



## Efecto del dopaje con Al, C y Si en nanojaulas de nitruro de boro ( $B_5N_{10}NC$ ) para mejorar la adsorción de gases tóxicos ambientales: técnica de simulación en un sensor de gas de alto rendimiento

### Resumen

Las propiedades electrónicas, magnéticas y termodinámicas de la adsorción de gases tóxicos, incluidas las moléculas de NO, NO<sub>2</sub> y N<sub>2</sub>O, mediante el uso de nanojaulas de nitruro de boro ( $B_5N_{10}NC$ ) dopadas con aluminio (Al), carbono (C) y silicio (Si) se han investigado utilizando la teoría funcional de la densidad (DFT). Según el análisis de resonancia cuadrupolar nuclear (RCN), las  $B_5N_{10}NC$  dopadas con C ha mostrado la fluctuación más baja en el potencial eléctrico y la carga atómica negativa más alta en NO@C- $B_4N_{10}NC$ , NO<sub>2</sub>@C- $B_4N_{10}NC$  y N<sub>2</sub>O@C- $B_4N_{10}NC$ . Además, los resultados informados de la espectroscopía de resonancia magnética nuclear (RMN) han demostrado que la aceptación de electrones para los átomos dopantes del X- $B_4N_{10}NC$ , a través de la adsorción de moléculas de gas, se puede ordenar como Si > Al > C. Según los resultados de la cantidad de energía libre de Gibbs ( $\Delta G^{\circ}_{ads}$ ), la eficiencia máxima del dopaje de átomos de Al, C y Si en  $B_5N_{10}NC$ , para la adsorción de moléculas de gas, depende del enlace covalente entre las moléculas de gas y X- $B_4N_{10}NC$  como un potente sensor para la eliminación de la contaminación del aire.

**Palabras clave:** contaminación del aire; sensor de gases; dopaje; nanojaulas de nitruro de boro  $B_5N_{10}NC$ ; teoría funcional de la densidad.

## Effect of Al, C, and Si doping on $B_5N_{10}$ -nanocages for enhancing environmental toxic gas adsorption: simulation technique in a high-performance gas sensor

### Abstract

The electronic, magnetic and thermodynamic properties of adsorption of toxic gases, including NO, NO<sub>2</sub>, and N<sub>2</sub>O molecules, by using boron nitride nanocages ( $B_5N_{10}NC$ ) doped with aluminum (Al), carbon (C), and silicon (Si) have been investigated using density functional theory (DFT). Based on nuclear quadrupole resonance (NQR) analysis, C-doped on  $B_5N_{10}NC$  has shown the lowest fluctuation in electric potential and the highest negative atomic charge in NO@C- $B_4N_{10}NC$ , NO<sub>2</sub>@C- $B_4N_{10}NC$ , and N<sub>2</sub>O@C- $B_4N_{10}NC$ . Furthermore, the reported results of NMR spectroscopy have exhibited that the yield of electron accepting for doping atoms on the X- $B_4N_{10}NC$  through gas molecules adsorption can be ordered as Si > Al > C. Based on the results of ( $\Delta G^{\circ}_{ads}$ ) amounts in this research, the maximum efficiency of Al, C, and Si atoms doping of  $B_5N_{10}NC$  for gas molecules adsorption depends on the covalent bond between NO, NO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O molecules and X- $B_4N_{10}NC$  as a potent sensor for air pollution elimination.

**Keywords:** air pollution; gas sensor; doping; boron nitride nanocages  $B_5N_{10}NC$ ; density functional theory.

## Efeito da dopagem Al, C e Si no nanogaiolas de nitreto de boro ( $B_5N_{10}NC$ ) para melhorar a adsorção de gases tóxicos ambientais: técnica de simulação em um sensor de gás de alto desempenho

### Resumo

As propriedades eletrônicas, magnéticas e termodinâmicas da adsorção de gases tóxicos, incluindo moléculas de NO, NO<sub>2</sub> e N<sub>2</sub>O, usando nanogaiolas de nitreto de boro ( $B_5N_{10}NC$ ) dopadas com alumínio (Al), carbono (C) e silício (Si) foram investigadas usando densidade teoria funcional (DFT). De acordo com a análise de ressonância quadrupolo nuclear (RCN), o  $B_5N_{10}NC$  dopado com C apresentou a menor flutuação no potencial elétrico e a maior carga atômica negativa em NO@C- $B_4N_{10}NC$ , NO<sub>2</sub>@C- $B_4N_{10}NC$  e N<sub>2</sub>O@C- $B_4N_{10}NC$ . Além disso, os resultados relatados da espectroscopia de ressonância magnética nuclear (RMN) mostraram que a aceitação de elétrons para os átomos dopantes do X- $B_4N_{10}NC$ , através da adsorção de moléculas de gás, pode ser ordenada como Si > Al > C. De acordo com os resultados de a quantidade de energia livre de Gibbs ( $\Delta G^{\circ}_{ads}$ ) a máxima eficiência de dopagem dos átomos de Al, C e Si em  $B_5N_{10}NC$ , para a adsorção de moléculas de gás, depende da ligação covalente entre as moléculas de gás e X- $B_4N_{10}NC$  como um poderoso sensor para remoção de poluição do ar.

**Palavras-chave:** poluição do ar; sensor de gás; dopagem; nanogaiolas de nitreto de boro  $B_5N_{10}NC$ ; densidade teoria funcional.



## Introducción

Los nanomateriales de nitruro de boro (BN) se han utilizado debido a sus atributos ecológicos y su capacidad para la adsorción de contaminantes [1–5]; además, los nanométricos de BN tienen propiedades semiconductoras, por lo que se consideran una alternativa adecuada para reemplazar los nanotubos de carbono. Las propiedades de los átomos de boro (B) y nitrógeno (N), que son los primeros vecinos del carbono (C) en la tabla periódica, hacen del BN un compuesto llamativo para numerosos estudios [6–9].

El BN existe en múltiples formas que difieren según la disposición de los átomos de B y N, lo que da lugar a materiales con diferentes propiedades. Existe BN en formas cristalinas que son isoelectrónicas a una red de C estructurada de manera similar. Debido a su excelente estabilidad térmica y química, las cerámicas de BN se utilizan en equipos de alta temperatura y fundición de metales. El BN tiene un uso potencial en nanotecnología. En los últimos años se han hecho diferentes investigaciones sobre la adsorción de contaminantes químicos y la aplicación de nanoestructuras de BN como adsorbentes para la purificación de agua [10–12]. Varias formas físicas de nanoadsorbentes de BN, como nanopartículas, fullerenos, nanotubos, nanofibras, nanocintas, nanoláminas, nanomallas, nanoflores y esferas huecas, se han considerado como posibles adsorbentes debido a sus características excepcionales: su gran superficie, su variabilidad estructural, su gran resistencia química y mecánica, sus abundantes defectos estructurales y su gran cantidad de sitios reactivos y grupos funcionales [13–15].

Sus grupos funcionales y su alta superficie específica permiten que el BN adsorba física y químicamente moléculas de gas [16–22]. Investigaciones recientes [23–25] proporcionan conocimientos novedosos sobre las características fisicoquímicas y el impacto toxicológico de los nanomateriales 2D de BN comerciales. Estos resultados respaldan la idoneidad de los nanomateriales de BN como materiales 2D para desarrollar aplicaciones biomédicas y medioambientales. Sin embargo, dado que el grado de pureza, el tamaño, la forma y el espesor del nanomaterial pueden influir en la respuesta biológica de diferentes organismos, en el presente trabajo se han elegido las nanojaulas de nitruro de boro  $B_5N_{10}NC$ .

En las investigaciones también se ha evaluado la eficiencia de las  $B_5N_{10}NC$  dopadas con Aluminio (Al), C y Silicio (Si) para la detección de gases. Después de dopar las nanojaulas con los elementos mencionados, la fórmula del compuesto es  $X-B_4N_{10}NC$ , donde  $X = Al, C$  o  $Si$ . También se puede destacar la naturaleza quimisorbitiva del enlace entre las moléculas de gas con B y N a través de la distribución en equilibrio de los átomos dopantes (Al, C y Si) y las nanojaulas. El dopado de Al, C y Si en algunos compuestos produce semiconductores isoelectrónicos que pueden aplicarse como biosensores para la detección de gases.

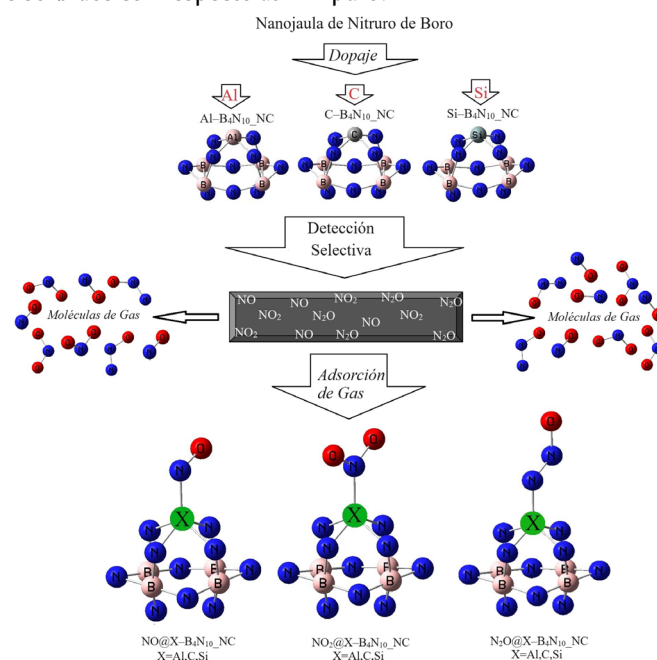
Las moléculas de gas que constituyen la contaminación dominante en el aire son NO,  $NO_2$  y  $N_2O$ . Por lo tanto, este trabajo tiene como objetivo investigar, a través de la teoría del funcional de la densidad (DFT), las propiedades electrónicas, magnéticas y termodinámicas de la adsorción de gases tóxicos (NO,  $NO_2$  y  $N_2O$ ) utilizando  $B_5N_{10}NC$  dopado con Al, C y Si. Se calcularon algunas posiciones geométricas de interacción, pero sus estructuras después del cálculo no se minimizaron. Los resultados reportados pertenecen a las estructuras mejor optimizadas.

## Materiales y métodos

### Adsorción de moléculas de gas en $X-B_4N_{10}NC$

En este estudio se utilizaron  $B_5N_{10}NC$  dopadas con Al, C y Si para eliminar las moléculas tóxicas de gas del aire, incluidos NO,  $NO_2$  y  $N_2O$ . Cada nanojaula (NC) se modeló en presencia de átomos do-

pantes de Al, C y Si que aumentan su potencial de detección de gas. La caracterización de la muestra se realizó mediante CAM-B3LYP-D3/EPR-3, nivel de teoría LANL2DZ. La adición de correcciones de dispersión, PBE + D3, mejora la energía de adsorción de los sistemas fisisorbidos con respecto al PBE puro.



**Figura 1.** Aplicación de  $B_5N_{10}NC$  dopado con X para la adsorción de moléculas de gas NO,  $NO_2$  y  $N_2O$ :  $NO@X-B_4N_{10}NC$ ,  $NO_2@X-B_4N_{10}NC$  y  $N_2O@X-B_4N_{10}NC$  utilizando CAM - B3LYP-D3/6-311 + G (d, p), LANL2DZ.  $X = Al, C$  o  $Si$ .

