Bu tezde, elektrik üretimi teknolojisi kapsamında PEDOT: PSS: Borofen-ZnO P-N eklem TEJ hazırlanıp termoelektrik karakteristikleri literatürde ilk kez belirlenmiştir. PEDOT:PSS:Borofen-ZnO P-N eklem TEJ'de, özellikle 5 μm kalınlığındaki TEJ yapısında, 350-380 K aralığında güç faktörünün 3000-4000 $\mu Wm^{-1}K^{-2}$ seviyelerine ulaştığı görülmüştür. Bu, malzemenin ince film formunda yüksek termoelektrik verimlilik sergilediğini göstermiştir. Ancak, kalınlık arttıkça performansın düşmesi, malzemenin optimal termoelektrik özelliklerinin ince yapılar için daha uygun olduğunu göstermiştir. PEDOT:PSS:Borofen-ZnO P-N eklem TEJ'in, özellikle ince film uygulamaları için yüksek güç faktörü sunduğu ve düşük-orta sıcaklık aralığında (300-380 K) etkili olduğu sonucuna ulaşılmıştır. Bu TEJ, esnek ve hafif malzeme gerektiren uygulamalarda (giyilebilir termoelektrik jeneratörler gibi) avantaj sağlayabilir. İleriki çalışmalarda, düşük sıcaklıklarda çalışan kompakt ve esnek termoelektrik jeneratörler geliştirilmek amaçlanırsa PEDOT:PSS:Borofen-ZnO P-N eklem TEJ kullanışlı olacaktır.

Anahtar Sözcükler: Enerji, enerji üretimi; termoelektrik jeneratör; borofen; poli (3,4-etilendioksitiyofen) polistiren sülfonat; çinko oksit.

ABSTRACT

PREPARİTON OF THERMOELECTRİC GENERATOR PANELS BASED ON POLYMER BOROPHANE NANOCPMPOSİTE FOR CONVERTİNG WASTE HEAT INTO ELECTRİCİAL ENERGY

Rumeysa Ayşenur Toker
Master Thesis
Interdisciplinary Renewable Energy Technologies and Management
Energy Efficient Structures Master's Degree with Thesis
Prof. Dr. Nevin Taşaltın
Maltepe University Graduate School, 2025

In the thesis, PEDOT: PSS: Borophene-ZnO P-N junction TEJ P-N junction TEJ were prepared within the scope of electricity generation technology and their thermoelectric characteristics were determined for the first time in the literature. In the PEDOT: PSS: Borophene-ZnO P-N junction TEJ, especially in the 5 μm thick TEJ structure, it is observed that the power factor reaches 3000-4000 $\mu Wm^{-1}K^{-2}$ levels in the range of 350-380 K. This showed that the material exhibits high thermoelectric efficiency in thin film form. However, the decrease in performance with increasing thickness showed that the optimal thermoelectric properties of the material are more suitable for thin structures. It was concluded that PEDOT:PSS:Borofen-ZnO P-N junction TEJ offered high power factor especially for thin film applications and was effective in the low-medium temperature range (300-380 K). This TEJ could provide advantages in applications requiring flexible and lightweight materials (such as wearable thermoelectric generators). In future studies, if it is aimed to develop compact and flexible thermoelectric generators operating at low temperatures, PEDOT:PSS: Borophene-ZnO P-N junction TEJ will be more useful.

Keywords: Energy, energy production; thermoelectric generator; borophene; poly (3,4-ethylenedioxythiophene) polystyrene sulfonate; zinc oxide.

İÇİNDEKİLER

JÜRİ VE ENSTİTÜ ONAYI ii

ETİK İLKE VE KURALLARA UYUM BEYANI iii

TEŞEKKÜR iv

ÖZET v

ABSTRACT vi

İÇİNDEKİLER vii

ŞEKİLLER LİSTESİ ix

TABLOLAR LİSTESİ x

KISALTMALAR xi

1. GİRİŞ 1

1.1 Problem 1

1.2 Amaç 1

1.3 Önem 3

1.4 Varsayımlar 3

1.5 Sınırlıklar 4

1.6 Tanımlar 4

2. GENEL BİLGİLER 6

2.1 Literatür Araştırması 6

2.1.1 Termoelektrik jeneratörler 6

2.1.2 İnorganik malzeme esaslı termoelektrik jeneratörler 8

2.1.3 Organik malzeme esaslı termoelektrik jeneratörler 9

2.1.4 PEDOT:PSS esaslı termoelektrik jeneratörler 11

3. YÖNTEM 15

3.1 Borofenin Hazırlanması ve Karakterizasyonlarının Yapılması 15
3.2 PEDOT:PSS:Borofen-ZnO Nanokompozitlerin Hazırlanması ve Karakterizasyonlarının Yapılması 15
3.3 Termoelektrik Jeneratör Test Sisteminin Kurulması 16
3.4 PEDOT:PSS:Borofen P-N Eklem Termoelektrik Jeneratörlerin Hazırlanması ve Termoelektrik Testlerin Yapılması 17
3.5 Verilerin Çözümlenmesi ve Yorumlanması 19
4. BULGULAR VE TARTIŞMA 20
4.1 Bulgular 20
4.1.1 Hazırlanan borofenin karakterizasyon sonuçları ve tartışmalar 20
4.2 Hazırlanan PEDOT:PSS:Borofen Nanokompozitin Karakterizasyon Sonuçları ve Tartışmalar 26
5. SONUÇ ve ÖNERİLER 31
KAYNAKÇA 32
EKLER 37
Ek-1: "Performance of the PEDOT: PSS: Borophene-ZnO Junction Thermoelectric Generator" başlıklı makale. 37
ÖZ GEÇMİŞ 38

ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 1. Termoelektrik cihaz mimarisinin (a) dikey olarak şematik gösterimi ve (b) yatay düzlemler 8

Şekil 2. Termoelektrik jeneratör modül test sistemi. 16

Şekil 3. 3 Boyutlu yazıcıda basılan modül alt tabanının tasarımı 17

Şekil 4. 45 mm boy x 3,2 mm genişlik x 2 mm derinlik olan modül alt tabanı 17

Şekil 5. 22,5 mm boy x 3,2 mm genişlik x 2 mm derinlik olan modül 18

Şekil 6. PEDOT:PSS: Borofen-ZnO termoelektrik jeneratör modülünün şematik gösterimi 18

Şekil 7. Hazırlanan borofenin (a)-(b) HRTEM görüntüleri, (c) yüksek büyütmeli HRTEM görüntüsü, (d) SAED deseni, (e) FFT deseni ve (f) profili 21

Şekil 8. Tekrar hazırlanan borofenin (a) TEM görüntüsü, (b) HRTEM görüntüsü, (c) profili, (d) FFT deseni. 22

Şekil 9. Hazırlanan borofenin (a) XRD, (b) FTIR, (c) Tauc, (d) XPS grafikleri. 25

Şekil 10. PEDOT:PSS-ZnO ve (b) PEDOT: PSS: Borofen-ZnO Seebeck katsayısı-sıcaklık ilişkisi. 27

Şekil 11. PEDOT:PSS-ZnO ve (b) PEDOT: PSS: Borofen-ZnO elektriksel iletkenlik-sıcaklık ilişkisi. 28

Şekil 12. PEDOT:PSS-ZnO ve (b) PEDOT: PSS: Borofen-ZnO güç faktörü-sıcaklık ilişkisi. 29

.

TABLOLAR LİSTESİ

Tablo 1. Pedot:PSS Karşılaştırma Tablosu 14

KISALTMALAR

TGA : Termogravimetrik Analiz

PEDOT:PSS : Poly(3,4-ethylenedioxythiophene): Poly(styrenesulfonate) – Poli(3,4-etilendioksitiyofen): Polistirensülfonat

ZnO : Zinc Oxide – Çinko Oksit

TEJ : Thermoelectric Generator – Termoelektrik Jeneratör

P-N : Positive-Negative (junction) – P tipi ve N tipi yarı iletken eklemi

μm : Micrometer – Mikrometre

K : Kelvin – Kelvin

$\mu W m^{-1} K^{-2}$: Microwatt per meter-kelvin squared – Mikrowatt bölü metre-Kelvin kare

σ : Electrical Conductivity – Elektriksel iletkenlik

ZT : Figure of Merit – Termoelektrik kalite faktörü

η : Efficiency – Verimlilik

η_C : Carnot Efficiency – Carnot Verimliliği

TH : Yüksek sıcaklık ucu

Bi_2Te_3 : Bismuth Telluride – Bizmut Tellürür

Te : Tellurium – Tellür

rGO : Reduced Graphene Oxide – İndirgenmiş grafen oksit

$S \cdot m^{-1}$: Siemens per meter – Siemens bölü metre

Mohm : Megaohm

IPA : Isopropyl Alcohol – İzopropil Alkol

DMF : N,N-Dimethylformamide – N,N-Dimetilformamid

NMP : N-Methyl-2-pyrrolidone – N-Metilpirolidon

N_2 : Nitrogen – Azot

Rpm : Revolutions Per Minute – Dakika başına devir

W : Watt

°C : Degrees Celsius – Santigrat derece

1. GİRİŞ

1.1 Problem

Küresel enerji belirsizliği ve artan enerji talepleri, enerji dönüşüm verimliliğinin artması, enerji teknolojileri için itici bir güç sağlamaktadır. Termoelektrik jeneratör panosu, atık ısıyı sabit ve direkt elektrik enerjisine dönüştürerek katı hal elektronik güç kaynakları olarak elektrik enerjisi ihtiyacını karşılayabilir. Bu önerilen tez, yenilenebilir enerji için yüksek performanslı termoelektrik jeneratörler geliştirmeyi önermektedir. Önerilen tez, yeni polimer-borofen nanokompozitler ve yeni termoelektrik jeneratör panellerinin hazırlanmasında her iki tarafın ilgili avantajlarından tam olarak yararlanmaktadır. Önerilen tez sonunda yüksek performanslı termoelektrik jeneratörler hedefine ulaşacaktır.

1.2 Amaç

Termoelektrik jeneratörler, termal enerjiyi doğrudan elektrik enerjisine dönüştüren katı hal elektronik güç kaynaklarıdır. Termoelektrik jeneratör panosundan yüksek çıkış gerilimi elde etmek için kompozitten yapılmış termal elemanların yüksek S değerlerine sahip olması gerekir. Güç faktörünün, elektriksel iletkenliğin ve Seebeck katsayısının eşzamanlı optimizasyonu son derece önemlidir. Elektriksel olarak yüksek iletken ağların tasarımı, ancak ısı yalıtım arayüzleri ve termoelektrik parametrelerin ayrılması, yüksek termoelektrik performans elde etmek için kritik öneme sahiptir.Bu çalışma, bir tüketici ürünü, Endüstriyel uygulama için en iyi soğutucuyu bulmaya yardımcı olmak için veya üreticiler tarafından tasarımları optimize etmek ve performans değerleri sağlamak için kullanılabilir. Polimer-inorganik yapı esaslı nanokompozitlerin termoelektrik özelliklerinde son 10 yılda artış olmuştur. Borun termoelektrik özelliği bilinmesine rağmen, polimer-borofen nanokompozitlerin termoelektrik özellikleri ile ilgili literatürde deneysel veri bulunmamaktadır. Önerilen önerilen teznin amacı, ısı enerjisini doğrudan kullanılabilir elektrik enerjisine dönüştürebilen yeni polimer-borofen nanokompozit esaslı termoelektrik jeneratörleri panelleri araştırılması, geliştirilmesi ve üretilmesidir. Polimerlere borofen ilave edilerek, borofen katkısı sayesinde yük transferinin artacağı, elektriksel iletkenliğin artacağı ve Seebeck katsayısının artacağı öngörülmektedir. Öte

yandan, polimerlerin borofen nanotabakaları arasına yerleştirilmesiyle oluşan katmanlı sandviç şeklindeki yapıda, fononların borofen nanotabakaları ile bloke edileceği, fonon hareketinin sınırlı olacağı ve bu nedenle ısıl iletkenliğin değişmeyeceği, dolayısıyla yüksek termoelektrik özellikler elde edilebileceği öngörülmektedir. Önerilen önerilen tez, polimer-borofen nanokompozit esaslı termoelektrik jeneratör modülü hazırlanmasını içermektedir.

Önerilen tezde ulaşılmak istenen hedefler aşağıda yer almaktadır:

– Hazırlanan borofen düzgün kristal yapıya sahip olmalı, başlangıç materyali ile aynı fazda olmalı, yüksek saflıkta olmalı, çözücüye bağlı olarak ayarlanabilir olmalı, az sayıda katmandan oluşmalı (<10), birkaç kat borofen istenilen miktarlarda (>100 mg/gün) rekolte edilebilir olmalıdır.

– Ayarlanabilir enerji bandı aralığı ile borofen hazırlama prosesinin optimizasyonu.

– Polimer-borofen nanokompozitler nano boyuttadır ve tek tip bileşimden oluşan morfolojilere sahiptir (polimerin borofen nanotabakaları arasına yerleştirilmesiyle oluşan nano ölçekli yeni yapılar).

