

# Análisis computacional de la trifetilamina y trifetilfosfina como sensibilizadores del tipo donador-aceptor en celdas solares sensibilizadas por colorante

Alberto Báez Castro<sup>1</sup>, Tomas de Jesús Delgado Montiel<sup>1</sup>, Jesús Adrián Baldenebro Lopez<sup>1</sup>, Rody Abraham Soto Rojo<sup>1</sup>, Daniel Glossman Mitnik<sup>2</sup> y Carlos Alberto Peñuelas Gámez<sup>1,†</sup>

<sup>1</sup>LAMMCAC, Facultad de ingeniería Mochis, Universidad Autónoma de Sinaloa, Los Mochis, Sinaloa, México

<sup>2</sup>Laboratorio Virtual de NANOCOSMOS, Departamento de Medio Ambiente y Energía, CIMAV, Chihuahua, Chihuahua, México

## Resumen

Se realizó un análisis computacional de dos sensibilizadores con una estructura del tipo donador-aceptor (D-A), para celdas solares sensibilizadas con colorante (DSSC, por sus siglas en inglés). Se empleó la teoría de funcionales de la densidad (DFT, por sus siglas en inglés) con el objetivo de comparar las propiedades optoelectrónicas de los grupos donadores trifetilamina y trifetilfosfina. Se utilizó el nivel de cálculo M06/6-31G(d), para optimizar las geometrías del estado fundamental y analizar los orbitales moleculares de frontera. A través de la teoría de funcionales de la densidad dependiente del tiempo (TD-DFT, por sus siglas en inglés) con el nivel de cálculo M06-2X/6-31G(d) se determinaron los espectros de absorción y sus transiciones electrónicas. Además, se evaluó la energía libre de inyección de electrones ( $\Delta G_{inject}$ ), la eficiencia de captación de luz (LHE) en conjunto del tiempo de vida del estado excitado ( $\tau$ ). Finalmente, con los datos obtenidos respecto al cambio del heteroátomo de nitrógeno por el de fósforo en el grupo donador, generó cambios en las propiedades estructurales, electrónicas y fotofísicas en los sensibilizadores.

**Keywords:** celdas solares, DSSC, química computacional, DFT, sensibilizadores

†Autor de correspondencia: Carlos Alberto Peñuelas Gámez *Correo electrónico:* carlos.apg@uas.edu.mx

DOI: <https://www.doi.org/10.59730/rer.v12n55a1>

Recibido: 4 de marzo, 2025 Revisado: 19 de marzo, 2025 Aceptado: 29 de marzo, 2025 Publicado: 1 de abril, 2025

## 1. Introducción

En la actualidad los combustibles fósiles son la fuente más utilizada para generar energía eléctrica debido a sus bajos costos y eficiencia para cubrir el abastecimiento de la energía requerida por la industria y el uso doméstico. Así mismo, estos combustibles como gas natural, carbón, gasolina, diésel, entre otros derivados del petróleo son los principales causantes del efecto invernadero (Olabi & Abdelkareem 2022). Con lo anterior, en las últimas décadas ha incrementado el uso de fuentes de energía renovables como solar, eólica, geotérmica e hidráulica, no obstante, existe un problema para cubrir por completo las necesidades de abastecimiento eléctrico actual (Alrikabi 2014). El sol es la principal fuente de energía de nuestro sistema solar y se le considera “inagotable”, debido a esto las celdas solares se establecen como los dispositivos más viables por su fácil acceso, no requieren una instalación compleja y poseen costos bajos de producción en comparación de otros dispositivos que generen energía renovable (Holechek et al. 2022). Sin embargo, las celdas solares convencionales poseen un costo elevado y una producción compleja para cubrir el abastecimiento de la energía requerida actualmente. Una de las celdas solares más utilizadas debido a su funcionalidad es a base de silicio, que pese a su alta producción y buen funcionamiento su eficiencia energética de 21 % aproximadamente se encuentra cerca de sus límites (Green & Emery 1993). Con lo anterior, nuevos tipos de celdas solares se encuentran en fase de investigación con el fin de disminuir sus costos, tiempo de producción y desechos contaminantes. Por ejemplo, las celdas solares sensibilizadas por colorante DSSC desarrolladas por el equipo de Grätzel con un funcionamiento más sencillo y de menor costo. Este tipo de celdas para su funcionamiento solo requiere de cuatro elementos que son: un ánodo, un sensibilizador, un electrolito y un cátodo, además de su exposición al sol para generar energía eléctrica (Sivaraj et al. 2021). El sensibilizador o colorante es un componente importante para una DSSC, el cual se encarga de absorber la luz del sol y con ello la transferencia de electrones para dar inicio al mecanismo de la DSSC y en conjunto del resto de los componentes produzca una corriente eléctrica. Algunos de los sensibilizadores más utilizados en la investigación son a base de una estructura orgánica

