

Efecto del grupo aceptor sobre las propiedades fotovoltaicas de colorantes D – π – A basados en carbazol-tiofeno-fenil: un estudio teórico para aplicaciones DSSC

José Ángel Espinoza-Basopoli¹, Ricardo Antonio Moreno-Inzunza¹, Manuel Alonso Luque-Román^{1,†}, Rody Abraham Soto-Rojo¹, Daniel Glossman-Mitnik² y Jesús Baldenebro-López^{1,†}

¹Laboratorio de Modelado Molecular y Cálculos Computacionales, Facultad de Ingeniería Mochis, Universidad Autónoma de Sinaloa, Los Mochis, Sinaloa, México

²Laboratorio Virtual NANOCOSMOS, Departamento de Medio Ambiente y Energía, Centro de Investigación en Materiales Avanzados, Chihuahua, Chihuahua, México

Resumen

En este trabajo se diseñó y estudió teóricamente un conjunto de tres compuestos orgánicos con arquitectura D– π –A, basados en carbazol como donador, un puente π de tiofeno y fenil, y distintos grupos aceptores, con potencial aplicación como sensibilizadores en celdas DSSC. Los colorantes CTC, CTA y CTN se analizaron mediante DFT y TD-DFT con el nivel de cálculo M06/6-31G(d,p). Los espectros UV–Vis mostraron máximos de absorción en 401, 530 y 598 nm, respectivamente, evidenciando un desplazamiento batocrómico asociado al grupo aceptor. El análisis electrónico reveló una alineación energética adecuada con el TiO₂ y el electrolito I[–]/I₃[–], mientras que las simulaciones de adsorción confirmaron un anclaje estable, destacando CTN con la energía de adsorción más negativa (–3.89 eV). En conjunto, los resultados indican que los tres compuestos presentan propiedades ópticas y electrónicas favorables para su uso potencial en DSSC.

Palabras clave: DSSC, colorantes orgánicos, DFT, orbitales moleculares de frontera, transferencia de carga intramolecular

†Autor de correspondencia: Manuel Luque-Román, Jesús Baldenebro-López *Correo electrónico:* manuel.luque@uas.edu.mx, jesus.baldenebro@uas.edu.mx
DOI: <https://doi.org/10.59730/rer.v13n61a3>

Recibido: 13 de abril de 2026 Revisado: 26 de mayo de 2026 Aceptado: 11 de junio de 2026 Publicado: 3 de agosto de 2026

1. Introducción

El aprovechamiento de fuentes de energía limpias para la generación eléctrica es un área de intensa investigación, en la cual las celdas solares sensibilizadas por colorante (DSSC) destacan por su bajo costo, facilidad de fabricación y eficiencia competitiva (Rahmatian & Sayyad-di 2024, Ashrafuzzaman et al. 2025). Estas celdas están compuestas por un ánodo de TiO₂, un colorante fotosensible, un electrolito redox, generalmente I[–]/I₃[–], y un contraelectrodo, operando mediante la fotoexcitación del colorante, la inyección electrónica al semiconductor y su regeneración posterior (Srivastava et al. 2025). El colorante es clave en el desempeño del dispositivo; aunque los complejos de rutenio han sido ampliamente utilizados, la atención se ha desplazado hacia colorantes orgánicos libres de metal, especialmente aquellos con arquitectura D– π –A, que favorecen la transferencia de carga, amplían la absorción en la región visible y optimizan los niveles energéticos HOMO (orbital molecular más alto ocupado) y LUMO (orbital molecular más bajo desocupado) (Roohi & Mohtamadifar 2022, Mustafa et al. 2023).

En este contexto, el presente trabajo reporta un estudio computacional de tres compuestos orgánicos con arquitectura D– π –A, donde el grupo donador es carbazol, el puente π está constituido por unidades de tiofeno y fenil, y el grupo aceptor y de anclaje corresponde a ácido carboxílico (CTC), ácido cianoacrílico (CTA) y grupo nitro (CTN). Se evalúa el efecto del grupo aceptor sobre las propiedades ópticas y electrónicas, con el objetivo de identificar las características estructurales más adecuadas para su aplicación como sensibilizadores en celdas DSSC.

