"تتناول الدراسة الحالية التركيب الإلكتروني لبعض المركبات المقترحة القائمة على جزيء الأنثراسين للتطبيقات الكهروضوئية كصبغات حساسة للخلايا الشمسية. تم تصميم المركبات المدروسة مبدئيًا في برنامج Gauss View 5.0.8 وباستخدام الدالة الهجينة B3LYP-DFTجنبًا إلى جنب مع استخدام دوال اساسية 6-31 Gفي برنامج Gaussian 09 لدراسة الحالة الأرضية وخصائص التحليل الطيفي للمركبات. تم استخدام طريقة DFT لدراسة خصائص الحالة المثارة للمركبات المدروسة.

أظهرت النتائج أنه تم الحصول على استرخاء جيد للمركبات باستخدام طريقة ال DFT وان الطاقة الكلية غير معتمدة عن موضع المجاميع الفعالة في المركبات ، فهي تعتمد فقط على عدد الإلكترونات في كل مركب.

أظهرت النتائج أن المركبات المدروسة أظهرت عدم استقرار LUMO واستقرار HOMO ، كلاهما تغير بشكل كبير ليشير إلى أن المركبات المختلفة تلعب أدوارًا مهمة في الخصائص الإلكترونية. تأثير التناظر وتوزيع الحلقات العطرية له تأثير على حساب HOMO و LUMO.أظهرت نتائج فجوة الطاقة إدخال روابط الكربون الكربونية المزدوجة والثلاثية بين جزيء العمود الفقري الأنثراسين وحلقات الفينيل في كلا الجانبين المانح والمستقبل ، ووجود إلكترون يجذب المجموعات الفرعية NO2 في المركبات مما يقلل فجوة النطاق. وبالتالي ، فإن زيادة طول اقتران المركبات تجعل المركبات تحدث في معالجة نقل الشحنة

"