del tipo D-A, y entre ellos los que poseen como unidad donadora una trifetilamina (Arkan et al. 2024, Mahmood 2016). Por otra parte, la trifetilfosfina posee algunas características estructurales similares a la trifetilamina, con la ventaja de tener un costo menor, lo cual es de importancia en la experimentación, además de poseer mayor estabilidad en su aplicación para la síntesis de nuevos compuestos (Changenet et al. 1997, Senear et al. 1960). En el desarrollo de este trabajo, un sensibilizador de trifetilamina ya reportado (Kitamura et al. 2004) fue modificado reemplazando el átomo de nitrógeno por un átomo de fósforo para obtener un compuesto a base de trifetilfosfina. Ambos compuestos fueron analizados y comparados con el empleo de la química computacional, a través la teoría de funcionales de la densidad (DFT) utilizando el software Gaussian 16 (Frisch et al. 2016).

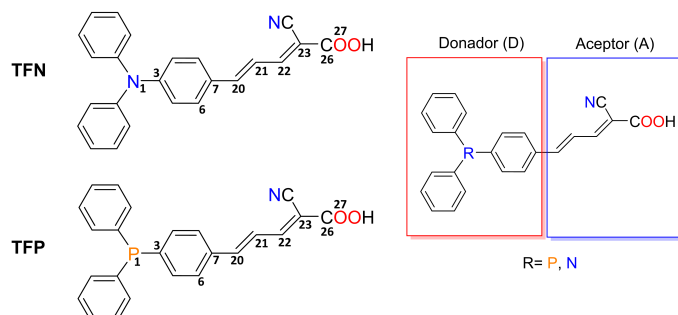
## 2. Metodología

Para el desarrollo de este trabajo se empleó el software Gaussian 16 y Gaussview (Frisch et al. 2016). Los compuestos fueron optimizados empleando la DFT con el nivel de cálculo M06/6-31G(d) para la obtención de las estructuras de mínima energía (Godbout et al. 1992, Zhao & Truhlar 2007). Las estructuras optimizadas se verificaron mediante el cálculo de frecuencias vibracionales (sin frecuencias imaginarias). Los espectros de absorción fueron obtenidos con la TD-DFT (Burke et al. 2005, Cossi & Barone 2001) y el nivel de cálculo M06-2X/6-31G(d) (Godbout et al. 1992, Zhao & Truhlar 2007), empleando el modelo de continuo polarizable con formalismo de ecuaciones integrales (IEF-PCM, por sus siglas en inglés) con el solvente etanol para ambos sensibilizadores (Cancès et al. 1997, Improta et al. 2006). Los datos fueron procesados con el software Aomix (Gorelsky 1997).

## 3. Resultados y discusión

En el estudio de las estructuras optimizadas se inspeccionaron los parámetros geométricos de las unidades donadora (D) y aceptora (A) denominada  $\phi$ D-A. Tales como las longitudes de enlace y ángulos diedros de interés, como se puede observar en la Fig. 1 y Tab. 1. En

el análisis comparativo de los parámetros geométricos las moléculas mostradas en la tabla, se observa que la distancia de enlace de C7-C20 para TFN con respecto a TFP incrementa de 1.44 a 1.45 Å, específicamente. Por otra parte, el ángulo diedro que se encuentra entre el donador y el aceptor C22-C23-C26-O27 para TFN con respecto a TFP aumenta la distorsión de 162.5 a 152.4° respectivamente. Estas distorsiones son ocasionadas por la presencia del átomo de fósforo en la unidad donadora.