2. Metodología

Los compuestos mostrados en la Figura 1 se estudiaron mediante cálculos de química computacional con Gaussian 16 (Frisch et al. 2016), empleando DFT (Hohenberg & Kohn 1964) con el funcional M06 (Zhao & Truhlar 2008) y el conjunto base 6-31G(d,p) (Hehre et al. 1972). Se realizó un análisis conformacional previo con PM6 (Stewart 2007), seguido de optimizaciones geométricas sin restricciones y verificación de mínimos mediante frecuencias vibracionales; las

visualizaciones se generaron con GaussView 5 (Dennington et al. 2009). Las propiedades ópticas se evaluaron mediante TD-DFT (Runge & Gross 1984), considerando 20 estados excitados y el solvente cloroformo mediante IEF-PCM (Cancès et al. 1997). A partir de las geometrías optimizadas se determinaron los niveles HOMO–LUMO, la densidad electrónica, parámetros de transferencia de carga, ΔG_{inj} , τ y LHE. Se simuló la interacción de los compuestos con una superficie de TiO₂ en la dirección [101] mediante cálculos DFTB (Elstner et al. 1998), empleando el conjunto de parámetros PTBP (Cui et al. 2024), implementados en el paquete computacional DFTB+ 24.1 (Hourahine et al. 2020). La superficie de TiO₂ (15.15 × 21.60 × 40 Å) se modeló con condiciones periódicas, fijando las dos capas inferiores durante la optimización para representar un cristal infinito e incorporando un vacío de aproximadamente 15 Å sobre las moléculas. Se utilizó un criterio de convergencia SCF de 1 × 10^{–8} hartree y un mallado k de 2 × 2 × 1. Los efectos de dispersión se incluyeron mediante el potencial de Lennard-Jones (Allen & Tildesley 2017), con visualizaciones en VESTA 3.90.5a (Momma & Izumi 2011).

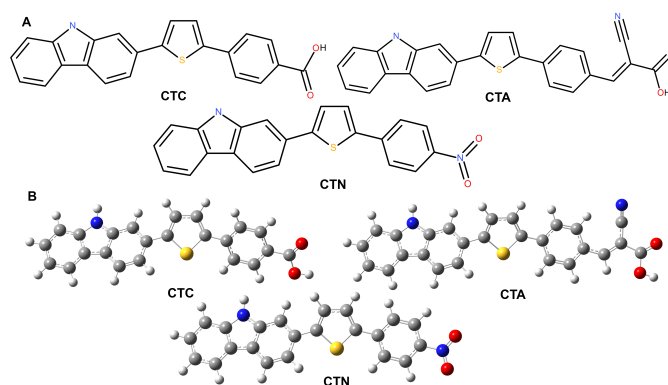


Figura 1. (A) Estructuras químicas de los colorantes orgánicos CTC, CTA y CTN con arquitectura D– π –A estudiados en este trabajo. **(B)** Geometrías moleculares optimizadas de los colorantes CTC, CTA y CTN, obtenidas con el nivel de cálculo M06/6-31G(d,p).

