

# UN ENFOQUE PROMETEDOR PARA LA PRODUCCIÓN DE ENERGÍA SOSTENIBLE Y RESPETUOSA CON EL MEDIO AMBIENTE UTILIZANDO NANOCOMPUESTOS BASADOS EN NITRURO MEDIANTE DOPAJE ATÓMICO<sup>a</sup>

## A PROMISING APPROACH FOR SUSTAINABLE ECO-FRIENDLY ENERGY PRODUCTION USING NITRIDE-BASED NANOCOMPOSITES THROUGH ATOM IMPLEMENTING

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

Recibido 02-11-2024, aceptado 13-03-2025, version final 14-03-2025.

Artículo de Investigación

**RESUMEN:** Se ha investigado la adsorción de hidrógeno mediante nanojaulas de nitruro de boro dopadas con  $X$  ( $X = Al, C, Si$ ) utilizando la teoría del funcional de la densidad. La densidad parcial de estados (PDOS) puede evaluar un ensamblaje de carga determinado entre moléculas de hidrógeno y  $X$ -BN, lo que indica la competencia entre complejos dominantes de metales (Al), no metálicos (C) y metaloides/semiconductores (Si). Con base en el análisis de resonancia cuadrupolar nuclear (RCN), el dopado con carbono sobre BN ha mostrado la fluctuación más baja en el potencial eléctrico y la carga atómica negativa más alta en átomos dopantes, incluidos C, Si y Al, incluidos 0, 1167, 1, 0620 y 1, 1541 coulomb en  $H@C-BN$ ,  $H@Si-BN$  y  $H@Al-BN$ . Además, los resultados informados de la espectroscopía de RMN han demostrado que el rendimiento de aceptación de electrones para átomos dopantes en el  $X-BN$  a través de la adsorción de  $H_2$  se puede ordenar como:  $Si \approx Al > C$ . En cuanto a la espectroscopia IR, las nanojaulas dopadas de  $H@Si-BN \approx H@Al-BN > H@C-BN$ , respectivamente, tienen la mayor cantidad de fluctuaciones y la mayor tendencia de adsorción para las moléculas de hidrógeno. Finalmente, la alta selectividad de la nanojaula dopada con átomos sobre nitruro de boro para la adsorción de moléculas de  $H_2$  ha resultado como:  $H@Si-BN > H@Al-BN \gg H@C-BN$ . Nuestros hallazgos preparan visiones importantes sobre el potencial de emplear nanojaulas  $X$  ( $X=Al, C, Si$ ) -BN en enfoques de almacenamiento de energía basados en hidrógeno. El análisis reveló que el Si-BN exhibió mejores interacciones y, por lo tanto, mejor capacidad de adsorción hacia el gas  $H_2$  que el BN prístino y otros dopados.

**PALABRAS CLAVE:** BN; almacenamiento de hidrógeno; celda de batería; nanomaterial; dopaje; DFT.

**ABSTRACT:** Hydrogen adsorption by using  $X$  ( $X=Al, C, Si$ )-doped boron nitride nanocage (BN) have been investigated using density functional theory. The partial density of states (PDOS) can evaluate a determined charge

<sup>a</sup>Mollaamin, F. (2025). Un enfoque prometedor para la producción de energía sostenible y respetuosa con el medio ambiente utilizando nanocompuestos basados en nitruro mediante dopaje atómico. *Rev. Fac. Cienc.*, 14 (2), 16–36. DOI: <https://10.15446/rev.fac.cienc.v14n2.117403>

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

\* Autor para correspondencia: [fmollaamin@kastamonu.edu.tr](mailto:fmollaamin@kastamonu.edu.tr)

assembly between hydrogen molecules and X-BN which indicates the competition among dominant complexes of metallic (Al), nonmetallic (C), metalloid/semiconductor (Si). Based on NQR analysis, carbon-doped on BN has shown the lowest fluctuation in electric potential and the highest negative atomic charge on doping atoms including C, Si, and Al including 0.1167, 1.0620, and 1.1541 coulomb in H@C-BN, H@Si-BN, and H@Al-BN. Furthermore, the reported results of NMR spectroscopy have exhibited that the yield of electron accepting for doping atoms on the X-BN\_NC through  $H_2$  adsorption can be ordered as:  $Si \approx Al > C$ . Regarding IR spectroscopy, doped nanocages of  $H@Si-BN \approx H@Al-BN > H@C-BN$ , respectively, have the most fluctuations and the highest adsorption tendency for hydrogen molecules. Finally, high selectivity of atom-doped on boron nitride nanocage for  $H_2$  molecules adsorption has been resulted as:  $H@Si-BN > H@Al-BN \gg H@C-BN$ . Our findings prepare important visions into the potential of employing X (X=Al, C, Si) -BN nanocages in hydrogen-based energy-storage approaches. The analysis revealed that Si-BN exhibited better interactions and, therefore, better adsorption ability towards  $H_2$  gas than pristine and other doped BN.

**KEYWORDS:** BN; hydrogen storage; battery cell; nanomaterial; doping; DFT.

## 1. INTRODUCCIÓN

Los nanomateriales de nitruro de boro se han utilizado debido a sus incomparables especificaciones de atributos ecológicos para la adsorción de contaminantes y propiedades semiconductoras (González-Ortiz *et al.*, 2020; Mishra & Saravanan, 2018; Weng *et al.*, 2016; Ocotitla Muñoz *et al.*, 2021). Los nanométricos de nitruro de boro suelen exhibir un comportamiento semi-líder, lo que se considera una alternativa adecuada a los nanotubos de carbono. Las propiedades de los átomos de boro y nitrógeno, que son los primeros vecinos del carbono en la tabla periódica, hacen del nitruro de boro un tema interesante de numerosos estudios (Shtansky *et al.*, 2022; Yang *et al.*, 2022; Davies *et al.*, 2018).

En los últimos años se han estudiado diferentes investigaciones sobre la adsorción de contaminantes químicos y la aplicación de diversas nanoestructuras de nitruro de boro como adsorbentes para la purificación de agua (Bangari *et al.*, 2020; Chao *et al.*, 2020; Mollaamin *et al.*, 2015). Varias formas físicas de nanoadsorbentes basados en nitruro de boro (BN), como nanopartículas, fullerenos, nanotubos, nanofibras, nanocintas, nanoláminas, nanomallas, nanoflores y esferas huecas, se han considerado ampliamente como posibles adsorbentes debido a sus características excepcionales, como una gran superficie, variabilidad estructural, gran resistencia química/mecánica, abundantes defectos estructurales, altos sitios reactivos y grupos funcionales (Monajjemi *et al.*, 2008; Guo *et al.*, 2019).

El gas  $H_2$  se conserva principalmente mediante licuefacción bajo alta presión de compresión (Cardella *et al.*, 2017; Hammad & Dincer, 2018; Cardella *et al.*, 2017; Qyyum *et al.*, 2020) o mediante adsorción en la superficie o región intersticial de la cavidad del material (Piñero *et al.*, 2018; Yu *et al.*, 2017; Chettri *et al.*, 2019). En relación con esto, la adsorción de  $H_2$  en la superficie de materiales 2D tiene ventajas en términos de funcionalidad segura y rentabilidad. Para la utilización eficaz del  $H_2$  en las pilas de combusti-

ble, la energía de adsorción y el porcentaje en peso gravimétrico del adsorbente deben ser suficientemente altos (Rivard *et al.*, 2019). La cinética de adsorción-desorción y la fuerza de la energía de unión deben ser intermedias para que el hidrógeno se una a las superficies del material con un rango óptimo de energía de adsorción.

Debido a las razones obvias mencionadas anteriormente, hemos explorado la posibilidad de utilizar nanojaulas de nitruro de boro dopadas con aluminio, carbono y silicio para el almacenamiento de  $H_2$  empleando cálculos de primeros principios. Hemos analizado las propiedades estructurales y electrónicas de nanojaulas X (Al, C, Si)-BN utilizando técnicas computacionales de última generación.