**Figura 1.** Esquemas de los compuestos TFN y TFP.

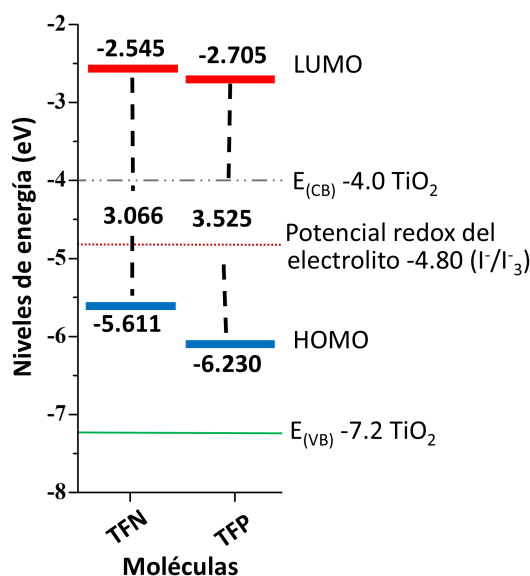
**Tabla 1.** Parámetros geométricos de los sensibilizadores TFN y TFP. Los valores de las distancias de enlace en (ángstrom Å) y los ángulos diedros en (grados°).

Moléculas	Parámetro	$\varphi$ D-A
TFN	C7-C20	1.44
	N1-C3	1.39
	C26-O27	1.21
	C6-C7-C20-C21	-179.6
	C22-C23-C26-O27	-162.9
TFP	C7-C20	1.45
	P1-C3	1.84
	C26-O27	1.20
	C6-C7-C20-C21	179.8
	C22-C23-C26-O27	152.4

La transferencia de carga entre los orbitales moleculares de frontera del orbital molecular más alto ocupado (HOMO, por sus siglas en inglés) y el orbital molecular más bajo desocupado (LUMO, por sus siglas en inglés) son aspectos importantes de los sistemas moleculares para las propiedades electrónicas de los compuestos. La diferencia de energías entre el HOMO y LUMO se le conocen como brecha de energía, la cual es utilizada para demostrar propiedades de la transferencia de carga intramolecular y la actividad química de las moléculas (Jayabharathi et al. 2012). Mediante el análisis de la brecha HOMO-LUMO es posible examinar que las características de los sensibilizadores sean apropiadas para DSSC.

Para el funcionamiento de una DSSC es necesario exponerla a la luz solar, para que los electrones del sensibilizador sean promovidos del nivel de energía del HOMO al LUMO. Por lo anterior, el nivel de energía LUMO del sensibilizador debe ubicarse por encima del nivel de energía de la banda de conducción del semiconductor ( $\text{TiO}_2$ ) facilitando la transferencia de electrones entre estos (Mehmood et al. 2015). Por otro lado, el nivel de energía del HOMO debe estar por debajo del nivel de energía del potencial redox del electrolito ( $\text{I}^-/\text{I}_3^-$ ) con el propósito de regenerar los electrones perdidos del sensibilizador (Sharma et al. 2018). Con la explicación anterior, se realizó el análisis para TFN y TFP. En la Fig. 2 se aprecia que ambos compuestos cumplen los requisitos para su uso como sensibilizadores. Es de importancia señalar que el sensibilizador TFN ya está probado en una DSSC, lo que reafirma la validez de dicha interpretación (Kitamura et al. 2004).

En la comparación de ambos compuestos se puede observar que el sustituir el nitrógeno por el fósforo en el grupo donador reduce la brecha que existe entre el nivel LUMO y la banda de conducción del semiconductor con un valor de 0.160 eV lo que mejora la transferencia de electrones. Sin embargo, este incrementa la brecha de energía que existe entre el HOMO y el potencial redox del electrolito con un valor de 0.619 eV lo que afecta en la regeneración del sensibilizador. Posteriormente, en el análisis de la brecha de energía entre los niveles HOMO y LUMO de los sensibilizadores mostrada en la Fig. 2, indica que TFN con 3.066 eV con respecto a TFP con 3.525 eV presenta una reducción de 0.549 eV. Finalmente, con este análisis TFN presenta las mejores características como sensibilizador en una DSSC debido a que requiere menor energía para promover electrones.



