

# CROMO DOPADO EN LA NANOSUPERFICIE DE CARBURO DE SILICIO PARA CAPTURAR $CO_2$ , $CO$ , $NO_2$ O $NO$ : APLICACIÓN DE NANOMATERIALES AL AIRE LIMPIO<sup>a</sup>

## DOPING CHROMIUM ON THE SILICON CARBIDE NANOSURFACE FOR GRABBING $CO_2$ , $CO$ , $NO_2$ OR $NO$ : APPLICATION OF NANOMATERIALS TOWARD CLEAN AIR

FATEMEH MOLLAAMIN<sup>b\*</sup>

Recibido 13-06-2024, aceptado 12-05-2025, versión final 13-06-2025.

Artículo Investigación

**RESUMEN:** Se requiere una rápida desfossilización del sector industrial para detener las emisiones de gases de efecto invernadero y frenar el calentamiento global. Se presenta un nuevo enfoque para almacenar gases provenientes de instalaciones de captura directa de aire en Carburo de Silicio (SiC) sólido. Las propiedades termoquímicas, eléctricas y magnéticas de la lámina monocapa de SiC dopada con metal de cromo (Cr) se estudian mediante métodos de primeros principios basados en la teoría funcional de la densidad (DFT) para la eliminación de  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO$  y  $NO_2$ . Los resultados recomiendan que la adsorción de estas moléculas de gas en la monocapa de lámina de SiC incrustada con Cr es más energéticamente favorable que en las prístinas. Las moléculas de gas  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO$  y  $NO_2$  se han adsorbido en el sitio de Cr de la monocapa de SiC dopada mediante la formación de enlaces covalentes. La suposición de adsorciones químicas ha sido confirmada por la densidad proyectada de estados (PDOS) y los gráficos de diferencia de densidad de carga. Los cálculos de diferencia de densidad de carga también indican que las densidades electrónicas se acumularon principalmente en el adsorbato de las moléculas de gas  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO$  y  $NO_2$ . Los resultados de esta investigación pueden indicar la competencia de las nanoláminas de carburo de silicio dopadas con metales de transición en dispositivos sensores.

**PALABRAS CLAVES:** SiC; GM@ Cr-SiC\_sh; sensor de gas; DFT.

**ABSTRACT:** DThermochemical, electric, and magnetic properties of chromium (Cr) metal-doped graphene-like silicon carbide (SiC) monolayer sheet are studied by the first-principles methods based on the density functional theory (DFT) for scavenging of  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO$ ,  $NO_2$  gas molecules. The results recommend that the adsorption of these gas molecules on Cr-embedded SiC sheet monolayer is more energetically desired than that on the pristine ones. Gas molecules of  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO$ , and  $NO_2$  have been adsorbed on the Cr site of doped SiC monolayer through the formation of covalent bonds. The assumption of chemical adsorptions has been approved by the projected density of states (PDOS)

<sup>a</sup>Mollaamin, F. (2025). Cromo dopado en la nanosuperficie de Carburo de Silicio para capturar  $CO_2$ ,  $CO$ ,  $NO_2$  o  $NO$ : Aplicación de nanomateriales al aire limpio. *Rev. Fac. Cienc.*, 14 (2), 108–126. DOI: <https://10.15446/rev.fac.cienc.v14n2.113729>

<sup>b</sup>Department of Biomedical Engineering, Faculty of Engineering and Architecture, Kastamonu University, Kastamonu, Turkey.

\* Autor de correspondencia: fmollaamin@kastamonu.edu.tr

and charge density difference plots. Charge density difference calculations also indicate that the electronic densities were mainly accumulated on the adsorbate of  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO$ , and  $NO_2$  gas molecules. The results in this investigation can indicate the competence of transition metal-doped silicon carbide nanosheet in sensor devices.

**KEYWORDS:** SiC; GM@  $Cr - SiC\_sh$ ; gas sensor; DFT.

## 1. INTRODUCCIÓN

El grafeno con una estructura física en capas bidimensional (2D) y propiedades electrónicas únicas ha simulado una amplia gama de entusiasmo por la investigación sobre materiales 2D que pueden aplicarse a dispositivos electrónicos, optoelectrónicos y espintrónicos (Zabolotnov *et al.*, 2023). Sin embargo, la aplicación práctica de material 2D como el grafeno podría limitarse a una banda prohibida pequeña. Así, nuevos materiales 2D con perfectas propiedades mecánicas, termoeléctricas, ópticas y electrónicas son la clave de las recientes investigaciones científicas (Davydov & Posrednik, 2019).

En la nanoestructura de carbono decorada con metales de transición (TM), la unión TM-carbono se produce a través de un mecanismo de transferencia de carga y el TM permanece en estado catiónico. Por lo tanto, la molécula de gas puede ser absorbida por el elemento de metal de transición catiónico dando cierta carga electrónica (Mollaamin & Monajjemi, 2023a; Yan *et al.*, 2019; Mollaamin & Monajjemi, 2023b; Mollaamin & Monajjemi, 2023c; Mollaamin & Monajjemi, 2023d).

Se propone esta traducción: El Carburo de Silicio, conocido por sus propiedades químicas y físicas distintivas, es cada vez más reconocido como un material clave en sectores como la energía, el espacio y la defensa. Para abordar estos problemas, este artículo propone un enfoque de economía circular para la producción de carburo de silicio, aprovechando el desafío ecológico de la eliminación de residuos de arroz para crear una nueva fuente de materiales de silicio. (Xi *et al.*, 2006; Zolotarev *et al.*, 2024; Hammudi & Mahmood, 2025). La monocapa de Carburo de Silicio (SiC) como nuevo semiconductor tipo grafeno es un material de banda prohibida directa, mientras que el silicio al estar en el mismo grupo que el carbono representa atributos totalmente análogos al del carbono y permite generar potentes aplicaciones en optoelectrónica y instrumentos electrónicos (Utamuradova *et al.*, 2024; Daliev *et al.*, 2024; Mamadalimov *et al.*, 2024). Como la polarizabilidad del Si es mayor que la del C, se espera que, debido a la interacción más fuerte de van der Waal, la nanosuperficie de SiC/Si pueda unir compuestos con más fuerza en comparación con las nanoestructuras de carbono puro. Se sabe que, para una adsorción óptima de moléculas de gas, la forma ideal de unión entre el material huésped (nanolámina de SiC) y las moléculas de gas adsorbidas debe ser intermedia entre la energía de fisisorción y quimisorción (Belarouci *et al.*, 2018).

Además, los átomos de TM se consideran la fuente del magnetismo; En los resultados de la monocapa de SiC dopada con TM, se puede encontrar que el sistema puede ser un semiconductor magnético mediante dopaje de Co, Cu, Fe, Mn y Ni (Majid *et al.*, 2021). Los dopantes TM pueden causar una perturbación

hamiltoniana total, lo que eventualmente conduce a cambios en las estructuras electrónicas, lo que los convierte en una aplicación sustancial en dispositivos electrónicos magnéticos.

En este trabajo, se presentan las estimaciones teóricas para la transferencia de carga y la energía de unión con la superficie de SiC para la adsorción de moléculas. Tener en cuenta que también existen algunos enfoques modelo para el problema de la adsorción, además de los cálculos de primeros principios populares y ampliamente utilizados en la actualidad. Luego, se han investigado las estructuras magnéticas y electrónicas de láminas de SiC tipo grafeno dopadas con Cr mediante la adsorción de moléculas de gas *CO*, *CO*<sub>2</sub>, *NO*, *NO*<sub>2</sub> (GM@ Cr-SiC\_sh) mediante el uso de cálculos del primer principio basados en la densidad funcional teoría (DFT) (Kresse & Furthmüller, 1996). El cálculo se realiza mediante aproximación de gradiente generalizado (GGA) potencial y Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) funcional (Perdew *et al.*, 1996; Kresse & Joubert, 1999). Los estudios presentados hasta ahora proporcionan evidencia de que el carburo de silicio es un material emergente con muchas aplicaciones en tecnologías avanzadas y un enorme potencial económico, la cáscara de arroz es un problema ambiental que se maneja mejor mediante el reciclaje y la comunidad científica está trabajando en la viabilidad tecnológica de la transformación de cáscara de arroz-SiC con éxitos experimentales.