La adsorción que involucra adsorbatos cargados provoca un cambio en la doble capa y el potencial en el plano externo de Helmholtz, lo que influye en las velocidades de adsorción de las reacciones anódicas y catódicas. Los primeros tres modos están íntimamente relacionados con la adsorción y la doble capa implica la interacción de los adsorbatos y los productos intermedios. Estos compuestos se han formado durante las reacciones electroquímicas parciales y la interacción de los intermedios adsorbidos con moléculas orgánicas que pueden inhibir o mejorar la velocidad de reacción del electrodo (Mollaamin & Monajjemi, 2012).

Un material ideal para almacenar hidrógeno requiere una adsorción eficaz de hidrógeno y una cinética de desorción fácil. La interacción del hidrógeno con materiales heteronucleares incluye tanto la fisisorción, en la que la molécula de hidrógeno interactúa con la superficie a través de fuerzas de van der Waals débiles, como la quimisorción, en la que la molécula de hidrógeno se disocia e interactúa a través de enlaces químicos con la superficie (Mollaamin, 2024).

La disponibilidad de materiales de almacenamiento de hidrógeno con seguridad confiable, alta capacidad, condiciones termodinámicas moderadas y rendimiento cinético rápido es un problema científico y tecnológico urgente en todo el mundo. Las nanojaulas de nitruro de boro poseen enlaces covalentes polares B–N y, por lo general, una gran área de superficie específica, lo que las convierte en un candidato más prometedor en comparación con sus análogos de grafeno para la aplicación de sorción de hidrógeno en estado sólido (Chigo-Anota *et al.*, 2015; Mollaamin & Monajjemi, 2024; Rodríguez Juárez *et al.*, 2019; Mollaamin & Monajjemi, 2024; Mollaamin & Monajjemi, 2024).

Se han realizado cálculos de la teoría funcional de la densidad para investigar las moléculas de hidrógeno adsorbidas en el dopaje de metales prístinos y de transición en el sitio B o N de la nanojaula de nitruro de boro (Mollaamin & Monajjemi, 2023a; Villanueva *et al.*, 2023; Mollaamin *et al.*, 2024; Rodríguez Juárez *et al.*, 2019; Mollaamin & Monajjemi, 2024; Mollaamin *et al.*, 2024).

En particular, este trabajo de investigación tiene como objetivo evaluar las influencias de los átomos dopantes de Al, C, Si en el X–BN<sub>NC</sub> para aumentar la detección de hidrógeno mediante la medición de algunos

parámetros que contienen transferencia de carga, potencial eléctrico, propiedades electromagnéticas y termodinámicas, área de superficie, grupo funcional y examinar la capacidad de aplicar nanojaulas (Al, C, Si)-BN en enfoques de almacenamiento de energía basados en hidrógeno.

En este artículo, se resumen en profundidad los avances recientes en el cálculo teórico sobre estrategias de mejora de la adsorción, como el dopaje con elementos metálicos, metaloides y no metálicos. En general, creemos que este artículo proporciona una presentación integral de la investigación de vanguardia y perspectivas útiles para mejorar aún más el rendimiento del almacenamiento de hidrógeno en nanojaulas de nitruro de boro. Se investigaron los efectos del dopaje con Al, C y Si en el comportamiento de adsorción del BN. Las geometrías optimizadas se utilizaron para analizar los parámetros geométricos. Se midieron las energías de adsorción para comprender la termodinámica de la adsorción de  $H_2$ . La densidad de estados, la carga atómica y la distribución de orbitales moleculares se examinaron y verificaron mediante descriptores de reactividad.

## 2. IDEAS TEÓRICAS, MATERIAL APLICADO Y MÉTODO.

### 2.1. Adsorción de molécula de hidrógeno en X - BN\_NC.

El objetivo de este estudio es adsorber moléculas de hidrógeno en la celda de almacenamiento de energía como un enfoque ecológico mediante el uso de BN\_NC dopado con (Al, C, Si) (Figura 1). La nanojaula de nitruro de boro se modeló en presencia de átomos dopantes de aluminio, carbono y silicio que pueden aumentar el potencial de detección de hidrógeno de la nanojaula BN. En nuestra investigación, la caracterización de la muestra se realizó mediante CAM - B3LYP - D3 / EPR - 3, nivel de teoría LANL2DZ.

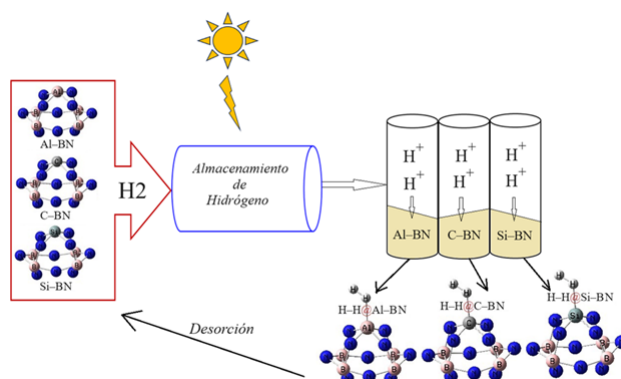


Figura 1: Aplicación de X-BN para la adsorción de moléculas de hidrógeno en la celda de almacenamiento de energía que acompaña a la formación de complejos:  $H@Al-BN$ ,  $H@C-BN$  y  $H@Si-BN$ , complejos que utilizan CAM-B3LYP-D3/ 6-311+G (d,p), cálculo de LANL2DZ. Fuente: Elaboración Propia.

La Figura 1 ha mostrado el proceso de adsorción de moléculas de  $H_2$  en la superficie X - BN que conduce a la formación de complejos que contienen complejos H @ Al - BN, H - H @ C - BN y H @ Si - BN mediante cálculos de modelado molecular. La distribución de carga de los complejos mencionados se calcula mediante el análisis de carga de Bader (Henkelman *et al.*, 2006). Sobre la base de una comprensión fundamental del proceso de adsorción de  $H_2$ , se investiga más a fondo la transferencia de carga a través del análisis de diferencia de carga de Bader y de densidad de carga. La captura de moléculas de  $H_2$  por X - BN (X = Al, C, Si) se incorporó con éxito debido a la formación de enlaces que consisten en  $H \rightarrow Al$ ,  $H \rightarrow C$ ,  $H \rightarrow Si$  (Figura 1).

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

Las funciones de Hohenberg-Kohn (HK) han permitido rigidamente la densidad electrónica como variable fundamental para los cálculos electrónicos y estructurales. En otras palabras, el desarrollo de la metodología 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) (Monajjemi *et al.*, 2010; Perdew *et al.*, 1996; Mollaamin & Monajjemi, 2024; Arrigoni & Madsen, 2019; Hohenberg & Kohn, 1964; Kohn *et al.*, 1965). Considerar la densidad electrónica dentro de la imagen de KS nos lleva a una reducción notable de la computación cuántica. 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. Kohn y Sham introducen la solución que trae a colación los orbitales monoeléctricos para calcular la energía cinética de una manera simple y relativamente exacta, al encontrar una modificación residual que podría calcularse por separado (Mollaamin & Monajjemi, 2023b; Lee *et al.*, 1988; Khalili Hadad *et al.*, 2011; Monajjemi *et al.*, 2013; Zadeh *et al.*, 2015; Mollaamin & Monajjemi, 2024; Mollaamin & Monajjemi, 2023c; Monajjemi *et al.*, 2014).