**Figura 2.** Brechas de energía HOMO y LUMO de TFN y TFP.

Otro factor de importancia es la localización de la densidad de los orbitales HOMO y LUMO de los sensibilizadores. Es deseable que en estos sistemas la densidad de HOMO este localizada en el grupo donador y la densidad del LUMO en el grupo aceptor. Con lo anterior, se realizó el estudio de la densidad electrónica de TFN y TFP, ver Fig. 3. En el análisis de la densidad electrónica del HOMO se observa que en ambos compuestos esta se encuentra localizada en la trifenilamina de TFN y la trifenilfosfina de TFP que forman el grupo donador. Por otra parte, en el estudio de la densidad electrónica en el LUMO para ambas moléculas se localiza en el ácido cianoacrílico que forma parte del grupo aceptor. En conclusión, ambos compuestos cumplen con una localización de la densidad adecuada para ser un buen sensibilizador (Mahmood 2016).

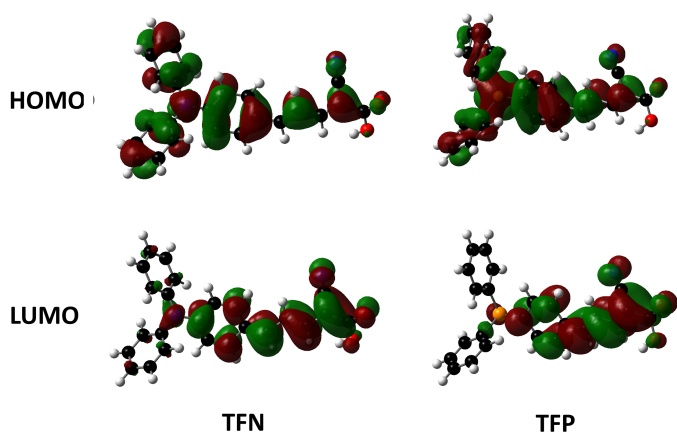


Figura 3. Orbitales de frontera de TFN y TFP.

Por otra parte, se realizó un estudio de análisis poblacional mediante los criterios de análisis de cargas de orbitales naturales de enlace (NBO, por sus siglas en inglés), empleando el nivel de cálculo M06/6-31G(d). Los valores de las cargas puntuales se agruparon por unidades tanto donadoras comoceptoras para los sistemas TFN y TFP. Para la obtención de la carga neta de las unidades donadoras yceptoras se sumaron las cargas de los átomos que forman dichas unidades, estos valores se muestran en la Tab. 2. Se puede observar en tabla que la carga neta de las unidades donadoras es positiva y la carga neta de la unidad del aceptor es negativa en ambos sensibilizadores, siendo esto consistente con la literatura Li et al. (2017).

El análisis poblacional por NBO permite relacionar que la carga negativa del aceptor puede ser un factor que conduzca a la inyección de electrones desde el colorante a la banda de conducción del TiO<sub>2</sub>. Además, el incremento de la carga ( $\Delta q$ ) entre la unidad donadora y la unidad aceptor puede estar relacionada con la separación de carga de la molécula y esta a su vez con una mejor transferencia de carga intramolecular (Li et al. 2019). Tomando en cuenta este parámetro, el sensibilizador que mejor separación de carga presenta es TFN.

Tabla 2. Cargas en las zonas de los sensibilizadores tipo D-A mediante NBO.