## 2. FUNDAMENTOS TEÓRICOS, SUSTANCIAS Y ENFOQUES

Para el cálculo de la lámina de SiC similar al grafeno, la lámina se ha modelado con átomos de 15 C y 15 Si dispuestos alternativamente. En un cálculo teórico previo, se informa que la estructura más estable del SiC plano forma una estructura similar al grafeno con un enlace de SiC alternativo y el enlace en dicha estructura es de tipo sp<sub>2</sub> (Figura 1). En nuestro cálculo hemos considerado una estructura similar y optimizada sin ninguna restricción de simetría.

La adsorción de moléculas de gas *CO*, *CO*<sub>2</sub>, *NO*, *NO*<sub>2</sub> en la superficie de Cr-SiC\_sh se definió mediante la teoría de la isoterma “Langmuir” (Mollaamin *et al.*, 2023; Mollaamin & Monajjemi, 2023e; Mollaamin & Monajjemi, 2023f), que indica la quimisorción entre moléculas de gas y Cr-SiC\_sh. Los adsorbatos de moléculas de gas *CO*, *CO*<sub>2</sub>, *NO*, *NO*<sub>2</sub> se mantienen en la superficie de Cr-SiC\_sh con quimisorción “Langmuir” (Figura 1).

En esta investigación, los cálculos simulados han sido dirigidos en GaussView 6.06.16 (Dennington *et al.*, 2016) y calculados mediante Gaussian 16, Revisión C.01 (Frisch *et al.*, 2016) utilizando el método DFT. Se ha empleado el “PBE” funcional de [Perdew-Burke-Ernzerhof] con aproximación de gradiente generalizado de alta precisión “GGA” para lograr resultados más auténticos (Perdew *et al.*, 1996).

La energía de enlace se calcula como:  $E_b = (E_t - 15E_{Si} - 15E_C)/30$ , donde  $E_t$  es la energía total después de

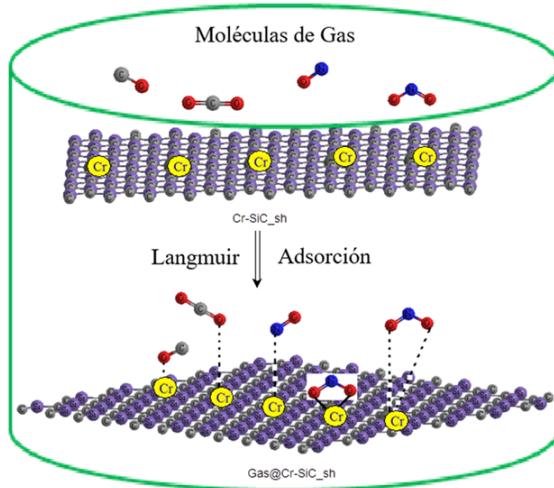


Figura 1: Adsorción Langmuir de  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO$  y  $NO_2$  en nanoláminas de SiC dopadas con Cr. Fuente: Elaboración propia

la optimización,  $E_{Si}$  y  $E_C$  son los factores de corrección para los átomos de Si y C, respectivamente.

A partir de la distribución de densidad de carga de la lámina de SiC, se ve que una cantidad considerable de carga electrónica se transfiere del sitio Si al C. La presencia de estas cargas puntuales en la lámina de SiC influye en la propiedad de adsorción de gas.

La lámina de SiC fue dopada con átomos de cromo. Se realizó una optimización completa de la geometría y los datos exploraron que la ubicación más estable del cromo está en la parte superior del átomo de Si empujándolo hacia la superficie.

La Figura 1 ha demostrado que la lámina de SiC se distorsiona desde la planaridad después de agregar el cromo de tal manera que el cromo dopado puede unirse con el átomo de Si junto con tres átomos de carbono vecinos, desarrollando así la estabilidad del sistema. Cuando el átomo de cromo está sobre el átomo de silicio, la distancia del enlace Cr-Si es de 2.56 Å, mientras que la distancia del enlace Cr-C es de 1.98 Å. Después del dopado con cromo sobre el átomo de silicio, la planaridad del sistema se altera porque el átomo de silicio se dirige hacia la hibridación  $sp^3$ . Aunque los átomos de silicio y carbono son isovalentes, el estado más estable del carbono es  $sp^2$  y el del silicio es  $sp^3$  (Rusho *et al.*, 2025).

Se ha estudiado la interacción de las moléculas de gas  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO$  y  $NO_2$  con la lámina de SiC decorada con Cr. Las geometrías optimizadas de la lámina de SiC decorada con GM@ Cr se muestran en la Figura 1.

El análisis de cambios de densidad de carga en el proceso de adsorción ha ilustrado que Cr–SiC\_sh muestra la carga de Bader de  $-1.308e$ , antes de la adsorción de  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO$ ,  $NO_2$  y  $-1.314e$ ,  $-1.304e$ ,  $-1.319e$ ,  $-1.322e$  después de la adsorción de  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO$ ,  $NO_2$ , respectivamente. Por lo tanto, los cambios de densidad de carga para la adsorción “Langmuir” de  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO$ ,  $NO_2$  en la superficie de Cr–SiC\_sh son alternativamente  $\Delta Q_{CO_2 \rightarrow Cr-SiC} = +0.004e > \Delta Q_{CO \rightarrow Cr-SiC} = -0.006e > \Delta Q_{NO \rightarrow Cr-SiC} = -0.011e > \Delta Q_{NO_2 \rightarrow Cr-SiC} = -0.014e$ . Los valores de los cambios de densidad de carga han mostrado una transferencia de carga más importante para Cr–SiC\_sh, que actúa como aceptador de electrones, mientras que las moléculas de gas actúan como donadores de electrones más fuertes a través de la adsorción en la superficie de Cr–SiC\_sh (Luo & Shen, 2018). Las funciones de distribución simuladas de  $NO \rightarrow Cr-SiC_{sh}$ ,  $NO_2 \rightarrow Cr-SiC_{sh}$ ,  $CO \rightarrow Cr-SiC_{sh}$  y  $CO_2 \rightarrow Cr-SiC_{sh}$  han ilustrado que los grupos creados conducen a longitudes de enlace de  $N \rightarrow Cr$  en  $NO \rightarrow Cr-SiC_{sh}$  (2.07 Å),  $O \rightarrow Cr$  en  $NO_2 \rightarrow Cr-SiC_{sh}$  (2.06 Å),  $O \rightarrow Cr$  en  $CO \rightarrow Cr-SiC_{sh}$  (2.05 Å) y  $O \rightarrow Cr$  en  $CO_2 \rightarrow Cr-SiC_{sh}$  (2.05 Å) (Figura 1).

### 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este veredicto, se ha investigado la lámina monocapa de carburo de silicio (SiC) dopada con metal de cromo (Cr) como grafeno como superficie eficiente debido a su selectividad estructural para la adsorción de monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono ( $CO_2$ ) y óxido nítrico (NO) y dióxido de nitrógeno ( $NO_2$ ). Estos experimentos se han realizado mediante análisis espectroscópico a través de algunas propiedades físicas y químicas.

#### 3.1. Propiedades electrónicas

Las estructuras electrónicas de  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO$  y  $NO_2$  adsorbidas en la nanohoja de SiC dopada con Cr (GM@Cr–SiC\_sh) se han analizado para simplificar la discusión posterior sobre las propiedades electrónicas interfaciales utilizando CAM-B3LYP/LANL2DZ, 6-311+G (d,p) conjuntos de bases.

La Figura 2 muestra la densidad de estado proyectada (PDOS) de la lámina de SiC decorada con Cr. La aparición de los estados de energía (orbital d) del Cr dentro del espacio de la lámina de SiC induce la reactividad del sistema.

De la Figura 2 se desprende claramente que después del dopaje con átomo de Cr hay una contribución significativa del orbital d de Cr en el nivel desocupado. Con base en el análisis de población y DOS se puede concluir que el Cr permanece en estado catiónico y puede aceptar más electrones de otros átomos. Por lo tanto, el gráfico de DOS parcial (PDOS) ha ilustrado que los estados p de la adsorción de N- y O- en Cr–SiC\_sh son dominantes a través de la banda de conducción (Figura 2).

