

"تضمنت الدراسة الحالية دراسة نظرية باستخدام نظرية دالية الكثافة DFT المعتمدة وغير المعتمدة على الزمن لخمس مجاميع من الصبغات العضوية (قابل – جسر – مانح ) الجسر الإلكتروني هو الثايوفين والصبغة المانحة هي النفثالين بينما الصبغة المتقبلة للإلكترونات هي تتراسيانو كينوديميثان لتحديد الصبغة التي تحقق الأداء الأمثل للخلايا الشمسية الحساسة . شملت الدراسة النظرية دراسة المدارات الجزيئية المشغولة والفارغة من الإلكترونات وحساب فجوة الطاقة وكذلك تم دراسة أطيف الامتصاص والانبعاث وجهد الدائرة المفتوح بينت هذه الدراسة تأثير زيادة الذرات المضافة الى الجزء القابل على الخواص البصرية والالكترونية والفولتائية