En este artículo, el PES rígido utilizando cálculos DFT se ha calculado aplicando el software Gaussian 16 revisión C.01 (Frisch *et al.*, 2016). La matriz Z de entrada para la adsorción de moléculas de  $H_2$  por el X-BN se ha diseñado con GaussView 6.1 (Dennington *et al.*, 2016) utilizando el conjunto de bases 6-311+G(d,p), EPR-3, LANL2DZ. En este estudio, se modeló y analizó la interacción entre las moléculas de  $H_2$  y X-BN. Como lo reveló el análisis basado en DFT, la potencia de X-BN para capturar moléculas de  $H_2$  estuvo determinada principalmente por la electronegatividad de los grupos funcionales, así como por la interacción entre X-BN y las moléculas de  $H_2$ . La adición de correcciones de dispersión, PBE+D3, mejora la energía de adsorción de los sistemas fisisorbidos con respecto al PBE puro. Se propone una nueva función híbrida de intercambio-correlación denominada CAM-B3LYP. Combina las cualidades híbridas de B3LYP y la corrección de largo alcance. Demostramos que CAM-B3LYP produce energías de atomización de calidad similar a las de B3LYP, a la vez que funciona bien para excitaciones de transferencia de carga en un modelo de dipéptidos, que B3LYP subestima enormemente (Yanai *et al.*, 2004; Mollaamin & Monajjemi, 2023d; Monajjemi *et al.*, 2013).

Además, la carga global de cero y la multiplicidad de las simulaciones de 1 y 2 se consideraron en el progra-

ma Gaussian (Frisch *et al.*, 2016) hacia el sistema de mínima energía. 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, que se puede establecer una corrección de nivel superior.

### 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

El dopado de aluminio, carbono y silicio en algunos compuestos produce semiconductores isoelectrónicos que pueden aplicarse como biosensores para la detección de gases. Por lo tanto, en este artículo, se evaluó la capacidad del nitruro de boro dopado con Al, C y Si para la detección de hidrógeno. 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. En este artículo, los datos han evaluado la eficiencia de la nanojaula de nitruro de boro dopada con aluminio, carbono y silicio (X-BN) para la detección de hidrógeno. De hecho, se puede destacar la naturaleza quimisoritiva del enlace entre las moléculas de hidrógeno con los elementos boro y nitrógeno a través de la distribución en equilibrio de los átomos dopantes, BN, y un atributo de monocapa.

#### 3.1. PDOS y evaluación electrónica

Las estructuras electrónicas de la adsorción de hidrógeno en el BN dopado con X (X=Al, C, Si) como sensor de molécula inteligente se han ilustrado utilizando CAM-B3LYP-D3/6-311+G(d,p), nivel LANL2DZ de teoría. La Figura 2 (a-c) muestra la densidad de estado proyectada (PDOS) de H @ (Al, C, Si)-BN a través de la adsorción de moléculas de hidrógeno. La aparición de los estados de energía (orbital p) de Al, C, Si, N dentro del espacio de (Al, C, Si)-BN induce la reactividad del sistema. De la figura se desprende claramente que después del atrapamiento con moléculas de hidrógeno, hay una contribución significativa del orbital p en el nivel desocupado. Por lo tanto, la curva de PDOS parcial ha descrito que los estados s de los átomos de H y los átomos de Al, C, Si en X-BN se superan debido a la banda de conducción (Figura 2a-c). Se podría observar un rasgo de adsorción distinguido en H @ X-BN debido a la potente interacción entre los estados s de los átomos de hidrógeno con los estados p de Al, C, Si en los complejos X-BN.

La Figura2(a-c) muestra que los complejos H@Al-BN, H@C-BN y H@Si-BN, a través de la adsorción de hidrógeno, respectivamente, tienen la mayor contribución en el medio de la banda de conducción entre -5 y -10 eV, mientras que la contribución de los estados de boro y nitrógeno es mayor y similar entre sí. La adsorción de moléculas de  $H_2$  representa la electrónica interfacial del BN para la selección de moléculas de hidrógeno. H@Al-BN ha indicado picos con la intensidad más alta para el átomo de Al cerca de los átomos de H en la Figura2(a). H@C-BN (Figura2(b)) ha mostrado fuertes picos para el átomo de C cercano a los

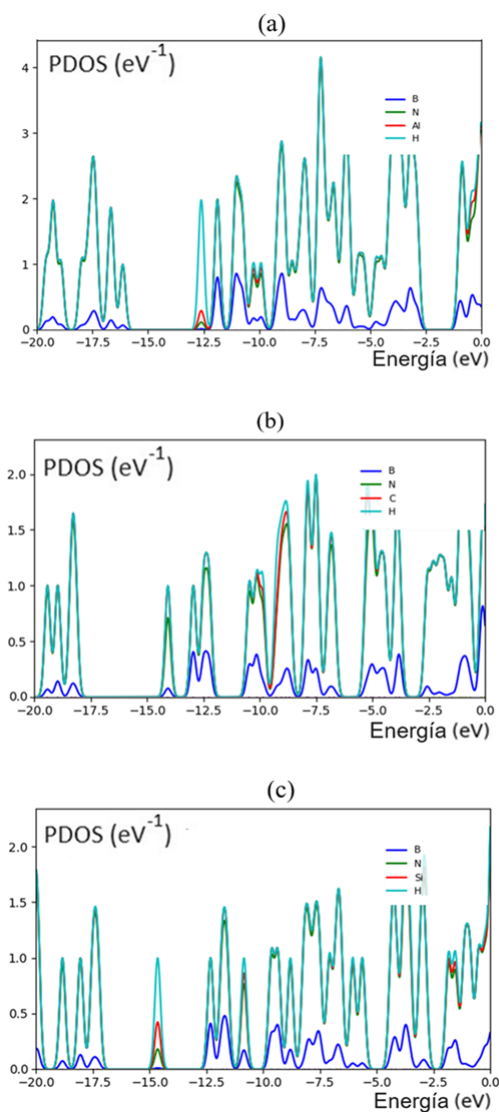


Figura 2: PDOS de  $H_2$  adsorbido en X-BN, incluidos a) complejos H@Al-BN, b) H@C-BN y c) H@ Si-BN por CAM-B3LYP-D3/6-311+G (d,p), LANL2DZ. Fuente: Elaboración propia.

átomos de H. Además, se ha indicado el gráfico nítido de Si cerca de los átomos de H en H@Si-BN (Figura 2(c)). Por lo tanto, la capacidad de orden de la adsorción de hidrógeno mediante el dopaje de átomos de Al, C y Si en X-BN según el PDOS podría expresarse como: Si-BN > C-BN > Al-BN.

### 3.2. Información sobre la resonancia cuadrupolar nuclear (RCN)

Como el gradiente de campo eléctrico (GCE) en la excitación del núcleo en H<sub>2</sub> es asignado por los electrones de valencia distorsionados en la unión con núcleos cercanos de X-BN (X = Al, C, Si) mediante la captura de moléculas de hidrógeno, la frecuencia de resonancia del núcleo (RCN) a la que ocurren las transiciones es particular para los complejos H@(Al, C, Si)-BN (Tabla 1). (Mollaamin & Monajjemi, 2023e; Mollaamin & Monajjemi, 2023f; Mollaamin & Monajjemi, 2025; Monajjemi *et al.*, 2014). En este trabajo de investigación, se ha evaluado el potencial eléctrico como la cantidad de energía de trabajo mediante el transporte de la carga eléctrica de una posición a otra en la esencia del campo eléctrico para H@Al-BN, H<sub>2</sub>@C-BN y H@Si-BN. (Tabla 1).

En la Tabla 1, se investigaron la carga de Bader y las propiedades potenciales electrónicas de Al, C, Si-B, N en X-BN y las moléculas de hidrógeno absorbidas en una nanojaula de nitruro de boro dopado con átomos. Las cantidades indican que al aumentar la carga negativa de diferentes átomos, aumenta el potencial eléctrico resultante de los cálculos RCN. Además, los átomos dopantes de Al (13), C (13), Si (13) en la BN han mostrado el mayor potencial para aceptar el electrón del donante de electrones de H (16) y H (17) en la molécula de H<sub>2</sub> adsorbida en el BN (Tabla 1).