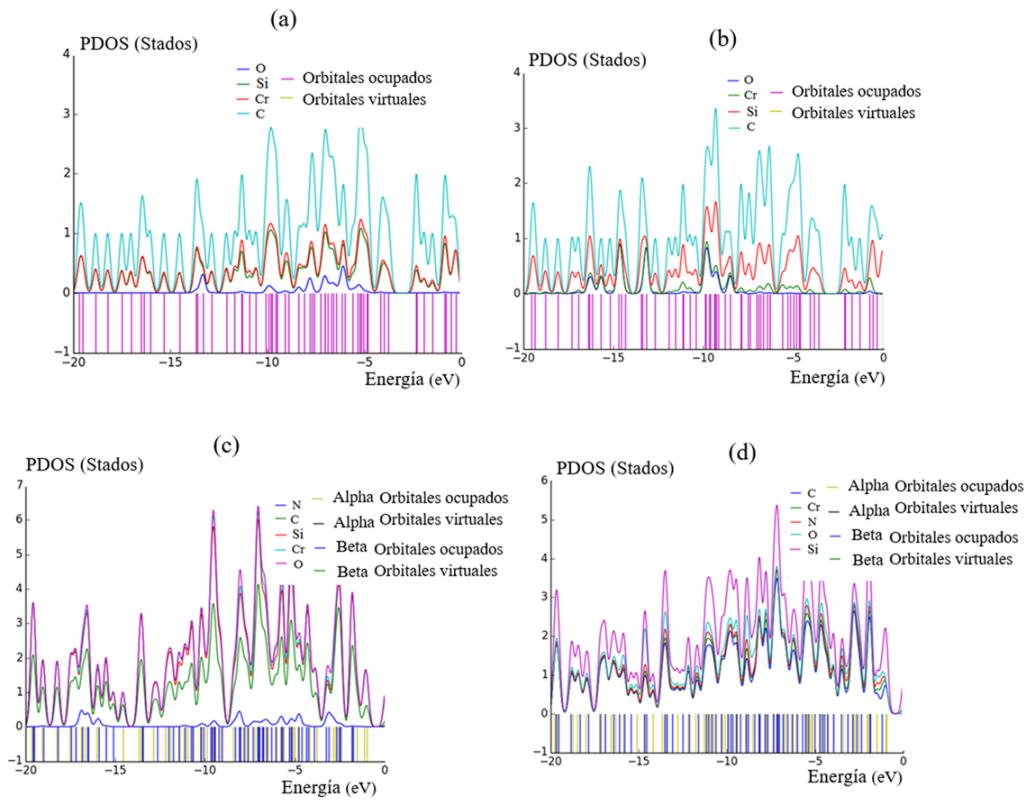


Figura 2: Adsorción PDOS ( $eV^{-1}$ ) de a)  $CO@Cr-SiC_{sh}$ , b)  $CO_2@Cr-SiC$ , c)  $NO@Cr-SiC$ , y d)  $NO_2@Cr-SiC$ . Fuente: Elaboración propia

Se puede observar una característica metálica distintiva en  $SiC_{sh}$  debido a la fuerte interacción entre los estados p de C, N, O, Si y el estado d de Cr cerca de la energía de Fermi. Además, la existencia de características covalentes para estos complejos ha mostrado la misma cantidad de energía y figura del PDOS para los orbitales p de C, N, O, Si y d de Cr (Figura 2 a-d).

La Figura 2 a, b muestra que los estados de  $CO$  y  $CO_2$ , respectivamente, en  $Cr-SiC_{sh}$  tienen una mayor contribución en el medio de la banda de conducción entre -5eV y -10eV, mientras que la contribución de los estados de carbono y silicio se expande y se acerca entre sí, pero los estados de cromo tienen aportes menores. La Figura 2 c, d muestra que los estados  $NO$  y  $NO_2$ , respectivamente, en  $Cr-SiC_{sh}$  tienen más contribución en el medio de la banda de conducción entre -5eV y -10eV, mientras que la contribución de los estados de carbono y silicio se expande y se acerca entre sí, pero los estados de cromo tienen aportes importantes. Los resultados también fueron aprobados por la densidad electrónica parcial (PDOS) que han mostrado una cierta asociación de carga entre  $Cr-SiC_{sh}$  y moléculas de gas de  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO$  y  $NO_2$ .

Por lo tanto, los resultados anteriores muestran que el grupo dominante de características metálicas y no metálicas y un cierto grado de características covalentes pueden ilustrar el aumento de la banda prohibida semiconductor directa de las moléculas de gas de CO, CO<sub>2</sub>, NO y NO<sub>2</sub> que se adsorben en Cr-SiC\_sh.

### 3.2. Análisis NQR de “resonancia cuadrupolar nuclear”

Se ha realizado el procedimiento NQR para los complejos de moléculas de gas de CO, CO<sub>2</sub>, NO y NO<sub>2</sub> que se adsorben en Cr-SiC\_sh. NQR está relacionado con la ampliación multipolar en armonías cartesianas de la siguiente manera (Gregorovič, 2015):

$$V(r) = V(0) + \left[ \left( \frac{\partial v}{\partial x_i} \right) \Big|_0 \cdot x_i \right] + \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x_i \partial x_j} \right) \Big|_0 \cdot x_i x_j \right] + \dots \quad (1)$$

$$\begin{aligned} U &= -\frac{1}{2} \int_D d^3 r \rho_r \left[ \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x_i^2} \right) \Big|_0 \cdot x_i^2 \right] = -\frac{1}{2} \int_D d^3 r \rho_r \left[ \left( \frac{\partial E_i}{\partial x_i} \right) \Big|_0 \cdot x_i^2 \right] \\ &= -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial E_i}{\partial x_i} \Big|_0 \right) \cdot \int_D d^3 r \rho(r) \cdot x_i^2. \end{aligned} \quad (2)$$

Hay dos factores que deberían obtenerse de los experimentos de resonancia de cuadrupolo nuclear; la constante de acoplamiento del cuadrupolo,  $\chi$ , y el factor de asimetría del tensor de gradiente de campo eléctrico  $\eta$ :

$$\chi = \frac{e^2 Q q_{zz}}{h}, \quad (3)$$

$$\eta = \frac{q_{xx} - q_{yy}}{q_{zz}} \quad (4)$$

mientras que  $q_{ii}$  son ingredientes del tensor de gradiente de campo eléctrico en el núcleo cuadrupolar asignado en el sistema de ejes principales del gradiente de campo eléctrico,  $e$  la carga del protón y  $h$  es la constante de Planck y  $Q$  el momento cuadrupolar nuclear (Kyriakidou *et al.*, 2015; Budker & Romalis, 2007). Dado que el gradiente de campo eléctrico en la situación de CO, CO<sub>2</sub>, NO y NO<sub>2</sub> adsorbidos en la superficie de Cr-SiC\_sh como detector de gas es aprobado por los electrones de valencia distorsionados en la conexión especial con núcleos cercanos de nanoláminas de SiC dopadas con Cr, la energía nuclear de resonancia cuadripolar en la que se producen las transiciones es especial para NO@ Cr-SiC\_sh y NO<sub>2</sub>@ Cr-SiC\_sh (Tabla 1).

Tabla 1: Distribución de carga parcial (Q) y energía potencial ( $E_p$ ) de cada átomo en complejos moleculares adsorbidos sobre Cr-SiC\_sh.