– Elektrot kaplamalarının tekrarlanabilirliği ve elektrot hazırlama parametrelerinin belirlenmesi ve optimizasyonu

– Polimer-borofen nanokompozitlere dayalı termoelektrik jeneratörlerin hazırlanması, termoelektrik jeneratör panosu çıkış güç faktörü en az birkaç yüz $mWcm^{-1}.mK^2$ olacaktır.

– Önerilen önerilen tezde, polimer-borofen nanokompozit esaslı termoelektrik jeneratör panosu üretiminin yenilenebilir enerji teknolojilerine ve nanoteknolojiye katkı sağlayacağı ve en önemlisi ekonomiye fayda sağlayacağı öngörülmektedir.

Türkiye'nin bir bor kaynağına sahip olması nedeniyle, borofenin düşük maliyetli üretimi, özgün termoelektrik malzemelerin geliştirilmesi için son derece önemlidir. Bu sayede termoelektrik malzemelerin Türkiye'de düşük maliyetle ve basit bir süreçle üretilmesinin,

sürdürülebilir enerji üretimi açısından küresel düzeyde önemli bir soruna çözüm getirerek enerji maliyetini düşürebileceği ve refahı artırabileceği öngörülmektedir.

1.3 Önem

Termal enerji, enerji ekonomisinde sıklıkla gözden kaçan bir kaynaktır. Termal enerji, geri dönüşü olmayan bir çalışma döngüsünün tüketilebilir bir sonucu olmaktan ziyade, kendisi bir enerji kaynağı olarak hizmet edebilir. Farklı enerji türlerinin gelişimini hızlandırmak için büyük finansman çabaları sarf edilirken termal enerji gölgede bırakılmamalıdır.

1.4 Varsayımlar

Hedeflenen çıktılar polimer-borofen termoelektrik nanokompozitler, polimer-borofen nanokompozit esaslı termoelektrik jeneratör panodur. Önerilen önerilen teznin yenilikçi yönü, borofen, polimer-borofen nanokompozitlerin termoelektrik özelliklerinin literatürde ilk kez teorik ve deneysel olarak tanımlanması ve polimer-borofen esaslı termoelektrik jeneratör üretilmesidir. Bu nedenle, önerilen önerilen tez, polimer-borofen nanokompozit esaslı termoelektrik jeneratör panosunun yeni ürünler olarak modellenmesini içermektedir. Artan enerji talebini karşılamak için en iyi çözüm, endüstriyel sektörlerden, otomobil egzozlarından ve binaların pencerelerinin güneş enerjisiyle ısınmasından kaynaklanan atık ısıyı geri kazanmak ve elektrik enerjisi üretmek olacaktır. Termoelektrik jeneratör panolarının fabrikalara, otomobillere ve bina pencerelerine uygulanması, CO_2 emisyonlarını azaltacak, ısıtma-soğutma ve günlük aktif ihtiyaçlar için elektrik üretimi sağlayacaktır. Önerilen önerilen tez ile atık ısıdan elektrik üretilerek enerji alanında teknolojide dışa bağımlılığını azaltacak ve her iki ülkenin rekabet gücünü artıracak.Borun oda sıcaklığında ısıl iletkenliği 27.4 W/mK ve elektriksel iletkenliği 10^{-6}-10^{-7}ohm^{-1}cm^{-1}'dir (Lindquist, Hammond & Bragg, 1968; Zhang, Penev & Yakobson, 2016). Elektriksel olarak yüksek iletken ağların tasarımı, ancak ısı yalıtım arayüzleri ve termoelektrik parametrelerin ayrılması, yüksek termoelektrik performans elde etmek için kritik öneme sahiptir. Polimer-borofen nanokompozit yapılarda yük transferinin artacağı, elektriksel iletkenliğin artacağı ve Seebeck katsayısının artacağı öngörülmektedir. Öte yandan, polimer nanokompozit yapılarda borofen nanotabakaları arasına polimerlerin yerleştirilmesiyle oluşan katmanlı sandviç şeklindeki yapıda,

fononların borofen nanotabakaları ile bloke olacağı, fonon hareketinin sınırlı olacağı ve bu nedenle ısıl iletkenliğin değişmeyeceği öngörülmektedir. (Zhang, Penev & Yakobson, 2016)

Önerilen önerilen tezde, polimer-borofen nanokompozit esaslı termoelektrik jeneratör panosu yenilenebilir enerji teknolojilerine ve nanoteknolojiye katkı sağlaması öngörülmektedir. Önerilen tez kapsamında polimer-borofen nanokompozitler, polimer-borofen esaslı termoelektrik jeneratör panoları önerilen teznin özgün çıktıları olacaktır. Konunun oldukça özgün olması, enerji ve nanoteknoloji alanlarında yeni patentlerin kazanılmasını sağlayacaktır. Hedeflenen pazar, küresel termoelektrik jeneratör pazarıdır. Termoelektrik jeneratör panosunun kısa vadede enerji, havacılık, otomotiv, endüstriyel uygulamalar ve giyilebilir elektronik alanlarında küresel pazarda ticarileşmesi öngörülmektedir.

1.5 Sınırlıklar

Tez kapsamındaki çalışmalarda tez önerisinin içeriğinin yoğun olması , zamanın çok verimli kullanımını gerektirmektedir.

1.6 Tanımlar

Polimer-Borofen Nanokompozit: Borun iki boyutlu nanoyapılarının (borofen) polimer malzeme ile birleşiminden oluşan kompozit bir malzemedir. Termoelektrik özellikleri yüksek ve enerji dönüşüm verimliliği sağlayan bu yapı, borofen tabakalarının polimer arayüzü ile entegre edilmesi ile elde edilir.

Termoelektrik Jeneratör (TEG): Isı enerjisini doğrudan elektrik enerjisine dönüştüren katı hal cihazıdır. Atık ısı kaynaklarından yararlanarak enerji üretiminde kullanılır.

Seebeck Etkisi: İki farklı malzeme arasında sıcaklık farkı olduğunda, bu fark bir elektrik voltajı üretir. Bu etki, termoelektrik jeneratörlerin temel prensiplerinden biridir.

Güç Faktörü: Bir termoelektrik malzemenin verimliliğini ifade eden bir parametredir. Elektriksel iletkenlik ve Seebeck katsayısı ile orantılıdır.

Polimer Nanokompozit: Polimer matris içinde nano boyutlu partiküller (örneğin borofen) dağılarak oluşturulan malzemedir. Termoelektrik malzemelerde kullanılarak elektriksel iletkenlik, ısıl iletkenlik ve Seebeck katsayısı iyileştirilir.

Fonon Blokajı: Termal iletkenliği azaltmak için nanoyapılar arasında ısı taşıyıcı fononların hareketinin sınırlandırılmasıdır. Bu, termoelektrik malzemelerde ısı kaybını azaltarak verimliliği artırır.

2. GENEL BİLGİLER

Enerji verimliliği ve sürdürülebilir kaynak kullanımının giderek önem kazandığı günümüzde, atık ısının geri kazanımı büyük bir potansiyele sahiptir. Termoelektrik malzemeler, ısı enerjisini doğrudan elektrik enerjisine dönüştürme kabiliyetleri nedeniyle bu alanda öne çıkan çözümler sunmaktadır. Ancak geleneksel inorganik termoelektrik malzemelerin yüksek maliyet, toksisite ve kırılganlık gibi dezavantajları, araştırmacıları organik-inorganik hibrit malzemeler geliştirmeye yönlendirmiştir. Bu tez kapsamında, iki boyutlu (2D) malzemelerden borofenin PEDOT:PSS iletken polimerle nanokompozitlerinin termoelektrik performansı incelenmiştir.

Borofen, yüksek elektriksel iletkenlik, mekanik esneklik ve geniş yüzey alanı gibi benzersiz özellikleriyle son yıllarda büyük ilgi gören bir malzemedir. Bu çalışmada, borofenin polimer matrislerle etkileşimi sayesinde termoelektrik performans parametrelerinden olan Seebeck katsayısı ve güç faktöründe önemli artışlar elde edilmiştir. Özellikle PEDOT:PSS:Borofen-ZnO sisteminde 5 μm kalınlıkta 350-380 K aralığında 3000-4000 $\mu Wm^{-1}K^{-2}$ güç faktörüne ulaşılması, ince film uygulamaları için umut verici sonuçlar sunmuştur.

Bu tez amacı, düşük maliyetli, esnek ve yüksek verimli polimer-borofen nanokompozit esaslı termoelektrik jeneratörler geliştirmek ve bu malzemelerin performans sınırlarını belirlemektir. Literatürde ilk kez sunulan bu kapsamlı çalışma, borofenin termoelektrik özellikler üzerindeki etkisini sistematik olarak incelemekte ve yenilenebilir enerji teknolojilerine katkı sağlamayı hedeflemiştir.

2.1 Literatür Araştırması

2.1.1 Termoelektrik jeneratörler

Termoelektrik etki (Seebeck etkisi) ilk olarak 1821'de Thomas Seebeck tarafından iki teli birlikte büktüğünde ve bir ucunu bükerek bir voltaja neden olduğunda keşfedilmiştir (Donald, 1962). Bir termoelektrik malzeme boyunca bir sıcaklık gradyanını indüklemek için voltaj uygulaması, 1834'te Jean Peltier tarafından keşfedilmiştir (Rowe, 2006).

Termoelektrik malzemeler, taşıyıcıların bir sıcaklık gradyanına tepki olarak hareket ettiği Seebeck etkisini sergiler. (Russ vd. , 2016; Urban vd. , 2019). Yük taşıyıcılar, sıcaklık gradyanı boyunca dağılarak bir yük birikimi ve dolayısıyla bir potansiyel fark, ΔV oluşturur (Wang & Yu, 2019; Nandihalli vd. , 2020). Bu kavramlara dayanarak, bir malzemenin termoelektrik performansı **Eşitlik (2.1)** kullanılarak belirlenir (Lee vd. 2016).

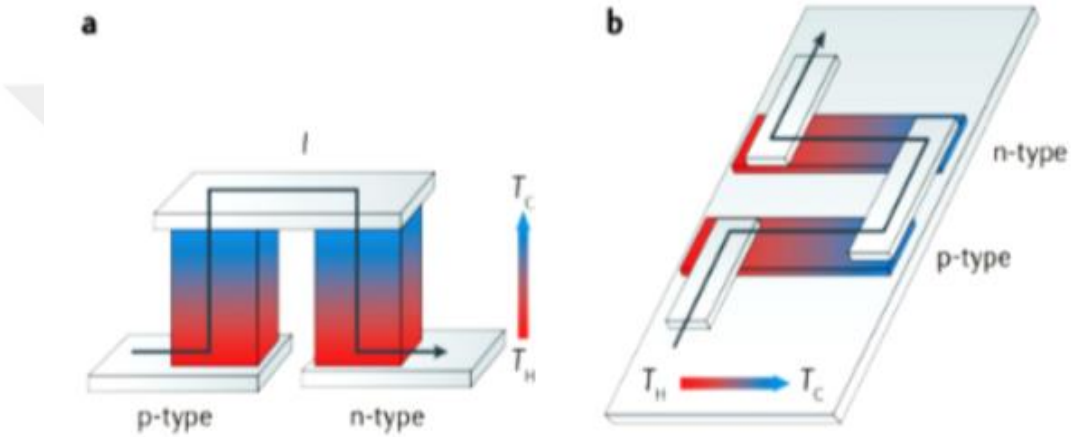
$$ZT = \sigma S2T / K \qquad (2.1)$$

σ elektriksel iletkenlik olduğunda, K termal iletkenliktir, T mutlak sıcaklıktır ve S, Seebeck katsayısıdır (S = ΔV/ΔT, yani, indüklenen voltajın termoelektrik jeneratör boyunca sıcaklık gradyanına oranı) (Reineke vd. , 2013). Yüksek performanslı bir termoelektrik malzeme, yüksek elektrik iletkenliğine, yüksek Seebeck katsayısına ve düşük ısı iletkenliğine sahiptir. Yüksek elektrik iletkenliği ve düşük ısı iletkenliği ile yüksek Seebeck katsayısına sahip bir malzeme bulmak zordur. Çoğu malzemede, elektriksel iletkenlik, termal iletkenlik ile doğru orantılıdır. İdeal bir termoelektrik malzeme, bir yarıiletkende olduğu gibi yüksek bir Seebeck katsayısına ve bir metalde olduğu gibi yüksek bir elektrik iletkenliğine sahip olacaktır (Sirringhaus, 2014; Cahill vd. , 2013).