La **figura 1** muestra el proceso de adsorción de moléculas de gas de NO,  $NO_2$  y  $N_2O$  en la superficie de  $X-B_4N_{10}NC$  que conduce a la formación de complejos que contienen  $NO@Al-B_4N_{10}NC$ ,  $NO@C-B_4N_{10}NC$ ,  $NO@Si-B_4N_{10}NC$ ,  $NO_2@Al-B_4N_{10}NC$ ,  $NO_2@C-B_4N_{10}NC$ ,  $NO_2@Si-B_4N_{10}NC$ ,  $N_2O@Al-B_4N_{10}NC$ ,  $N_2O@C-B_4N_{10}NC$  y  $N_2O@Si-B_4N_{10}NC$  mediante cálculos de modelado molecular. La distribución de carga de los complejos mencionados se calculó mediante el análisis de carga de Bader [26–29].

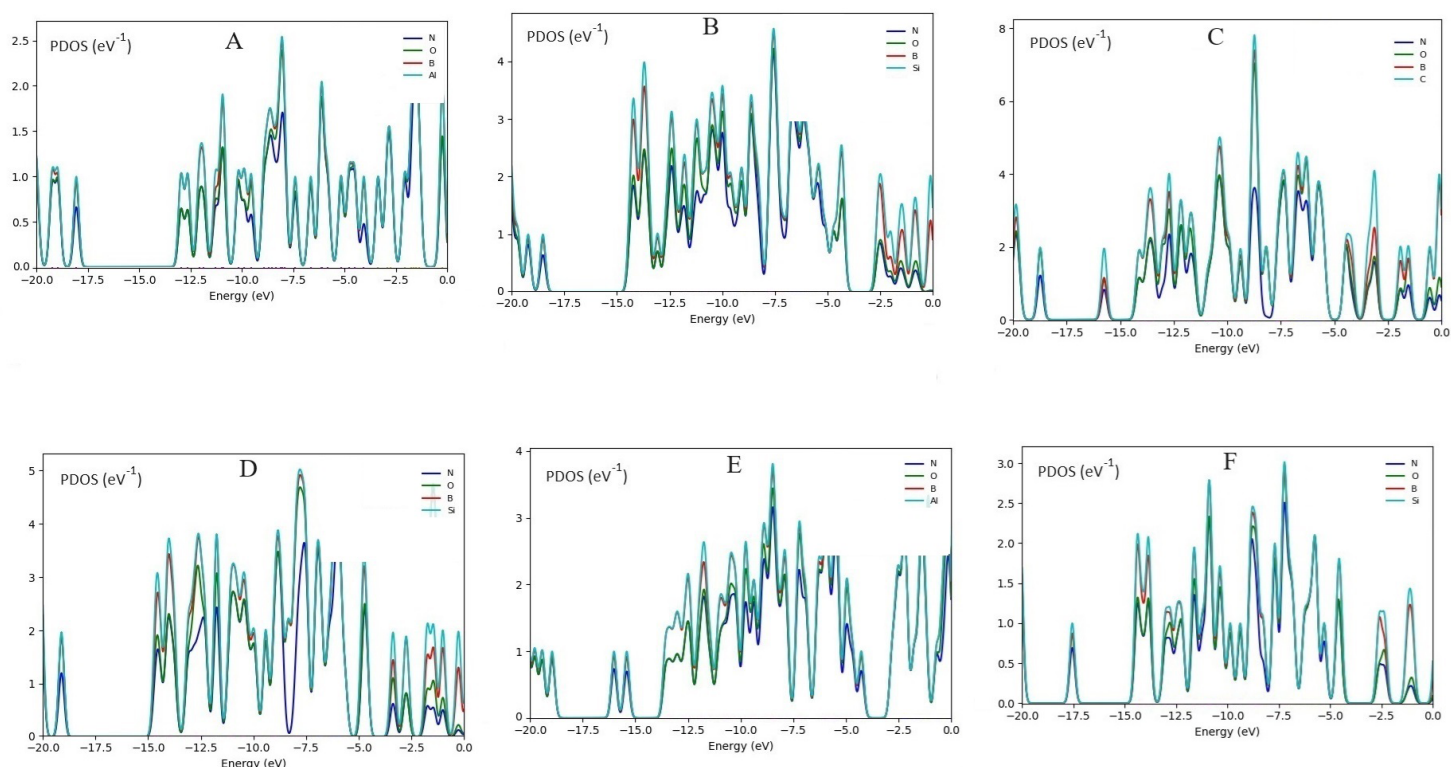
La captura de moléculas de NO,  $NO_2$  y  $N_2O$  por  $X-B_4N_{10}NC$  ( $X = Al, C$  o  $Si$ ) se incorporó con éxito debido a la formación de unión que consiste en  $N \rightarrow Al$ ,  $N \rightarrow C$ ,  $N \rightarrow Si$  (**figura 1**). Cada nanojaula se expandió para acomodar las moléculas de gas mejorando la sensibilidad selectiva a través de diferentes átomos dopantes de Al, C y Si (**figura 1**).

### Aplicación del enfoque de la teoría funcional de la densidad (DFT)

Las funciones de Hohenberg-Kohn (HK) han permitido la densidad electrónica como variable fundamental para los cálculos electrónicos y estructurales. En otras palabras, el desarrollo de la teoría funcional de la densidad (DFT) aplicada sólo se hizo notable después de que W. Kohn y L. J. Sham publicaron su reputada serie de ecuaciones que se presentan como ecuaciones de Kohn-Sham (KS) [30–35]. Por lo tanto, la metodología KS aligera el camino para la búsqueda de sistemas que no pueden ser discutidos por las metodologías *ab-initio* convencionales [36–44].

En este artículo, se ha calculado la superficie de energía potencial, utilizando cálculos DFT, aplicando la revisión C.01 del software Gaussian 16 [45]. La matriz Z de entrada para la adsorción de moléculas de NO,  $NO_2$  y  $N_2O$  en el aire mediante el  $X-B_4N_{10}NC$  se ha diseñado con GaussView 6.1 [46] utilizando el conjunto de bases 6-311+G (d,p), EPR-3 y LANL2DZ. En este estudio se modeló y analizó la interacción entre las moléculas de gas y  $X-B_4N_{10}NC$ .

Como lo reveló el análisis basado en DFT, la potencia de  $X-B_4N_{10}NC$  para capturar moléculas de gas estuvo determinada principalmente



**Figura 2.** PDOS de moléculas de gas de NO, NO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O adsorbidas en X-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>NC. A: NO@Al-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>NC, B: NO@Si-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>NC, C: NO<sub>2</sub>@C-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>NC, D: NO<sub>2</sub>@Si-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>NC, E: N<sub>2</sub>O@Al-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>NC, y F: N<sub>2</sub>O@Si-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>NC. Datos calculados en CAM-B3LYP-D3/6-311+G (d,p), LANL2DZ.

por la electronegatividad de los grupos funcionales, así como por la interacción entre X-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>NC y las moléculas de gas [47–53]. Aquí enfatizamos la distinción entre la energía de enlace (fuerza de interacción), que es el objetivo de nuestro cálculo de grupo, y la energía de quimisorción, que es el objetivo del enfoque completo. Utilizamos el concepto químico de preparación de enlaces para argumentar que el enlace local ya está bien descrito por grupos de tamaño pequeño y, por lo tanto, se puede establecer una corrección de nivel superior.

## Resultados y discusión

### PDOS y evaluación electrónica

Las estructuras electrónicas de adsorción de gas ( $G = NO, NO_2$  y  $N_2O$ ), utilizando  $B_5N_{10}NC$  dopado con X ( $X = Al, C$  o  $Si$ ) como sensor selectivo para detectar y capturar moléculas de gas en el aire, se han ilustrado utilizando CAM-B3LYP-D3/6-311+G (d,p), nivel teórico LANL2DZ.

La **figura 2** muestra la densidad de estado proyectada (PDOS) de  $G@X-B_4N_{10}NC$  a través de la adsorción de moléculas de gas. La aparición de los estados de energía (orbital p) de Al, C, Si, N y O dentro del espacio de  $X-B_4N_{10}NC$  induce la reactividad del sistema. En la figura se observa que después de atrapar moléculas de gas, hay una contribución significativa del orbital p en el nivel desocupado. Por lo tanto, la curva de PDOS parcial ha descrito que los estados p de los átomos de N en las moléculas de gas y los átomos de Al, C y Si en  $X-B_4N_{10}NC$  se superan debido a la banda de conducción (**figura 2**). Se puede observar un rasgo de adsorción distinguido en  $G@X-B_4N_{10}NC$  debido a la potente interacción entre los estados p del átomo de N en las moléculas de gas con los estados p de Al, C y Si en los complejos  $X-B_4N_{10}NC$ .

La **figura 2** muestra que  $NO@Al-B_4N_{10}NC$ ,  $NO@Si-B_4N_{10}NC$ ,  $NO_2@C-B_4N_{10}NC$ ,  $NO_2@Si-B_4N_{10}NC$ ,  $N_2O@Al-B_4N_{10}NC$  y  $N_2O@Si-B_4N_{10}NC$ , a través de la adsorción de moléculas de gas, tienen la contribución en el medio de la banda de conducción entre -5 y -10 eV, mientras que la contribución de los estados de B y N son mayores y similares juntos, y la adsorción de NO, NO<sub>2</sub> y N<sub>2</sub>O representa la electrónica interfacial del  $B_5N_{10}NC$  para la selección de estas

moléculas de gas.  $NO@Al-B_4N_{10}NC$  muestra un pico agudo para Al en la **figura 2A**, mientras que  $NO@Si-B_4N_{10}NC$  (**figura 2B**) muestra un pico agudo alrededor de -7,5 eV para el átomo de Si. Además, los complejos  $NO_2@C-B_4N_{10}NC$  (**figura 2C**) y  $NO_2@Si-B_4N_{10}NC$  (**figura 2D**) muestran un pico alrededor de -9 eV para el átomo de C y de -7,5 eV para el átomo de Si. La gráfica de Al tiene un pico agudo alrededor de -9 eV en  $N_2O@Al-B_4N_{10}NC$  (**figura 2E**), y el gráfico de Si tiene un pico agudo alrededor de -7,5 eV en  $N_2O@Si-B_4N_{10}NC$  (**figura 2F**). Por lo tanto, el orden de potencia de la adsorción de gas mediante dopaje de átomos de Al, C y Si en  $X-B_4N_{10}NC$ , según el PDOS, es  $Si-B_4N_{10}NC > Al-B_4N_{10}NC > C-B_4N_{10}NC$ .

### Resonancia cuadrupolar nuclear (RCN)

Como el gradiente del campo eléctrico (GCE) del núcleo en NO, NO<sub>2</sub> y N<sub>2</sub>O es asignado por los electrones de valencia en la unión con los núcleos cercanos de  $X-B_4N_{10}NC$ , mediante la captura de moléculas de gas, la resonancia cuadrupolar nuclear (RCN) es alta para los complejos  $G@X-B_4N_{10}NC$  ( $G = NO, NO_2$  o  $N_2O$ ) (**tabla 1**) [54–57].