CO@Cr-SiC_sh			CO <sub>2</sub> @Cr-SiC_sh			NO@Cr-SiC_sh			NO <sub>2</sub> @Cr-SiC_sh		
Átomo	Q	$E_p$	Átomo	Q	$E_p$	Átomo	Q	$E_p$	Átomo	Q	$E_p$
C1	-0.01	-14.70	C1	0.38	-14.31	O1	-0.08	-22.03	N1	-0.19	-18.12
O2	-0.20	-21.97	O2	-0.18	-21.79	N2	-0.24	-18.18	O2	-0.18	-21.81
C3	-0.86	-14.85	C3	-0.86	-14.85	C3	-0.84	-14.83	O3	-0.20	-22.02
Si4	0.81	-48.63	Si4	0.80	-48.64	Si4	0.81	-48.63	C4	-0.83	-14.82
C5	-0.83	-14.83	C5	-0.83	-14.84	C5	-0.82	-14.82	Si5	0.82	-48.62
Si6	1.14	-48.57	Si6	1.11	-48.58	Si6	1.14	-48.57	C6	-0.83	-14.82
C7	-0.81	-14.87	C7	-0.83	-14.89	C7	-0.82	-14.87	Si7	1.21	-48.53
C8	-1.18	-14.84	C8	-1.18	-14.85	C8	-1.17	-14.82	C8	-0.81	-14.85
Si9	1.16	-48.58	Si9	1.14	-48.59	Si9	1.17	-48.57	C9	-1.11	-14.80
Si10	1.16	-48.58	Si10	1.15	-48.59	Si10	1.17	-48.57	Si10	1.15	-48.56
C11	-0.85	-14.84	C11	-0.86	-14.85	C11	-0.83	-14.82	Si11	1.21	-48.55
C12	-1.20	-14.80	C12	-1.20	-14.81	C12	-1.20	-14.79	C12	-0.84	-14.82
Si13	0.84	-48.62	Si13	0.82	-48.63	Si13	0.84	-48.62	C13	-1.20	-14.79
Si14	1.30	-48.50	Si14	1.28	-48.51	Si14	1.31	-48.50	Si14	0.85	-48.61
C15	-1.16	-14.82	C15	-1.18	-14.82	C15	-1.16	-14.81	Si15	1.32	-48.48
C16	-1.16	-14.82	C16	-1.17	-14.83	C16	-1.15	-14.81	C16	-1.03	-14.69
Cr17	1.30	-101.89	Cr17	1.30	-101.9	Cr17	1.32	-101.88	C17	-1.14	-14.81
Si18	1.14	-48.57	Si18	1.13	-48.58	Si18	1.15	-48.57	Cr18	1.28	-101.90
C19	-0.82	-14.88	C19	-0.83	-14.89	C19	-0.82	-14.87	Si19	1.16	-48.57
C20	-1.21	-14.77	C20	-1.22	-14.78	C20	-1.22	-14.82	C20	-0.82	-14.87
Si21	0.76	-48.66	Si21	0.74	-48.68	Si21	0.81	-48.64	C21	-1.22	-14.80
Si22	1.31	-48.50	Si22	1.30	-48.51	Si22	1.28	-48.53	Si22	0.74	-48.67
C23	-1.25	-14.82	C23	-1.26	-14.82	C23	-1.25	-14.82	Si23	1.29	-48.52
C24	-1.20	-14.80	C24	-1.20	-14.81	C24	-1.20	-14.80	C24	-1.25	-14.81
Si25	1.30	-48.50	Si25	1.29	-48.51	Si25	1.31	-48.50	C25	-1.20	-14.79
Si26	0.83	-48.63	Si26	0.82	-48.63	Si26	0.85	-48.62	Si26	1.28	-48.50
C27	-0.83	-14.84	C27	-0.83	-14.84	C27	-0.82	-14.82	Si27	0.84	-48.62
C28	-0.85	-14.77	C28	-0.85	-14.79	C28	-0.87	-14.80	C28	-0.82	-14.82
Si29	0.92	-48.57	Si29	0.90	-48.59	Si29	0.88	-48.59	C29	-0.87	-14.80
Si30	0.91	-48.58	Si30	0.90	-48.59	Si30	0.92	-48.57	Si30	0.92	-48.57
C31	-1.22	-14.77	C31	-1.22	-14.78	C31	-1.22	-14.80	Si31	0.87	-48.60
Si32	0.76	-48.67	Si32	0.74	-48.68	Si32	0.77	-48.65	C32	-1.22	-14.82
			O33	-0.11	-21.81				Si33	0.83	-48.63

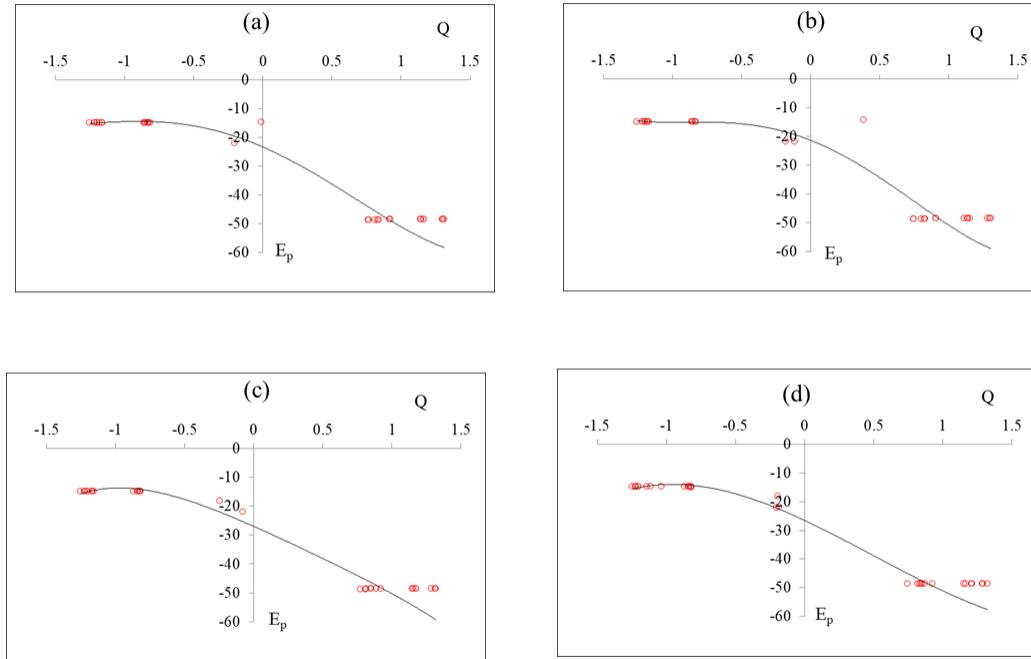


Figura 3: El potencial eléctrico ( $E_p$ /a.u.) versus la carga de Bader ( $Q$ /coulomb) para elementos involucrados en el mecanismo de adsorción de  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO$  y  $NO_2$  adsorbidos en la nanoja de SiC dopada con Cr. Fuente: Elaboración propia

Además, en la Figura 3 (a-d) se ha dibujado el potencial eléctrico del método de resonancia cuadrupolar nuclear versus la carga de Bader para elementos de carbono, nitrógeno, oxígeno, silicio y cromo en el proceso de adsorción de  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO$  y  $NO_2$  sobre el Cr-. Nanoja de SiC dopada por nivel teórico “CAM-B3LYP/EPR-III, 6-311+G (d,p), LANL2DZ”. Se han observado los cambios de potencial eléctrico del carbono, nitrógeno, oxígeno, silicio y cromo en el sitio activo de adsorción de Langmuir.

De hecho, se ha observado el efecto de la unión entre los átomos de C, N y O de moléculas de gas con dopaje con cromo en la nanolámina de SiC durante la adsorción de  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO$  y  $NO_2$  a través del potencial eléctrico resultante mediante análisis NQR (Figura 3a-d). Es obvio que la capacidad de las nanojas de SiC para detectar  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO$  y  $NO_2$  fluctúa según su selectividad y sensibilidad, que pueden representar la eficiencia de estas superficies como sensores prometedores (Figura 3a-d).