Seebeck katsayısı doğrudan durumların yoğunluğu ile ilgilidir, oysa elektriksel iletkenlik elektronik ve morfolojik kusurlarla sınırlandırılabilir. Seebeck katsayısı, yük taşıyıcı başına taşınan ortalama entropiyi yansıtır ve artan taşıyıcı konsantrasyonu ile azalır. Elektriksel iletkenlik, taşıyıcı konsantrasyonu (n) ile artar, σ = eμn. Termal iletkenlik, bir kafes katkı maddesi ve bir elektronik katkı maddesinden oluşur. Yük taşıyıcılar aynı zamanda ısı da taşıyabildiğinden, elektronik katkı maddesi taşıyıcı konsantrasyonu ile artar. Bir termoelektrik jeneratörün verimliliği, η, malzemenin ZT'si ve Carnot limiti, ηC = ΔT/TH ile ilgilidir. Bir termoelektrik jeneratörün verimliliği, Eşitlik (2.2) kullanılarak belirlenir (Donald, 1962; Rowe, 2006; Lee vd. , 2016). Tipik bir termoelektrik cihaz,

elektriksel olarak seri ve termal olarak paralel bağlanmış "elektrotlardan" ve ayrıca ZT uyumlu alternatif p-tipi ve n-tipi termoelektrik malzemelerden oluşur (Şekil 1).

$$\eta = \eta_C [(\sqrt{1} + ZT) - 1 / (\sqrt{1} + ZT) + 1] \quad (2.2)$$



Şekil 1. Termoelektrik cihaz mimarisinin (a) dikey olarak şematik gösterimi ve (b) yatay düzlemler

2.1.2 İnorganik malzeme esaslı termoelektrik jeneratörler

1950'lerde, en iyi termoelektrik malzemeler Bi_2Te_3 gibi inorganik bileşiklerdi. İlk termoelektrik jeneratörler Bi_2Te_3 baz alınarak üretilmiştir (Tan vd. , 2011; Goldsmid, 1958). Ancak, bu ilk jeneratörlerin verimliliği düşük olduğu için, daha iyi performans gösterebilen Bi_2Te_3 alaşımları geliştirilmiştir (Majumdar, 2004). Bi_2Te_3 alaşımlarının oda sıcaklığına yakın optimum performans gösterdiği ve verimliliklerinin artırılabildiği bildirilmiştir (Snyder & Toberer, 2008).

Ancak, Bi_2Te_3 ve benzeri malzemeler toksik oldukları için kullanım alanları sınırlıdır. Ayrıca, tellür (Te) nadir bir elementtir ve alaşımın hazırlanması karmaşık vakum işlemleri gerektirir, bu da üretim maliyetlerini yükseltmektedir (Vineis vd. , 2010;

Venkatasubramanian vd. , 2001). 1990'lı yıllardan itibaren yapılan teorik çalışmalar, nanoyapıların termoelektrik performansı artırabileceğini öne sürmüş ve bu alandaki araştırmaları hızlandırmıştır (Hicks & Dresselhaus, 1993). Nanoyapıların, elektriksel iletkenliği artırırken termal iletkenliği düşürebileceği birçok çalışmada gösterilmiştir (Li vd. , 2010; Girard vd. , 2010; Zhao vd. , 2012; Chen vd. , 1997; Uher vd. , 1999; Nolas vd. , 1998; Littleton vd. , 1998). 2000'li yılların başında, yarıiletken polimerlerin yüksek elektriksel iletkenlik, büyük Seebeck katsayısı ve düşük termal iletkenlik kombinasyonuna sahip olabileceği gösterilmiştir (Sun vd. , 2012). Yarıiletken polimerler içeren termoelektrik malzemeler, hafiflik, esneklik ve düşük üretim maliyeti gibi avantajlar sunar ve bu nedenle son 20 yılda yoğun bir şekilde araştırılmıştır (Yue vd. , 2012; Søndergaard vd. , 2013).

2.1.3 Organik malzeme esaslı termoelektrik jeneratörler

Polimerler, en düşük boş moleküler orbitalden (LUMO) en yüksek dolu moleküler orbitale (HOMO) kadar enerji aralıklarına (yaklaşık 1-3 eV) sahiptir ve doğal olarak düşük yük taşıyıcı hareketliliğine (<1 cm^2/Vs) sahiptir (Coropceanu vd. , 2007; Bredas & Street, 1985; Anthony vd. , 2010). Termoelektrik malzemeler, yüksek elektrik iletkenliğine ve ayarlanabilir yük taşıyıcı konsantrasyonlarına sahip olmalıdır (Sirringhaus, 2014; Fabretto vd. , 2012; Heeger, 2001; Worfolk vd. , 2015).

Hareketlilik (mobilite) gibi parametreler, elektriksel iletkenlik gereksinimlerinin belirlenmesine yardımcı olsa da Seebeck katsayısının taşıyıcı konsantrasyonuna bağımlılığı birçok malzeme için tahmin edilmesi zor bir parametredir ve bu durum, organik malzemeler için en büyük belirsizliklerden biri olmaya devam etmektedir (Bubnova vd. , 2011; Kim vd. , 2013; Bubnova vd. , 2014; Xuan vd. , 2010). Son 15 yılda yarıiletken polimerlerin, Poli (4-etilenoksitiyofen) (PEDOT) (Bubnova vd. , 2011; Kim vd. , 2013; Bubnova vd. , 2014), Poli (3,4-etilendioksitiyofen) (Aich vd. , 2009; Glaudell vd. , 2015; Zhang vd. , 2014), Poliasetilen (PA) ve Polianilin (PANI) (Yoon vd. , 1994; Sun vd. , 2010; Yoon vd. , 1995) gibi polimerlerin yüksek verimli termoelektrik malzemeler olduğu bildirilmiştir.

Yarı iletken polimerlerin bant aralıklarının ayarlanabilmesi ve fiziksel ve kimyasal özelliklerinin modifikasyonlarla düzenlenebilmesi, onları termoelektrik cihaz

uygulamaları için cazip hale getirmiştir (Paloheimo vd. , 1995; Nogami vd. , 1990). Ayrıca, polimerlerin ana bileşeni olan karbon doğada bol miktarda bulunduğundan, polimer bazlı termoelektrik cihazlar ekonomik bir seçenek sunmaktadır (Kaiser, 1989).

Hücrelerin seri bağlanmasıyla ve modüllerin paralel bağlanmasıyla elde edilen çıkış gücünün daha da artırılabileceği bildirilmiştir. Bununla birlikte, bu polimerlere inorganik katkı maddeleri eklendiğinde, birbirine bağlı katkı ağı oluşturabildikleri ve böylece termal iletkenliği neredeyse sabit tutarken elektriksel iletkenliği önemli ölçüde artırabildikleri gösterilmiştir. Az miktarda katkı maddesi bile (ağırlıkça yaklaşık %0.1), polimerin elektrik iletkenliğini 5-10 kat artırabilir (Zhang vd. , 2014; Yoon vd. , 1994).

Polimerlerin moleküler ağırlıklarının elektron hareketliliği üzerinde önemli bir etkiye sahip olduğu ve dolayısıyla elektriksel iletkenliği etkilediği bildirilmektedir. Polimer zincir uzunluğundaki/moleküler ağırlıktaki artışın, polimer omurgası boyunca elektron atlaması yoluyla elektriksel iletkenliği artırdığı bulunmuştur (Paloheimo vd. , 1995; Nogami vd. , 1990). Polimer-inorganik nanokompozitler hazırlanırken, nihai ürünün termoelektrik özelliklerini optimize etmek için farklı nanoyapılar (küreler, çubuklar, nanoteller, nanotüpler) ve çeşitli en-boy oranları kullanılır.

Bu nanokompozitler tipik olarak çözeltinin organik bir çözücü içinde karıştırılmasıyla üretilir ve enerji verimli üretim süreçleri, mekanik esneklik, hafiflik, mimari uyumluluk, düşük termal iletkenlik ve iyi elektriksel özellikler gibi avantajlara sahiptirler (Bubnova vd. , 2011; Kim vd. , 2013; Bubnova vd. , 2014).

Polimer-inorganik nanokompozitlerin üretimindeki ana zorluk, polimer matrisindeki inorganik katkı maddelerinin dağılımını kontrol etmektir. İnorganik katkı nanoyapıları, polimerdeki inorganik katkı maddeleri arasındaki yüksek yüzey enerjileri ve güçlü Van der Waals çekici kuvvetleri nedeniyle agrega oluşturma eğiliminde olabilir ve bu da düşük elektrik iletkenliğine neden olabilir. Kovalent yüzey modifikasyonu (güçlü asitler kullanılarak kimyasal işlevselleştirme) yoluyla dispersiyonu iyileştirme girişimleri, inorganik katkı maddelerinde uzun süreli π konjugasyonunun bozulması nedeniyle yan duvarlarda kusurlara ve iletkenliğin azalmasına neden olabilir (Yang vd. , 2011). Öte yandan, inorganik katkı maddelerinin kovalent olmayan stabilizasyonu, sp2 karakterindeki oksidasyonu veya hasarı ortadan kaldırabilir (Sumfleth vd. , 2009). Bu

nanokompozitlerin Seebeck katsayısı, polimerin Seebeck katsayısından önemli ölçüde yüksek olduğu için, yük transferinin sadece polimer üzerinden gerçekleşmediği, katkılı malzemenin hareketliliğinin Seebeck katsayısını güçlü bir şekilde etkilediği ortaya çıkmıştır (Li vd. , 2007). Tüm bu bulgular, polimerlerin termoelektrik verimliliğini artırmak için bir avantajdır (Ma vd. , 2009; Wei vd. , 2010).

2.1.4 PEDOT:PSS esaslı termoelektrik jeneratörler

Termoelektrik jeneratörler (TEJ'ler), mekanik bileşenler kullanmadan termal enerjiden elektrik üreten yüksek verimli cihazlardır. TEJ'ler, bir sıcaklık farkının doğrudan elektriğe dönüştürüldüğü termoelektrik (TE) etki prensibine göre çalışır (Zoui vd. , 2020). TEJ'lerdeki TE elemanları, elektron akışını yönlendiren ve elektrik akımı üreten bir sıcaklık farkı oluşturmak için düzenlenmiş yarıiletken malzemelerden oluşur (Jiang vd. , 2020). TE elemanları ve bunları oluşturmak için kullanılan malzemeler arasındaki sıcaklık farkı, TEJ verimliliğinin ana belirleyicileridir. Artan verimlilikleri ve daha büyük sıcaklık farkları nedeniyle, TEJ'ler güç üretmenin güvenilir bir yöntemidir (Panbude & Veluswamy, 2023). TEJ'lerin çalışma prensibi, p-tipi ve n-tipi yarıiletkenlerden yapılmış iki bacaktaki elektron akışına dayanır ve bir elektrik akımı oluşturmak için zıt yönlerde hareket eder (Muhammad vd. , 2024). Etkili çalışma için, TEJ malzemeleri, TE elemanları arasındaki sıcaklık farkını korumak için düşük termal iletkenliğe sahip olmalıdır (Li vd. , 2021). TE sistemleri, ısıyı doğrudan güce dönüştürebilir veya gücü bir soğutma biçimine dönüştürebilir. Yüksek performanslı bir TE malzemesi, daha yüksek bir Seebeck katsayısına, artan elektrik iletkenliğine ve düşük termal iletkenliğe sahip olmalıdır. Bununla birlikte, tüm bu özellikleri aynı anda elde etmek, birbirine bağlı oldukları için zordur (Rathi vd. , 2024). Son on yılda, Organik Termoelektrik (OTE) malzemelerdeki gelişmeler, maksimum güç faktörü (PF) değerleri 70-2710 $mW \cdot m^{-1} \cdot K^{-2}$ arasında değişen birkaç potansiyel OTE malzemesinin keşfedilmesine yol açmıştır (Zhang vd. , 2014; Sanin-Villa, 2022).

Son yıllarda, OTE malzemeleri, geleneksel inorganik TE malzemelerine göre doğal faydaları nedeniyle büyük ilgi görmüştür. Organik malzemeler, özellikle iletken polimer malzemeler, ucuz, hafif, oldukça esnek ve imal edilmesi kolay olma gibi sayısız avantajları nedeniyle oldukça umut verici TE malzemeleridir (Panbude & Veluswamy, 2023). Poli (3,4-etilen dioksitiyofen) polistiren sülfonat (PEDOT: PSS), polipirol (Py),

poliasetilen (PA), polianilin (PANI) ve poli (3-heksiltiofen) (P3HT) gibi konjuge polimerler kapsamlı bir şekilde incelenmiş ve en kapsamlı şekilde araştırılan polimer TE malzemeleri olarak tanımlanmıştır (Hendricks vd. , 2022). Bununla birlikte, bu organik iletken malzemelerin, geleneksel inorganik malzemelere kıyasla zayıf elektriksel taşıma özellikleri nedeniyle bazı dezavantajları vardır. Elektron taşıma özelliklerini geliştirmek için grafen, iyi mekanik özellikleri, müreffeh elektronik durumu, geniş yüzey alanı, yüksek esnekliği, yüksek hareketliliği ve düşük yoğunluğu nedeniyle iletken konjuge polimerlerle hibritleştirilmiş bir doping maddesi olarak tercih edilir (Zhang vd. , 2014).