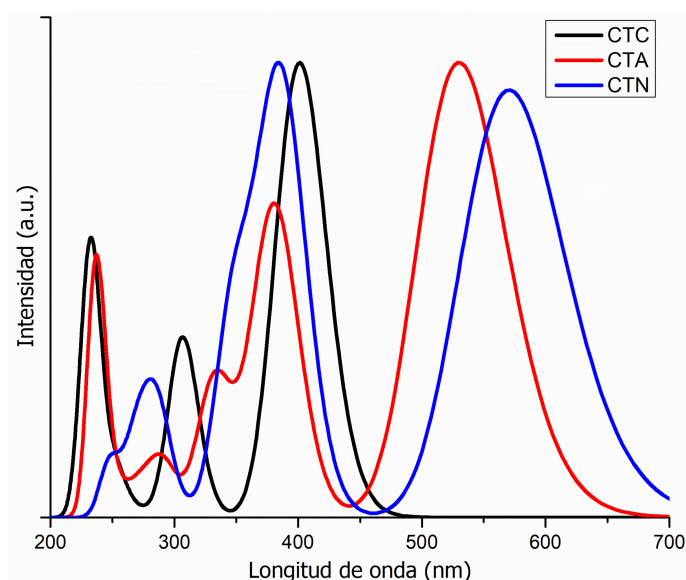
3. Resultados

3.1. Estructura molecular de los colorantes

Las geometrías optimizadas de CTC, CTA y CTN exhiben una disposición esencialmente lineal y una marcada tendencia a la planaridad del sistema conjugado, especialmente en la región carbazol-tiofeno. Esta planaridad favorece la deslocalización electrónica a lo largo del puente π y mejora las propiedades ópticas de los compuestos (Ibrayeva et al. 2024, Alolyan et al. 2026). Se observaron ligeras variaciones estructurales en función del grupo aceptor presente, lo que evidencia la influencia de este fragmento molecular en la conformación global.

3.2. Espectros de absorción UV-Vis

Los espectros de absorción UV-Vis calculados (Figura 2) revelaron bandas intensas en la región de 200–350 nm, así como desplazamientos batocrómicos de la longitud de onda de máxima absorción, asociados al grado de conjugación del sistema π y a la naturaleza del grupo aceptor. CTC presentó una absorción máxima alrededor de 401 nm, mientras que CTA y CTN exhibieron máximos a 530 y 598 nm, respectivamente; estos desplazamientos batocrómicos progresivos indican una transferencia de carga intramolecular más eficiente en los compuestos que incorporan grupos aceptores con mayor carácter electroatractor.



C*	Longitud de onda (nm)	Transición electrónica
CTC	401	H $\rightarrow$ L (97%)
	307	H $\rightarrow$ L+1 (60%) H-2 $\rightarrow$ L (33%)
CTA	530	H $\rightarrow$ L (99%)
	381	H-2 $\rightarrow$ L (91%)
CTN	336	H $\rightarrow$ L+1 (54%) H-1 $\rightarrow$ L+1 (33%)
	598	H $\rightarrow$ L (93%)
	569	H-1 $\rightarrow$ L (93%)
	386	H-2 $\rightarrow$ L (90%)
	348	H-1 $\rightarrow$ L+1 (84%)

C*=Colorantes

Figura 2. Espectros de absorción UV-Vis calculados para los colorantes CTC, CTA y CTN, considerando cloroformo mediante IEF-PCM. En la tabla inferior se presentan las principales transiciones electrónicas y sus contribuciones.

A pesar de que CTN exhibe la absorción más desplazada hacia la región visible, la naturaleza de la transición electrónica responsable de esta banda merece una consideración adicional. A diferencia de CTC y CTA, en los que la excitación dominante involucra una transición directa HOMO $\rightarrow$ LUMO, en CTN la contribución principal proviene de la transición HOMO-1 $\rightarrow$ LUMO. Esta característica puede influir en la probabilidad de la transición electrónica y, por ende, en la

fuerza del oscilador asociada con la absorción. A su vez, dado que la eficiencia de recolección de luz depende directamente de la fuerza del oscilador, puede predecirse que la transición HOMO $\rightarrow$ LUMO de CTN no presentaría una eficiencia de recolección de luz elevada y, por consiguiente, no garantizaría una capacidad favorable de captación de luz.

3.3. Distribución de densidad electrónica y alineación energética de los orbitales frontera

La distribución de la densidad electrónica evidenció que el HOMO se localiza principalmente en el grupo donador y el puente π , mientras que el LUMO se concentra en el grupo aceptor, lo que confirma la transferencia de carga intramolecular característica de la arquitectura D- π -A. En CTN se observó una mayor separación espacial entre estos orbitales, reforzada por la contribución del HOMO-1. Como se muestra en la Figura 3, los niveles energéticos obtenidos son adecuados para su aplicación en DSSC, ya que el LUMO se sitúa por encima de la banda de conducción del TiO_2 (-4.0 eV), lo que favorece la inyección electrónica, mientras que el HOMO se encuentra por debajo del potencial redox I^-/I_3^- (-4.8 eV), permitiendo la regeneración del colorante (Saud et al. 2024). Entre los compuestos, CTA presentó la menor brecha HOMO-LUMO, mientras que CTA y CTN mostraron valores de energía del HOMO más negativos que CTC, lo que sugiere una mayor estabilidad. En particular, CTN exhibe la alineación energética más favorable con el TiO_2 , lo que permite anticipar un mejor desempeño en DSSC (Steparuk et al. 2022, Öztürk et al. 2024).