Tabla 1: El potencial eléctrico (a.u.) y la carga de Bader (coulomb) mediante el cálculo RCN para los complejos H@Al-BN, H@C-BN y H@Si-BN utilizando el cálculo CAM-B3LYP-D3/EPR-3, LANL2DZ.

H@Al-BN			H@C-BN			H@Si-BN		
Átomo	Q	E <sub>p</sub>	Átomo	Q	E <sub>p</sub>	Átomo	Q	E <sub>p</sub>
B1	0.28	-11.31	B1	0.29	-11.27	B1	0.32	-11.27
N2	-0.18	-18.15	N2	-0.15	-18.09	N2	-0.16	-18.12
N3	-0.11	-18.12	N3	-0.14	-18.07	N3	-0.16	-18.12
B4	0.28	-11.31	B4	0.29	-11.26	B4	0.32	-11.28
B5	0.30	-11.30	B5	0.29	-11.27	B5	0.32	-11.28
B6	0.31	-11.29	B6	0.29	-11.27	B6	0.33	-11.28
N7	-0.17	-18.14	N7	-0.15	-18.09	N7	-0.16	-18.13
N8	-0.15	-18.14	N8	-0.13	-18.08	N8	-0.15	-18.10
N9	-0.36	-18.21	N9	-0.10	-18.09	N9	-0.34	-18.18
N10	-0.37	-18.21	N10	-0.10	-18.09	N10	-0.35	-18.18
N11	-0.33	-18.20	N11	-0.09	-18.08	N11	-0.33	-18.17
N12	-0.36	-18.19	N12	-0.10	-18.07	N12	-0.34	-18.17
Al13	1.15	-43.68	C13	0.11	-14.52	Si13	1.06	-48.33
N14	-0.16	-18.12	N14	-0.14	-18.08	N14	-0.20	-18.13
N15	-0.17	-18.14	N15	-0.14	-18.08	N15	-0.18	-18.13
H16	-0.03	-1.06	H16	0.02	-1.17	H16	-0.02	-1.01
H17	0.09	-1.02	H17	-0.02	-1.21	H17	0.04	-1.10

Además, en la Figura 3 (a–c), se ha esbozado el potencial eléctrico de la resonancia cuadrupolar nuclear para algunos átomos de Al, C, Si/B, N en X–BN y átomos de H de la molécula de H<sub>2</sub> atrapados en átomos dopados. Nanojaula de nitruro de boro que ha sido calculada por CAM–B3LYP–D3 / EPR–3, LANL2DZ.

En la Figura 3 (a), se observó el comportamiento de la adsorción de H<sub>2</sub> en el Al–BN con alta sensibilidad basada en el coeficiente de relación  $R^2 = 0.9276$ . La adsorción de H<sub>2</sub> en el C–BN y en la Figura 3 (b) ha ilustrado la detección más alta de  $R^2 = 0.9769$ . Además, la Figura 3(c) muestra que Si–BN tiene una buena detección de adsorción de H<sub>2</sub> en la celda de la batería según el coeficiente de relación  $R^2 = 0.9689$ . Es vívido que la curva de X–BN es ondeada por estas moléculas de H<sub>2</sub>.

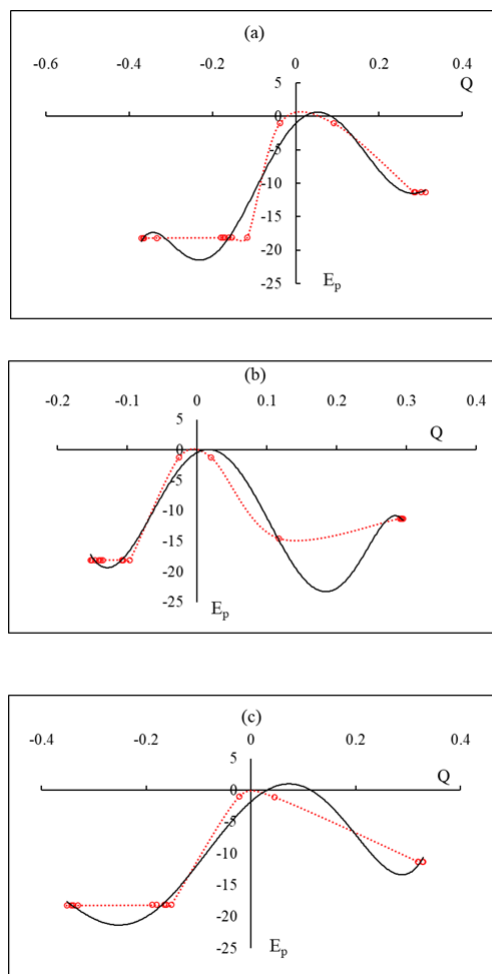


Figura 3: Potencial eléctrico ( $E_p$ /a.u.) versus carga de Bader ( $Q$ /culombio) mediante cálculo RCN para a) complejos H@Al-BN, b) H@C-BN, c) complejos H@Si-BN mediante CAM-B3LYP-D3/EPR-3, LANL2DZ. Fuente: Elaboración propia.

Los picos fluctuantes del potencial eléctrico se han mostrado alrededor del atrapamiento de  $H_2$  en el X–BN, lo que demuestra las especificaciones de aceptación de electrones del hidrógeno frente al aluminio, el carbono y el silicio dopados en el BN (Figura 3 a–c).

Además, se puede considerar que el carbono (Figura 3 b) y el silicio (Figura 3 c), como elementos semiconductores en el BN funcionalizado, podrían tener una sensibilidad más impresionante para aceptar electrones de los átomos de H en el proceso del mecanismo de adsorción.

Sin embargo, el material dopado con aluminio en BN (adsorbente) ha mostrado la fluctuación más baja ( $R^2 = 0.9276$ ) entre la carga de Bader versus el potencial eléctrico extraído de los parámetros RCN y la carga atómica negativa más baja, incluido 1.1541 culombio en  $H@Al-BN$ , que puede ser un valor apropiado. Opción para moléculas de  $H_2$  (adsorbato) después de C–BN con 0.1167 culombio en el átomo de C y Si–BN con 1.0620 culombio en el átomo de Si, la tendencia más alta para la aceptación de electrones en la corriente de adsorción (Tabla 1). De hecho, se sabe que la absorción de moléculas de  $H_2$  está asociada con X–BN, lo que indica que las moléculas de hidrógeno adsorbidas en la nanojaula dopada con X pueden internalizarse a través de una vía diferente a la de la nanojaula prístina.

### 3.3. Análisis de espectros de Resonancia Magnética Nuclear

Según las cantidades resultantes, los espectros de resonancia magnética nuclear (RMN) de los complejos X (X=Al, C, Si)–BN como potente sensor para adsorber moléculas de  $H_2$  pueden desentrañar la eficiencia de X–BN para ahorrar energía limpia como un medio ecológico, enfoque en celdas de batería. 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 y el blindaje químico anisotrópico. Los datos de RMN de los tensores de blindaje isotrópicos ( $\sigma_{iso}$ ) y anisotrópicos ( $\sigma_{aniso}$ ) de moléculas de hidrógeno atrapadas en el X–BN hacia la formación de complejos  $H@Al-BN$ ,  $H@C-BN$  y  $H@Si-BN$  se han calculado mediante el paquete de programa Gaussian 16 revisión C.01 (Frisch *et al.*, 2016) y se muestra en la Tabla 2.