Criterio		NBO	
Molécula	Carga del donador	Carga del aceptor	$\Delta q(D-A)$
TFN	0.1202	-0.1866	0.3068
TFP	0.0691	-0.1502	0.2193

Otro estudio de importancia es el análisis de los espectros de absorción por UV-Vis obtenidos por TD-DFT, los cuales se muestran en la Fig. 4. En el análisis es de interés que la banda con longitud de onda con absorción máxima ( $\lambda_{max}$ ) se encuentre en el espectro visible, debido a que esto indica un menor requerimiento de energía para excitar electrones mediante la exposición de luz solar. Además, se espera que las transiciones electrónicas en la  $\lambda_{max}$  correspondan a la transición HOMO→LUMO con la mayor fuerza del oscilador ( $f$ ), debido a que esta se relaciona con la intensidad de absorción. Para validar el método se comparó la  $\lambda_{max}$  reportada de TFN (Kitamura et al. 2004) con una  $\lambda_{max}=417$  nm mostrando una diferencia de 12 nm a comparación del espectro teórico mostrado en la Fig. 4 con una  $\lambda_{max}=429$  nm, reafirmando la confiabilidad del nivel de cálculo utilizado. En la comparación de TFN y TFP de los espectros se aprecia que intercambio de fósforo en el grupo donador genera un desplazamiento hipsocrómico en la  $\lambda_{max}$  de 60 nm de la transición HOMO→LUMO.

Para el análisis de las bandas del espectro de absorción mostradas en la Fig. 4, se realizó un resumen las transiciones electrónicas de los orbitales moleculares de mayor importancia en la Tab. 3. En el estudio de esta tabla se puede observar que la banda con mayor

fuerza del oscilador para que TFN y TFP se presenta en la transición HOMO→LUMO. Sin embargo, el sensibilizador TFN la  $\lambda_{max}$  tiene su transición de HOMO→LUMO la cual se encuentra en el visible, por lo que requiere de menor energía.

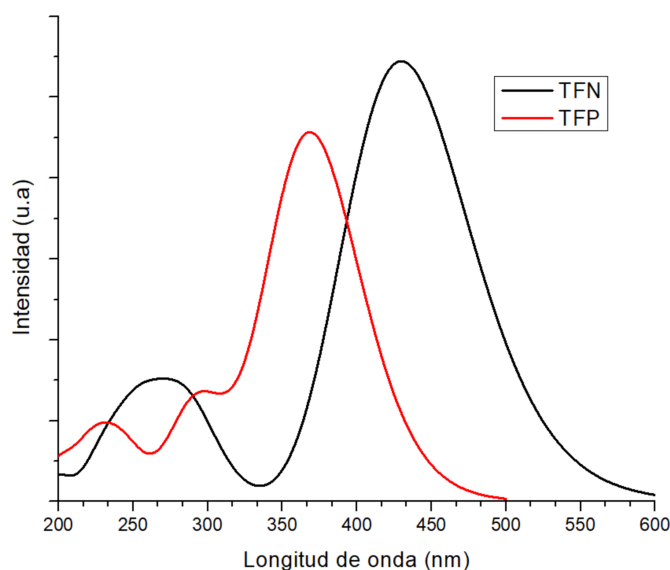


Figura 4. Espectros teóricos de UV-Vis.

Tabla 3. Longitud de onda de absorción ( $\lambda_{max}$ ), energía de excitación vertical ( $E$ ), fuerza del oscilador ( $f$ ) y transiciones de los orbitales moleculares de mayor importancia.

Moléculas	$\lambda_{max}$ (nm)	$E$ (eV)	$f$	Transiciones H=HOMO, L=LUMO
TFN	417	2.97	-	-
Experimental				
TFN	429	2.88	1.344	H → L (95 %)
	287	4.31	0.273	H-1 → L (92 %)
	255	4.85	0.141	H → L+3 (50 %), H → L+1 (18 %)
TFP	369	3.36	1.124	H → L (89 %)
	295	4.21	0.315	H-1 → L (82 %)
	198	6.25	0.087	H → L+6 (35 %), H-1 → L+2 (19 %)