Tabla 2: Datos de tensores de blindaje “GIAO/NMR” para átomos seleccionados de  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO$  y  $NO_2$  adsorbidos en la nanolámina de SiC dopada con Cr (GM@ Cr-SiC\_sh) usando CAM-B3LYP/EPR-III, 6-311 Cálculo +G (d,p). Con “Isotropic chemical-shielding” ( $\sigma_{iso}$ ) & “anisotropic chemical-shielding” ( $G_{aniso}$ ):

$$\sigma_{iso} = \frac{\sigma_{33} + \sigma_{22} + \sigma_{11}}{3}, \quad G_{aniso} = \sigma_{33} - \frac{\sigma_{22} + \sigma_{11}}{2}$$

$CO @ Cr-SiC\_sh$			$CO_2 @ Cr-SiC\_sh$			$NO @ Cr-SiC\_sh$			$NO_2 @ Cr-SiC\_sh$		
Atom	$\sigma_{iso}$	$G_{aniso}$	Atom	$\sigma_{iso}$	$G_{aniso}$	Atom	$\sigma_{iso}$	$G_{aniso}$	Atom	$\sigma_{iso}$	$G_{aniso}$
C1	919.79	1222.39	C1	104.78	127.69	O1	2461.23	3517.62	N1	71.59	420.00
O2	156.05	912.93	O2	320.51	246.55	N2	623.40	988.10	O2	285.67	632.05
C3	11.73	506.53	C3	38.53	441.43	C3	91.71	263.77	O3	364.23	675.24
Si4	420.18	658.02	Si4	530.63	420.63	Si4	399.44	482.66	C4	102.22	268.67
C5	162.29	737.54	C5	111.36	588.06	C5	34.49	432.86	Si5	398.08	465.51
Si6	571.51	201.85	Si6	565.47	145.63	Si6	508.13	221.18	C6	6.39	380.51
C7	1071.14	1852.24	C7	306.82	707.32	C7	31.30	182.16	Si7	538.44	226.51
C8	220.83	683.26	C8	99.24	246.24	C8	126.21	189.03	C8	0.53	209.57
Si9	550.73	218.16	Si9	524.97	226.91	Si9	492.16	193.31	C9	109.80	187.10
Si10	561.66	246.98	Si10	523.85	246.26	Si10	483.72	199.85	Si10	499.29	239.73
C11	189.46	869.46	C11	41.99	450.79	C11	101.33	255.92	Si11	489.34	193.56
C12	163.30	248.93	C12	150.26	201.04	C12	176.60	132.36	C12	90.29	277.60
Si13	373.25	687.25	Si13	304.33	643.70	Si13	345.75	559.38	C13	142.44	239.05
Si14	544.67	510.68	Si14	539.28	231.36	Si14	535.26	143.36	Si14	389.23	548.80
C15	196.90	334.31	C15	137.89	193.28	C15	113.18	109.43	Si15	544.59	166.48
C16	192.79	184.43	C16	136.32	208.91	C16	117.08	146.66	C16	182.09	31.89
Cr17	1646.59	1918.12	Cr17	1476.36	730.92	Cr17	517.01	741.00	C17	103.83	150.02
Si18	575.54	291.55	Si18	566.03	155.74	Si18	514.70	205.33	Cr18	764.59	702.10
C19	1082.64	2011.82	C19	363.01	780.24	C19	4.24	207.97	Si19	511.00	240.22
C20	116.36	260.39	C20	104.67	277.16	C20	154.36	46.40	C20	13.33	227.08
Si21	36.22	1571.94	Si21	176.40	1500.01	Si21	251.80	251.80	C21	107.55	192.71
Si22	531.76	369.24	Si22	535.93	394.12	Si22	450.06	63.77	Si22	308.33	1275.13
C23	228.64	145.86	C23	232.87	141.85	C23	227.25	111.12	Si23	461.15	65.07
C24	183.46	172.73	C24	151.86	199.96	C24	191.44	116.70	C24	227.05	125.36
Si25	471.57	306.05	Si25	540.10	238.99	Si25	545.51	106.06	C25	200.46	97.00
Si26	303.83	735.31	Si26	308.26	655.23	Si26	322.17	615.50	Si26	529.98	188.28
C27	182.23	661.12	C27	114.36	596.13	C27	27.29	430.20	Si27	327.81	585.94
C28	28.64	197.05	C28	16.46	204.02	C28	109.07	585.55	C28	37.54	440.43
Si29	297.22	498.06	Si29	361.05	214.16	Si29	121.72	330.23	C29	75.39	515.50
Si30	563.49	580.44	Si30	363.06	232.65	Si30	155.69	394.74	Si30	237.30	336.69
C31	48.10	367.94	C31	100.25	285.00	C31	117.12	159.56	Si31	168.97	275.50
Si32	371.21	1553.42	Si32	183.00	1517.43	Si32	226.73	1109.67	C32	171.25	22.52
			O33	132.27	224.08				Si33	298.37	782.29

### 3.3. Magnetismo de adsorción de gas sobre monocapa de Sic dopada con Cr

Los tensores de protección isotrópicos ( $\sigma_{iso}$ ) y anisotropía ( $\sigma_{aniso}$ ) de la espectroscopia de RMN para ciertos átomos en el sitio activo de  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO$  y  $NO_2$  adsorbidos en la nanolámina de SiC dopada con Cr (GM @ Cr-SiC\_sh) a través de la formación de la unión entre las moléculas de gas y las superficies sólidas se calcularon utilizando Gaussian 16, Revisión C.01 y se informaron en la Tabla 2 (Frisch *et al.*, 2016).

Los gráficos resultantes de los datos de “RMN” en la Tabla 2 han mostrado aproximadamente el mismo comportamiento de protección química de los factores isotrópicos y anisotrópicos de GM @ Cr-SiC\_sh con varios picos agudos relacionados con el carbono, nitrógeno, oxígeno, silicio y cromo de las moléculas de gas (adsorbato) y nanohojas de SiC (adsorbentes) dopadas con TM en situaciones de sitio activo.  $CO @ Cr-SiC\_sh$  con varios picos agudos relacionados con el sitio de adsorción de átomos, incluidos C1, C7, C11, C19, C28, Si4, Si21, Si29, Si30, Cr17;  $CO_2 @ Cr-SiC\_sh$  con varios picos agudos para los átomos de C7, C11, C19, C28, Si13, Si21, Si29, Si30, Cr17;  $NO @ Cr-SiC\_sh$  con varios picos agudos para los átomos de O1, N2, Cr17 y varios picos menos agudos para los átomos de C5, C8, C28, Si13, Si26; y  $NO_2 @ Cr-SiC\_sh$  con varios picos agudos para los átomos de O1, N2, Cr17 y varios picos menos agudos para los átomos de C5, C8, C28, Si13, Si26.

Cr–SiC\_sh con varios picos agudos para átomos de O3, Si14, Si22, Si27, Si30, Si31, y varios picos menos agudos de N1, C6, Cr18, respectivamente (Tabla 2).

Aunque, en la espectroscopia de RMN, se han observado picos notables alrededor de los átomos de silicio y cromo en las nanoláminas de SiC a través del procedimiento de adsorción de moléculas de gas, existen algunas fluctuaciones en los comportamientos de protección química de los atributos isotrópicos y anisotrópicos.

### 3.4. Vibraciones de adsorción de gas sobre monocapa de Sic dopada con Cr

En esta parte, se ha investigado la estabilidad de complejos, incluida la adsorción de gas en una lámina monocapa de carburo de silicio (SiC) dopada con metal de cromo (Cr), a través de propiedades termodinámicas que definen las reacciones que soportan *CO*, *CO*<sub>2</sub>, *NO* y *NO*<sub>2</sub> en la esfera de coordinación Cr–SiC\_sh. Con respecto al proceso de adsorción, se evaluaron los caracteres termodinámicos para *CO*, *CO*<sub>2</sub>, *NO* y *NO*<sub>2</sub> en la superficie de Cr–SiC\_sh como detectores de gases que pueden ser aplicables como sensores selectivos para estos gases (Tabla 3).

Además, en la Figura 4 (a-d) se informan los espectros de IR para la adsorción de *CO*, *CO*<sub>2</sub>, *NO* y *NO*<sub>2</sub> en las superficies de Cr–SiC\_sh. El gráfico de la Figura 4 (a) se ha observado en el rango de frecuencia entre 500–2500 cm<sup>-1</sup> para el complejo de *CO* @ Cr–SiC\_sh con varios picos agudos alrededor de 544.14, 788.20, 1269.6, 1660.33, 2150.96 y 2372.32 cm<sup>-1</sup>.