En la Tabla 2, los datos de RMN informaron cantidades notables de moléculas de  $H_2$  que fueron adsorbidas en el X–BN como sensor selectivo para ahorrar energía. El aumento observado en los intervalos de anisotropía de desplazamiento químico para la adsorción de átomos de H en el X–BN está cerca de N(9), N(10), N(11), N(12), N(14) y N(15). La débil intensidad de la señal observada cerca del borde paralelo del patrón de nanojaula puede deberse a la distribución no esférica de estos complejos inducida por la unión de boro.

Tabla 2: Datos de tensores de blindaje de RMN para átomos seleccionados de complejos H@Al-BN, H@C-BN y H@Si-BN utilizando CAM-B3LYP-D3/6-311+G(d,p), cálculo LANL2DZ.

H@Al-BN			H@C-BN			H@Si-BN		
Átomo	$\sigma_{iso}$	$\sigma_{aniso}$	Átomo	$\sigma_{iso}$	$\sigma_{aniso}$	Átomo	$\sigma_{iso}$	$\sigma_{aniso}$
B1	97.53	83.40	B1	104.44	91.68	B1	75.38	57.49
N2	256.12	636.67	N2	122.34	619.50	N2	33.56	576.41
N3	62.43	79.19	N3	1555.43	2736.94	N3	1098.19	2362.50
B4	105.73	72.88	B4	100.08	126.13	B4	104.48	42.51
B5	95.50	55.88	B5	126.13	40.37	B5	60.95	54.51
B6	78.10	73.12	B6	110.96	62.81	B6	56.07	69.73
N7	173.56	565.37	N7	248.31	382.14	N7	49.56	1405.12
N8	78.65	254.42	N8	516.69	1188.98	N8	1110.12	1984.65
N9	472.62	831.22	N9	593.24	1206.16	N9	18.26	5065.21
N10	569.41	703.54	N10	871.58	1747.50	N10	528.91	2567.90
N11	508.15	940.57	N11	1075.36	1808.54	N11	446.94	4452.66
N12	275.13	706.00	N12	601.11	1086.02	N12	146.36	1615.65
Al13	522.13	157.54	C13	106.50	79.78	Si13	722.90	178.47
N14	26.41	596.76	N14	0.53	1401.62	N14	253.75	706.94
N15	18.66	593.71	N15	268.24	1157.89	N15	46.21	1894.76
H16	23.45	2.75	H16	24.29	6.76	H16	16.54	32.84
H17	21.29	2.81	H17	26.55	3.36	H17	22.67	25.85

Es notable que el dopaje de Al, C, Si en BN 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, Si se pueden optimizar para lograr una alineación óptima de la nanojaula en presencia de un campo magnético aplicado.

De hecho, la adsorción de H<sub>2</sub> puede introducir polarización de espín en el X-BN, lo que indica que estas superficies podrían aplicarse como superficie de eliminación magnética como el detector de hidrógeno. El blindaje isotrópico y anisotrópico fluctúa con la ocupación de las moléculas de hidrógeno que aceptan electrones atrapadas en el átomo dopado en la nanojaula de nitruro de boro.

La Figura 4 (a-c) mostró la misma tendencia de protección para el boro y el nitrógeno; sin embargo, existe una desviación considerable del dopaje de los átomos de Al(13), C(13) y Si(13) a través de la interacción con el H(16) de las moléculas de H<sub>2</sub> durante la adsorción en la BN.

En la Figura 4 (a-c), las moléculas de H<sub>2</sub> en los complejos H@Al-BN (Figura 4 a), H@C-BN (Figura 4 b) y H@Si-BN (Figura 4 c) evidencian fluctuaciones en el blindaje químico durante la captura de iones. La Figura 4 (a-c) muestra la variación del blindaje químico entre los sistemas dopados con aluminio, carbono y silicio en los complejos X-BN, y las moléculas de hidrógeno adsorbidas. El rendimiento de los átomos aceptores de electrones en la dopación de los complejos X-BN mediante la adsorción de moléculas de H<sub>2</sub> puede ordenarse como: Si  $\approx$  Al > C. Este resultado respalda la posibilidad de enlaces covalentes entre los átomos de Al, C, Si e hidrógeno en las moléculas de H<sub>2</sub> con potencial aplicación en tecnologías de almacenamiento de energía, como baterías.

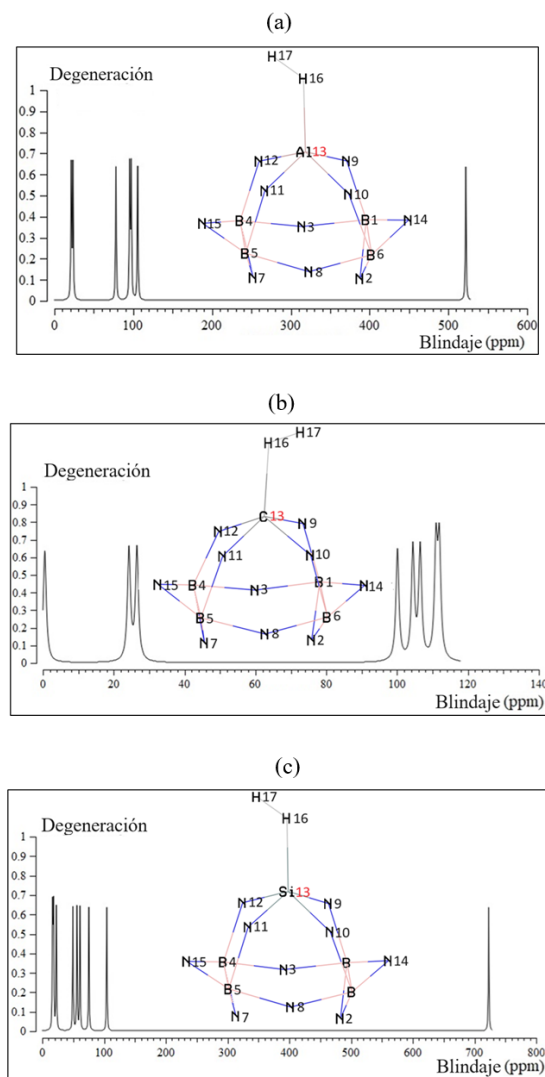


Figura 4: Los espectros de RMN para a) complejos H@ Al-BN, b) H@ C-BN y c) H@ Si-BN utilizando CAM-B3LYP-D3/6-311+G (d,p). LANL2DZ. Fuente: Elaboración Propia.

En los espectros de resonancia magnética nuclear (RMN), se han observado picos notables en la región de interacción de las moléculas de H<sub>2</sub> durante su adsorción en los complejos X-BN. No obstante, se presentan ciertas fluctuaciones en los comportamientos de blindaje químico, tanto isotrópico como anisotrópico. Por lo tanto, los resultados obtenidos pueden ser útiles para el diseño de nanomateriales dopados basados en X-BN con el fin de optimizar la adsorción de hidrógeno, complementando los estudios estructurales mediante técnicas de RMN en estado sólido y en solución.

La captura de elementos semiconductores puede inducir propiedades ferromagnéticas o antiferromagnéticas en el BN prístino, originalmente no magnético. El dopaje con Al, C y Si reduce significativamente la brecha de banda del BN prístino y mejora sustancialmente la movilidad de portadores. Estos hallazgos indican que la dopación con distintos elementos puede conferir al BN propiedades electrónicas y magnéticas versátiles. En consecuencia, la modificación del proceso de adsorción mediante la aplicación de un campo magnético estático representa una estrategia eficaz, especialmente en condiciones de baja concentración dopante.

### 3.4. Espectroscopía infrarroja (IR) y factores termodinámicos

Los cálculos de IR se realizaron para la adsorción de moléculas de H<sub>2</sub> por X-BN durante la detección de hidrógeno. Por lo tanto, se han simulado varios grupos que contienen H@ Al-BN (Figura 5 a), H@C-BN (Figura 5 b) y H@ Si-BN (Figura 5 c) utilizando CAM-B3LYP-D3/6-311+G (d,p), LANL2DZ.