Grafen, son derece yüksek içsel taşıyıcı hareketliliğine sahip tek bir sp^2-hibritleştirilmiş karbon atomu katmanından oluşan tipik bir iki boyutlu (2D) malzemedir. Eşsiz dayanıklılık, hafif esneklik ve üstün termal tolerans kombinasyonu ile - toksik ödünleşimler olmadan - grafen, yeni nesil esnek termoelektrik cihazlar için bir oyun değiştiricidir (Zoui vd. , 2020). Son derece yüksek içsel taşıyıcı hareketliliği ile karakterize edilen elektriksel taşıma, ölçeklenebilir sentez, doping yoluyla özellik ayarlama ve termoelektrik özellikleri değiştiren veya işlevselleştiren nanoyapısal kusurları içerir. Grafenin deneysel güç faktörleri 6.93×10^3 ve 3.29×10^3 $mW \cdot m^{-1} \cdot K^{-2}$, sırasıyla p-tipi ve n-tipi doping için belirlenmiştir (Champier, 2017). Fulleren ile dekore edilmiş indirgenmiş grafen oksidin (rGO) PEDOT:PSS'ye dahil edilmesinin, nanohibrit dolgu maddesinin elektriksel iletkenliğini 7 kat artırarak 70.000 $S \cdot m^{-1}$'ye ulaştığı, termo-gücün ise dört kat arttığı gösterilmiştir (Jiang vd. , 2020). Termal iletkenlik de 0,2'den 2 $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$'e iyileştirildi. Elektron hareketliliğini ve ısı taşınımını etkileyen sınırlarındaki malzemeler arasındaki etkileşim, termoelektrik performansta iyileşmeye yol açan şeydir. Ayrıca, PEDOT:PSS-rGO kompozit filme ağırlıkça %2 rGO eklenmesi, güç faktörünü 2,03'ten 11,09 $mW \cdot m^{-1} \cdot K^{-2}$ aynı anda termal iletkenliği 0,24'ten 0,14 $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$'e düşürmüştür (Aridi vd. , 2021). Kompozitin düşük termal iletkenliği, bir fonon saçılma merkezi olarak işlev gören çok katmanlı gözenekli yapısına atfedilir (Jaziri vd. , 2020).

TEJ'ler için mevcut küresel pazar, bu araştırmanın arkasındaki önemli bir motive edici faktör haline geldi. Sürdürülebilirlik ve enerji verimliliğine artan küresel odaklanma, son zamanlarda yenilenebilir enerji teknolojilerine, özellikle de atık ısıyı kullanılabilir elektrik enerjisine dönüştürmeye büyük ilgi uyandırmıştır (Sun vd. , 2024). Atık ısıyı etkin bir şekilde kullanabilen ve elektriğe dönüştürebilen TEJ'ler, hem akademik hem de

endüstriyel sektörlerden artan ilgi görmüştür. Bu artan ilgi, büyük ölçüde geleneksel güç kaynaklarına olan bağımlılığı azaltmak ve çevresel etkileri en aza indirmek için daha temiz, daha verimli enerji çözümlerine duyulan ihtiyaçtan kaynaklanmaktadır. Özellikle imalat, otomotiv ve elektronik endüstrileri, daha katı çevre düzenlemelerini karşılamaya ve enerji maliyetlerini düşürmeye çalıştıkça, gelişmiş TEJ'lere olan talep önemli ölçüde artmıştır (Baskaran & Rajasekar, 2024). TEJ pazarının daha rekabetçi hale gelmesiyle birlikte, araştırmacıların TEJ'lerin küresel sahnede etkin bir şekilde rekabet etmelerini sağlayacak, daha iyi performans, daha düşük maliyetler ve daha fazla güvenilirlik sunacak şekilde yenilik yapmaları zorunlu hale gelmiştir.

Bu küresel pazar, gelişen bu pazar taleplerine yanıt olarak TEJ teknolojisinin geliştirilmesine katkıda bulunmayı amaçlayan mevcut çalışma için güçlü bir motivasyon sağladı. Bu araştırmanın temel amacı, TEJ'lerin verimliliğini ve performansını artırmak, böylece çok çeşitli uygulamalar için daha uygun bir seçenek haline gelebilmektir. Endüstriler, özellikle enerji yoğun süreçlerle uğraşanlar, çevresel sürdürülebilirliğe katkıda bulunurken operasyonel maliyetleri düşürmeye yardımcı olabilecek çözümler ararlar. TEJ'ler bu ihtiyaçları karşılama potansiyeline sahiptir, ancak yalnızca performansları önemli ölçüde iyileştirilir ve farklı çalışma koşulları için optimize edilirse. Bu araştırma, daha yüksek enerji dönüşüm verimliliği sağlayabilen, daha düşük maliyetlerle çalışabilen ve TEJ modüllerini optimize ederek uzun vadeli güvenilirlik sağlayabilen cihazlara yönelik kritik ihtiyacı ele almaktadır.

Ayrıca, bu araştırma, termoelektrik sistemleri ticari olarak daha uygulanabilir ve rekabetçi hale getirecek yeni bir yöntem ve yaklaşımı keşfetmeyi amaçlamaktadır. Bu çalışma, termoelektrik performansı iyileştirerek ve üretim maliyetlerini düşürerek sürdürülebilir enerji teknolojileri için büyüyen pazara önemli ölçüde katkıda bulunmayı amaçlamaktadır. Bu sistemleri yalnızca maksimum verimlilik için değil, aynı zamanda çeşitli endüstrilerde ölçeklenebilirlik ve uyarlanabilirlik için de optimize etmek çok önemlidir. Pazar ihtiyaçlarıyla bu uyum, bu araştırmayı küresel pazardaki termoelektrik teknolojilerin geleceği ile zamanında ve doğrudan ilgili hale getirir.

Tablo 1. Pedot:PSS Karşılaştırma Tablosu

Yıl	Araştırmacı(lar)	İşlem/Tedavi	Elektriksel İletkenlik (S/cm)	Seebeck Katsayısı (µV/K)	Sıcaklık Aralığı (°C)	Makale Adı
2020	Atoyo vd.	EMIM:TFSI + $NaBH_4$	1439	30–33	40–200+	Highly Conductive and Thermoelectric PEDOT:PSS Films Doped with Ionic Liquid and Reducing Agent
2023	Zhang vd.	HCl ile BST yıkama	Azaldı	Artış gözlendi	Oda sıcaklığı	Improved Seebeck Coefficient of PEDOT:PSS via Post-treatment with Hydrochloric Acid and BST Additives
2023	Salah vd.	Sn-doped CuI katkısı	1260	Belirtilmemiş	Oda sıcaklığı	Sn-doped CuI/PEDOT:PSS Composite for Thermoelectric Applications
2024	Osada vd.	Moleküler gerilim uygulanması	Belirtilmemiş	–2100 ila +3100	Belirtilmemiş	Giant Thermoelectric Response in Conducting Polymers under Molecular Strain
2025	Zhang vd.	Bi_2Te_3 katkısı	1467	Belirtilmemiş	300 K (yaklaşık 27°C)	Hybrid Bi_2Te_3–PEDOT:PSS Films for Enhanced Thermoelectric Performance

3. YÖNTEM

3.1 Borofenin Hazırlanması ve Karakterizasyonlarının Yapılması

Parçacık boyutu 1 μm olan bor mikropartiküller Nanografi firmasından satın alındı. Fiziksel eksfoliasyon işlemi için 18 Mohm dirençli deiyonize su kullanıldı. İzopropil alkol (IPA), N,N-Dimetilformamid (DMF) ve N-Metilpirolidon (NMP) Merck firmasından satın alındı. ZnO, Sigma Aldrich firmasından satın alındı. PEDOT: PSS Heraeus firmasından satın alındı.

100 mg bor mikropartikülleri, fiziksel eksfoliasyon işlemi sırasında oksitlenmeyi önlemek için nitrojen (N2) akışı kontrollü bir kabinde 4 saat boyunca 200 W'da 100 ml DMF içerisinde sonikasyona tabi tutuldu. Pul pul dökülen bor parçacıklarının çözeltisi sırasıyla 5000 rpm ve 12.000 rpm'de 15 dakika santrifüj edildi, daha sonra borofen dikkatlice toplandı ve vakumlu fırında 50 ◦C'de 4 saat kurutuldu.

Hazırlanan malzemelerin yapısal, morfolojik ve kimyasal analizleri, Yüksek Çözünürlüklü Transmisyon Elektron Mikroskobu (HRTEM) (JEOL JEM-ARM200CFEG UHR-TEM), X-Işını Kırınımı (XRD) (PAN analitik Xpert-Pro), Cu-Kα radyasyonu ile X-Işını Kırınımı (XRD) (PAN analitik Xpert-Pro) (λ = 1,5406 Å), Fourier Dönüşümlü Kızılötesi Spektroskopisi (FTIR) (Perkin Elmer, Spectrum Two, 4000 ile 500 cm−1 arasındaki frekanslar, 4 cm−1 ve 8 tarama çözünürlüğü), X-Işını Fotoelektron Spektroskopisi (XPS) (Al-Kα X-ray source Thermo ESCALAB 25) teknikleri kullanılarak yapıldı.

3.2 PEDOT:PSS:Borofen-ZnO Nanokompozitlerin Hazırlanması ve Karakterizasyonlarının Yapılması

Satın alınan sulu PEDOT: PSS çözeltisi kullanımdan önce filtrelendi. 50 ml PEDOT: PSS çözeltisine (hazır sulu çözelti satın alındı) 20 mg borofen eklendi ve 15 dakika boyunca 50 W'ta sonikasyona tabi tutuldu. 200 mg ZnO tozunun oda sıcaklığında 50 ml deiyonize su içinde çözülmesiyle ZnO çözeltisi hazırlandı. Hazırlanan malzemelerin yapısal, morfolojik ve kimyasal analizleri, Taramalı Elektron Mikroskobu (SEM, FEI FEG

QUANTA 450) ve FTIR (Perkin Elmer, Spectrum Two, 4000 ile 500 cm−1 arasındaki frekanslar, 4 cm−1 ve 8 tarama çözünürlüğü) teknikleri kullanılarak yapıldı.

3.3 Termoelektrik Jeneratör Test Sisteminin Kurulması

Tez kapsamında sıcaklık kontrol cihazı satın alındı ve termoelektrik jeneratör test sistemi kuruldu (Şekil 2). Hazırlanan termoelektrik jeneratör modülü, sıcaklık kontrollü metal blok üzerine yarı-yarıya yerleştirildi, modülün yarısı oda sıcaklığından 150 0C'ye ısıtılan metal blok üzerinde ve kalan diğer alt yarısı oda sıcaklığında olan boşluk üzerinde kaldı. Sıcak tarafın yani ısıtılan metal blok tarafın sıcaklığı, oda sıcaklığından 150 0C'ye kadar bir ısıtıcı ile değiştirildi. Termoelektrik jeneratörün sıcak ve soğuk taraflarının arayüzündeki sıcaklıklar, termal olarak iletken bir malzemeye bağlanmış Pt100 ile doğrudan ölçüldü. Termoelektrik jeneratörün sıcak ve soğuk tarafları arasındaki termovoltaj, GW Instek GDM83-51 cihazı ile modülden alınan iki Al kontak uçlarından ölçüldü. Test sisteminde kullanılacak yazılım MATLAB kullanılarak hazırlandı.

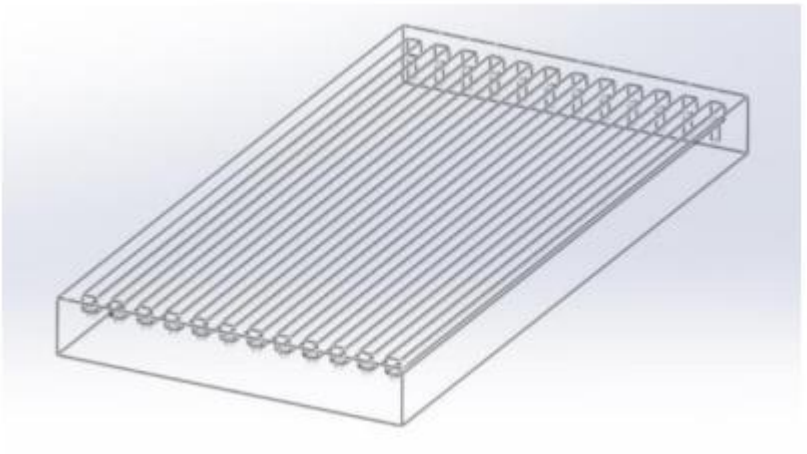
Araştırmalar, çoğu zaman, belli bir evrene (bütüne, ana kitleye) genellemek amacıyla, ondan yansızlık (random) kuralına göre seçilen "yeterince küçük "bir örnek grup (örneklem) üzerinde yapılır. Örneğin, altmış bin kişilik grubu ilgilendiren bir problem hakkında grup üyelerinin görüşleri belirlenmek istendiğinde, aralarından yansız olarak seçilmiş bin kişinin görüşleri alınmakla yetinilebilir. Burada, altmış bin kişilik grup evren, bin kişilik grup ise örneklem olarak adlandırılır.



Şekil 2. Termoelektrik jeneratör modül test sistemi.