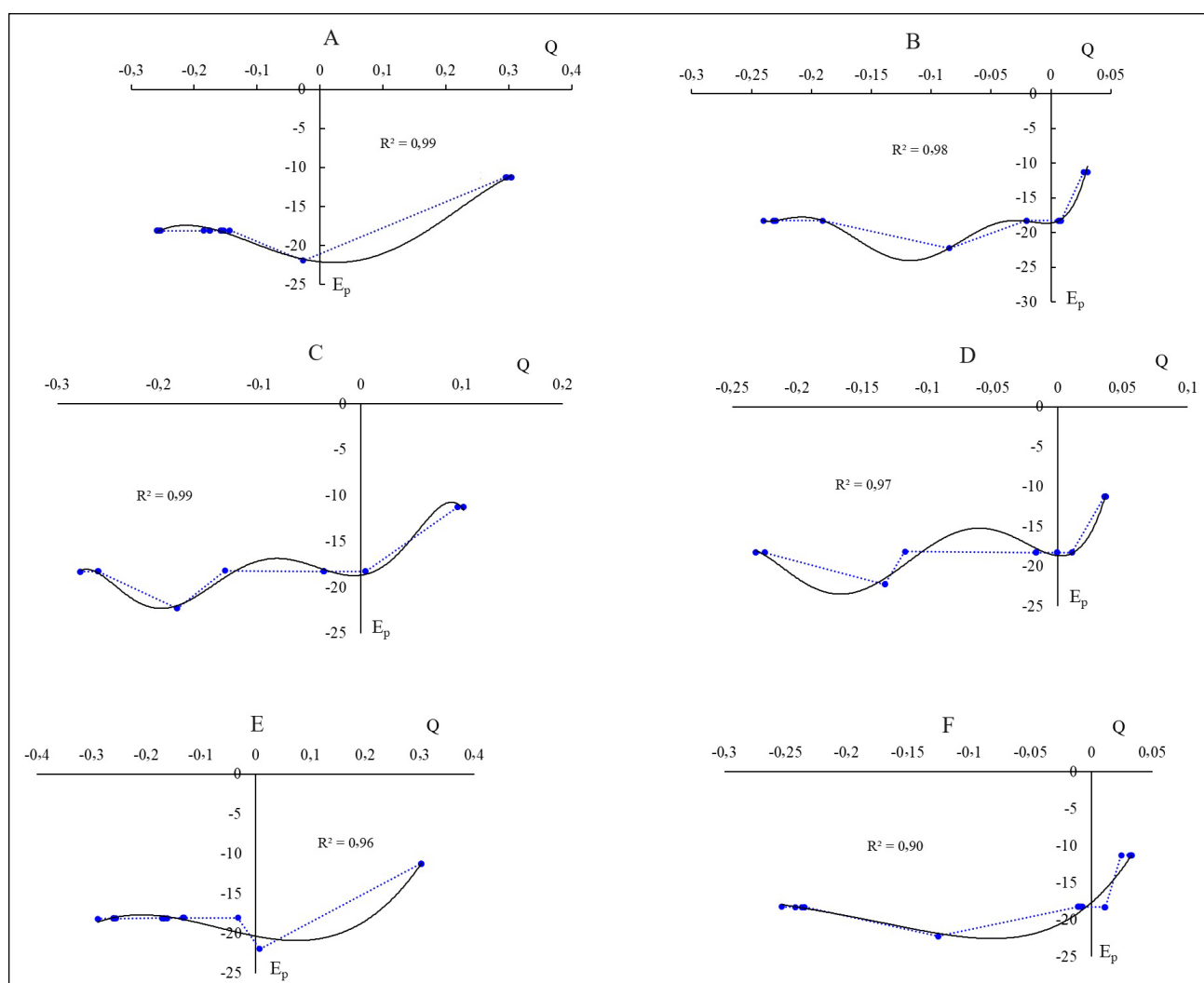
En este trabajo de investigación, se ha evaluado tanto el potencial eléctrico como la cantidad de energía de trabajo durante el transporte de la carga eléctrica de una posición a otra dentro del campo eléctrico de los siguientes complejos:  $NO@Al-B_4N_{10}NC$ ,  $NO@C-B_4N_{10}NC$ ,  $NO@Si-B_4N_{10}NC$ ,  $NO_2@Al-B_4N_{10}NC$ ,  $NO_2@C-B_4N_{10}NC$ ,  $NO_2@Si-B_4N_{10}NC$ ,  $N_2O@Al-B_4N_{10}NC$ ,  $N_2O@C-B_4N_{10}NC$  y  $N_2O@Si-B_4N_{10}NC$  (**tabla 1**).

En la **tabla 1** se muestra la carga de Bader y el potencial eléctrico de Al, C, Si, B y N en  $X-B_4N_{10}NC$ , y de N y O en moléculas de gas atrapadas en las nanojaulas dopadas. Las cantidades indican que, al aumentar la carga negativa de diferentes átomos, aumenta el potencial eléctrico que resulta de los cálculos de resonancia cuadrupolar nuclear (RCN). Además, los átomos dopantes de Al (15), C (15) y Si (15) en el  $B_5N_{10}NC$  muestran el potencial necesario para aceptar el electrón del donante de electrones de N (1) en NO, NO<sub>2</sub> y N<sub>2</sub>O adsorbido en el  $B_5N_{10}NC$  (**tabla 1**).

Además, en la **figura 3** se ha esbozado el potencial eléctrico de RCN para algunos átomos de Al, C, Si, B y N en  $X-B_4N_{10}NC$  y de N y O en moléculas de gas atrapadas en partículas dopadas. Las nanojaulas han sido calculadas por CAM-B3LYP-D3/EPR-3, LANL2DZ.

**Tabla 1.** Potencial eléctrico (Ep/a.u.) y carga de Bader (Q/coulombio) mediante el cálculo de RCN para los complejos NO@Al-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, NO@C-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, NO@Si-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, NO<sub>2</sub>@Al-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, NO<sub>2</sub>@C-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, NO<sub>2</sub>@Si-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, N<sub>2</sub>O@Al-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, N<sub>2</sub>O@C-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC y N<sub>2</sub>O@Si-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC utilizando CAM-B3LYP-D3/EPR-3, LANL2DZ.

NO@Al-B <sub>4</sub> N <sub>10</sub> _NC			NO@C-B <sub>4</sub> N <sub>10</sub> _NC			NO@Si-B <sub>4</sub> N <sub>10</sub> _NC		
Átomo	Q	Ep	Átomo	Q	Ep	Átomo	Q	Ep
N1	-0,1853	-18,0820	N1	0,1466	-18,1839	N1	-0,1906	-18,2495
O2	-0,0268	-21,9319	O2	-0,0949	-22,2001	O2	-0,0846	-22,2135
B3	0,3040	-11,2292	B3	0,0321	-11,2869	B3	0,0273	-11,2791
N4	-0,1757	-18,0903	N4	-0,0140	-18,2911	N4	0,0080	-18,2831
N5	-0,1524	-18,0544	N5	-0,0458	-18,2680	N5	0,0060	-18,2656
B6	0,3033	-11,2288	B6	0,0310	-11,2865	B6	0,0310	-11,2787
B7	0,2954	-11,2274	B7	0,0323	-11,2871	B7	0,0303	-11,2793
B8	0,2970	-11,2278	B8	0,0316	-11,287	B8	0,0316	-11,2788
N9	-0,1558	-18,0628	N9	-0,0256	-18,2799	N9	-0,0205	-18,2690
N10	-0,1434	-18,0452	N10	-0,0447	-18,2682	N10	0,0066	-18,2652
N11	-0,2581	-18,1141	N11	-0,0369	-18,2631	N11	-0,2401	-18,2808
N12	-0,2549	-18,1122	N12	-0,0337	-18,2633	N12	-0,2300	-18,2805
N13	-0,2532	-18,1122	N13	-0,0326	-18,2642	N13	-0,2316	-18,2817
N14	-0,2595	-18,1145	N14	-0,0328	-18,2626	N14	-0,2309	-18,2802
Al15	0,9984	-43,6440	C15	0,1190	-14,5472	Si15	1,0996	-1,7597
N16	-0,1580	-18,0648	N16	-0,0259	-18,2804	N16	-0,0204	-18,2692
N17	-0,1748	-18,0893	N17	-0,0091	-18,2903	N17	0,0082	-18,2832
NO <sub>2</sub> @Al-B <sub>4</sub> N <sub>10</sub> _NC			NO <sub>2</sub> @C-B <sub>4</sub> N <sub>10</sub> _NC			NO <sub>2</sub> @Si-B <sub>4</sub> N <sub>10</sub> _NC		
Átomo	Q	Ep	Átomo	Q	Ep	Átomo	Q	Ep
N1	-0,1342	-18,1795	N1	0,1612	-18,1173	N1	-0,1173	-18,1461
O2	-0,1816	-22,2655	O2	-0,1127	-22,2184	O2	-0,1327	-22,2400
B3	0,0958	-11,2523	B3	0,0351	-11,2800	B3	0,0359	-11,2720
N4	0,0048	-18,2508	N4	-0,0082	-18,2851	N4	0,0108	-18,2776
N5	-0,0365	-18,2198	N5	-0,0420	-18,2631	N5	-0,0004	-18,2554
B6	0,1019	-11,2528	B6	0,0365	-11,2801	B6	0,0370	-11,2719
B7	0,0958	-11,2523	B7	0,0351	-11,2800	B7	0,0359	-11,2719
B8	0,1018	-11,2527	B8	0,0364	-11,2801	B8	0,0370	-11,2719
N9	-0,0366	-18,2368	N9	-0,0233	-18,2733	N9	-0,0168	-18,2634
N10	-0,0365	-18,2197	N10	-0,0420	-18,2631	N10	-0,0004	-18,2554
N11	-0,2598	-18,2510	N11	-0,0295	-18,2567	N11	-0,2250	-18,2703
N12	-0,2772	-18,2540	N12	-0,0287	-18,2568	N12	-0,2321	-18,2707
N13	-0,2597	-18,2510	N13	-0,0295	-18,2567	N13	-0,2250	-18,2703
N14	-0,2772	-18,2540	N14	-0,0287	-18,2568	N14	-0,2320	-18,2707
Al15	1,3123	-1,1113	C15	0,1844	-14,5136	Si15	1,1638	-1,7398
N16	-0,0364	-18,2368	N16	-0,0232	-18,2733	N16	-0,0166	-18,2634
N17	0,0048	-18,2508	N17	-0,0082	-18,2851	N17	0,0108	-18,2776
O18	-0,1816	-22,2655	O18	-0,1127	-22,2184	O18	-0,1327	-22,2400
N <sub>2</sub> O@Al-B <sub>4</sub> N <sub>10</sub> _NC			N <sub>2</sub> O@C-B <sub>4</sub> N <sub>10</sub> _NC			N <sub>2</sub> O@Si-B <sub>4</sub> N <sub>10</sub> _NC		
Átomo	Q	Ep	Átomo	Q	Ep	Átomo	Q	Ep
N1	-0,2890	-18,1400	N1	0,0243	-18,2323	N1	-0,2528	-18,2554
N2	-0,0327	-18,0231	N2	0,0758	-18,1955	N2	0,0998	-18,1806
B3	0,3032	-11,2217	B3	0,0273	-11,2777	B3	0,0245	-11,2753
N4	-0,1661	-18,0676	N4	-0,0131	-18,2725	N4	-0,0089	-18,2677
N5	-0,1313	-18,0435	N5	-0,0475	-18,2591	N5	-0,0107	-18,2589
B6	0,3032	-11,2188	B6	0,0317	-11,2780	B6	0,0325	-11,2758
B7	0,3026	-11,2192	B7	0,0330	-11,2790	B7	0,0315	-11,2755
B8	0,3021	-11,2221	B8	0,0330	-11,2794	B8	0,0331	-11,2764
N9	-0,1688	-18,0859	N9	-0,0037	-18,2820	N9	0,0115	-18,2797
N10	-0,1330	-18,0451	N10	-0,0528	-18,2625	N10	-0,0113	-18,2595
N11	-0,2600	-18,1047	N11	-0,0200	-18,2508	N11	-0,2417	-18,2743
N12	-0,2591	-18,1052	N12	-0,0220	-18,2540	N12	-0,2344	-18,2770
N13	-0,2556	-18,1053	N13	-0,0283	-18,2551	N13	-0,2346	-18,2762
N14	-0,2608	-18,1058	N14	-0,0190	-18,2536	N14	-0,2366	-18,2776
Al15	1,0720	-43,6436	C15	0,1312	-14,5096	Si15	1,1201	-1,7531
N16	-0,1717	-18,0898	N16	-0,0042	-18,2830	N16	0,0105	-18,2811
N17	-0,1619	-18,0612	N17	-0,0121	-18,2720	N17	-0,0071	-18,2666
O18	0,0070	-21,9432	O18	-0,1334	-22,2329	O18	-0,1253	-22,2322



**Figura 3.** Potencial eléctrico (a.u.) versus carga de Bader (e) mediante cálculo de RCN para los complejos A:  $NO@Al-B_4N_{10\_NC}$ , B:  $NO@Si-B_4N_{10\_NC}$ , C:  $NO_2@C-B_4N_{10\_NC}$ , D:  $NO_2@Si-B_4N_{10\_NC}$ , E:  $N_2O@Al-B_4N_{10\_NC}$ , y F:  $N_2O@Si-B_4N_{10\_NC}$ . Se utilizó CAM-B3LYP-D3/EPR-3, LANL2DZ.