Para la DSSC la eficiencia de la inyección de electrones es un elemento de importancia para la densidad de corriente de cortocircuito ( $J_{sc}$ ), la cual se encuentra relacionada con la energía libre de inyección de electrones ( $\Delta G_{inject}$  (eV)) (Mehmood et al. 2015). El valor de  $\Delta G_{inject}$  se determina a partir de la diferencia entre la energía potencial de oxidación del estado excitado ( $E_{ox}^{dye*}$ ) y la energía potencial de reducción de la banda de conducción de TiO<sub>2</sub> ( $E_{CB} = 4.0$  eV) (Sharma et al. 2018). Para cálculo de  $E_{ox}^{dye*}$ , se puede determinar a partir de la diferencia del potencial de oxidación del estado fundamental ( $E_{ox}^{dye} =$  nivel HOMO del sensibilizador) y la energía de absorción asociada con  $\lambda_{max}$  ( $\Delta E$ ) (Mehmood et al. 2015). Además, el tiempo de vida del estado excitado ( $\tau$ ) se relaciona con una buena transferencia de carga y la probabilidad de reducir la recombinación de carga (Bourouina & Rekis 2021). Para determinar el tiempo de vida del estado excitado se determina utilizando la siguiente ecuación:

$$\tau = \frac{1.499}{f \times E^2} \quad (1)$$

Donde  $E$  representa la energía de excitación del estado electrónico ( $cm^{-1}$ ) y  $f$  la fuerza del oscilador del estado electrónico. Con toda la

información anterior se realizó la Tab. 4.

Un  $\Delta G_{inject}$  cercano a 0.20 eV puede predecir qué los sensibilizadores tienen la fuerza de impulsión necesaria para inyectar electrones excitados del sensibilizador a la  $E_{CB}$  de  $TiO_2$ , una propiedad requerida para un buen funcionamiento de la DSSC (Mehmood et al. 2015) y de acuerdo con la Tab. 4 los sensibilizadores TFN y TFP cumplen con lo requerido. Otro parámetro importante es el parámetro de la fuerza del oscilador  $f$ , el cual se relaciona con la eficiencia de captación de luz (LHE, por sus siglas en inglés) expresada como LHE ( $\lambda_{max}$ ) =  $1 - 10^{-f}$  (Ahmadi et al. 2024). La LHE indica que si la fotocorriente de cortocircuito (JSC) incrementa también lo hará la fuerza del oscilador (Mehmood et al. 2015). Con lo anterior, la LHE para TFN y TFP fue de 0.954 y 0.924 respectivamente. Esto indica que la trifetilamina como grupo donador incrementa la captación de luz y la trifetilfosfina la disminuye. Finalmente, en la Tab. 4 se encuentra el tiempo de vida en estado excitado ( $\tau$ ) para TFN y TFP con 2.07 y 1.82 ns respectivamente, observando que la sustitución del átomo de nitrógeno por el de fósforo en el grupo donador afecta la transferencia de carga.

**Tabla 4.** Potencial de oxidación del estado fundamental ( $E_{ox}^{dye}$ ), energía de absorción ( $\Delta E$ ), energía potencial de oxidación ( $E_{ox}^{dye*}$ ), eficiencia de inyección de electrones ( $\Delta E_{inject}$ ), eficiencia de recolección de luz (LHE) y tiempo de vida en el estado excitado ( $\tau$ ) de los sensibilizadores.

Compuesto químico	$E_{ox}^{dye}$ (eV)	$\Delta E$ (eV)	$E_{ox}^{dye*}$ (eV)	$\Delta G_{inject}$ (eV)	LHE	$\tau$ (ns)
TFN	5.611	2.88	2.731	1.269	0.954	2.07
TFP	6.230	3.36	2.870	1.130	0.924	1.82

#### 4. Conclusiones

Con los sensibilizadores del tipo donador-aceptor basados en trifetilamina y trifetilfosfina se logró determinar que el intercambio del heteroátomo de nitrógeno por fósforo en el grupo donador afecta ampliamente las propiedades estructurales, electrónicas y fotofísicas. La sustitución del átomo de nitrógeno por el de fósforo en la unidad donadora distorsiona el ángulo diedro en la unidad aceptora. En los niveles de energía el uso de trifetilfosfina como grupo donador incrementa la brecha de energía HOMO-LUMO. En el estudio teórico de absorción, se produjo un desplazamiento hipsocrómico en los espectros de absorción debido a la modificación del grupo donador del sensibilizador de trifetilfosfina por trifetilamina. En las propiedades electrónicas de los sensibilizadores se observó que la sustitución del átomo de nitrógeno por fósforo en el grupo donador genera una disminución en su tiempo de vida y la eficiencia de recolección de luz, lo que afecta la transferencia de carga electrónica y la captación de luz.