3.4 PEDOT:PSS:Borofen P-N Eklem Termoelektrik Jeneratörlerin Hazırlanması ve Termoelektrik Testlerin Yapılması

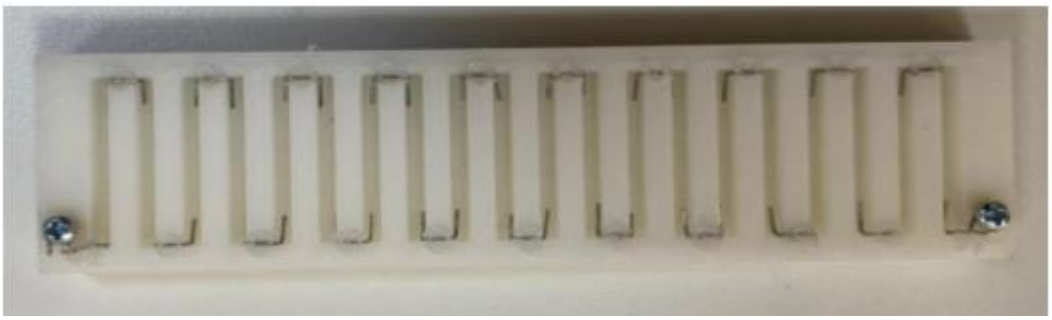
TEJ modülü alt tabanı, bir 3D yazıcı kullanılarak 10 adet p-n elektrot kanalı oluşturularak hazırlanmıştır. pn elektrotları arasındaki eklemleri kurmak için bakır tel kullanılmıştır. Elektrotlar, 22 mm uzunluğunda, 3 mm genişliğinde ve 2 mm derinliğinde olan TEJ modülü alt tabanı içinde hazırlandı (Şekil 3). Literatüre göre borofen, p-tipi bir yarıiletken malzemedir. ZnO, uygun maliyetli ve optimal n-tipi elektrot performansı gösteren, çözelti ile işlenebilir bir malzeme olduğu için tüm çalışmalarda n-tipi elektrot olarak kullanılmıştır (Zhang, Z., Penev, E. S., & Yakobson, B. I.,2016). Bu, p-tipi elektrotların karşılaştırmalı bir değerlendirmesine izin verdi.



Şekil 3. 3 Boyutlu yazıcıda basılan modül alt tabanının tasarımı

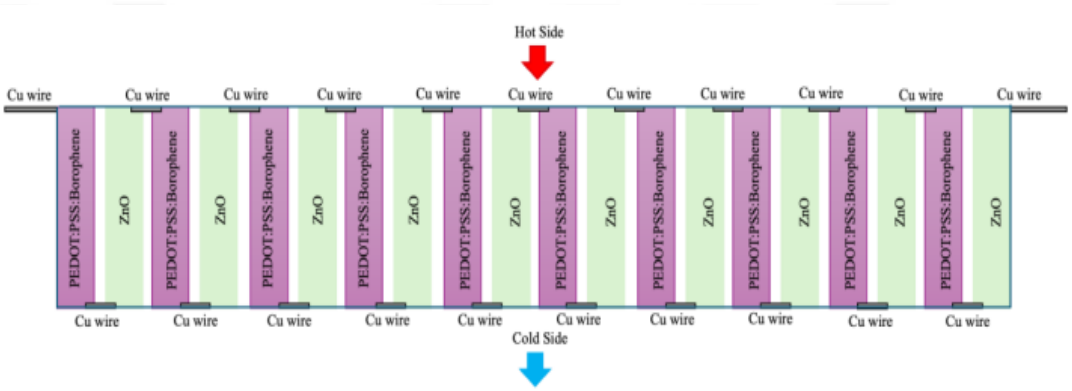


Şekil 4. 45 mm boy x 3,2 mm genişlik x 2 mm derinlik olan modül alt tabanı



Şekil 5. 22,5 mm boy x 3,2 mm genişlik x 2 mm derinlik olan modül

PEDOT:PSS: Borofen-ZnO termoelektrik jeneratör modülünün şematik gösterimi Şekil 6'da verilmiştir.



Şekil 6. PEDOT:PSS: Borofen-ZnO termoelektrik jeneratör modülünün şematik gösterimi

PEDOT: Saf halde ve borofen ile birleştirilmiş bir p-tipi yarıiletken polimer olan PSS, ptipi elektrotları hazırlamak için kullanılırken, n-tipi elektrotları hazırlamak için bir ZnO çözeltisi kullanıldı. PEDOT: PSS, PEDOT:PSS:Borofen ve ZnO, TEJ modülünün kanallarına damlatılarak dolduruldu ve modül içinde PEDOT:PSS, PEDOT:PSS:Borofen ve ZnO elektrotları oluşturuldu. PEDOT: PSS-ZnO eklem TEJ'leri ve PEDOT: PSS: Borofen-ZnO eklem TEJ'leri farklı elektrot kalınlıkları (5, 10 ve 20 μm) ile hazırlandı. Daha sonra PEDOT:PSS, PEDOT:PSS:Borofen ve ZnO içeren TEJ modülü vakumlu fırına konuldu ve 90°C'de 30 dakika kurutuldu. Bakır (Cu) teller, p-tipi ve n-tipi kanallar arasında temas kurmak ve bir p-n eklemsı oluşturmak için modüle önceden monte edildiğinden, modül test sistemine yerleştirildi ve bu işlemden sonra değerlendirildi.

Hazırlanan TEJ modülleri, yarısı sıcaklık kontrollü metal bir blok üzerinde, diğer yarısı ise oda sıcaklığında kalacak şekilde ayarlandı. Modül boyunca bir sıcaklık gradyanı oluşturmak için metal blok 25°C'den 150°C'ye ısıtıldı. Bir ısıtıcı kullanılarak, ısıtılmış metal bloğa karşılık gelen sıcak taraftaki sıcaklık 25 °C'den 150 °C'ye değiştirildi. TEJ'lerin sıcak ve soğuk taraflarının arayüzündeki sıcaklıklar, termal olarak iletken bir malzemeye bağlı bir Pt100 sensörü kullanılarak doğrudan ölçüldü. Sıcak ve soğuk taraflar arasındaki termovoltaj, GW Instek GDM83-51 cihazı kullanılarak modüle bağlı iki alüminyum kontak ucu aracılığıyla kaydedildi. Test sistemi yazılımı MATLAB yazılımında geliştirilmiştir.

3.5 Verilerin Çözümlenmesi ve Yorumlanması

Toplanan ham veriler, deneysel ve teorik modelleme süreçlerinde kullanılan farklı tekniklerle analiz edilmiştir. Deneysel verilerin çözümlenmesinde, her bir polimerborofen nanokompozitin elektriksel ve termal iletkenlik özellikleri ile Seebeck katsayıları 17 analiz edilmiştir. Verilerin çözümlenmesinde, istatistiksel analizler yapılmış ve her bir nanomalzemenin termoelektrik performansı, karşılaştırmalı olarak değerlendirilmiştir. Sonuç olarak, elde edilen verilerin çözümlenmesi ve yorumlanması, önerilen tez hedeflerine ulaşmada kritik bir rol oynayacak ve araştırmanın sonuçlarının enerji teknolojilerine olan katkısı net bir şekilde ortaya konulmuştur.

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

Raporun bu bölümü elde edilen sonuç anlamında “bulgular ve yorumlar” için ayrılır. Bu bölüm her araştırmaya özgü ayrı bir yapıya sahiptir; o kadar ki araştırma raporlarının farklı altbölümlere sahip tek bölümüdür denilebilir. Bulgular ve yorumlar şemsiye başlıkları dışında verilenler, tümü ile araştırmaya özgü başlıklar ve temsil ettikleri bilgi kümeleridir. Burada, giriş cümlesi olarak, bölümde yer alan bilgilere (başlıklara) yer verilir. Örneğin: “Bu bölümde, önce araştırmanın amaçlarını yansıtan belli başlıklar halinde, elde edilen bulgulara; sonra onların kümeler ve bütün halinde anlamlandırılmaya çalışıldığı yorumlara yer verilmiştir” gibi.

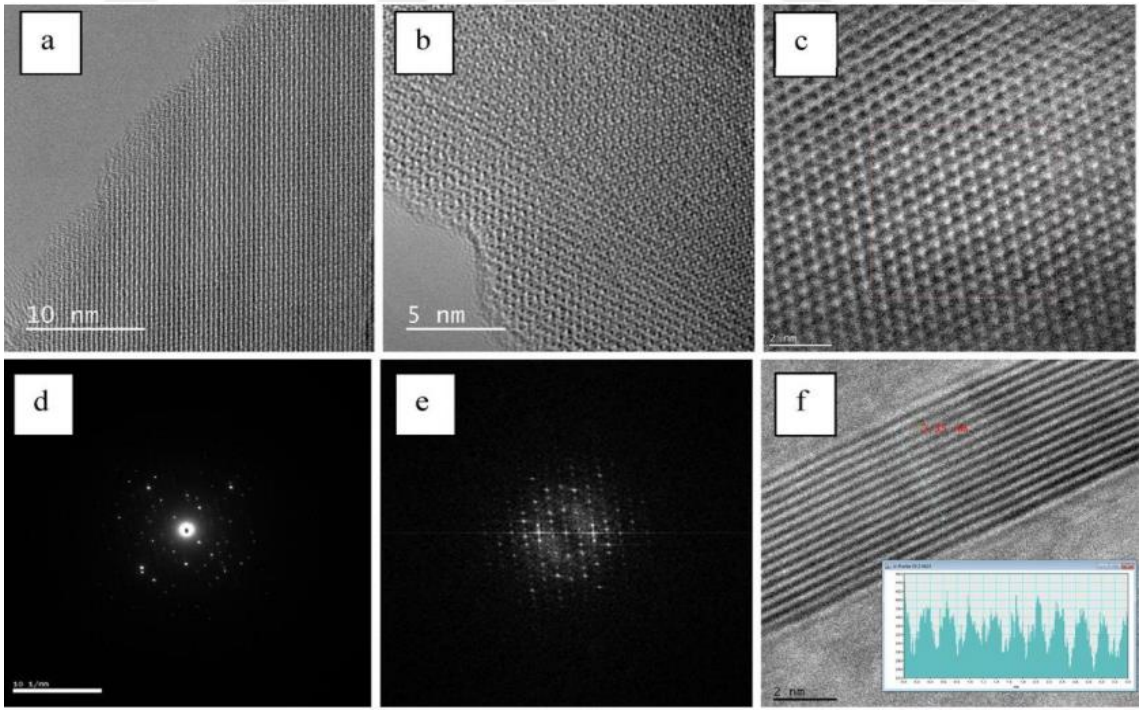
4.1 Bulgular

4.1.1 Hazırlanan borofenin karakterizasyon sonuçları ve tartışmalar

Hazırlanan borofen katmanları arasındaki morfoloji, d-aralığı ve mesafe, Seçilen Alan Elektron Kırınımı (SAED) analizi, Hızlı Fourier Dönüşümü (FFT) analizi ve profil analizi ile HRTEM ile analiz edildi. Hazırlanan borofenin HRTEM görüntüleri, SAED deseni ve FFT deseni Şekil 7'de verilmiştir. Serbest duran borofen nano tabakaları Şekil 7(a)-(b)'de görülmektedir. Altıgen petek kafesi Şekil 7(c)-(e)'den görülmektedir. Bu sonuçlar borofenin imzasıdır. Çok katmanlı borofen nanotabakaları, Şekil 7(f)'deki profil görüntüsünden görülmektedir. Borofen nanotabakanın kalınlığı yaklaşık 0,3 nm'dir ve iki borofen nanotabaka arasındaki mesafe yaklaşık 0,3 nm'dir. HRTEM analizinde, DMF'de bağımsız borofen nano tabakaları gözlendi. FFT desenlerinin, her biri altıgen simetride düzenlenmiş altı nokta içeren farklı nokta dairelerinden oluştuğu gözlemlendi. Hazırlanan borofen nanosheet, 0.41 nm d aralığına sahip kristal bir yapıya sahiptir. Bor en basit bor polimorfudur, her birim hücrede yalnızca 12 atom vardır. Bor atomları ikosahedranın her bir köşesinde bulunur ve ikosahedra komşularına altı-iki merkez bağıyla bağlanarak bir eşkenar dörtgen kafes oluşturur. Bor, düşük konsantrasyonda yapısal düzensizliğe, arayerlere ve boşluklara sahiptir. Borofenin iki boyutlu (2D) doğasına uygun olarak, HRTEM sonuçları, katmanlı ve dalgalı bir yüzeye sahip ayrı borofen nanotabakaları göstermektedir. Değişen kalınlıktaki bölgeler, borofen tabakalarının homojenliğini veya

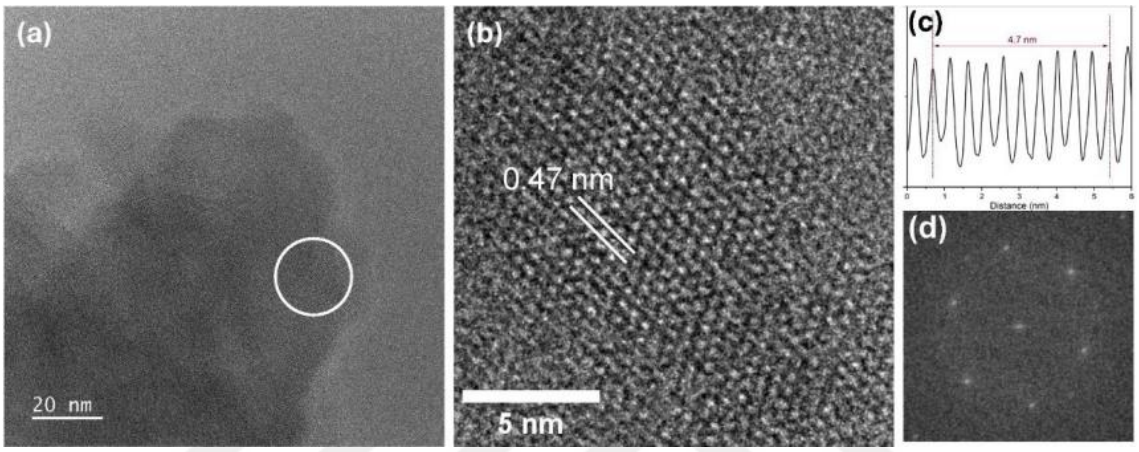
potansiyel katlanmasını gösterebilen keskin zıt dalgalanmalarla gösterilir. Borofenin yüksek kaliteli sentezi, nispeten pürüzsüz kenarlarla karakterize edilir. Geliştirilen malzemenin olağanüstü kalitesi, 2D borofen tabakası içindeki atomik sütunlarla eşleşen parlak noktaların periyodik olarak düzenlenmesi ile doğrulanır. Ayrıca, atomik sıraların homojenliği ve düzenliliği ile gösterildiği gibi, taranan bölgede kayda değer bir kusur veya sapma yoktur.