Tabla 3: El carácter termodinámico del *CO*, *CO*<sub>2</sub>, *NO* y *NO*<sub>2</sub> adsorbidos en Cr–SiC\_sh como sensores selectivos de gas.

Compound	$\Delta E^\circ \times 10^{-4}$ (kcal/mol)	$\Delta H^\circ \times 10^{-4}$ (kcal/mol)	$\Delta G^\circ \times 10^{-4}$ (kcal/mol)	$S^\circ$ (Cal/K·mol)	Momento bipolar (Debye)
<i>CO</i>	-6.98	-6.98	-6.98	47.10	0.23
<i>CO</i> <sub>2</sub>	-11.61	-11.61	-11.61	51.38	0.00
<i>NO</i>	-8.00	-8.00	-8.00	48.97	0.23
<i>NO</i> <sub>2</sub>	-12.63	-12.63	-12.63	57.79	0.23
SiC_sh	-304.34	-304.34	-304.34	93.68	9.60
Cr–SiC_sh	-351.23	-351.23	-351.23	90.93	9.60
<i>CO</i> @ Cr–SiC_sh	-358.23	-358.23	-358.23	98.81	11.13
<i>CO</i> <sub>2</sub> @Cr–SiC_sh	-362.89	-362.89	-362.89	98.04	10.14
<i>NO</i> @ Cr–SiC_sh	-359.27	-359.27	-359.27	101.64	8.58
<i>NO</i> <sub>2</sub> @Cr–SiC_sh	-363.90	-363.90	-363.90	94.97	8.34

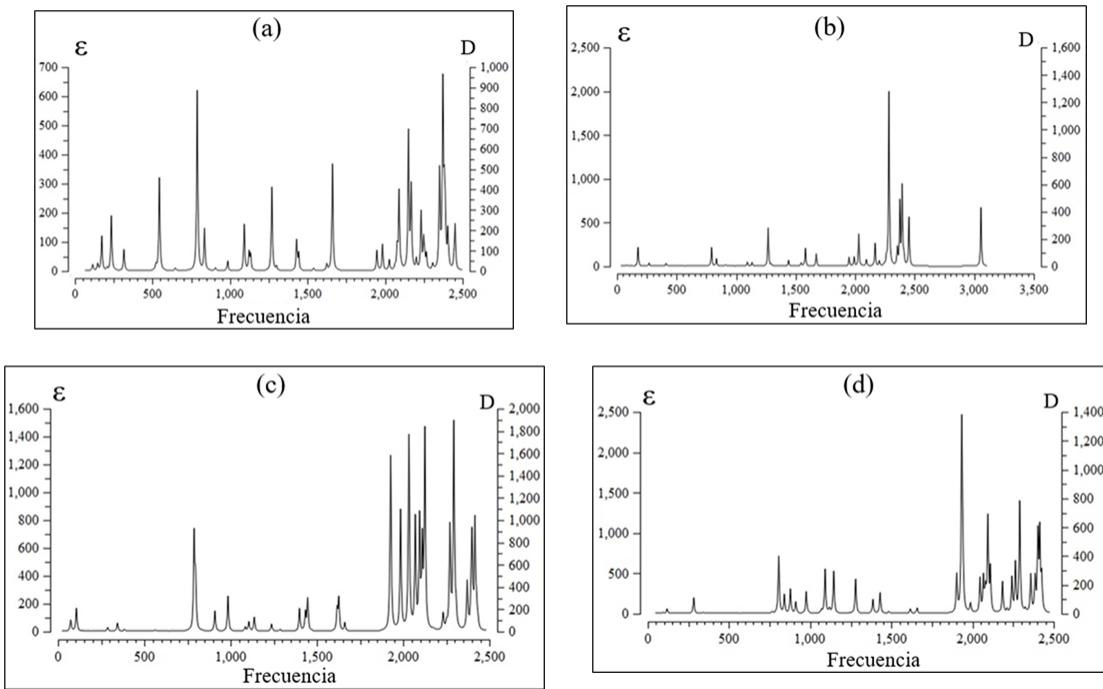


Figura 4: La Frecuencia ( $cm^{-1}$ ) cambia a través de los espectros “IR” para a)  $CO@ Cr-SiC_{sh}$ , b)  $CO_2@Cr-SiC_{sh}$ , c)  $NO@ Cr-SiC_{sh}$  y d)  $NO_2@ Cr-SiC_{sh}$  como los detectores selectivos de gases.  $\epsilon$  ( $M^{-1}cm^{-1}$  o  $L mol^{-1}cm^{-1}$ ) es la unidad de absorbancia y  $D$  ( $10^{-4} esu^2 cm^2$ ) es la fuerza dipolar a través de la esu o unidad electrostática, que es una unidad de carga en el sistema cgs (centímetro-gramo-segundo). Fuente: Elaboración propia

La Figura 4 (b) ha mostrado los picos IR más fuertes de  $CO_2 @ Cr-SiC_{sh}$  aproximadamente entre  $1000\text{ cm}^{-1}$  y  $3000\text{ cm}^{-1}$  con un pico agudo de alrededor de  $2029.61\text{ cm}^{-1}$ . La Figura 4 (c) ha mostrado varios picos IR menos fuertes de  $NO@ Cr-SiC_{sh}$  aproximadamente entre  $550\text{--}2500\text{ cm}^{-1}$  con varios picos considerables alrededor de  $1927.38$ ,  $1985.13$ ,  $2033.32$ ,  $2070.30$ ,  $2094.94$ ,  $2110.71$ ,  $2125.89$ ,  $2270.87$ ,  $2293.92$  y  $2416.07\text{ cm}^{-1}$ . La Figura 4 (d) ha mostrado varios picos IR menos fuertes de  $NO_2@ Cr-SiC_{sh}$  aproximadamente entre  $550\text{--}2500\text{ cm}^{-1}$  con varios picos agudos alrededor de  $1091.68$ ,  $1144.68$ ,  $1933.85$ ,  $2094.63$ ,  $2290.29$ ,  $2402.25$  y  $2413.97\text{ cm}^{-1}$ .

La capacidad de adsorción de  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO$  y  $NO_2$  en la superficie de  $Cr-SiC_{sh}$  está aprobada por las cantidades  $\Delta E_{ads}$  como fórmula:

$$\Delta E_{ads} = \Delta E_{X \rightarrow Cr-SiC_{sh}} - (\Delta E_X + \Delta E_{Cr-SiC_{sh}}); \quad (X = CO, CO_2, NO, NO_2) \quad (5)$$

La Tabla 3 ha demostrado que la adsorción de  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO$  y  $NO_2$  en la superficie de  $Cr-SiC_{sh}$  debe tener una naturaleza tanto “física” como “química”. Todas las energías de adsorción relativas medidas ( $\Delta E_{ads}$ ) son

casi idénticas y muestran la concordancia de los datos estimados por todos los métodos y la precisión de los cálculos. De hecho, Cr-SiC\_sh tiene una mayor energía de interacción de las fuerzas de Van der Waals con moléculas de gas, incluidas CO,  $CO_2$ , NO y  $NO_2$ , que pueden hacerlas altamente estables.

Además, la diferencia de  $\Delta H_{ads}$  entre la adsorción de CO,  $CO_2$ , NO y  $NO_2$  en la superficie de SiC\_sh dopado con Cr se ha desentrañado debido a la unión no covalente resultante de las interacciones interatómicas entre las moléculas de gas y la superficie (GM @ Cr-SiC) y la unión covalente resultó de interacciones intraatómicas entre el metal de transición de cromo y la nanohoja de carburo de silicio (Cr-SiC\_sh) (Tabla 3).

Para el mecanismo de adsorción,  $\Delta G_{ads}$  se calcula de la siguiente manera:

$$\Delta G_{ads}^{\circ} = \Delta G_{X \rightarrow Cr-SiC\_sh}^{\circ} - (\Delta G_X^{\circ} + \Delta G_{Cr-SiC\_sh}); \quad (X = CO, CO_2, NO, NO_2) \quad (6)$$

Sobre la base de los datos de la Tabla 3, se predice que la adsorción de las moléculas de gas en la superficie de Cr-SiC\_sh podría ser de naturaleza física y química. Como se muestra en la Tabla 3, todas las cantidades de  $\Delta G_{ads}$  calculadas son cercanas, lo que muestra la concordancia de los datos evaluados por todos los métodos y la validez de los cálculos.