#### ■ Referencias

Ahmadi, Y., Teymourinia, H., Hosseininezhad, S. & Ramazani, A. (2024), 'Dft and td-dft optoelectronic study on hybrid alizarin-carbazol based dyes incorporated on titanium dioxide (tio2) for dye sensitized solar cell application', *Inorganic Chemistry Communications* **162**, 112153.  
 URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.inoche.2024.112153>

Alrikabi, N. K. M. A. (2014), 'Renewable energy types', *Journal of Clean Energy Technologies* p. 61–64.  
 URL: <http://dx.doi.org/10.7763/jocet.2014.v2.92>

Arkan, F., Pakravesh, F., Barati Darband, F., Sabagh, S. & Izadyar, M. (2024), 'Recent progress toward high-performance dye-sensitized solar cells: a review', *Journal of the Iranian Chemical Society* **21**(3), 577–638.  
 URL: <http://dx.doi.org/10.1007/s13738-024-02967-2>

Bourouina, A. & Rekis, M. (2021), 'Comparison in optoelectronic properties of triphenylamine-imidazole or imidazole as donor for dye-sensitized solar cell: theoretical approach', *Journal of Molecular Modeling* **27**(8).  
 URL: <http://dx.doi.org/10.1007/s00894-021-04844-8>

Burke, K., Werschnik, J. & Gross, E. K. U. (2005), 'Time-dependent density functional theory: Past, present, and future', *The Journal of Chemical Physics* **123**(6).  
 URL: <http://dx.doi.org/10.1063/1.1904586>

Cancès, E., Mennucci, B. & Tomasi, J. (1997), 'A new integral equation formalism for the polarizable continuum model: Theoretical background and applications to isotropic and anisotropic dielectrics', *The Journal of Chemical Physics* **107**(8), 3032–3041.  
 URL: <http://dx.doi.org/10.1063/1.474659>

Changenet, P., Plaza, P., Martin, M. M., Meyer, Y. H. & Rettig, W. (1997), 'Photophysics of triphenylphosphines and their oxides: role of dimethylamino substituents', *Chemical Physics* **221**(3), 311–322.  
 URL: [http://dx.doi.org/10.1016/S0301-0104\(97\)00167-5](http://dx.doi.org/10.1016/S0301-0104(97)00167-5)

Cossi, M. & Barone, V. (2001), 'Time-dependent density functional theory for molecules in liquid solutions', *The Journal of Chemical Physics* **115**(10), 4708–4717.  
 URL: <http://dx.doi.org/10.1063/1.1394921>

Frisch, M. J., Trucks, G. W., Schlegel, H. B., Scuseria, G. E., Robb, M. A., Cheeseman, J. R., Scalmani, G., Barone, V., Petersson, G. A., Nakatsuji, H., Li, X., Caricato, M., Marenich, A. V., Bloino, J., Janesko, B. G., Gomperts, R., Mennucci, B., Hratchian, H. P., Ortiz, J. V., ... & Fox, D. J. (2016), 'Gaussian-16 Revision C.01'. Gaussian Inc. Wallingford CT.