El gráfico de la Figura 5 (a) se ha observado en el rango de frecuencia entre 100 y 2000 cm<sup>-1</sup> para H@Al-BN, con varios picos de alta intensidad alrededor de 177,92, 483,81, 910,24 y 1645,95 cm<sup>-1</sup>. La Figura 5 (b) muestra el rango de frecuencia entre 200 y 2000 cm<sup>-1</sup> para H@C-BN, con un pico agudo alrededor de 1729,19 cm<sup>-1</sup>. La Figura 5 (c) indica la fluctuación de frecuencia entre 1000 y 2500 cm<sup>-1</sup> para H@Si-BN, con un pico agudo alrededor de 1531,05 cm<sup>-1</sup>.

Los espectros IR de adsorción de H<sub>2</sub> con X-BN han demostrado que la estructura del complejo dominante se correlaciona con la potencia electrónica del átomo dopante X (Al, C, Si) en el BN. La nanojaula dopada con Al-BN (Figura 5 a) ha mostrado la mayor cantidad de fluctuaciones y la mayor tendencia a la adsorción de moléculas de H<sub>2</sub> en comparación con los complejos C-BN y Si-BN (Figuras 5 b y 5 c, respectivamente). Por lo tanto, se puede concluir que la espectroscopia IR del sistema Al-BN adsorbido con H<sub>2</sub> se encuentra en una posición favorable para abordar preguntas específicas sobre el efecto individual de los portadores de carga (molécula de hidrógeno-nanojaula), así como de los átomos dopantes en la estructura general (Figuras 5 a-c).

Los cálculos de primeros principios muestran que la captura de Al, C y Si por el BN posee estabilidad termodinámica para la síntesis de materiales basados en BN. En este trabajo, la quimisorción implica una reacción química entre el adsorbato de H<sub>2</sub> y la superficie de Al-BN, C-BN y Si-BN. Se generan nuevos enlaces químicos en la superficie del adsorbente. La fuerte interacción entre el adsorbato y la superficie del sustrato genera nuevos tipos de enlaces electrónicos.

La Tabla 3, a través de las especificaciones termodinámicas, concluye que los sistemas X-BN (X = Al, C, Si)-BN debido a la adsorción de H<sub>2</sub>, podrían ser sensores más eficientes para detectar y absorber moléculas de hidrógeno, para el almacenamiento de energía en las celdas de la batería y su implicación para la energía limpia tecnología.

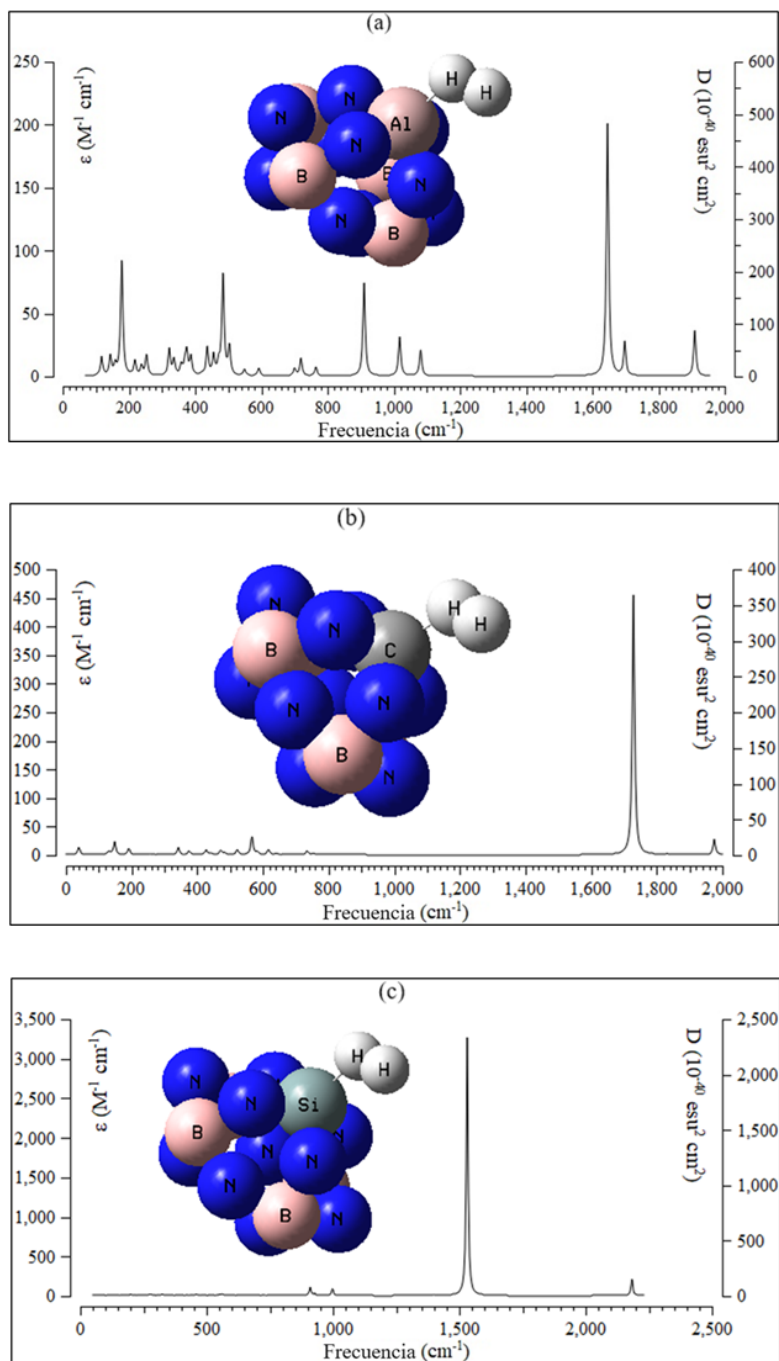


Figura 5: La frecuencia ( $\text{cm}^{-1}$ ) varía a lo largo del espectro IR para: a) los complejos  $\text{H@Al-BN}$ , b)  $\text{H@C-BN}$  y c)  $\text{H@Si-BN}$ , utilizando el método CAM-B3LYP-D3/6-311+G(d,p), LANL2DZ. **Nota:**  $\epsilon$  ( $\text{M}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$ ) representa la unidad de absorbancia, y  $D$  ( $10^{-40} \text{ esu}^2 \cdot \text{cm}^2$ ) es la fuerza dipolar, expresada en unidades electrostáticas (esu), correspondientes al sistema cgs (centímetro-gramo-segundo). Fuente: Elaboración propia.

Tabla 3: Los caracteres termodinámicos de los complejos H@Al-BN, H@C-BN y H@Si-BN utilizando CAM-B3LYP-D3/6-311+G(d,p), cálculo LANL2DZ.

Compound	Dipole moment (Debye)	$AE_{\text{ads}}^{\circ} \times 10^{-3}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{\text{ads}}^{\circ} \times 10^{-3}$ (kcal/mol)	$\Delta G_{\text{ads}}^{\circ} \times 10^{-3}$ (kcal/mol)	$S_{\text{ads}}^{\circ}$ (cal/K·mol)
BN	0.2020	-420.550	-420.549	-420.579	100.650
Al-BN	3.9464	-406.553	-406.553	-406.584	105.620
C-BN	1.7591	-428.953	-428.952	-428.982	99.184
Si-BN	1.2666	-407.701	-407.700	-407.730	102.387
H@Al-BN	4.4034	-551.051	-551.050	-551.081	104.003
H@C-BN	1.4722	-424.231	-424.231	-424.260	99.710
H@Si-BN	2.8124	-580.207	-580.206	-580.235	95.419

los parámetros termodinámicos de la adsorción de moléculas de  $H_2$  en los complejos X-BN se han determinado utilizando la técnica teórica DFT. Se ha demostrado que para un número dado de sitios donantes de hidrógeno en las moléculas de  $H_2$ , las estabildades de los complejos debido al dopaje de átomos de Al, C, Si pueden considerarse como: H@Si-BN > H@Al-BN >>> Complejos H @ C – BN (Tabla 3).