En las **figuras 3A** y **3B** se observa el comportamiento de la adsorción de NO en  $Al-B_4N_{10\_NC}$  y en  $NO@Si-B_4N_{10\_NC}$  de acuerdo con los coeficientes de relación  $R^2 = 0,99$  y  $R^2 = 0,98$ , respectivamente. La adsorción de  $NO_2$  en  $C-B_4N_{10\_NC}$  y  $Si-B_4N_{10\_NC}$  (**figuras 3C** y **3D**) muestra la detección más alta con  $R^2 = 0,99$  y  $R^2 = 0,97$ . Además, las **figuras 3E** y **3F** muestran que  $N_2O@Al-B_4N_{10\_NC}$  y  $N_2O@Si-B_4N_{10\_NC}$  tienen buena detección para eliminar  $N_2O$  del aire pues presentan un coeficiente de relación de  $R^2 = 0,96$  y  $R^2 = 0,90$ . Los altos valores de los coeficientes de correlación han ilustrado una medida numérica de algún tipo de correlación lineal, es decir, una relación estadística entre el potencial eléctrico y la carga atómica.

La curva de  $X-B_4N_{10\_NC}$  es ondulada por las moléculas de gas. Los picos fluctuantes del potencial eléctrico se observan alrededor del atrapamiento de  $NO_2 > NO > N_2O$  en el  $X-B_4N_{10\_NC}$ , lo que demuestra las especificaciones de aceptación de electrones del N y el O frente al Al, el C y el Si dopados en el  $B_5N_{10\_NC}$  (**figura 3**). Además, se puede considerar que el Si, como elemento semiconductor en la  $B_5N_{10\_NC}$ , podría tener una mayor sensibilidad para aceptar electrones de NO (**figura 3B**),  $NO_2$  (**figura 3D**) y  $N_2O$  (**figura 3F**) durante la adsorción. Sin embargo, el material dopado con C en  $B_5N_{10\_NC}$  ha mostrado la fluctuación más baja entre la carga de Bader vs. el extracto de potencial eléctrico de los parámetros RCN y la carga atómica negativa más alta, incluyendo 0,1190 C en  $NO@C-B_4N_{10\_NC}$ , 0,1844 C en  $NO_2@C-B_4N_{10\_NC}$  y 0,1312 C en  $N_2O@C-B_4N_{10\_NC}$ , que pueden ser apropiados porque tienen la mayor tendencia a aceptar electrones en la corriente de adsorción (**tabla 1**). El Al y el Si dopados con  $B_5N_{10\_NC}$  (adsorbentes), con un promedio de 1,1 C de carga atómica sobre (Al, Si)- $B_4N_{10\_NC}$ , han mostrado un comportamiento similar en el procedimiento de eliminación de moléculas de gas (adsorbatos).

De hecho, se sabe que la absorción de moléculas de gas está asociada con  $X-B_4N_{10\_NC}$ , lo que indica que las moléculas de gas adsorbidas en la nanojaula dopada con X pueden internalizarse a través de una vía diferente a la de la primera nanojaula ( $B_5N_{10\_NC}$ ).

### **Espectroscopía de resonancia magnética nuclear (RMN)**

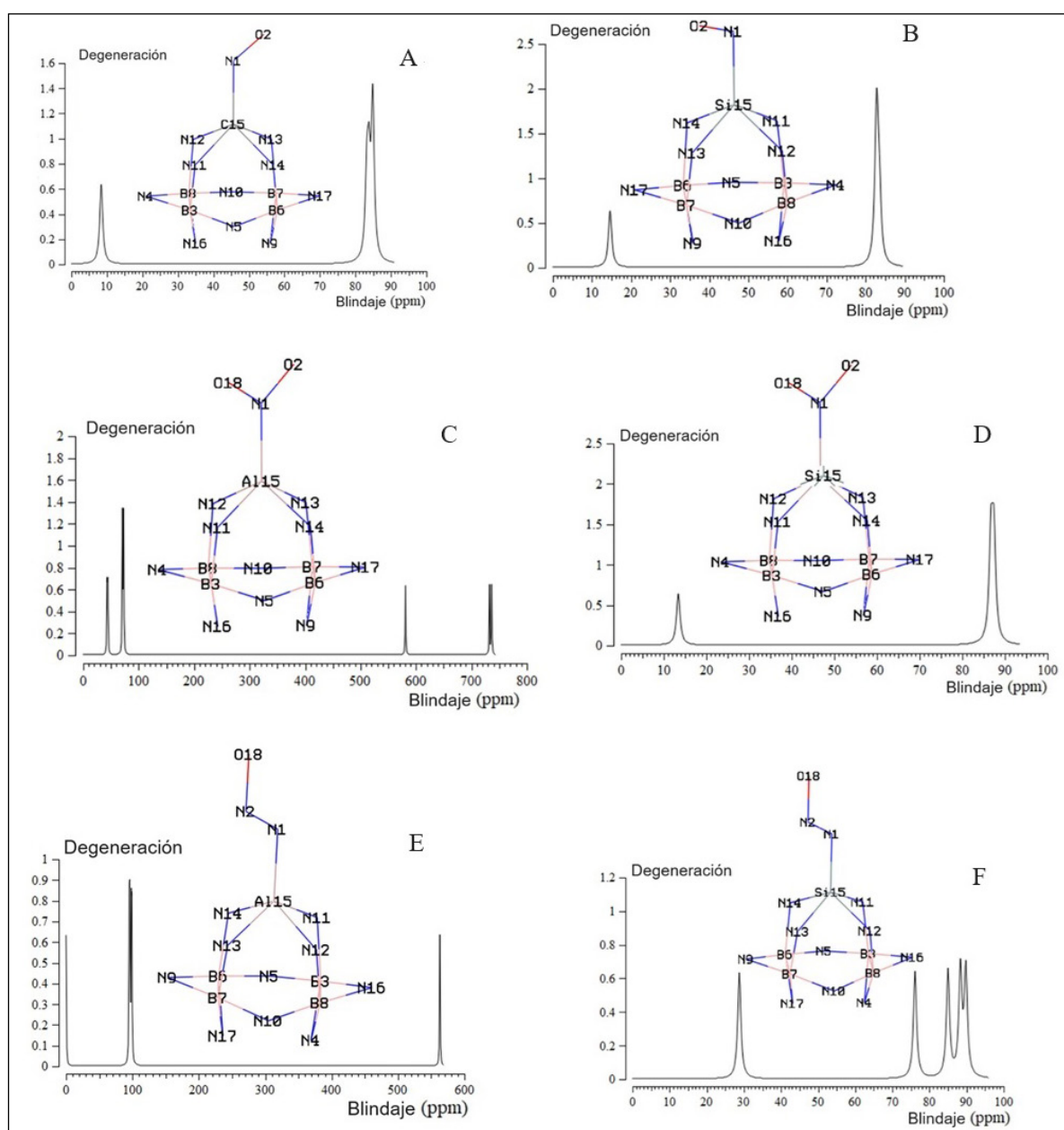
Según las cantidades resultantes, los espectros de resonancia magnética nuclear (RMN) pueden desentrañar la eficiencia de  $X-B_4N_{10\_NC}$  para detectar y eliminar los gases peligrosos en el aire con un enfoque ecológico. A partir de los cálculos de DFT, se han obtenido los tensores de blindaje químico en el sistema de ejes principales para estimar el blindaje químico isotrópico ( $\sigma_{iso}$ ) y el blindaje químico anisotrópico ( $\sigma_{aniso}$ ) de los gases [58-60].

Los datos de RMN de tensores de  $\sigma_{iso}$  y  $\sigma_{aniso}$  de moléculas de gas atrapadas en  $X-B_4N_{10\_NC}$  para la formación de  $NO@Al-B_4N_{10\_NC}$ ,  $NO@C-B_4N_{10\_NC}$ ,  $NO@Si-B_4N_{10\_NC}$ ,  $NO_2@Al-B_4N_{10\_NC}$ ,  $NO_2@C-B_4N_{10\_NC}$ ,  $NO_2@Si-B_4N_{10\_NC}$ ,  $N_2O@Al-B_4N_{10\_NC}$ ,  $N_2O@C-B_4N_{10\_NC}$  y  $N_2O@Si-B_4N_{10\_NC}$  se han calculado mediante el paquete de programa Gaussian 16 revisión C.01 [45] y se muestran en la **tabla 2**.

En la **tabla 2**, los datos de RMN informaron las cantidades notables de NO,  $NO_2$ ,  $N_2O$  que se adsorbieron en el  $X-B_4N_{10\_NC}$  como sensor selectivo para detectar moléculas de gas en el aire. El aumento observado en la anisotropía del desplazamiento químico se extiende para los átomos de N y O2 para la adsorción de NO/ $N_2O$  y O2/O18 para la adsorción de  $NO_2$  en el  $X-B_4N_{10\_NC}$ . La débil intensidad de la señal observada cerca del borde paralelo del patrón de la nanojaula puede deberse a la distribución no esférica de estos complejos inducida por la unión del B.

**Tabla 2.** Datos de tensores de blindaje de RMN para átomos seleccionados de NO@Al-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, NO@C-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, NO@Si-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, NO<sub>2</sub>@Al-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, NO<sub>2</sub>@C-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, NO<sub>2</sub>@Si-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, N<sub>2</sub>O@Al-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, N<sub>2</sub>O@C-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC y N<sub>2</sub>O@Si-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC utilizando CAM-B3LYP-D3/6-311+G (d,p), cálculo LANL2DZ.