Borofenin kristal yapısının daha fazla kanıtı, SAED modelinden gelir. Malzemenin kristal doğası, oldukça düzenli bir atom düzenlemesi gösteren ayrık kırınım noktalarının varlığı ile doğrulanır. Oryantasyon ve kafes yapısı, kırınım noktalarının simetrisi ve düzenlemesinden çıkarılabilir. Desene göre, borofen, farklı atomik konfigürasyonlara sahip iki boyutlu malzemeler için yaygın olan, altıgen veya yalancı altıgen olan bir kafes simetrisine sahiptir. Borofenin spesifik kristalografik yönelimleri veya fazları, atomik düzlemlerin kırınıma katkısındaki değişiklikleri ortaya çıkarabilen lekelerin parlaklığı incelenerek belirlenebilir. Hazırlanan borofenin mükemmel kristalliği ve yapısal bütünlüğü, elektronik, enerji depolama ve katalizde kullanımları için gerekli olan bu SAED modeli tarafından desteklenir.



Şekil 7. Hazırlanan borofenin (a)-(b) HRTEM görüntüleri, (c) yüksek büyütmeli HRTEM görüntüsü, (d) SAED deseni, (e) FFT deseni ve (f) profili

Tekrarlanabilirlik için yeniden aynı prosesle borofen hazırlanıp karakterizasyonlar tekrarlandığında aynı sonuçlar elde edildi (Şekil 8). Hazırlanan borofenin yüksek çözünürlüklü TEM (HRTEM) görüntüleme (Şekil 8b ve f) ve karşılık gelen hızlı Fourier dönüşümü (FFT) (Şekil 8d ve h) kırınım desenleri kristalin doğasını doğrulamaktadır. Borofen için d-aralığı, HRTEM görüntülemenin (Şekil 8c) kafes saçaklarından ve karşılık gelen FFT kırınım deseninden (Şekil 8d) sırasıyla 0,47 nm ve 0,48 olarak hesaplanmıştır. Sonuçlar, β-rombohedral B yapısının (104) düzlemine karşılık gelir.



Şekil 8. Tekrar hazırlanan borofenin (a) TEM görüntüsü, (b) HRTEM görüntüsü, (c) profili, (d) FFT deseni.

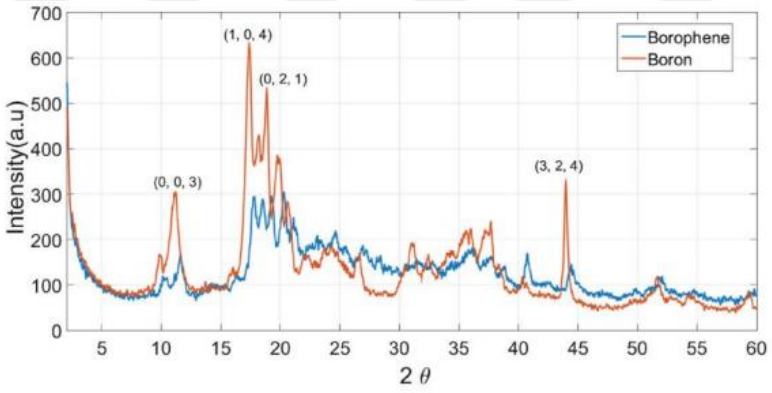
Bor mikropartiküllerinin ve hazırlanan borofenin XRD, FTIR ve XPS analiz sonuçları Şekil 8'de gösterilmektedir. Borofenin XRD pikleri, öncü bor mikropartiküllerinin benzer karakteristik zirvelerine sahipti. Bor mikropartikülleri ve hazırlanan borofen nanotabakaları aynı brombohedral kristal yapıya sahipti. Borofenin XRD modeli, borofenin HRTEM analizi ile uyumluydu. Analiz, PDF31-0207 kartına göre (birim hücre parametreleri: a = 10,925 A˚, b = 10,925 A˚ ve c = 23,814 A˚). XRD desenleri, R-3m (No. 166) uzay grubuyla sentrosimetrik b-eşkenar dörtgen borofen kristal yapısına endekslendi (Şekil 8a).

FTIR sonuçlarına göre Borofenin karakteristik pikleri 2968 cm^{-1}'de gözlenmiştir. (B-B), 2938 cm^{-1} (B-H), 1424 cm^{-1} (B-H), 1263 cm^{-1} (B-O), 1015 cm^{-1} (B – O – B titreşimleri) ve 541 cm^{-1} (sp2 bağlı h) -BN) (Şekil 8b).

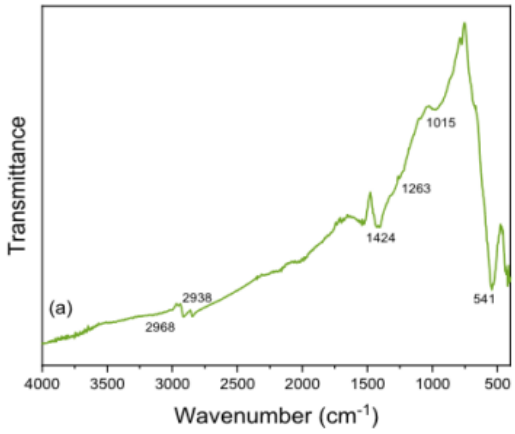
Borofenin enerji bant aralıklarını belirlemek için ultraviyole görünür (UV-Vis) dağınık yansıma spektroskopisi yapılmıştır. Toplanan verileri dönüştürmek için Kubelka–Munk eşitliği (2.1) uygulanır:

$$F(R) = \frac{(1-R)^2}{2R} \tag{2.1}$$

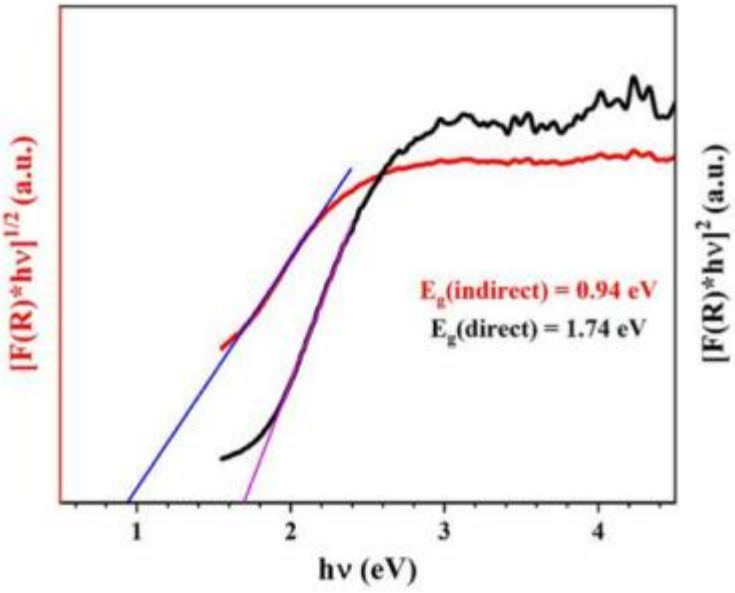
R, dağınık yansıma ölçümlerinden elde edilen dağınık yansıma değerini temsil eder. Hazırlanan borofenin hem doğrudan hem de dolaylı bant aralığı geçişlerini tahmin etmek için Kubelka-Munk fonksiyonunun Tauc grafiği kullanılmıştır. Hazırlanan borofenin hesaplanan bant aralığı enerjileri sırasıyla dolaylı ve doğrudan geçiş bant aralıkları için 0,94 eV ve 1,74 eV'dir (Şekil 9c).



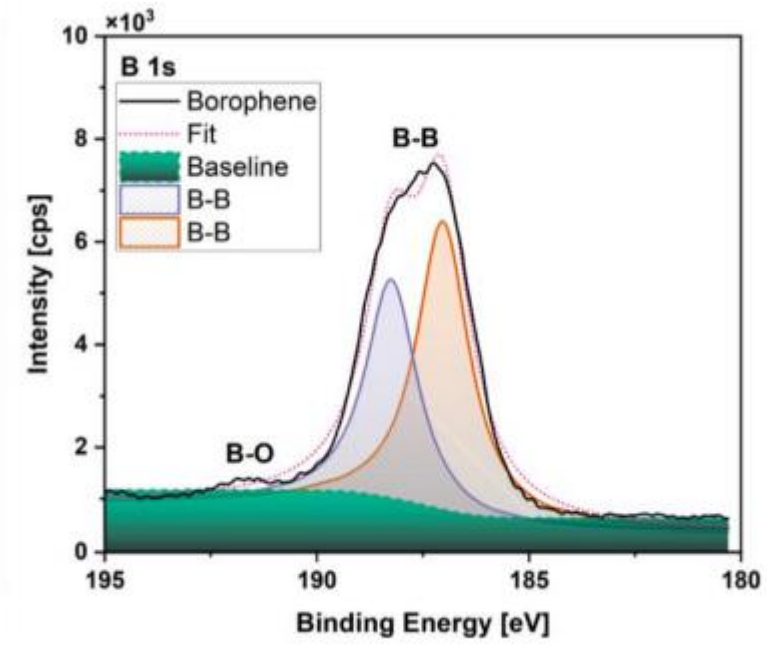
(a)


Transmittance
(a)
2968
2938
1424
1263
1015
541
4000
3500
3000
2500
2000
1500
1000
500
Wavenumber (cm-1)

(b)


[F(R)*hν]1/2 (a.u.)
[F(R)*hν]2 (a.u.)
Eg(indirect) = 0.94 eV
Eg(direct) = 1.74 eV
1
2
3
4
hν (eV)

(c)



(d)

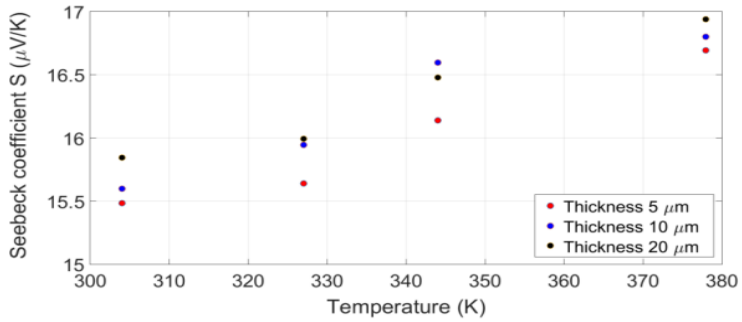
Şekil 9. Hazırlanan borofenin (a) XRD, (b) FTIR, (c) Tauc, (d) XPS grafikleri.