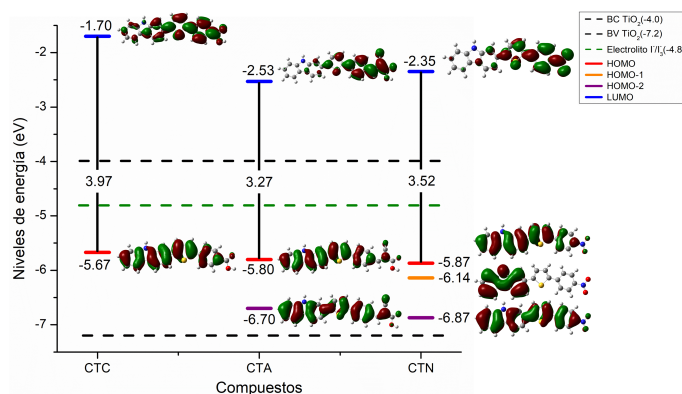


Figura 3. Diagrama de niveles energéticos de los orbitales moleculares de interés de los colorantes CTC, CTA y CTN, obtenido con el nivel de cálculo M06/6-31G(d,p).

3.4. Parámetros fotovoltaicos

El análisis de los parámetros fotovoltaicos (Tabla 1) evidenció diferencias relevantes entre los compuestos. CTC mostró la mayor eficiencia de recolección de luz (LHE = 0.91) y el mayor voltaje de circuito abierto (V_{OC} = 2.30 eV), destacando por su capacidad de captación de radiación visible.

El voltaje de circuito abierto se estimó mediante la expresión:

$$V_{OC} = E_{LUMO}(\text{dye}) - E_{CB}(\text{TiO}_2), \quad (1)$$

donde $E_{LUMO}(\text{dye})$ corresponde a la energía del orbital molecular más bajo desocupado del sensibilizador, mientras que $E_{CB}(\text{TiO}_2)$ representa el nivel energético de la banda de conducción del semiconductor. Físicamente, este parámetro representa la máxima diferencia de potencial que puede generarse en la celda bajo condiciones ideales y está directamente relacionado con la capacidad del colorante para inyectar electrones en el TiO_2 , así como con la separación energética que contribuye a evitar la recombinación electrónica.

A su vez, CTN presentó la menor energía libre de inyección (ΔG_{inj} = 0.20 eV) y el mayor tiempo de vida del estado excitado (τ = 236.89 ns), favoreciendo la transferencia electrónica y la estabilidad. De acuerdo con la teoría de las transiciones electrónicas, el

tiempo de vida del estado excitado es inversamente proporcional a la probabilidad de transición, representada por la fuerza del oscilador. Por tanto, los valores de este parámetro para el compuesto CTN implican transiciones electrónicas poco probables y, en consecuencia, estados excitados más longevos.

Por su parte, CTA exhibió un comportamiento intermedio. En cuanto a los procesos de regeneración y recombinación, los tres compuestos mostraron valores termodinámicamente viables, aunque CTN presentó el mayor valor de ΔG_{rec} , lo que indica una menor recombinación electrónica y una mayor eficiencia en la transferencia de carga. En conjunto, CTC y CTN presentan perfiles complementarios: el primero destaca en la captación de luz y el voltaje de circuito abierto, mientras que el segundo sobresale en la inyección electrónica y la estabilidad; CTA se sitúa entre ambos.

Tabla 1. Parámetros fotovoltaicos calculados para los colorantes CTC, CTA y CTN: energía asociada a la longitud de onda de máxima absorción ($E_{\lambda_{\text{máx}}}$), potencial de oxidación del colorante excitado (E_{Com}^*), energías libres de inyección electrónica (ΔG_{inj}), regeneración (ΔG_{reg}) y recombinación (ΔG_{rec}), eficiencia de recolección de luz (LHE), voltaje de circuito abierto (V_{OC}), tiempo de vida del estado excitado (τ) y fuerza del oscilador (f). Todas las energías se expresan en eV y τ en ns.