NO@Al-B <sub>4</sub> N <sub>10</sub> _NC			NO@C-B <sub>4</sub> N <sub>10</sub> _NC			NO@Si-B <sub>4</sub> N <sub>10</sub> _NC		
Átomo	$\sigma_{iso}$	$\sigma_{aniso}$	Átomo	$\sigma_{iso}$	$\sigma_{aniso}$	Átomo	$\sigma_{iso}$	$\sigma_{aniso}$
N1	8623,32	27621,57	N1	767,22	574,98	N1	192,56	384,90
O2	1911,01	60055,67	O2	1697,96	1904,72	O2	483,66	446,82
B3	86,22	111,56	B3	83,21	75,50	B3	82,97	83,28
N4	398,76	5613,57	N4	698,49	846,36	N4	632,16	715,69
N5	1776,02	4560,20	N5	419,17	284,09	N5	460,89	248,70
B6	49,90	132,42	B6	84,90	76,89	B6	82,84	84,06
B7	88,70	112,26	B7	83,80	78,10	B7	83,55	82,75
B8	71,25	98,23	B8	84,84	75,04	B8	82,66	83,30
N9	673,90	3914,01	N9	421,55	778,50	N9	336,67	513,56
N10	2101,53	4479,16	N10	417,63	182,60	N10	457,73	296,56
N11	1145,30	6048,66	N11	574,52	402,81	N11	461,37	425,06
N12	284,26	4440,80	N12	538,46	433,46	N12	468,95	388,36
N13	434,51	1761,12	N13	581,63	365,00	N13	499,78	451,39
N14	681,36	2664,93	N14	556,56	519,43	N14	465,66	387,06
Al15	44,57	1469,07	C15	8,39	43,65	Si15	14,62	12,52
N16	496,25	2696,81	N16	390,13	810,91	N16	329,86	536,87
N17	2319,99	5536,37	N17	685,03	860,42	N17	611,84	711,69
NO <sub>2</sub> @Al-B <sub>4</sub> N <sub>10</sub> _NC			NO <sub>2</sub> @C-B <sub>4</sub> N <sub>10</sub> _NC			NO <sub>2</sub> @Si-B <sub>4</sub> N <sub>10</sub> _NC		
Átomo	$\sigma_{iso}$	$\sigma_{aniso}$	Átomo	$\sigma_{iso}$	$\sigma_{aniso}$	Átomo	$\sigma_{iso}$	$\sigma_{aniso}$
N1	127,48	408,57	N1	355,92	240,70	N1	351,76	362,40
O2	736,54	2843,97	O2	1494,82	344,94	O2	1640,67	1363,15
B3	72,81	102,90	B3	82,62	80,50	B3	86,75	83,11
N4	1345,89	3740,25	N4	675,11	728,24	N4	667,28	729,72
N5	1403,66	2050,89	N5	419,86	100,44	N5	449,04	212,10
B6	70,81	100,78	B6	83,98	77,82	B6	87,42	81,72
B7	72,85	102,84	B7	82,60	80,57	B7	86,74	83,16
B8	70,79	100,83	B8	83,99	77,83	B8	87,42	81,75
N9	593,07	1535,08	N9	337,76	725,45	N9	313,33	635,74
N10	1405,28	2053,34	N10	419,80	100,64	N10	448,95	211,72
N11	43,11	2097,30	N11	565,20	477,60	N11	444,08	395,29
N12	69,38	1911,86	N12	585,31	503,19	N12	449,18	406,40
N13	44,49	2099,87	N13	565,92	478,21	N13	444,94	395,52
N14	68,31	1917,77	N14	585,41	503,81	N14	449,40	407,20
Al15	581,14	354,23	C15	49,99	87,76	Si15	13,41	10,65
N16	593,69	1538,86	N16	337,34	725,90	N16	313,06	636,08
N17	1340,04	3734,09	N17	674,45	727,66	N17	666,68	729,12
O18	732,81	2835,74	O18	1494,73	344,88	O18	1640,63	1363,26
N <sub>2</sub> O@Al-B <sub>4</sub> N <sub>10</sub> _NC			N <sub>2</sub> O@C-B <sub>4</sub> N <sub>10</sub> _NC			N <sub>2</sub> O@Si-B <sub>4</sub> N <sub>10</sub> _NC		
Átomo	$\sigma_{iso}$	$\sigma_{aniso}$	Átomo	$\sigma_{iso}$	$\sigma_{aniso}$	Átomo	$\sigma_{iso}$	$\sigma_{aniso}$
N1	267,89	453,18	N1	41,33	1687,67	N1	78,93	567,22
N2	168,13	170,90	N2	864,66	932,50	N2	625,27	512,88
B3	99,01	75,58	B3	69,95	136,15	B3	76,10	120,90
N4	0,05	389,96	N4	1952,94	3217,63	N4	1209,22	2081,44
N5	14,97	299,65	N5	4341,51	5912,65	N5	2524,64	3080,04
B6	95,88	75,63	B6	70,45	117,46	B6	84,99	95,13
B7	95,20	76,47	B7	97,47	105,05	B7	89,80	100,23
B8	98,22	75,70	B8	86,46	108,18	B8	88,32	97,13
N9	102,43	331,31	N9	747,56	7237,79	N9	278,88	3989,46
N10	29,83	283,75	N10	2423,12	3261,16	N10	1756,26	2124,54
N11	467,03	400,15	N11	381,13	2220,66	N11	220,22	1341,21
N12	501,16	490,33	N12	423,86	1511,34	N12	309,98	1116,88
N13	470,79	469,84	N13	98,49	2976,83	N13	361,77	1430,73
N14	441,85	357,38	N14	71,03	2659,88	N14	265,39	1247,17
Al15	563,07	31,28	C15	6,56	79,12	Si15	28,77	17,21
N16	406,24	655,66	N16	1026,01	6313,65	N16	539,06	3707,21
N17	149,96	150,11	N17	2268,01	3633,97	N17	1376,43	2295,01
O18	748,70	361,86	O18	2712,98	4012,29	O18	1803,07	1337,35



**Figura 4.** Espectros de RMN para A:  $NO@C-B_4N_{10}$ \_NC, B:  $NO@Si-B_4N_{10}$ \_NC, C:  $NO_2@Al-B_4N_{10}$ \_NC, D:  $NO_2@Si-B_4N_{10}$ \_NC, E:  $N_2O@Al-B_4N_{10}$ \_NC y F:  $N_2O@Si-B_4N_{10}$ \_NC usando CAM-B3LYP-D3/6-311+G (d,p), LANL2DZ.

Es notable que el dopaje de Al, C y Si en  $B_5N_{10}$ \_NC pueda promover la estabilidad de la nanojaula, lo que resulta en una mejor alineación magnética de los complejos. Curiosamente, los resultados informados muestran que los elementos Al, C y Si se pueden optimizar para lograr una alineación óptima de la nanojaula en presencia de un campo magnético aplicado.

De hecho, la adsorción de  $NO$ ,  $NO_2$  y  $N_2O$  puede introducir polarización de espín en el  $X-B_4N_{10}$ \_NC, lo que indica que estas superficies podrían ser una superficie de eliminación magnética y detección de gas. El blindaje isotrópico y anisotrópico fluctúa con la ocupación de las moléculas de gas que aceptan electrones atrapados en la nanojaula dopada con átomos de BN.

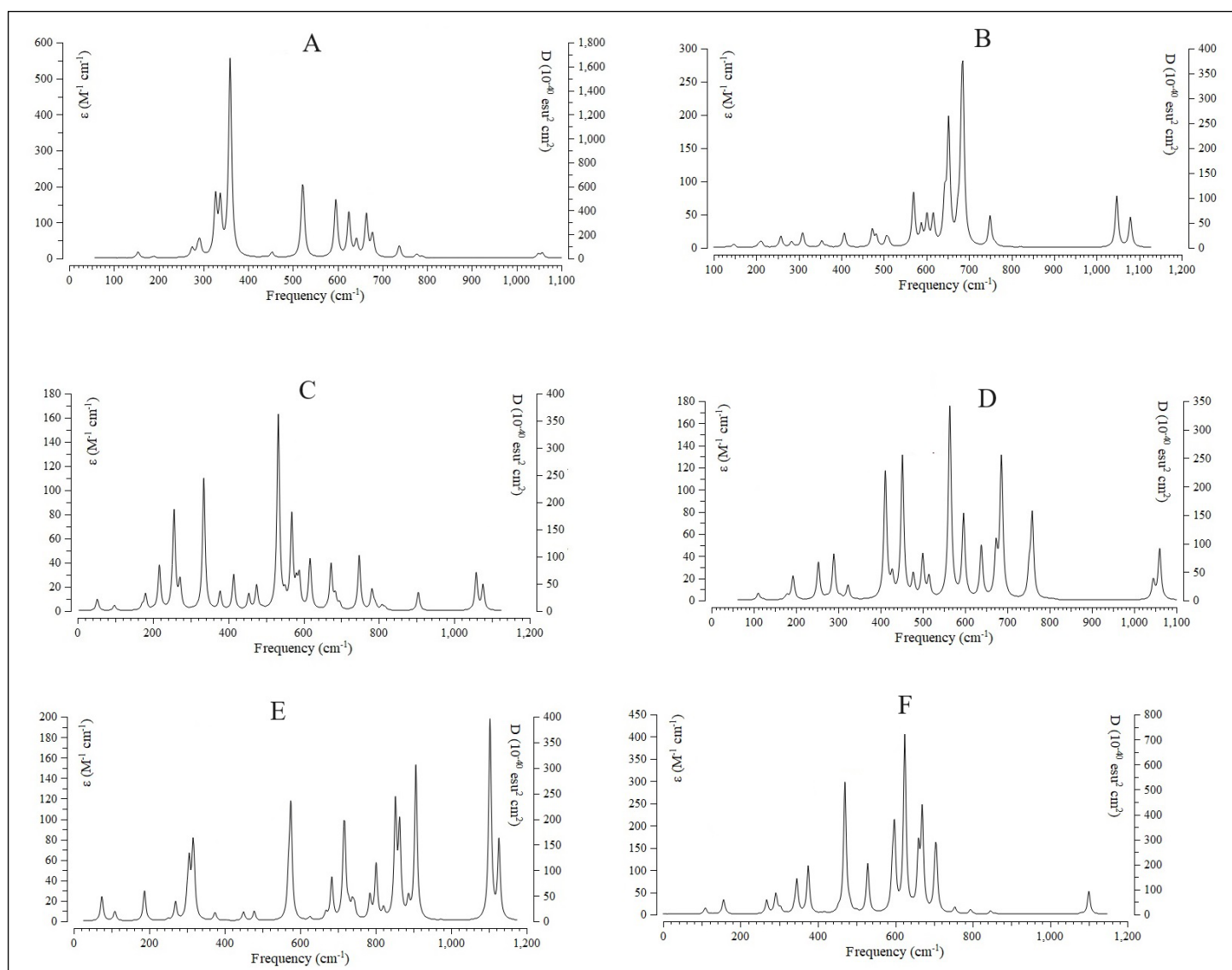
La **figura 4** exhibe la misma tendencia de blindaje para B y N; sin embargo, existe una desviación considerable del dopaje de los átomos de Al15, C15 y Si15 a través de la interacción con N1 de  $NO$ ,  $NO_2$  y  $N_2O$  durante la adsorción en  $B_5N_{10}$ \_NC.

En la **figura 4**, las moléculas de gas de  $NO$ ,  $NO_2$  y  $N_2O$  en los complejos de  $NO@C-B_4N_{10}$ \_NC (**figura 4A**),  $NO@Si-B_4N_{10}$ \_NC (**figura 4B**),  $NO_2@Al-B_4N_{10}$ \_NC (**figura 4C**),  $NO_2@Si-B_4N_{10}$ \_NC (**figura 4D**),  $N_2O@Al-B_4N_{10}$ \_NC (**figura 4E**) y  $N_2O@Si-B_4N_{10}$ \_NC (**figura 4F**) dan cuenta de la fluctuación en el blindaje químico durante la captura de iones.

La **figura 4** muestra la brecha de protección química entre el dopaje de Al, C y Si de la nanojaula  $X-B_4N_{10}$ \_NC y las moléculas de gas. El rendimiento de los átomos receptores de electrones para dopar el  $X-B_4N_{10}$ \_NC a través de la adsorción de moléculas de gas se puede ordenar como  $Si > Al > C$ , por lo tanto, es posible un enlace covalente entre Al, C y Si y los gases  $NO$ ,  $NO_2$  y  $N_2O$  que contribuya a la eliminación de los gases tóxicos del aire.

En la espectroscopia de RMN, se han observado picos notables alrededor de la interacción de las moléculas de  $NO$ ,  $NO_2$  y  $N_2O$  mediante la adsorción en el  $X-B_4N_{10}$ \_NC durante la detección y eliminación de gases tóxicos del aire; sin embargo, existen algunas fluctuaciones en los comportamientos de protección química de los atributos isotrópicos y anisotrópicos.