Los cambios de la energía libre de Gibbs versus el momento dipolar en la Tabla 3 podrían detectar la eficiencia máxima del dopaje de átomos de Al, C y Si de BN para la adsorción de moléculas de  $H_2$  a través de que depende del enlace covalente entre las moléculas de  $H_2$  y X-BN como potente sensor para la eliminación de la contaminación del aire.

La Tabla 3 ha mostrado el papel clave de los átomos dopados que contienen Al, C, Si durante la interacción entre el adsorbato de moléculas de  $H_2$  como donadores de electrones y el adsorbente de nanojaulas de Al-BN, C-BN y Si-BN como aceptores de electrones.

Por lo tanto, la selectividad de la nanojaula dopada con átomos de nitrógeno de boro (sensor de hidrógeno) para la adsorción de  $H_2$  puede resultar de la siguiente manera: Si>Al>>>C.

## 4. CONCLUSIONES

Se investigó la adsorción de  $H_2$  en el nitrógeno de boro prístino y dopado con átomos mediante cálculos DFT. También se estudiaron las propiedades estructurales, las capacidades de adsorción y las propiedades electrónicas para la configuración de adsorción de  $H_2$  más estable en el nitrógeno de boro prístino y dopado con átomos. Esta investigación ha investigado el dopaje de elementos X (X=Al, C, Si) en la nanojaula de nitrógeno de boro (BN) para mejorar la detección de  $H_2$  en la tecnología de almacenamiento de energía basada en hidrógeno. Por lo tanto, la adsorción de moléculas de  $H_2$  que involucra las nanojaulas X-BN se ha experi-

mentado basándose en interacciones electrostáticas entre las moléculas de  $H_2$  y los complejos X–BN. Las propiedades electromagnéticas y termodinámicas de los complejos X–BN se calcularon utilizando la teoría funcional de la densidad. Los resultados han ilustrado que las moléculas de hidrógeno elegidas adsorbidas en el sistema X–BN son bastante estables y el sitio de adsorción más estable se encuentra en el centro del sistema X–BN. La selectividad de la nanojaula dopada con átomos en nitrato de boro (sensor de hidrógeno) para la adsorción de moléculas de  $H_2$  puede resultar como: complejos  $H@ Si-BN > H@ Al-BN >>> H@ C-BN$ , respectivamente. 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 con el fin de diseñar sensores de eliminación de contaminación.

## Contribución del autor

La autora confirma que fue la única responsable de la concepción, diseño, análisis, interpretación, redacción y aprobación final del artículo.

## Agradecimientos

La autora agradece a Kastamonu University por el apoyo para la realización de este artículo y la investigación.

## Referencias

- Arrigoni, M. & Madsen, G.K.H. (2019). Comparing the performance of LDA and GGA functionals in predicting the T lattice thermal conductivity of III-V semiconductor materials in the zincblende structure: The cases of AlAs and GaAs, *Comput. Mater. Sci.* 156, 354-360. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.10.005>.
- Bangari, R.S., Yadav, V.K., Singh, J.K. & Sinha, N. (2020). Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>-functionalized boron nitride nanosheets as novel adsorbents for removal of arsenic (III) from contaminated water, *ACS Omega*. 5(18), 10301-10314. <https://doi.org/10.1021/acsomega.9b04295>.
- Cardella, U., Decker, L. & Klein, H. (2017). Economically viable large-scale hydrogen liquefaction, *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.* 171, 012013. <https://doi.org/10.1088/1757-899x/171/1/012013>.
- Cardella, U., Decker, L., Sundberg, J. & Klein, H. (2017). Process optimization for large-scale hydrogen liquefaction, *Int. J. Hydrogen Energy*. 42, 12339-12354. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.03.167>.

- Chao, Y., Zhang, J., Li, H., Wu, P., Li, X., Chang, H., He, J. et al. (2020). Synthesis of boron nitride nanosheets with N-defects for efficient tetracycline antibiotics adsorptive removal, *Chem. Eng. J.*, 387, 124138. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2020.124138>.
- Chettri, B., Patra, P. K., Srivastava, S., Lalhriatzuala, Zadeng, L. & Rai, D. P. (2019). Electronic Properties of Hydrogenated Hexagonal Boron Nitride (h-BN): DFT Study, *Senhri Journal of Multidisciplinary Studies*. 4, 72-79. <https://doi.org/10.36110/sjms.2019.04.02.008>.
- Chigo-Anota, E., Escobedo-Morales, A., Hernández-Cocoletzi, H. & López y López, J.G. (2015). Nitric oxide adsorption on non-stoichiometric boron nitride fullerene: Structural stability, physicochemistry and drug delivery perspectives, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 74, 538-543. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2015.08.008>.
- Davies, A., Albar, J.D., Summerfield, A., Thomas, J.C., Cheng, T.S., Korolkov, V.V., Stapleton, E. et al. (2018). Lattice-Matched Epitaxial Graphene Grown on Boron Nitride, *Nano Lett.* 18, 498-504. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.7b04453>.
- Dennington, R., Keith, T.A. & Millam, J.M. (2016). GaussView, Version 6.06.16, Semichem Inc., Shawnee Mission, KS.
- Frisch, M. J., Trucks, G. W., Schlegel, H. B., Scuseria, G. E., Robb, M. A., Cheeseman, J. R., Scalmani, G. et al. (2016). Gaussian 16, Revision C.01, Gaussian, Inc., Wallingford CT.
- Gonzalez-Ortiz, D., Salameh, C., Bechelany, M. & Miele, P. (2020). Nanostructured boron nitride-based materials: synthesis and applications, *Mater. Today Adv.* 8, 100107. <https://doi.org/10.1016/j.mtadv.2020.100107>.
- Guo, Y., Wang, R.X., Wang, P.F., Rao, L. & Wang, C. (2019). Developing a novel layered boron nitride-carbon nitride composite with high efficiency and selectivity to remove protonated dyes from water, *ACS Sustain. Chem.* 7 (6), 5727-5741. <https://doi.org/10.1021/ACSSUSCHEMENG.8B05150>.
- Hammad, A. & Dincer, I. (2018). Analysis and assessment of an advanced hydrogen liquefaction system, *Int. J. Hydrogen Energy*. 43, 1139-1151. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.10.158>.
- Henkelman, G., Arnaldsson, A. & Jónsson, H. (2006). A fast and robust algorithm for Bader decomposition of charge density, *Computational Materials Science*. 36(3), 354-360. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2005.04.010>.
- Hohenberg, P. & Kohn, W. (1964). Inhomogeneous Electron Gas, *Phys. Rev. B.*, 136, B864-B871. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864>.
- Khalili Hadad, B., Mollaamin, F. & Monajjemi, M. (2011). Biophysical chemistry of macrocycles for drug delivery: a theoretical study, *Russ. Chem. Bulletin*, 60, 238-241. <https://doi.org/10.1007/s11172-011-0039-5>.