C*	$E_{\lambda_{\text{máx}}}$	E_{Com}^*	ΔG_{inj}	ΔG_{reg}	ΔG_{rec}	LHE	V_{OC}	τ	f
CTC	3.09	-2.58	1.42	0.87	1.67	0.91	2.30	2.31	1.04
CTA	2.34	-3.46	0.54	1.00	1.80	0.88	1.47	4.62	0.91
CTN	2.07	-3.80	0.20	1.07	1.87	0.05	1.65	236.89	0.02

C*: colorantes.

3.5. Interacción con el TiO₂

Los compuestos CTC, CTA y CTN se modelaron sobre la superficie de TiO₂ mediante cálculos DFTB, empleando una supercelda Ti₈₀O₁₄₄ con condiciones periódicas y dimensiones de 15.15 × 21.60 × 40 Å. Como se muestra en la Figura 4, los resultados revelaron un modo de anclaje bidentado en los tres casos, con diferencias en las energías de adsorción: CTC (-2.09 eV), CTA (-1.90 eV) y CTN (-3.89 eV), siendo este último el compuesto con mayor estabilidad sobre la superficie. En particular, CTN presentó distancias Ti-O más cortas y la formación adicional de puentes de hidrógeno, lo que favorece la transferencia de carga.

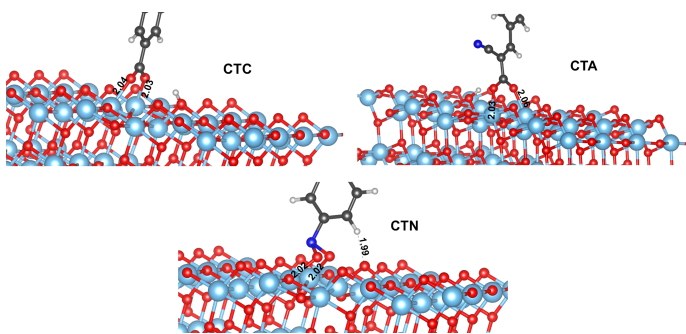


Figura 4. Geometías optimizadas de adsorción de los colorantes CTC, CTA y CTN sobre la superficie de TiO₂, obtenidas mediante cálculos DFTB.

Sin embargo, al considerar los parámetros ópticos presentados en la Tabla 1, se observa que CTN presenta una eficiencia de recolección de luz (LHE = 0.05) significativamente menor que la de CTC (LHE = 0.91) y CTA (LHE = 0.88), lo que indica una capacidad muy limitada de absorción para la transición analizada. Dado que la eficiencia global de una DSSC depende no solo del anclaje y de la inyección electrónica, sino también de la absorción de luz, CTC y CTA emergen como candidatos más equilibrados. En este contexto, aunque CTN muestra propiedades favorables de adsorción y transferencia de carga,

CTC y CTA presentan un mejor balance entre una alta capacidad de absorción y una adsorción suficientemente estable.

4. Conclusiones

El estudio teórico-computacional de los compuestos CTC, CTA y CTN con arquitectura D- π -A permitió evaluar integralmente sus propiedades electrónicas, ópticas y fotovoltaicas como sensibilizadores en DSSC. Los espectros UV-Vis mostraron desplazamientos batocrómicos progresivos asociados con la naturaleza del grupo aceptor, evidenciando su influencia en la deslocalización electrónica y en la absorción de luz visible. En términos fotovoltaicos, CTC destacó por su alta eficiencia de recolección de luz (LHE = 0.91) y su elevado voltaje de circuito abierto (V_{OC} = 2.30 eV), mientras que CTN presentó la menor energía libre de inyección (ΔG_{inj} = 0.20 eV) y el mayor tiempo de vida del estado excitado (τ = 236.89 ns), lo que favorece la transferencia electrónica y reduce la recombinación. Por su parte, CTA mostró un comportamiento intermedio.

Las simulaciones de adsorción sobre TiO₂ confirmaron un anclaje bidentado estable en los tres compuestos, siendo CTN el más favorable (E_{ads} = -3.89 eV), lo que refuerza su capacidad de transferencia de carga. En conjunto, los resultados indican que CTC y CTA poseen propiedades adecuadas para su aplicación en DSSC, con perfiles complementarios: CTC sobresale en la captación de luz y la generación de voltaje, mientras que CTN destaca en la inyección electrónica, la estabilidad y la adsorción sobre el semiconductor. Estos resultados evidencian la importancia del grupo aceptor en la optimización del desempeño fotovoltaico.