Por lo tanto, los resultados extraídos serían útiles en el diseño de nanomateriales dopados basados en  $X-B_4N_{10}$ \_NC para aumentar la adsorción de moléculas de gas, además de los estudios estructurales utilizando técnicas de RMN de estado sólido y solución. La captura de elementos semiconductores puede hacer que el prístino  $B_5N_{10}$ \_NC no magnético sea ferromagnético o antiferromagnético. La captura con Al, C y Si reduce sustancialmente la banda prohibida del prístino  $B_5N_{10}$ \_NC. Sorprendentemente, la movilidad del portador en ambos materiales mejora significativamente en



**Figura 5.** Cambio de frecuencia ( $\text{cm}^{-1}$ ) a través de los espectros IR para los complejos A:  $\text{NO}@C\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$ , B:  $\text{NO}@Si\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$ , C:  $\text{NO}_2@Al\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$ , D:  $\text{NO}_2@Si\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$ , E:  $\text{N}_2\text{O}@Al\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$  y F:  $\text{N}_2\text{O}@C\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$  usando CAM-B3LYP-D3/6-311+G (d, p), LANL2DZ.

comparación con el prístino  $\text{B}_5\text{N}_{10}\text{-NC}$ . Nuestros hallazgos sugieren que la captura con diferentes elementos puede dotar al  $\text{B}_5\text{N}_{10}\text{-NC}$  de propiedades electrónicas y magnéticas versátiles. Estas conclusiones demuestran claramente que la modificación del proceso de adsorción mediante un campo magnético estático puede ser una forma eficaz de modificación, especialmente en concentraciones bajas de elementos.

### Espectroscopia infrarroja (IR) y factores termodinámicos

Los cálculos de espectroscopia infrarroja (IR) se realizaron para la adsorción de moléculas de NO,  $\text{NO}_2$  y  $\text{N}_2\text{O}$  por  $X\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$  durante la detección de gases tóxicos en el aire. Por lo tanto, se han simulado los distintos clusters que contienen  $\text{NO}@C\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$  (figura 5A),  $\text{NO}@Si\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$  (figura 5B),  $\text{NO}_2@Al\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$  (figura 5C),  $\text{NO}_2@Si\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$  (figura 5D),  $\text{N}_2\text{O}@Al\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$  (figura 5E) y  $\text{N}_2\text{O}@C\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$  (figura 5F) utilizando CAM-B3LYP-D3/6-311+G (d, p), LANL2DZ.

El gráfico de la figura 5A se observa el rango de frecuencia entre 200 y  $800\text{ cm}^{-1}$  para  $\text{NO}@C\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$  con varios picos agudos en  $327,09$ ;  $337,61$ ;  $359,54$ ;  $595,74$  y  $664,20\text{ cm}^{-1}$ . La figura 5B muestra el rango de frecuencia entre 200 y  $1100\text{ cm}^{-1}$  para  $\text{NO}@Si\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$  con picos pronunciados en  $652,05$ ;  $682,12$ ;  $685,59$  y  $1047,31\text{ cm}^{-1}$ . La figura 5C muestra la fluctuación de la frecuencia entre 100 y  $1100\text{ cm}^{-1}$  para  $\text{NO}_2@Al\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$  con varios picos agudos en  $256,25$ ;  $335,13$ ;  $532,75$  y  $568,45\text{ cm}^{-1}$ . La figura 5D muestra la fluctuación de la frecuencia entre 100 y  $1100\text{ cm}^{-1}$  para  $\text{NO}_2@Si\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$  con algunos picos pronunciados en  $411,31$ ;  $451,64$ ;  $563,66$ ;  $596,34$ ;

$685,50$  y  $758,87\text{ cm}^{-1}$ . Además, se ha observado una frecuencia entre 150 y  $900\text{ cm}^{-1}$  para  $\text{N}_2\text{O}@Al\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$  con picos agudos en  $305,94$ ;  $315,78$ ;  $574,78$ ;  $575,58$ ;  $717,95$ ;  $801,12$ ;  $852,32$ ;  $863,46$ ;  $906,48$ ;  $1102,93$  y  $1126,61\text{ cm}^{-1}$  (figura 5E). Por último, la figura 5F muestra la frecuencia entre 100 y  $1200\text{ cm}^{-1}$  para  $\text{N}_2\text{O}@C\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$  con picos pronunciados en  $345,39$ ;  $374,87$ ;  $469,76$ ;  $528,65$ ;  $592,59$ ;  $597,92$ ;  $624,44$ ;  $659,94$ ;  $669,69$ ;  $702,84$  y  $706,06\text{ cm}^{-1}$ .

En este trabajo, la quimisorción ha implicado una reacción química entre el adsorbato de NO,  $\text{NO}_2$ , y  $\text{N}_2\text{O}$  y la superficie de  $Al\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$ ,  $C\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$ ,  $Si\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$ ,  $Al\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$ ,  $C\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$ ,  $Si\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$ ,  $Al\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$ ,  $C\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$  y  $Si\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$ , a partir de la cual se generan nuevos enlaces químicos en la superficie del adsorbente. La fuerte interacción entre el adsorbato y la superficie del sustrato crea nuevos tipos de enlaces electrónicos.

Los espectros IR de adsorción de NO,  $\text{NO}_2$  y  $\text{N}_2\text{O}$  con  $X\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$  han demostrado que la estructura del complejo dominante se correlaciona con la potencia electrónica del X dopado en  $\text{B}_5\text{N}_{10}\text{-NC}$ . Como se ha visto, las nanojaulas dopadas de  $C\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$  y  $Si\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$  (figuras 5A y 5B),  $Al\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$  y  $Si\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$  (figuras 5C y 5D),  $Al\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$  y  $C\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$  (figura 5E y 5F) tienen las fluctuaciones y la tendencia a la adsorción de NO,  $\text{NO}_2$  y  $\text{N}_2\text{O}$ . Por lo tanto, se puede encontrar que la espectroscopia IR de  $X\text{-B}_4\text{N}_{10}\text{-NC}$  adsorbido ( $X = Al, C$  o  $Si$ ) ahora está en una buena posición para abordar preguntas específicas sobre el efecto individual de los portadores de carga (molécula de gas-nanojaula), así como los átomos dopantes en la estructura general (figura 5).



**Tabla 3.** Caracteres termodinámicos de los complejos NO@Al-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, NO@C-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, NO@Si-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, NO<sub>2</sub>@Al-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, NO<sub>2</sub>@C-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, NO<sub>2</sub>@Si-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, N<sub>2</sub>O@Al-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, N<sub>2</sub>O@C-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC y N<sub>2</sub>O@Si-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC utilizando el cálculo CAM-B3LYP-D3/6-311+G (d,p), LANL2DZ.

Complejos	$\Delta E^\circ \times 10^{-3}$ (kcal/mol)	$\Delta H^\circ \times 10^{-3}$ (kcal/mol)	$\Delta G^\circ \times 10^{-3}$ (kcal/mol)	S <sup>o</sup> (cal/K.mol)	Momento bipolar (Debye)
NO@Al-B <sub>4</sub> N <sub>10</sub> _NC	-630,889	-630,889	-630,920	103,437	0,601
NO@C-B <sub>4</sub> N <sub>10</sub> _NC	-510,557	-510,556	-510,588	103,732	0,246
NO@Si-B <sub>4</sub> N <sub>10</sub> _NC	-489,207	-489,206	-489,239	108,794	1,129
NO <sub>2</sub> @Al-B <sub>4</sub> N <sub>10</sub> _NC	-535,200	-535,199	-535,233	114,347	5,114
NO <sub>2</sub> @C-B <sub>4</sub> N <sub>10</sub> _NC	-557,713	-557,712	-557,745	108,608	1,431
NO <sub>2</sub> @Si-B <sub>4</sub> N <sub>10</sub> _NC	-536,378	-536,377	-536,411	111,937	2,558
N <sub>2</sub> O@Al-B <sub>4</sub> N <sub>10</sub> _NC	-664,586	-664,585	-664,616	104,385	0,701
N <sub>2</sub> O@C-B <sub>4</sub> N <sub>10</sub> _NC	-544,868	-544,867	-544,902	116,794	1,968
N <sub>2</sub> O@Si-B <sub>4</sub> N <sub>10</sub> _NC	-523,518	-523,518	-523,552	114,612	1,738

En la **tabla 3**, según las especificaciones termodinámicas, se concluyó que X-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, debido a la adsorción de NO, NO<sub>2</sub> y N<sub>2</sub>O, podrían ser sensores más eficientes para detectar y eliminar las moléculas de gas del aire contaminado.

Se han determinado los parámetros termodinámicos de la adsorción de moléculas de gas con X-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC utilizando la técnica teórica DFT. Se ha demostrado que para un número dado de sitios donantes de nitrógeno en NO, NO<sub>2</sub> y N<sub>2</sub>O, las estabildades de los complejos debido al dopaje de átomos de Al, C y Si pueden considerarse como N<sub>2</sub>O@Al-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC > NO@Al-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC > NO<sub>2</sub>@C-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC > N<sub>2</sub>O@C-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC > NO<sub>2</sub>@Si-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC ≈ NO<sub>2</sub>@Al-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC > N<sub>2</sub>O@Si-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC > NO@C-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC > NO@Si-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC.

Los datos termodinámicos de la **figura 6** podrían detectar la máxima eficiencia del dopaje de átomos de Al, C y Si de B<sub>5</sub>N<sub>10</sub>\_NC para la adsorción de moléculas de gas a través de la energía libre de Gibbs ( $\Delta G^\circ_{ads}$ ), la cual depende del enlace covalente entre las moléculas de NO, NO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O y X-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, como un potente sensor para la eliminación de la contaminación del aire.

El proceso de adsorción de moléculas de NO, NO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O en X-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC está confirmado por las cantidades  $\Delta G^\circ_{ads}$  descritas en la Ec. (1), donde G = NO, NO<sub>2</sub> o N<sub>2</sub>O y X = Al, C o Si.

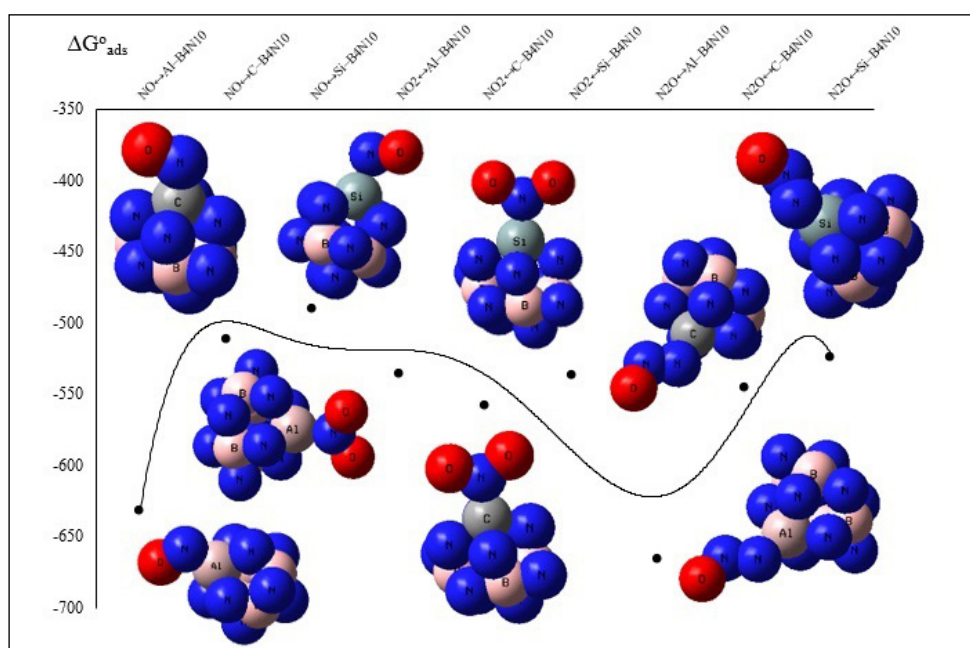
$$\Delta G^\circ_{ads} = \Delta G^\circ_{G@X-B_4N_{10}_NC} - (\Delta G^\circ_G + \Delta G^\circ_{X-B_4N_{10}_NC}) \quad (1)$$

La **figura 6** demuestra que el papel clave de los átomos dopados de Al, C y Si durante la interacción entre los adsorbatos de moléculas de

NO, NO<sub>2</sub> y N<sub>2</sub>O, como donadores de electrones, y el adsorbente de Al-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, C-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, Si-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, Al-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, C-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, Si-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, Al-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, C-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC y Si-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC como receptores de electrones. Por lo tanto, la selectividad de la nanojaula (sensor de gas) dopada con átomos en BN para la adsorción de moléculas de gas puede resultar como Al > C > Si (**tabla 3** y **figura 6**).