Godbout, N., Salahub, D. R., Andzelm, J. & Wimmer, E. (1992), 'Optimization of gaussian-type basis sets for local spin density functional calculations. part i. boron through neon, optimization technique and validation', *Canadian Journal of Chemistry* **70**(2), 560–571.  
 URL: <http://dx.doi.org/10.1139/v92-079>

Gorelsky, S. (1997), 'Aomix: Program for molecular orbital analysis (6.94)'.  
 URL: <http://www.sg-chem.net>

Green, M. A. & Emery, K. (1993), 'Solar cell efficiency tables', *Progress in Photovoltaics: Research and Applications* **1**(1), 25–29.  
 URL: <http://dx.doi.org/10.1002/pip.4670010104>

Holechek, J. L., Geli, H. M. E., Sawalhah, M. N. & Valdez, R. (2022), 'A global assessment: Can renewable energy replace fossil fuels by 2050?', *Sustainability* **14**(8), 4792.  
 URL: <http://dx.doi.org/10.3390/su14084792>

Improta, R., Barone, V., Scalmani, G. & Frisch, M. J. (2006), 'A state-specific polarizable continuum model time dependent density functional theory method for excited state calculations in solution', *The Journal of Chemical Physics* **125**(5).  
 URL: <http://dx.doi.org/10.1063/1.2222364>

Jayabharathi, J., Thanikachalam, V. & Perumal, M. V. (2012), 'Physicochemical and solvatochromic analysis of an imidazole derivative as nlo material', *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* **85**(1), 31–37.  
 URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.saa.2011.08.060>

Kitamura, T., Ikeda, M., Shigaki, K., Inoue, T., Anderson, N. A., Ai, X., Lian, T. & Yanagida, S. (2004), 'Phenyl-conjugated oligoene sensitizers for tio2 solar cells', *Chemistry of Materials* **16**(9), 1806–1812.  
 URL: <http://dx.doi.org/10.1021/cm0349708>

- Li, Y., Li, Y., Song, P., Ma, F., Liang, J. & Sun, M. (2017), 'Screening and design of high-performance indoline-based dyes for dsscs', *RSC Advances* **7**(33), 20520–20536.  
**URL:** <http://dx.doi.org/10.1039/C6RA28396A>
- Li, Y., Liu, J., Liu, D., Li, X. & Xu, Y. (2019), 'D-a- $\pi$ -a based organic dyes for efficient dsscs: A theoretical study on the role of  $\pi$ -spacer', *Computational Materials Science* **161**, 163–176.  
**URL:** <http://dx.doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.01.033>
- Mahmood, A. (2016), 'Triphenylamine based dyes for dye sensitized solar cells: A review', *Solar Energy* **123**, 127–144.  
**URL:** <http://dx.doi.org/10.1016/j.solener.2015.11.015>
- Mehmood, U., Hussein, I. A., Harrabi, K. & Ahmed, S. (2015), 'Density functional theory study on the electronic structures of oxadiazole based dyes as photosensitizer for dye sensitized solar cells', *Advances in Materials Science and Engineering* **2015**, 1–8.  
**URL:** <http://dx.doi.org/10.1155/2015/286730>
- Olabi, A. & Abdelkareem, M. A. (2022), 'Renewable energy and climate change', *Renewable and Sustainable Energy Reviews* **158**, 112111.  
**URL:** <http://dx.doi.org/10.1016/j.rser.2022.112111>
- Senear, A. E., Valient, W. & Wirth, J. (1960), 'Derivatives of triphenylphosphine and triphenylphosphine oxide', *The Journal of Organic Chemistry* **25**(11), 2001–2006.  
**URL:** <http://dx.doi.org/10.1021/jo01081a046>
- Sharma, K., Sharma, V. & Sharma, S. S. (2018), 'Dye-sensitized solar cells: Fundamentals and current status', *Nanoscale Research Letters* **13**(1).  
**URL:** <http://dx.doi.org/10.1186/s11671-018-2760-6>
- Sivaraj, S., Kaliyannan, G. V., Anandraj, M., Chinnasamy, M. & Rathanasamy, R. (2021), 'Dye-sensitized solar cells'.  
**URL:** <http://dx.doi.org/10.1002/9781119725022.ch6>
- Zhao, Y. & Truhlar, D. G. (2007), 'The m06 suite of density functionals for main group thermochemistry, thermochemical kinetics, noncovalent interactions, excited states, and transition elements: two new functionals and systematic testing of four m06-class functionals and 12 other functionals', *Theoretical Chemistry Accounts* **120**(1–3), 215–241.  
**URL:** <http://dx.doi.org/10.1007/s00214-007-0310-x>