Borofenin yüzey bileşimleri ve kimyasal durumları XPS spektrumları kullanılarak incelendi ve bağlanma enerjisi kalibrasyonu 284,6 eV'de C 1s'ye referanslandı (Şekil 9d). XPS taraması spektrumları, sentezlenen filmlerin yüzeylerinin hava maruziyetinden dolayı sadece eser miktarda karbonla temiz olduğunu göstermektedir. Şekil 9d, Borofen için, bor 1s sinyalini ve ayrıca karbon 1s ve O 1s tepelerini gösterir. Bor 1s sinyalinde üç tepe çözülebilir, 191.60, 188.25 ve 187.03 eV, çeşitli kimyasal ortamlara sahip üç tip bor atomunu gösterir. Toplu bordaki bor 1s tepesinin bağlanma enerjisi 189.4 eV olduğundan, toplu değere kıyasla hafifçe kırmızıya kaymış olan daha düşük bağlanma enerjilerindeki (188.25 ve 187.03 eV) iki tepe muhtemelen 2D sentezlenmiş borofen tabakalarındaki B–B bağlarına atfedilir. Buna karşılık, daha yüksek enerjili tepe noktası (191,60 eV) bor oksidasyonu ile ilişkilidir ve B-O tepe noktasının B-B tepe noktasına ölçülen alan oranı oldukça ihmal edilebilir düzeydedir, bu da çoğu bor atomunun oksitlenmemiş kaldığını gösterir. İki B–B tepe noktası (188,25 ve 187,03 eV), 2D borofen tabakalarında farklı kimyasal ortamlara sahip iki tip bağlanma yapısı ile açıklanabilir. Sonuç olarak, sentezlenen 2D malzemelerin XPS analizi, minimum kontaminasyona sahip temiz

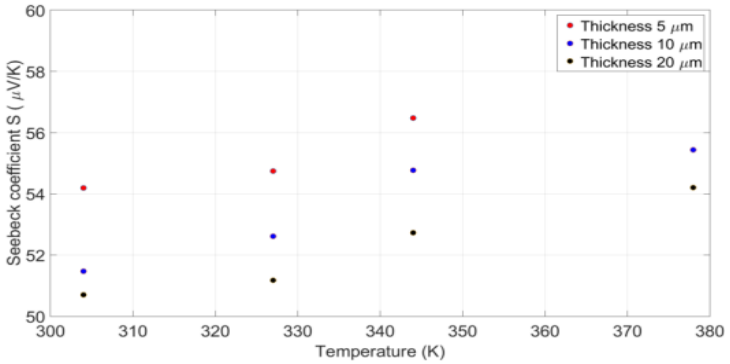
yüzeyler ortaya koyuyor. Borofen, iki farklı B-B bağlayıcı ortama sahip oksitlenmemiş bor gösteriyor.

4.2 Hazırlanan PEDOT:PSS:Borofen Nanokompozitin Karakterizasyon Sonuçları ve Tartışmalar

PEDOT:PSS-ZnO eklem TEJ ve PEDOT:PSS:Borofen-ZnO eklem TEJ için Seebeck katsayısının sıcaklık ve kalınlık bağımlılığı **Şekil 10**'da gösterilmiştir. OTEJ modülünün elektrotlarının kalınlığından bağımsız olarak, elektrotlardaki yük taşıyıcı difüzyonu arttığı için sıcaklık arttıkça elektrot malzemelerinin Seebeck katsayısı artmıştır. Elektrot malzemelerinin Seebeck katsayısı, sıcaklık arttıkça artmıştır, çünkü elektrot malzemelerinin filmleri içindeki arayüzlerde ve sınırlarda yük taşıyıcıların saçılması artmıştır. PEDOT:PSS:Borofen-ZnO eklem TEJ'sinde, daha kararlı yük taşıyıcı dinamiği, daha iyi yapısal bütünlük ve borofen ilavesiyle azaltılmış saçılma kayıplarının avantajları nedeniyle daha yüksek Seebeck katsayıları elde edildi.



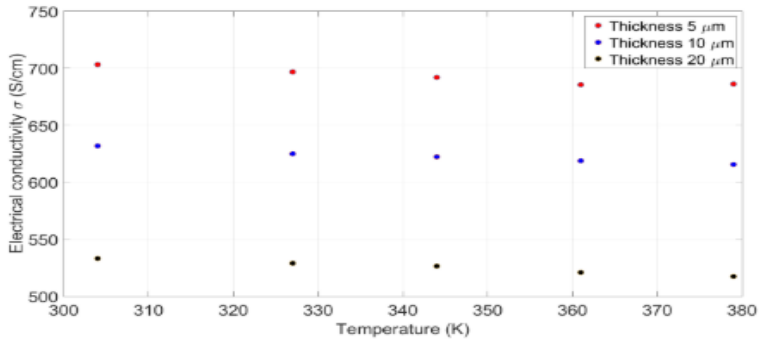
(a)



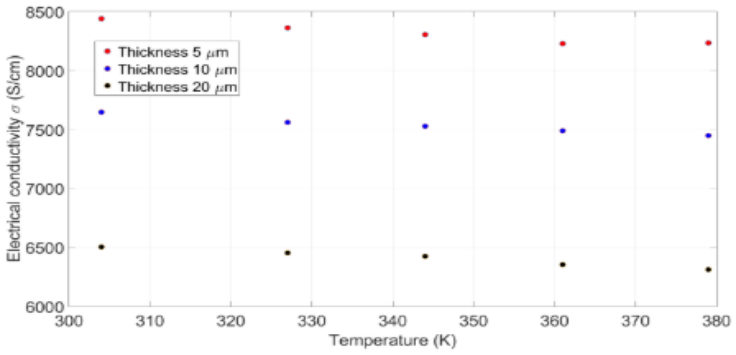
(b)

Şekil 10. PEDOT:PSS-ZnO ve (b) PEDOT: PSS: Borofen-ZnO Seebeck katsayısı-sıcaklık ilişkisi.

PEDOT: PSS-ZnO eklem TEJ ve PEDOT: PSS: Borofen-ZnO eklem TEJ için elektriksel iletkenliğin sıcaklık ve kalınlık bağımlılığı sırasıyla Şekil 11'da gösterilmektedir. Elektrot malzemelerinin filmlerinin kalınlığı arttırıldığında, yük taşıyıcıların hareketinin kısıtlanması ve yüzey etkilerinin artması nedeniyle daha düşük elektrik iletkenliği ölçülmüştür. Bununla birlikte, yük taşıyıcıların hareketliliği artmış ve böylece PEDOT:PSS:Borofen elektroduna borofen ilavesi sayesinde elektrotun elektriksel iletkenliği artmıştır



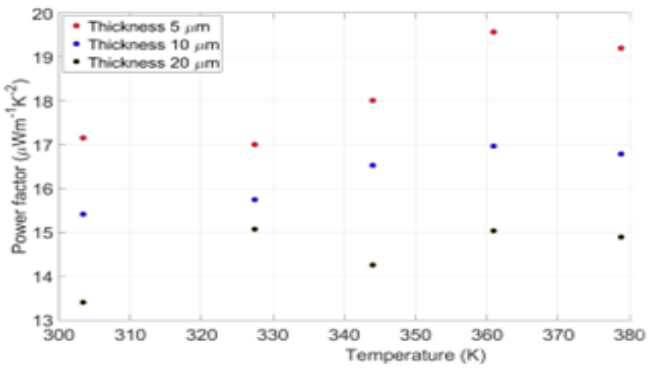
(a)



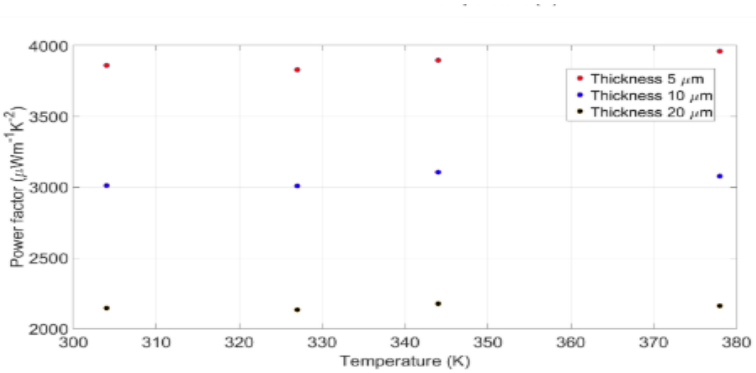
(b)

Şekil 11. PEDOT:PSS-ZnO ve (b) PEDOT: PSS: Borofen-ZnO elektriksel iletkenlik-sıcaklık ilişkisi.

PEDOT: PSS-ZnO eklemsı TEJ ve PEDOT: PSS: Borofen-ZnO eklemsı TEJ'nin güç faktörünün sıcaklık ve kalınlık bağımlılığı sırasıyla Şekil 12'de gösterilmiştir. Elektriksel iletkenlik ve Seebeck katsayısının etkileri nedeniyle, daha ince elektrotlarda daha büyük güç faktörü elde edildi. Ayrıca, düşük elektrik iletkenliği ve oda sıcaklığında Seebeck katsayıları nedeniyle oda sıcaklığında düşük güç faktörleri gözlenmiştir. Seebeck katsayısı artan sıcaklıkla arttığından ve elektriksel iletkenlik sıcaklıkla birlikte biraz azaldığından, güç faktörü artan sıcaklıkla artmıştır. Borofen ilavesi elektrot yapısının yapısal mukavemetini arttırdığından ve yük taşıyıcı saçılımı azaldığından, tüm sıcaklık ölçümlerinde PEDOT:PSS:Borofen elektrot için PEDOT:PSS elektroda göre daha yüksek güç faktörü elde edilmiştir.



(a)



(b)

Şekil 12. PEDOT:PSS-ZnO ve (b) PEDOT: PSS: Borofen-ZnO güç faktörü-sıcaklık ilişkisi.

Bu tezde, termoelektrik performanslarını daha iyi anlamak için PEDOT:PSS:Borofen-ZnO eklem TEJ'in termoelektrik özellikleri araştırılmıştır.

PEDOT: PSS matrisinin termoelektrik özellikleri, malzemenin etkili enerji dönüşüm uygulamaları için potansiyelini vurgulayan 2D borofen ilavesiyle önemli ölçüde geliştirilmiştir. Tek başına PEDOT: PSS ile karşılaştırıldığında, 2D borofen, artan güç faktörü, elektriksel iletkenlik ve Seebeck katsayısı dahil olmak üzere net faydalar gösterdi ve bu da onu organik termoelektrik cihazlar için umut verici bir seçenek haline getirdi. Deneysel sonuçlar, borofenin yapısal bütünlüğünden kaynaklanan gelişmiş taşıyıcı difüzyonu ve kararlı taşıyıcı dinamiklerinin, PEDOT:PSS:Borofen elektrotlarının Seebeck katsayısının sıcaklıkla artmasına neden olduğunu göstermiştir. Geleneksel PEDOT: PSS sistemlerinin aksine, bu kararlılık saçılma kayıplarını azalttı. Ayrıca, yük taşıyıcı hareketliliğini artırarak ve yüzey saçılmasını azaltarak, borofen, özellikle daha kalın elektrotlarda elektrik iletkenliğini artırdı. Bu sonuçlar, borofenin organik termoelektriklerin performansını nasıl iyileştirebileceğini göstermektedir.

Bu çalışmanın birincil bulgusu, elektrot kalınlığı ve sıcaklık ile güç faktörü arasındaki ilişkinin belirlenmesidir. Artan elektriksel iletkenlikleri ve Seebeck katsayıları nedeniyle, PEDOT: PSS: Borofen kompozitleri, tek başına PEDOT: PSS ile karşılaştırıldığında gelişmiş güç faktörleri göstermiştir. Bu model, tüm sıcaklık aralıkları için geçerliydi, bu da taşıyıcı hareketliliğinin termal olarak aktive edildiğini ve iyi tasarlanmış malzeme arayüzlerinin sınır saçılmasını en aza indirmek için ne kadar önemli olduğunu vurguladı. Termoelektrik performansı en üst düzeye çıkarmada elektrot kalınlığının önemi çalışma ile vurgulandı. Yüzey etkilerini ve dispersiyonu azaltarak, daha kalın elektrotlar güç faktörlerini ve taşıyıcı hareketliliğini artırdı. PEDOT: PSS: Borofen kompozitleri, olağanüstü termal dirençleri ve yapısal kararlılıkları nedeniyle yüksek performanslı uygulamalar için mükemmeldir. PEDOT: PSS matrisinin borofen içermesi, sofistike organik termoelektrik malzemeler için yeni olanaklar sunar. PEDOT: PSS ve PEDOT: PSS: Borophene malzemelerinin karşılaştırılması, PEDOT: PSS: Borophene malzemesinin güç faktörü, elektriksel iletkenlik ve Seebeck katsayısı açısından sürekli olarak öncekinden daha iyi performans gösterdiğini ortaya koydu. Bu

geliştirmeler, termal iletkenliği azaltan ve yük transferini teşvik eden nano ölçekte PEDOT: PSS ve borofen arasındaki etkileşimlerle ortaya çıkar. Bulgular, borofenin organik termoelektrikler için yararlı ve çevre dostu bir malzeme olarak vaadini desteklemektedir ve önceki araştırmalarla tutarlıdır. Sonuç olarak, borofenin PEDOT: PSS'ye dahil edilmesi, organik termoelektriklerde kayda değer bir gelişmeyi temsil etmektedir. Bu yenilikçi kompozitin gelişmiş termoelektrik performansı, enerji dönüşüm uygulamaları için vaadini göstermektedir. Yüksek performanslı organik termoelektrik cihazlar için bu çalışma, malzeme tasarımı ve optimizasyon teknikleri hakkında kapsamlı bilgiler sağlar. Sürdürülebilir ve verimli enerji çözümlerine olan talep geliştikçe, PEDOT: PSS: Borofen kompozitleri, termoelektrik teknolojide gelecekteki ilerlemeler için kapıyı açarak, bu hedeflere ulaşmak için potansiyel bir yol sunmaktadır.