## Conclusiones

En este estudio se investigó el dopaje de elementos Al, C y Si en la nanojaula de BN (X-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC) para mejorar la detección de gases tóxicos de estos nanomateriales y poder usarlos para la eliminación de contaminantes del aire. Para ello, la separación de moléculas de NO, NO<sub>2</sub> y N<sub>2</sub>O que involucra a X-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC se hizo con base en interacciones electrostáticas entre las moléculas de gas y X-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC. Las propiedades electromagnéticas y termodinámicas de los complejos X-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC se calcularon utilizando la DFT. Los resultados han ilustrado que las moléculas de gas elegidas adsorbidas en X-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC son bastante estables y el sitio de adsorción más estable se encuentra en el centro del sistema X-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC. La selectividad de la nanojaula dopada con átomos en BN para la adsorción de moléculas de gas puede resultar como: C-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC y Si-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC para NO, Al-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC y Si-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC para NO<sub>2</sub>, y Al-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC y C-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC para N<sub>2</sub>O. Este trabajo propone que el metaloide metálico y no metálico como semiconductor se puede examinar mediante el dopaje de los nanomateriales para mejorar la potencia de adsorción, esto con el fin de diseñar sensores de eliminación de contaminación en el aire.

**Figura 6.** Energía libre de Gibbs ( $\Delta G^\circ_{ads}$ ) para NO@Al-BB<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, NO@C-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, NO@Si-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, NO<sub>2</sub>@Al-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, NO<sub>2</sub>@C-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, NO<sub>2</sub>@Si-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, N<sub>2</sub>O@Al-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC, N<sub>2</sub>O@C-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC y N<sub>2</sub>O@Si-B<sub>4</sub>N<sub>10</sub>\_NC utilizando CAM-B3LYP-D3/6-311+G (d,p), LANL2DZ.

## Agradecimientos

Para completar con éxito este artículo y su investigación, la autora agradece a la Universidad de Kastamonu.

## Referencias

- [1] D. Gonzalez-Ortiz, C. Salameh, M. Bechelany y P. Miele, "Nanostructured boron nitride-based materials: synthesis and applications", *Mater. Today Adv.*, vol. 8, pp. 100–107, ene. 2020. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.mtadv.2020.100107>
- [2] N. S. Mishra y P. Saravanan, "A review on the synergistic features of hexagonal boron nitride (white graphene) as adsorbent-photo active nanomaterial", *Chemistry Select*, vol. 3, nro. 28, pp. 8023–8034, ene. 2018. DOI: <https://doi.org/10.1002/slct.201801524>
- [3] Q. H. Weng, X. B. Wang, X. Wang, Y. Bando y D. Golberg, "Functionalized hexagonal boron nitride nanomaterials: emerging properties and applications", *Chem. Soc. Rev.*, vol. 45, nro. 14, pp. 3989–4012, ene. 2016. DOI: <https://doi.org/10.1039/C5CS00869G>
- [4] A. D. O. Muñoz, A. Escobedo-Morales, E. Skakerzadeh, E. C. Anota, "Effect of homonuclear boron bonds in the adsorption of DNA nucleobases on boron nitride nanosheets", *J. Mol. Liquids*, vol. 322, pp. 114951, ene. 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.114951>
- [5] J. Carreto Escobar, M. Salazar Villanueva, A. Bautista Hernández, D. Cortés-Arriagada y E. Chigo Anota, "Interactions of B12N12 fullerenes on graphene and boron nitride nanosheets: A DFT study", *J. Mol. Graph. Model.*, vol. 86, pp. 27–34, ene. 2019. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmgm.2018.10.003>
- [6] D. V. Shtansky et al., "Recent Progress in Fabrication and Application of BN Nanostructures and BN-Based Nanohybrids", *Nanomaterials*, vol. 12, nro. 16, pp. 2810, ene. 2022. DOI: <https://doi.org/10.3390/nano12162810>
- [7] Y. Yang, Y. Peng, M. F. Saleem, Z. Chen, W. Sun, "Hexagonal Boron Nitride on III-V Compounds: A Review of the Synthesis and Applications", *Materials*, vol. 15, nro. 3, pp. 4396, ene. 2022. DOI: <https://doi.org/10.3390/ma15134396>
- [8] A. Davies et al., "Lattice-Matched Epitaxial Graphene Grown on Boron Nitride", *Nano Lett.*, vol. 18, nro. 1, pp. 498–504, ene. 2018. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.7b04453>
- [9] A. Escobedo-Morales et al., "Structural and Physicochemical Properties of Carbon Doped Boron Nitride Fullerenes: Effect of Doping Level and Atomic Arrangement", *Adv. Theor. Simul.*, vol. 7, nro. 3, pp. 2300698, ene. 2024. DOI: <https://doi.org/10.1002/adts.202300698>
- [10] R. S. Bangari, V.K. Yadav, J.K. Singh, N. Sinha, "Fe3O4-functionalized boron nitride nanosheets as novel adsorbents for removal of arsenic (III) from contaminated water", *ACS Omega*, vol. 5, nro. 18, pp. 10301–10314, ene. 2020. DOI: <https://doi.org/10.1021/acsomega.9b04295>
- [11] Y. H. Chao et al., "Synthesis of boron nitride nanosheets with N-defects for efficient tetracycline antibiotics adsorptive removal", *Chem. Eng. J.*, vol. 387, pp. 124138, ene. 2020. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cej.2020.124138>
- [12] Z. Zheng, M. Cox y B. Li, "Surface modification of hexagonal boron nitride nanomaterials: a review", *J Mater Sci*, vol. 53, pp. 66–99, ene. 2018. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10853-017-1472-0>
- [13] F. Mollaamin y M. Monajjemi, "Graphene-based resistant sensor decorated with Mn, Co, Cu for nitric oxide detection: Langmuir adsorption & DFT method", *Sensor Review*, vol. 43, nro. 4, pp. 266–279, ene. 2023. DOI: <https://doi.org/10.1108/SR-03-2023-0040>
- [14] Y. Guo, R. X. Wang, P. F. Wang, L. Rao y C. Wang, "Developing a novel layered boron nitride-carbon nitride composite with high efficiency and selectivity to remove protonated dyes from water", *ACS Sustain. Chem.*, vol. 7 nro. 6 pp. 5727–5741, ene. 2019. DOI: <https://doi.org/10.1021/ACSUSCHEMENG.8B05150>
- [15] M. C. F. Bautista, D. Cortés-Arriagada, E. Shakerzadeh y E. C. Anota, "Acetylsalicylic acid interaction with Boron nitride nanostructures – A density functional analysis", *J. Mol. Liquids*, vol. 355, pp. 118980, ene. 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2022.118980>
- [16] H. N. Vergara-Reyes, M. Acosta-Alejandro y E. Chigo-Anota, "Quantum-mechanical assessment of the adsorption of nitric oxide molecules on the magnetic carbon nitride (C36N24)-fullerene", *Struct Chem*, vol. 32, pp. 1775–1786, ene. 2021. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11224-021-01736-8>
- [17] F. Mollaamin y M. Monajjemi, "Determination of GaN nanosensor for scavenging of toxic heavy metal ions (Mn<sup>2+</sup>, Zn<sup>2+</sup>, Ag<sup>+</sup>, Au<sup>3+</sup>, Al<sup>3+</sup>, Sn<sup>2+</sup>) from water: Application of green sustainable materials by molecular modeling approach", *Comput Theor Chem*, vol. 1237, pp. 114646, ene. 2024. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2024.114646>
- [18] K. Bakhshi, F. Mollaamin y M. Monajjemi, "Exchange and correlation effect of hydrogen chemisorption on nano V(100) surface: A DFT study by generalized gradient approximation (GGA)", *J. Comput. Theor. Nanosci*, vol. 8, nro. 4, pp. 763–768, ene. 2011. DOI: <https://doi.org/10.1166/jctn.2011.1750>
- [19] F. Mollaamin y M. Monajjemi, "Trapping of toxic heavy metals from water by GN-nanocage: Application of nanomaterials for contaminant removal technique", *J. Mol. Struct.*, vol. 1300, nro. 137214, ene. 2024. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2023.137214>
- [20] F. Mollaamin, "On the behavior of boron nitride Nanotube-Flavin adenine Dinucleotide interaction ion implantation order to design Biofuel cells", *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, vol. 11, nro. 9, pp. 2017–2022, ene. 2014. DOI: <https://doi.org/10.1166/jctn.2014.3601>
- [21] F. Mollaamin, S. Mohammadi y Z. Khalaj et al., "Computational Modelling of Boron Nitride Nanosheet for Detecting and Trapping of Water Contaminant", *Russ. J. Phys. Chem. B*, vol. 18, pp. 67–82, ene. 2024. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1990793124010330>
- [22] M. A. A. Zadeh et al., "Density functional theory study and anti-cancer properties of shyshaq plant: In viewpoint of nano biotechnology", *J. Comput. Theor. Nanosci*, vol. 12, nro. 11, pp. 4358–4367, ene. 2015. DOI: <https://doi.org/10.1166/jctn.2015.4366>
- [23] F. Mollaamin, "Insight therapeutic viral diseases: application of SWCNT in drug delivery method", *Rev. Colomb. Quim.*, vol. 52, nro. 2, pp. 28–35, ene. 2023. DOI: <https://doi.org/10.15446/rev.colomb.quim.v52n2.111888>
- [24] F. Mollaamin y M. Monajjemi, "In Situ Ti-Embedded SiC as Chemiresistive Nanosensor for Safety Monitoring of CO, CO<sub>2</sub>, NO, NO<sub>2</sub>: Molecular Modelling by Conceptual Density Functional Theory", *Russ. J. Phys. Chem. B*, vol. 18, pp. 49–66, ene. 2024. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1990793124010159>
- [25] F. Mollaamin y M. Monajjemi, "Structural, Electromagnetic and Thermodynamic Analysis of Ion Pollutants Adsorption in Water by Gallium Nitride Nanomaterial: a Green Chemistry Application", *Russ. J. Phys. Chem. B*, vol. 18, pp. 533–548, ene. 2024. DOI: <https://doi.org/10.1134/S199079312402012X>
- [26] G. Henkelman, A. Arnaldsson y H. Jónsson, "A fast and robust algorithm for Bader decomposition of charge density", *Computational Materials Science*, vol. 36, nro. 3, pp. 354–360, ene. 2006. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2005.04.010>
- [27] F. Mollaamin y M. Monajjemi, "In Silico-DFT Investigation of Nanocluster Alloys of Al-(Mg, Ge, Sn) Coated by Nitrogen Heterocyclic Carbenes as Corrosion Inhibitors", *J Clust Sci*, vol. 34, nro. 6, pp. 2901–2918, ene. 2023. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10876-023-02436-5>
- [28] F. Mollaamin y M. Monajjemi, "Transition metal (X = Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn)-doped graphene as gas sensor for CO<sub>2</sub> and NO<sub>2</sub> detection: A molecular modeling framework by DFT perspective", *J. Mol. Model.*, vol. 29, nro. 4, pp. 119, ene. 2023. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00894-023-05526-3>