Sin embargo, la superficie Cr-SiC\_sh parece poseer suficiente eficiencia para la adsorción de moléculas de gas que contienen CO,  $CO_2$ , NO y  $NO_2$  a través de la transferencia de carga desde nitrógeno y oxígeno al dopaje con elemento cromo del carburo de silicio debido a interacciones intraatómicas e interatómicas.

### 3.5. Análisis de “HOMO, LUMO”

Con base en la teoría de los orbitales moleculares de frontera “FMO”, se calcularon “LUMO” y “HOMO” y la energía entre ellos es la banda prohibida del sistema de adsorción. De hecho, el diagrama de banda ancha indica que hay menos conductividad. La distribución de energía de la banda “LUMO”, “HOMO”, ( $\Delta E$ ) y otras cantidades de CO,  $CO_2$ , NO y  $NO_2$  en las superficies de Cr-SiC\_sh como sistemas detectores fue indicado en la Tabla 4.

Tabla 4: Distribuciones de "LUMO"(eV), "HOMO"(eV), banda prohibida de energía ( $\Delta E$ /eV) y otras cantidades (eV) de  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO$  y  $NO_2$  en las superficies de Cr-SiC\_sh. Donde: Brecha de energía de banda:  $\Delta E = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$ ; Potencial químico:  $\mu = (E_{\text{HOMO}} + E_{\text{LUMO}})/2$ ; Electronegatividad:  $\chi = -(E_{\text{HOMO}} + E_{\text{LUMO}})/2$ ; Dureza:  $\eta = (E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}})/2$ ; Blandura:  $\zeta = 1/(2\eta)$ ; Índice de electrofilicidad:  $\psi = \mu^2/(2\eta)$  (Kohn *et al.*, 1996; Parr & Pearson, 1983; Politzer & Abu-Awwad, 1998)

Gas → Cr-SiC_sh	LUMO	HOMO	$\Delta E$	$\mu$	$\chi$	$\eta$	$\zeta$	$\psi$
$CO @ \text{Cr-SiC_sh}$			0.6786	0.0452	-0.0452	0.3393	1.4736	0.0030
	0.384	-0.2941						
$CO_2 @ \text{Cr-SiC_sh}$			1.1616	0.5435	-0.5435	0.5808	0.8609	0.2543
	1.1243	-0.0373						
$NO @ \text{Cr-SiC_sh}$			1.4650	0.3325	-0.3325	0.7325	0.6826	0.0754
	1.0650	-0.4000						
$NO_2 @ \text{Cr-SiC_sh}$			2.0439	0.0739	-0.0739	1.0219	0.4892	0.0026
	1.0959	-0.9480						

La brecha energética entre HOMO y LUMO ha representado el transporte de caracteres eléctricos moleculares (Silverstein *et al.*, 1981). Por otro lado, la diferencia entre HOMO y LUMO ha demostrado el efecto del proceso de adsorción en el comportamiento electrónico de  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO$  y  $NO_2$  en las superficies de las nanohojas de Cr-SiC\_sh (Tabla 4). Otras cantidades (eV) que consisten en potencial químico, electronegatividad, dureza, suavidad e índice de electrofilicidad muestran un rendimiento agradable para capturar  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO$  y  $NO_2$  mediante nanohojas de Cr-SiC\_sh (Tabla 4).

La ilustración de las moléculas donante-aceptoras depende de los niveles moleculares fronterizos relativos. La brecha HOMO-LUMO define la transferencia de carga en las moléculas de gas adsorbidas en la nanohoja de Cr-SiC\_sh a través de un diagrama de nivel molecular simplificado. De hecho, la cantidad de cargas transferidas puede ser considerablemente pequeña, como en el caso de la coordinación paralela y perpendicular, que indican acoplamientos electrónicos más pequeños que en la coordinación cofacial. Los

resultados de la Tabla 4 han indicado los cambios en el nivel de energía de la molécula de gas →superficie-HOMO y de la molécula de gas →superficie-LUMO de los nanoclusters en función de su distancia  $d$  orbitales desde los puntos de alta simetría de cada molécula de gas en la nanohoja de Cr-SiC\_sh. Por lo tanto, el nivel HOMO de la molécula disminuye a medida que pierde su electrón, mientras que el nivel LUMO de la superficie aumenta a medida que gana carga parcial.

## 4. CONCLUSIÓN

En resumen, la nanolámina de SiC dopada con elementos no metálicos se ha estudiado mediante cálculos del primer principio. Se consideran diferentes dopantes de moléculas de gas y sitios de dopaje. La investigación actual quería destacar la ilustración de la adsorción de gas en nanohojas de Cr-SiC\_sh. En particular, las propiedades estructurales, energéticas y de adsorción infrarroja de las moléculas de gas CO, CO<sub>2</sub>, NO y NO<sub>2</sub> linealmente “encima” que se adsorben en nanohojas de Cr-SiC\_sh se han explorado mediante cálculos DFT. Los valores de los cambios de densidad de carga han mostrado una transferencia de carga más importante para las nanohojas de Cr-SiC\_sh, que actúan como aceptores de electrones, mientras que las moléculas de gas actúan como donadores de electrones más fuertes a través de la adsorción en la superficie de las nanohojas de Cr-SiC\_sh. Se ha asumido que la prioridad para seleccionar la unión superficial del átomo de N de NO y del átomo de O de NO<sub>2</sub>, CO y CO<sub>2</sub> en el sitio de adsorción puede verse afectada por la existencia de átomos cercanos en la superficie de Cr-SiC\_sh. De hecho, el sitio Cr en la nanohoja SiC\_sh tiene una mayor energía de interacción de las fuerzas de Van der Waals con moléculas de gas como CO, CO<sub>2</sub>, NO y NO<sub>2</sub>, lo que puede hacerlos altamente estables. Finalmente, las consecuencias de nuestra simulación molecular han mostrado la existencia de hibridación orbital entre el sitio de cromo y las moléculas de gas de CO, CO<sub>2</sub>, NO y NO<sub>2</sub> que también aprueba la recuperación de la susceptibilidad a la adsorción de la lámina de grafeno. De hecho, la superficie Cr-SiC\_sh puede prometer una perspectiva aplicable en el campo de los sensores de gases CO, CO<sub>2</sub>, NO y NO<sub>2</sub>.

## Agradecimientos

Por completar con éxito este artículo y su investigación, el autor agradece a la Universidad de Kastamonu.

## Referencias

- Ahmed, H. & Hashim, A. (2021). Structural, Optical and Electronic Properties of Silicon Carbide Doped PVA/NiO for Low Cost Electronics Applications. *Silicon*, 13, 1509–1518. <https://doi.org/10.1007/s12633-020-00543-w>.
- Belarouci, S., Ouahrani, T., Benabdallah, N., Morales-García, Á. & Belabbas, I. (2018). Two-dimensional silicon carbide structure under uniaxial strains, electronic and bonding analysis. *Computational Materials Science*, 151, 288–295. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.05.020>.