5. SONUÇ ve ÖNERİLER

PEDOT: PSS: Borofen-ZnO P-N eklem TEJ'de, özellikle 5 μm kalınlığındaki TEJ yapısında, 350-380 K aralığında güç faktörünün 3000-4000 $\mu Wm^{-1}K^{-2}$ seviyelerine ulaştığı görülmektedir. Bu, malzemenin ince film formunda yüksek termoelektrik verimlilik sergilediğini göstermiştir. Ancak, kalınlık arttıkça performansın düşmesi, malzemenin optimal termoelektrik özelliklerinin ince yapılar için daha uygun olduğunu göstermiştir.

PEDOT: PSS: Borofen-ZnO P-N eklem TEJ'in, özellikle ince film uygulamaları için yüksek güç faktörü sunduğu ve düşük-orta sıcaklık aralığında (300-380 K) etkili olduğu sonucuna ulaşılmıştır. Bu TEJ, esnek ve hafif malzeme gerektiren uygulamalarda (giyilebilir termoelektrik jeneratörler gibi) avantaj sağlayabilir.

Tez çıktıları aşağıda sıralanmıştır:

Borofen toz; PEDOT:PSS:Borofen-ZnO nanokompozit ve PEDOT:PSS:Borofen-ZnO TEJ modül.

Tezin sonunda, SCI-E indeksli dergiye aşağıda bilgileri verilen yayın taslağı gönderilmiştir:

"Performance of the PEDOT: PSS: Borophene-ZnO Junction Thermoelectric Generator".

Rumeysa Ayşenur Toker, Aysu Şahin, Nevin Taşaltın, Selcan Karakuş, Shoaib Khanmohammadi, Sajjad Khanjani, Gülsen Baytemir, Bahriye Karaca. Inorganic Chemistry Communications dergisine (Q1 dergi) Mart 2024 tarihinde gönderildi, hakem değerlendirme aşamasında.

İleriki çalışmalarda, düşük sıcaklıklarda çalışan kompakt ve esnek termoelektrik jeneratörler geliştirilmek amaçlanırsa PEDOT: PSS: Borofen-ZnO P-N eklem TEJ daha kullanışlı olacaktır.

KAYNAKÇA

Aich, R. B.; Blouin, N.; Bouchard, A.; Leclerc, M. 2009. "Electrical and thermoelectric properties of poly(2,7-carbazole) derivatives" *Chemical Materials,* 21, 751–757.

Anthony, J. E.; Facchetti, A.; Heeney, M.; Marder, S. R.; Zhan, X. 2010. "n-Type organic semiconductors in organic electronics", *Advanced Materials,* 22, 3876–3892.

Aridi, R.; Faraj, J.; Ali, S.; Lemenand, T.; Khaled, M. 2021. "Thermoelectric power generators: state-of-the-art, heat recovery method, and challenges*", Electricity,* 2(3), 359-386.

Baskaran, P.; Rajasekar, M. 2024. "Recent trends and future perspectives of thermoelectric materials and their applications", *RSC Adv,* 14(30), 21706–44.

Bharti, M.; Singh, A.; Debnath, A. K.; Chauhan, A. K.; Muthe, K. P.; Gupta, S. K.; vd. 2021. "Anionic conduction mediated giant n-type Seebeck coefficient in doped Poly (3-hexylthiophene) free-standing films", *Materials Today Physics,* 16, 100307.

Bubnova, O.; vd. 2011. "Optimization of the thermoelectric figure of merit in the conducting polymer poly(3,4-ethylenedioxythiophene)", *Nature Materials,* 10, 429–433.

Bubnova, O.; vd. 2014. "Semi-metallic polymers", *Nature Materials,* 13, 190–194.

Cahill, D. G. vd. 2013. "Nanoscale thermal transport", *Journal of Applied Physics*, 93, 793-818.

Champier, D. 2017. "Thermoelectric generators: a review of present and future applications", In 3rd International Congress on Energy Efficiency and Energy Related Materials (ENEFM2015) Proceedings, Oludeniz, Turkey, 19–23 October 2015 (pp. 203-212). *Springer International Publishing.*

Chen, B.; Xu, J. H.; Uher, C. vd. 1997. "Low-temperature transport properties of the filled skutterudites CeFe4−xCoxSb12s", *Physical Review B,* 55(3), 1476-1480.

Coropceanu, V. vd. 2007. “Charge transport in organic semiconductors”, *Chemical Reviews,* 107, 926–952.

Donald, D. K. C. M. 1962. Thermoelectricity: An Introduction to the Principles. *John Wiley & Sons*.

Fabretto, M. V. vd. 2012. “Polymeric material with metal-like conductivity for next generation organic electronic devices”, *Chemical Materials,* 24, 3998–4003.

Feng, Y.; Jiang, X.; Ghafari, E.; Kucukgok, B.; Zhang, C.; Ferguson, I.; Lu, N. 2018. “Metal oxides for thermoelectric power generation and beyond”, *Advanced Composites and Hybrid Materials*, 1, 114-126.

Girard, S. N.; He, J.; Li, C. vd. 2010. “In situ nanostructure generation and evolution within a bulk thermoelectric material to reduce lattice thermal conductivity”, *Nano Letters*, 10(8), 2825–2831.

Glaudell, A. M.; Cochran, J. E.; Patel, S. N.; Chabinyc, M. L. 2015. “Impact of the doping method on conductivity and thermopower in semiconducting polythiophenes”, *Advanced Energy Materials,* 5.

Goldsmid, H. J. 1958. “The electrical conductivity and thermoelectric power of bismuth telluride”, *Proceedings of the Physical Society,* 71, 633–646.

Heeger, A. J. 2001. “Semiconducting and metallic polymers: the fourth generation of polymeric materials†”, *The Journal of Physical Chemistry B,* 105, 8475–8491.

Hendricks, T.; Caillat, T.; Mori, T. 2022. “Keynote Review of Latest Advances in Thermoelectric Generation Materials. *Devices, and Technologies.”*

Hicks, L. D.; Dresselhaus, M. S. 1993. “Effect of quantum-well structures on the thermoelectric figure of merit”, *Physical Review B,* 47(19), 12727–12731.

Hwang, S.; Potscavage Jr, W. J.; Nakamichi, R.; Adachi, C. 2016. “Processing and doping of thick polymer active layers for flexible organic thermoelectric modules”, *Organic Electronics,* 31, 31-40.

Jaziri, N.; Boughamoura, A.; Müller, J.; Mezghani, B.; Tounsi, F.; Ismail, M. 2020. “A comprehensive review of Thermoelectric Generators: Technologies and common applications”, *Energy reports,* 6, 264-287.

Jiang, Q.; Yang, J.; Hing, P.; Ye, H. 2020. “Recent advances, design guidelines, and prospects of flexible organic/inorganic thermoelectric composites”, *Materials Advances,* 1(5), 1038-1054.

Kaiser, A. B. 1989. “Thermoelectric-power and conductivity of heterogeneous conducting polymers”, *Physical Review B,* 40, 2806–2813.

Kang, Y. H.; Ko, S. J.; Lee, M. H.; Lee, Y. K.; Kim, B. J.; Cho, S. Y. 2021. “Highly efficient and air stable thermoelectric devices of poly (3-hexylthiophene) by dual doping of Au metal precursors”, *Nano Energy,* 82, 105681.

Kang, Y. H.; Lee, U. H.; Jung, I. H.; Yoon, S. C.; Cho, S. Y. 2019. “Enhanced thermoelectric performance of conjugated polymer/CNT nanocomposites by modulating the potential barrier difference between conjugated polymer and CNT”, ACS *Applied Electronic Materials,* 1(7), 1282-1289.

Kim, G. H.; Shao, L.; Zhang, K.; Pipe, K. P. 2013. “Engineered doping of organic semiconductors for enhanced thermoelectric efficiency”, *Nature Materials,* 12, 719–723.

Lee, W.; Kang, Y. H.; Lee, J. Y.; Jang, K. S.; Cho, S. Y. 2017. “Hot-pressing for improving performance of CNT/conjugated polymer thermoelectric films and power generators”, *Materials Today Communications,* 10, 41-45.

Li, C.; Thostenson, E. T.; Chou, T. W. 2007. “Dominant role of tunneling resistance in the electrical conductivity of carbon nanotube-based composites”, *Applied Physics Letters,* 91.

Li, X.; Cai, K.; Gao, M.; Du, Y.; Shen, S. 2021. “Recent advances in flexible thermoelectric films and devices”, *Nano Energy,* 89, 106309.

Lindquist, P.F., M.L. Hammond ve R.H. Bragg. "Buharla Biriken Bor Filamentlerinin Kristal Yapısı." *Uygulamalı Fizik Dergisi* 39.11 (1968): 5152-5162.

Littleton, R. T.; Tritt, T. M.; Feger, C. R. vd. 1998. "Effect of Ti substitution on the thermoelectric properties of the pentatelluride materials M1−x Tix Te5 (M=Hf, Zr)", *Applied Physics Letters,* 72(16), 2056-2058.

M. Tan, Y. Wang, Y. Deng vd. 2011. "Oriented growth of A2Te3 (A = Sb, Bi) films and their devices with enhanced thermoelectric performance", *Sensors and Actuators A*, 171(2), 252–259.

Majumdar, A. 2004. "Thermoelectricity in semiconductor nanostructures", *Science*, 303(5659), 777–778.

Matsuda, I.; Wu, K. (Eds.). 2021. 2D boron: boraphene, borophene, boronene. Cham: Springer International Publishing.

Muhammad, S.; Franzini, M.; Galliano, S.; Bonomo, M.; Barolo, C.; La Notte, L.; Reale, A. 2024. "Graphene-Based Organic Polymer Composites for Improved Thermoelectric Properties Near Room Temperature", In 2024 IEEE International Conference on Environment and Electrical Engineering and 2024 IEEE Industrial and Commercial Power Systems Europe (EEEIC/I&CPS Europe) (pp. 1-5). *IEEE*.

Nandihalli, N.; Liu, C. J.; Mori, T. 2020. "Polymer based thermoelectric nanocomposite materials and devices: Fabrication and characteristics", *Nano Energy*, 78.

Nolas, G. S.; Cohn, J. L.; Slack, G. A.; Schujman, S. B. 1998. "Semiconducting Ge clathrates: Promising candidates for thermoelectric applications", *Applied Physics Letters,* 73(2), 178-180.

Reineke, S.; Thomschke, M.; Lüsem, B.; Leo, K. 2013. "White organic light-emitting diodes: Status and perspective", *Modern Physics,* 85, 1245–1293.

Rowe, D. M. 2006. *Thermoelectrics handbook: Macro to nano*. CRC Press.

Sirringhaus, H. 2014. 25th anniversary article. Organic field-effect transistors: The path beyond amorphous silicon. *Advanced Material, 26,* 1319-1335.

Snyder, G. J.; Toberer, E. S. 2008. “Complex thermoelectric materials”, *Nature Materials,* 7, 105–114.

Tan, M.; Wang, Y.; Deng, Y. vd. 2011. “Oriented growth of A2Te3 (A = Sb, Bi) films and their devices with enhanced thermoelectric performance”, *Sensors and Actuators A,* 171(2), 252–259.

Vineis, C. J.; Shakouri, A.; Majumdar, A.; Kanatzidis, M. G. 2010. “Nanostructured thermoelectrics: Big efficiency gains from small features”, *Advanced Material,* 22, 3970–3980.

Wang, H.; Yu, C. 2019. “Organic thermoelectrics: materials preparation, performance optimization, and device integration”, *Joule,* 3(1), 53-80.

Zhang, Z.; Penev, E. S.; Yakobson, B. I. 2016. "İki boyutlu malzemeler: B bemolde polifoni", *Nature Chemistry,* 8, 525- 527.

EKLER

Ek-1: "Performance of the PEDOT: PSS: Borophene-ZnO Junction Thermoelectric Generator" başlıklı makale.

Bu belge, Yükseköğretim Kurulu tarafından 19.01.2021 tarihli "Lisansüstü Tezlerin Elektronik Ortamda Toplanması, Düzenlenmesi ve Erişime Açılmasına İlişkin Yönerge" ile bildirilen 6698 Sayılı Kişisel Verilerin Korunması Kanunu kapsamında gizlenmiştir.

ÖZ GEÇMİŞ

Rumeysa Ayşenur TOKER

Eğitim

Yüksek Lisans	2025 Maltepe Üniversitesi, Yüksek Lisans Enstitü,Disiplinlerarası Yenilenebilir Enerji Teknolojileri ve Yönetimi
Lisans	2023 Elektrik-Elektronik Mühendisliği

İş/İstihdam (Varsa)

Yıl	**Görev**
2021	Satış Mühendisi–Renesmed Medikal Mimarlık Mühendislik LTD. ŞTİ

Mesleki Birlik/Dernek Üyelikleri (Varsa)

Yıl	**Kurum**
2021	Mühendis Ve Mimar Kadınlar Derneği

Alınan Burs ve Ödüller (Varsa)

Yıl	**Burs/Ödül**
2022	TÜBİTAK Araştırmacı Bursu