- [29] F. Mollaamin y M. Monajjemi, "Adsorption ability of Ga<sub>5</sub>N<sub>10</sub> nanomaterial for removing metal ions contamination from drinking water by DFT", *Int J Quantum Chem*, vol. 124, nro. 2, pp. e27348, ene. 2024. DOI: <https://doi.org/10.1002/qua.27348>
- [30] P. Hohenberg y W. Kohn, "Inhomogeneous Electron Gas", *Phys. Rev. B*, vol. 136, pp. B864–B871, ene. 1964. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864>
- [31] W. Kohn y L. J. Sham, "Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects", *Phys. Rev.*, vol. 140, A1133–A1138, ene. 1965. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>
- [32] F. Mollaamin, "Features of Parametric Point Nuclear Magnetic Resonance of Metals Implantation on Boron Nitride Nanotube by Density Functional Theory/Electron Paramagnetic Resonance", *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, vol. 11, nro. 11, pp. 2393–2398, ene. 2014. DOI: <https://doi.org/10.1166/jctn.2014.3653>
- [33] F. Mollaamin et al., "Thermodynamic and Solvent Effect on Dynamic Structures of Nano Bilayer-Cell Membrane: Hydrogen Bonding Study", *J. Comput. Theor. Nanosci.*, vol. 12, nro. 10, pp. 314–3154, ene. 2015. DOI: <https://doi.org/10.1166/jctn.2015.4092>
- [34] F. Mollaamin y M. Monajjemi, "Tailoring and functionalizing the graphitic-like GaN and GaP nanostructures as selective sensors for NO, NO<sub>2</sub>, and NH<sub>3</sub> adsorbing: A DFT study", *J. Mol. Model.*, vol. 29, nro. 6, pp. 170, ene. 2023. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00894-023-05567-8>
- [35] F. Mollaamin, S. Shahriari, M. Monajjemi y Z. Khalaj, "Nanocluster of Aluminum Lattice via Organic Inhibitors Coating: A Study of Freundlich Adsorption", *J. Clust. Sci.*, vol. 34, nro. 3, pp.1547–1562, ene. 2023. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10876-022-02335-1>
- [36] F. Mollaamin y M. Monajjemi, "Doping of Graphene Nanostructure with Iron, Nickel and Zinc as Selective Detector for the Toxic Gas Removal: A Density Functional Theory Study", *C-Journal of Carbon Research*, vol. 9, pp. 20, ene. 2023. DOI: <https://doi.org/10.3390/c9010020>
- [37] E. M. Sarasia, S. Afsharnezhad, B. Honarparvar, F. Mollaamin y M. Monajjemi, "Theoretical study of solvent effect on NMR shielding tensors of luciferin derivatives", *Phys Chem Liquids*, vol. 49, nro. 5, pp. 561–571, ene. 2011. DOI: <https://doi.org/10.1080/00319101003698992>
- [38] M. Khaleghian, M. Zahmatkesh, F. Mollaamin y M. Monajjemi, "Investigation of Solvent Effects on Armchair Single-Walled Carbon Nanotubes: A QM/MD Study", *Fuller. Nanotub. Carbon Nanostructures*, vol. 19, nro. 4, pp. 251–261, ene. 2011, DOI: <https://doi.org/10.1080/15363831003721757>
- [39] F. Mollaamin y M. Monajjemi, "Harmonic Linear Combination and Normal Mode Analysis of Semiconductor Nanotubes Vibrations", *J Comput Theor Nanosci*, vol. 12, nro. 6, pp. 1030–1039, ene. 2015. DOI: <https://doi.org/10.1166/jctn.2015.3846>
- [40] F. Mollaamin, M. Monajjemi, S. Salemi y M. T. Baei, "A Dielectric Effect on Normal Mode Analysis and Symmetry of BNNT Nanotube", *Fuller. Nanotub. Carbon Nanostructures*, vol. 19, nro. 3, pp. 182–196, ene. 2011. DOI: <https://doi.org/10.1080/15363831003782932>
- [41] M. Monajjemi, M. Khaleghian, N. Tadayonpour y F. Mollaamin, "The effect of different solvents and temperatures on stability of single-walled carbon nanotube: A QM/MD study", *Int J Nanosci*, vol. 9, nro. 5, 517–529, ene. 2010. DOI: <https://doi.org/10.1142/S0219581X10007071>
- [42] F. Mollaamin y M. Monajjemi, "The influence of Sc, V, Cr, Co, Cu, Zn as ferromagnetic semiconductors implanted on B<sub>5</sub>N<sub>10</sub>-nanocarrier for enhancing of NO sensing: An environmental eco-friendly investigation", *Comput Theor Chem*, vol. 1237, pp. 114666, ene. 2024. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2024.114666>
- [43] F. Mollaamin y M. Monajjemi, "Molecular modelling framework of metal-organic clusters for conserving surfaces: Langmuir sorption through the TD-DFT/ONIOM approach", *Molecular Simulation*, vol. 49, nro. 4, pp. 365–376, ene. 2023. DOI: <https://doi.org/10.1080/08927022.2022.2159996>
- [44] S. H. Vosko, L. Wilk y M. Nusair, "Accurate spin-dependent electron liquid correlation energies for local spin density calculations: a critical analysis", *Can. J. Phys.*, vol. 58, nro. 8, pp. 1200–1211, ene. 1980. DOI: <https://doi.org/10.1139/p80-159>
- [45] Gaussian 16, Revision C.01, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2016. [Software].
- [46] GaussView, Version 6.06.16, Dennington, Roy; Keith, Todd A.; Millam, John M. Semichem Inc., Shawnee Mission, KS, 2016. [Software].
- [47] F. Mollaamin y M. Monajjemi, "Nanomaterials for Sustainable Energy in Hydrogen-Fuel Cell: Functionalization and Characterization of Carbon Nano-Semiconductors with Silicon, Germanium, Tin or Lead through Density Functional Theory Study", *Russ. J. Phys. Chem. B*, vol. 18, pp. 607–623, ene. 2024. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1990793124020271>
- [48] M. Monajjemi, F. Mollaamin, S. Shojaei, "An overview on coronaviruses family from past to COVID-19: Introduce some inhibitors as antiviruses from Gillan's plants", *Biointerface Res. Appl. Chem.*, vol. 10, nro. 3, pp. 5575–5585, ene. 2020, DOI: <https://doi.org/10.33263/BRIAC103.575585>
- [49] S. Shahriari, F. Mollaamin y M. Monajjemi, "Increasing the Performance of  $\{[(1-x-y) \text{LiCo}_0.3\text{Cu}_0.7] (\text{Al} \text{ and } \text{Mg} \text{ doped}) \text{O}_2\}$ ,  $x\text{Li}_2\text{MnO}_3$ ,  $y\text{LiCoO}_2$  Composites as Cathode Material in Lithium-Ion Battery: Synthesis and Characterization", *Micro-machines*, vol. 14, nro. 2, pp. 241, ene. 2023. DOI: <https://doi.org/10.3390/mi14020241>
- [50] F. Mollaamin y M. Monajjemi, "Influence of Transition Metals for Emergence of Energy Storage in Fuel Cells through Hydrogen Adsorption on the MgAl Surface", *Russ. J. Phys. Chem. B*, vol. 18, pp. 398–418, ene. 2024. DOI: <https://doi.org/10.1134/S199079312402026X>
- [51] M. Monajjemi, L. Mahdavian, F. Mollaamin y M. Khaleghian, "Interaction of Na, Mg, Al, Si with carbon nanotube (CNT): NMR and IR study", *Russ. J. Inorg. Chem*, vol. 54, nro. 9, pp. 1465–1473, ene. 2009, DOI: <https://doi.org/10.1134/S0036023609090216>
- [52] F. Mollaamin y M. Monajjemi, "Competitive Intracellular Hydrogen-Nanocarrier Among Aluminum, Carbon, or Silicon Implantation: a Novel Technology of Eco-Friendly Energy Storage using Research Density Functional Theory", *Russ. J. Phys. Chem. B*, vol. 18, pp. 805–820, ene. 2024. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1990793124700131>
- [53] M. Monajjemi, M. T. Baie y F. Mollaamin, "Interaction between threonine and cadmium cation in  $[\text{Cd}(\text{Thr})] (n = 1-3)$  complexes: Density functional calculations", *Russian Chemical Bulletin*, vol. 59, pp. 886–889, ene. 2010. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11172-010-0181-5>
- [54] L. Cardona, J. Jiménez y N. Vanegas, "Nuclear quadrupole resonance for explosive detection", *Ingeniare. Rev. chil. ing.*, vol. 23, nro. 3, pp. 458–472, ene. 2015. DOI: <http://dx.doi.org/10.4067/S0718-33052015000300015>
- [55] A. Gregorovič y T. Apih, "WURST-QCPMG sequence and 'spin-lock' in <sup>14</sup>N nuclear quadrupole resonance", *J. Magn. Reson.*, vol. 233, pp. 96–102, ene. 2013. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmr.2013.05.010>
- [56] F. Mollaamin y M. Monajjemi, "Graphene Embedded with Transition Metals for Capturing Carbon Dioxide: Gas Detection Study Using QM Methods", *Clean Technol*, vol. 5, pp. 403–417, ene. 2023. DOI: <https://doi.org/10.3390/cleantechnol5010020>
- [57] A. S. Peshkovsky et al., "Noise-resilient multi-frequency surface sensor for nuclear quadrupole resonance", *J. Magn. Reson.*, vol. 194, nro. 2, pp. 222–229, ene. 2008. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmr.2008.07.003>
- [58] F. Mollaamin y M. Monajjemi, "Electric and Magnetic Evaluation of Aluminum–Magnesium Nanoalloy Decorated with Germanium Through Heterocyclic Carbenes Adsorption: A Density

Functional Theory Study”, *Russ. J. Phys. Chem. B*, vol. 17, nro. 3, pp. 658–672, ene. 2023. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1990793123030223>

[59] F. Mollaamin y M. Monajjemi, “Application of DFT and TD-DFT on Langmuir Adsorption of Nitrogen and Sulfur Heterocycle Dopants on an Aluminum Surface Decorated with Magnesium

and Silicon”, *Computation*, vol. 11, nro. 6, pp. 108, ene. 2023. DOI: <https://doi.org/10.3390/computation11060108>

[60] B. Khalili Hadad, F. Mollaamin y M. Monajjemi, “Biophysical chemistry of macrocycles for drug delivery: A theoretical study”, *Russian Chemical Bulletin*, vol. 60, nro. 2, pp. 238–241, ene. 2011. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11172-011-0039-5>

**Citación del artículo:**

F. Mollaamin, “Efecto del dopaje con Al, C y Si en nanojaulas de nitruro de boro ( $B_5N_{10}_NC$ ) para mejorar la adsorción de gases tóxicos ambientales: técnica de simulación en un sensor de gas de alto rendimiento”, *Rev. Colomb. Quim.*, vol. 52, nro. 3, pp. 59–70, 2023. DOI: <https://doi.org/10.15446/rev.colomb.quim.v52n3.112067>