■ Referencias

- Allen, M. P. & Tildesley, D. J. (2017), *Computer Simulation of Liquids*, Oxford University Press.
URL: <https://doi.org/10.1093/oso/9780198803195.001.0001>
- Alolyan, R., Alyahya, F., Alsmami, N., Al-Qurashi, O. & Wazzan, N. (2026), 'Enhancing DSSC performance via comparative design of D-A- π -A and D-D- π -A organic dyes: DFT calculations of structure-property correlation', *Journal of Cluster Science* **37**(2), 55.
URL: <https://doi.org/10.1007/s10876-026-03009-y>
- Ashrafuzzaman, M., Kalam, A., Al-Sehemi, A. G., Yadav, P. & Dubey, M. (2025), 'A review of photoanode materials, challenges, and outlook of dye-sensitized solar cells', *Journal of Power Sources* **638**, 236636.
URL: <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2025.236636>
- 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: <https://doi.org/10.1063/1.474659>
- Cui, M., Reuter, K. & Margraf, J. T. (2024), 'Obtaining robust density functional tight-binding parameters for solids across the periodic table', *Journal of Chemical Theory and Computation* **20**(12), 5276-5290.
URL: <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.4c00228>
- Dennington, R., Keith, T. A. & Millam, J. M. (2009), 'GaussView, version 5'.
- Elstner, M., Porezag, D., Jungnickel, G., Elsner, J., Haugk, M., Frauenheim, T., Suhai, S. & Seifert, G. (1998), 'Self-consistent-charge density-functional tight-binding method for simulations of complex materials properties', *Phys. Rev. B* **58**, 7260-7268.
URL: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.58.7260>