- Bizyaev, I., Gabdullin, P., Chumak, M., Babyuk, V., Davydov, S., Osipov, V., Kuznetsov, A., Kvashenkina, O. & Arkhipov, A. (2021). Low-Field Electron Emission Capability of Thin Films on Flat Silicon Substrates: Experiments with Mo and General Model for Refractory Metals and Carbon. *Nanomaterials*, 11, 3350. <https://doi.org/10.3390/nano11123350>.
- Budker, D. & Romalis, M. (2007). Optical magnetometry. *Nature Phys.* 3, 227–234. <https://doi.org/10.1038/nphys566>.
- Daliev, Kh.S., Utamuradova, Sh.B., Khamdamov, J.J. & Bahronkulov, Z.E. (2024). Electophysical properties of silicon doped with lutetium. *Advanced Physical Research*, 6, 42–49. <https://doi.org/10.62476/apr61.49>.
- Davydov, S.Y. & Posrednik, O.V. (2019). On the Adsorption of Gases on Silicon Carbide: Simple Estimates. *Phys. Solid State*, 61, 1490–1493. <https://doi.org/10.1134/S1063783419080109>.
- Dennington, R., Keith, T.A. & Millam, J.M. (2016). GaussView. Version 6. Shawnee Mission (KS): Semichem Inc.
- 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. et al. (2016). *Gaussian 16*, Revision C.01, Gaussian, Inc., Wallingford CT.
- Gregorovič, A. (2015). Quantitative Analysis of Hydration Using Nitrogen-14 Nuclear Quadrupole Resonance. *Anal. Chem.* 87, 6912–6918. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.5b01492>.
- Hammudi, R.A. & Mahmood, M.A. (2025). Study the effect of relationship between heat treatment and mechanical characteristic behavior of aluminum-boron carbide composite prepared use powder metallurgy technique. *Advanced Physical Research*. 7, 102–110. <https://doi.org/10.62476/apr.71102>.
- Kohn, W., Becke, A.D. & Parr, R.G. (1996). Density Functional Theory of Electronic Structure. *J. Phys. Chem.* 100, 12974–12980. <https://doi.org/10.1021/jp9606691>.
- Kresse, G. & Furthmüller, J. (1996). Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Phys. Rev. B*. 54, 11169–11186. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169>.
- Kresse, G. & Joubert, D. (1999). From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method. *Phys. Rev. B*. 59, 1758–1775. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.1758>.
- Kyriakidou, G., Jakobsson, A., Althoefer, K. & Barras, J. (2015). Batch-Specific Discrimination Using Nuclear Quadrupole Resonance Spectroscopy. *Anal. Chem.* 87, 3806–3811. <https://doi.org/10.1021/ac5044658>.

- Li, C., Li, D., Zhang, L. *et al.* (2023). Boosted microwave absorption performance of transition metal doped TiN fibers at elevated temperature. *Nano Res.* 16, 3570–3579. <https://doi.org/10.1007/s12274-023-5398-3>.
- Luo, M. & Shen, Y.H. (2018). Magnetic Properties of SiC Monolayer with Different Nonmagnetic Metal Dopeants. *J. Supercond. Nov. Magn.* 31, 3277–3282. <https://doi.org/10.1007/s10948-018-4589-8>.
- Majid, A., Akhtar, SeA., Sandhu, QuA. *et al.* (2021). Iodide Adsorption on Transition-Metal-Doped SiC Monolayers: A Density Functional Theory Based Bonding Analysis. *J. Electron. Mater.* 50, 3546–3556. <https://doi.org/10.1007/s11664-021-08876-x>.
- Mamadalimov, A.T., Isaev, M.Sh., Karimov, M.K., Isaev, F.M., Muminova, Z.A., Karimova, S.T., Kayumova, M.R., Badalova, G.T. & Abdurazzakov, Kh.T. (2024). *Advanced Physical Research*. 6, 50–55. <https://doi.org/10.62476/apr61.55>.
- Mollaamin, F. & Monajjemi, M. (2023a). 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*. 9, 20. <https://doi.org/10.3390/c9010020>.
- Mollaamin, F. & Monajjemi, M. (2023b). Graphene Embedded with Transition Metals for Capturing Carbon Dioxide: Gas Detection Study Using QM Methods. *Clean Technol.* 5(1), 403–417. <https://doi.org/10.3390/cleantechnol5010020>.
- Mollaamin, F. & Monajjemi, M. (2023c). 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.* 29, 119. <https://doi.org/10.1007/s00894-023-05526-3>.
- Mollaamin, F. & Monajjemi, M. (2023d). 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.* 29, 170. <https://doi.org/10.1007/s00894-023-05567-8>.
- Mollaamin, F. & Monajjemi, M. (2023e). Graphene-based resistant sensor decorated with Mn, Co, Cu for nitric oxide detection: Langmuir adsorption & DFT method. *Sensor Review*. 43(4), 266–279. <https://doi.org/10.1108/SR-03-2023-0040>.
- Mollaamin, F. & Monajjemi, M. (2023f). Molecular modelling framework of metal-organic clusters for conserving surfaces: Langmuir sorption through the TD-DFT/ONIOM approach. *Molecular Simulation* 49(4), 365–376. <https://doi.org/10.1080/08927022.2022.2159996>.
- Mollaamin, F., Shahriari, S., Monajjemi, M. & Khalaj, Z. (2023). Nanocluster of Aluminum Lattice via Organic Inhibitors Coating: A Study of Freundlich Adsorption. *J Clust Sci.* 34, 1547–1562. <https://doi.org/10.1007/s10876-022-02335-1>.

- Perdew, J.P., Burke, K. & Ernzerhof, M. (1996). Generalized gradient approximation made simple. *Phys. Rev. Lett.* 77, 3865–3868. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>.
- Parr, R.G. & Pearson, R.G. (1983) Absolute Hardness: Companion Parameter to Absolute Electronegativity. *J. Am. Chem. Soc.* 105, 7512–7516. <http://dx.doi.org/10.1021/ja00364a005>.
- Politzer, P. & Abu-Awwad, F. (1998). A comparative analysis of Hartree-Fock and Kohn-Sham orbital energies. *Theor. Chem. Acc.* 99, 83–87. <https://doi.org/10.1007/s002140050307>.
- Qin, T., Wang, Z., Wang, Y. *et al.* (2021). Recent Progress in Emerging Two-Dimensional Transition Metal Carbides. *Nano-Micro Lett.* 13, 183. <https://doi.org/10.1007/s40820-021-00710-7>.
- Rusho, M.A., Sharma, P., Ibrahim, S.K. *et al.* (2025). Silicon Carbide Monolayer as a Promising Material for the Adsorption of SF<sub>6</sub> Decomposed Gases. *Silicon.* 17, 789–798. <https://doi.org/10.1007/s12633-025-03233-7>.
- Silverstein, R.M., Bassler, G.C. & Morrill, T.C. (1981). *Spectrometric Identification of Organic Compounds*, 5th ed., John Wiley & Sons, Inc., New York.
- Singh, R.S. (2023). CO<sub>2</sub> Capture by Metal-Decorated Silicon Carbide Nanotubes. *Silicon.* 15, 4501–4511. <https://doi.org/10.1007/s12633-023-02368-9>.
- Soliman, K.A. & Aal, S.A. (2022). The efficiency of n- and p-type doping silicon carbide nanocage toward ( $NO_2$ ,  $SO_2$ , and NH<sub>3</sub>) gases. *Chem. Pap.* 76, 4835–4853. <https://doi.org/10.1007/s11696-022-02183-3>.
- Utamuradova, Sh.B., Daliev, Sh.Kh., Bokiyev, B.R. & Zarifbaev, J.Sh. (2024). X-ray spectroscopy of silicon doped with germanium atoms. *Advanced Physical Research* 6, 211–218. <https://doi.org/10.62476/apr63211>.
- Xi, G., Liu, Y., Liu, X., Wang, X. & Qian, Y. (2006). Mg-Catalyzed Autoclave Synthesis of Aligned Silicon Carbide Nanostructures. *J. Phys. Chem. B.* 110, 14172–14178. <https://doi.org/10.1021/jp0617468>.
- Zabolotnov, A.S., Gostev, S.S., Maklakova, I.A. *et al.* (2023). Influence of an Ultralow Graphene Content on the Physical and Mechanical Characteristics of UHMWPE-Based Composites. *Russ. J. Phys. Chem. B* 17, 1409–1413. <https://doi.org/10.1134/S1990793123060258>.
- Yan, Z., Bai, Y. & Sun, L. (2019). Adsorption of thiophene and SO<sub>x</sub> molecules on Cr-doped and Ti-doped graphene nanosheets: a DFT study. *Materials Research Express.* 6, 125067. <https://doi.org/10.1088/2053-1591/ab599d>.
- Zolotarev, K.V., Mikhailov, A.N., Nakhod, V.I., Tikhonova, E.G. & Mikhailova, M.V. (2024). Characterization and in vivo toxicity assay of uncoated silicon nanoparticles. *New Materials, Compounds and Applications.* 8, 162–170. <https://doi.org/10.62476/nmca82162>.