- 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., Izmaylov, A. F., Sonnenberg, J. L., Williams-Young, D., Ding, F., Lipparini, F., Egidi, F., Goings, J., Peng, B., Petrone, A., Henderson, T., Ranasinghe, D., Zakrzewski, V. G., Gao, J., Rega, N., Zheng, G., Liang, W., Hada, M., Ehara, M., Toyota, K., Fukuda, R., Hasegawa, J., Ishida, M., Nakajima, T., Honda, Y., Kitao, O., Nakai, H., Vreven, T., Throssell, K., Montgomery, Jr., J. A., Peralta, J. E., Ogliaro, F., Bearpark, M. J., Heyd, J. J., Brothers, E. N., Kudin, K. N., Staroverov, V. N., Keith, T. A., Kobayashi, R., Normand, J., Raghavachari, K., Rendell, A. P., Burant, J. C., Iyengar, S. S., Tomasi, J., Cossi, M., Millam, J. M., Klene, M., Adamo, C., Cammi, R., Ochterski, J. W., Martin, R. L., Morokuma, K., Farkas, O., Foresman, J. B. & Fox, D. J. (2016), 'Gaussian 16 Revision C.01'. Gaussian Inc. Wallingford CT.
- Hehre, W. J., Ditchfield, R. & Pople, J. A. (1972), 'Self-consistent molecular orbital methods. xii. further extensions of gaussian-type basis sets for use in molecular orbital studies of organic molecules', *The Journal of Chemical Physics* **56**(5), 2257–2261.
URL: <https://doi.org/10.1063/1.1677527>
- Hohenberg, P. & Kohn, W. (1964), 'Inhomogeneous electron gas', *Phys. Rev.* **136**, B864–B871.
URL: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864>
- Hourahine, B., Aradi, B., Blum, V., Bonafé, F., Buccheri, A., Camacho, C., Cevallos, C., Deshayé, M. Y., Dumitrică, T., Dominguez, A., Ehlert, S., Elstner, M., van der Heide, T., Hermann, J., Irle, S., Kranz, J. J., Köhler, C., Kowalczyk, T., Kubař, T., Lee, I. S., Lutscher, V., Maurer, R. J., Min, S. K., Mitchell, I., Negre, C., Niehaus, T. A., Niklasson, A. M. N., Page, A. J., Pecchia, A., Penazzi, G., Persson, M. P., Řezáč, J., Sánchez, C. G., Sternberg, M., Stöhr, M., Stuckenberg, F., Tkatchenko, A., Yu, V. W.-z. & Frauenheim, T. (2020), 'DFTB+, a software package for efficient approximate density functional theory based atomistic simulations', *The Journal of Chemical Physics* **152**(12), 124101.
URL: <https://doi.org/10.1063/1.5143190>
- Ibrayeva, A., Abibulla, U., Imanbekova, Z., Baptayev, B., O'Reilly, R. J. & Balanay, M. P. (2024), 'Advancements in carbazole-based sensitizers and hole-transport materials for enhanced photovoltaic performance', *Molecules* **29**(21), 5035.
URL: <https://doi.org/10.3390/molecules29215035>
- Momma, K. & Izumi, F. (2011), 'VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data', *Journal of Applied Crystallography* **44**(6), 1272–1276.
URL: <https://doi.org/10.1107/S0021889811038970>
- Mustafa, F. M., Abdel Khalek, A. A., Mahboob, A. A. & Abdel-Latif, M. K. (2023), 'Designing efficient metal-free dye-sensitized solar cells: A detailed computational study', *Molecules* **28**(17), 6177.
URL: <https://doi.org/10.3390/molecules28176177>
- Öztürk, N., Bekmez, M. G., Arslan, B. S., Bulut, E., Avci, D., Şişman, İ. & Nebioğlu, M. (2024), 'Acridine-based metal-free organic dyes with various auxiliary acceptors for dye-sensitized solar cells', *Dyes and Pigments* **225**, 112061.
URL: <https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2024.112061>
- Rahmatian, M. & Sayyaadi, H. (2024), 'A systematic review of a photoelectrical innovation: dye-sensitized solar cells', *International Journal of Ambient Energy* **45**(1), 2366538.
URL: <https://doi.org/10.1080/01430750.2024.2366538>
- Roohi, H. & Mohtamadifar, N. (2022), 'The role of the donor group and electron-accepting substitutions inserted in π -linkers in tuning the optoelectronic properties of D- π -A dye-sensitized solar cells: a DFT/TDDFT study', *RSC Advances* **12**(18), 11557–11573.
URL: <https://doi.org/10.1039/d2ra00906d>
- Runge, E. & Gross, E. K. U. (1984), 'Density-Functional Theory for Time-Dependent Systems', *Phys. Rev. Lett.* **52**, 997–1000.
URL: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.52.997>
- Saud, P. S., Bist, A., Kim, A. A., Yousef, A., Abutaleb, A., Park, M., Park, S.-J. & Pant, B. (2024), 'Dye-sensitized solar cells: Fundamentals, recent progress, and optoelectrical properties improvement strategies', *Optical Materials* **150**, 115242.
URL: <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2024.115242>
- Srivastava, K. V., Srivastava, P., Srivastava, A., Maurya, R. K., Singh, Y. P. & Srivastava, A. (2025), '1D TiO₂ photoanodes: a game-changer for high-efficiency dye-sensitized solar cells', *RSC Advances* **15**(7), 4789–4819.
URL: <https://doi.org/10.1039/d4ra06254j>
- Steparuk, A. S., Irgashev, R. A., Zhilina, E. F., Emets, V. V., Grinberg, V. A., Krivogina, E. V., Belova, E. V., Lazarenko, P. I., Rusinov, G. L. & Kozyukhin, S. A. (2022), 'Performance evaluation of dye-sensitized solar cells (DSSCs) based on metal-free thieno[3,2-b]indole dyes', *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* **33**(9), 6307–6317.
URL: <https://doi.org/10.1007/s10854-022-07805-w>
- Stewart, J. J. P. (2007), 'Optimization of parameters for semiempirical methods v: Modification of NDDO approximations and application to 70 elements', *Journal of Molecular Modeling* **13**(12), 1173–1213.
URL: <https://doi.org/10.1007/s00894-007-0233-4>
- Zhao, Y. & Truhlar, D. G. (2008), '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), 215–241.
URL: <https://doi.org/10.1007/s00214-007-0310-x>