- Kohn, W. & Sham, L. J. (1965). Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects, *Phys. Rev.*, 140, A1133-A1138. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>.
- Lee, C., Yang, W. & Parr, R.G. (1988). Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density, *Phys Rev B.*, 37, 785-789. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.37.785>.
- Mishra, N.S. & Saravanan, P. (2018). A review on the synergistic features of hexagonal boron nitride (white graphene) as adsorbent-photo active nanomaterial, *ChemistrySelect.* 3 (28) 8023-8034. <https://doi.org/10.1002/slct.201801524>.
- Mollaamin, F. (2014). Features of parametric point nuclear magnetic resonance of metals implantation on boron nitride nanotube by density functional theory/electron paramagnetic resonance. *J Comput Theor Nanosci.* 11(11), 2393-2398. <https://doi.org/10.1166/jctn.2014.3653>.
- Mollaamin, F. (2024). 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.*, 18, 805-820. <https://doi.org/10.1134/S1990793124700131>.
- Mollaamin, F. & Monajjemi, M. (2012). Fractal dimension on carbon nanotube-polymer composite materials using percolation theory, *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience.* 9(4), 597-601. <https://doi.org/10.1166/jctn.2012.2067>.
- Mollaamin, F. & Monajjemi, M. (2023a). 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.*, 17, 658-672. <https://doi.org/10.1134/S1990793123030223>.
- Mollaamin, F. & Monajjemi, M. (2023b). 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. (2023c). 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. & Monajjemi, M. (2023d). 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. (2023e). Graphene-based resistant sensor decorated with Mn, Co, Cu for nitric oxide detection: Langmuir adsorption & DFT method, *Sensor Review.* 43, 266-279. <https://doi.org/10.1108/SR-03-2023-0040>.

- Mollaamin, F. & Monajjemi, M. (2023f). In Silico-DFT Investigation of Nanocluster Alloys of Al-(Mg, Ge, Sn) Coated by Nitrogen Heterocyclic Carbenes as Corrosion Inhibitors, *J. Clust. Sci.* 34, 2901-2918. <https://doi.org/10.1007/s10876-023-02436-5>.
- Mollaamin, F. & Monajjemi, M. (2023g). 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. (2024b). 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, *Computational and Theoretical Chemistry*. 1237, 114666. <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2024.114666>.
- Mollaamin, F. & Monajjemi, M. (2024c). Boron nitride doped with transition metals for carbon monoxide detection: a promising nanosensor for air cleaning, *Sensor Review*. 44(2), 179-193. <https://doi.org/10.1108/SR-01-2024-0066>.
- Mollaamin, F. & Monajjemi, M. (2024d). Selectivity and Sensitivity Evaluation of Embedded BN-Nanostructure as a Gas Detector for Air Pollution Scavenging: a Theoretical Study, *Russ. J. Phys. Chem. B.*, 18, 1177-1198. <https://doi.org/10.1134/S1990793124700507>.
- Mollaamin, F. & Monajjemi, M. (2024e). Effect of Implanted Titanium, Vanadium or Chromium on Boron Nitride Surface for Increasing Carbon Monoxide Adsorption: Designing Gas Sensor for Green Chemistry Future, *Russ. J. Phys. Chem. B.*, 18, 1199-1216. <https://doi.org/10.1134/S1990793124700519>.
- Mollaamin, F. & Monajjemi, M. (2024f). Trapping of toxic heavy metals from water by GN-nanocage: Application of nanomaterials for contaminant removal technique, *J. Mol. Struct.* 1300, 137214. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2023.137214>.
- Mollaamin, F. & Monajjemi, M. (2024g). 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.* 18, 49-66. <https://doi.org/10.1134/S1990793124010159>.
- Mollaamin, F. & Monajjemi, M. (2025). Perspective of Clean Energy-saving by Semiconducting Quantum Dot Nanomaterials through Photoelectric and Density of States Analysis, *J Fluoresc.* <https://doi.org/10.1007/s10895-025-04207-z>.
- Mollaamin, F., Ilkhani, A., Sakhaei, N., Bonsakhteh, B., Faridchehr, A., Tohidi, S. & Monajjemi, M. (2015). Thermodynamic and solvent effect on dynamic structures of nano bilayer-cell membrane: Hydrogen bonding study, *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*. 12(10), 3148-3154. <https://doi.org/10.1166/jctn.2015.4092>.

- Mollaamin, F., Mohammadi, S., Khalaj, Z. & Monajjemi, M. (2024). Computational Modelling of Boron Nitride Nanosheet for Detecting and Trapping of Water Contaminant, *Russ. J. Phys. Chem. B.*, 18, 67-82. <https://doi.org/10.1134/S1990793124010330>.
- 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(3), 1547-1562. <https://doi.org/10.1007/s10876-022-02335-1>.
- Monajjemi, M., Karachi, N. & Mollaamin, F. (2014). The investigation of sequence-dependent interaction of messenger RNA binding to carbon nanotube, *Fullerenes Nanotubes and Carbon Nanostructures*. 22(7), 643-662. <https://doi.org/10.1080/1536383X.2012.717557>.
- Monajjemi, M., Khaleghian, M., Tadayonpour, N. & Mollaamin, F. (2010). THE EFFECT OF DIFFERENT SOLVENTS AND TEMPERATURES ON STABILITY OF SINGLE-WALLED CARBON NANOTUBE: A QM/MD STUDY, *Int. J. Nanosci.* 09, 517-529. <https://doi.org/10.1142/S0219581X10007071>.
- Monajjemi, M., Razavian, M.H., Mollaamin, F., Naderi, F. & Honarparvar, B. (2008). A theoretical thermochemical study of solute-solvent dielectric effects in the displacement of codon-anticodon base pairs, *Russian Journal of Physical Chemistry A*. 82(13), 2277-2285. <https://doi.org/10.1134/S0036024408130207>.
- Monajjemi, M., Sobhanmanesh, A. & Mollaamin, F. (2013). Theoretical studies of solvent effects on binding of Sn (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(N-acetyl-L-cysteinate) with single-walled carbon nanotube, *Fullerenes Nanotubes and Carbon Nanostructures*. 21(1), 47-63. <https://doi.org/10.1080/1536383X.2011.574325>.
- Monajjemi, M., Yamola, H. & Mollaamin, F. (2014). Study of bio-nano interaction outlook of amino acids on single-walled carbon nanotubes, *Fuller. Nanotub. Carbon Nanostruct.* 22, 595-603. <https://doi.org/10.1080/1536383X.2012.702163>.
- Ocotitla Muñoz, A.D., Escobedo-Morales, A., Skakerzadeh, E. & Anot, E.C. (2021). Effect of homonuclear boron bonds in the adsorption of DNA nucleobases on boron nitride nanosheets, *J. Mol. Liquids*. 322, 11495. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.114951>.
- Perdew, J.P., Burke, K. & Ernzerhof, M. (1996). Generalized gradient approximation made simple, *Phys. Rev. Lett.* 77, 3865. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>.
- Piñero, J. J., Ramírez, P. J., Bromley, S. T., Illas, F., Viñes, F. & Rodriguez, J. A. (2018). Diversity of Adsorbed Hydrogen on the TiC (001) Surface at High Coverages, *J. Phys. Chem. C*. 122, 28013-28020. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b07340>.
- Qyyum, M. A., Chaniago, Y. D., Ali, W., Saulat, H. & Lee, M. (2020). Membrane-Assisted Removal of Hydrogen and Nitrogen from Synthetic Natural Gas for Energy-Efficient Liquefaction, *Energies*, 13, 5023, <https://doi.org/10.3390/en13195023>.

- Rivard, E., Trudeau, M. & Zaghib, K. (2019). Hydrogen Storage for Mobility: A Review, *Materials*. 12, 1973. <https://doi.org/10.3390/ma12121973>.
- Rodríguez Juárez, A., Ortiz-Chi, F., Borges-Martínez, M., Cárdenas-Jirón, G., Salazar Villanueva, M. & Chigo Anot, E. (2019). Stability, electronic and optical properties of the boron nitride cage ( $B_{47}N_{53}$ ) from quantum mechanical calculations, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 111, 118-126. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2019.02.017>.
- Rodríguez Juárez, A., Salazar Villanueva, M., Cortés-Arriagada, D. & Chigo Anot, E. (2019). Fullerene-like boron nitride cages  $B_xN_y$  ( $x+y=28$ ): stabilities and electronic properties from density functional theory computation, *J Mol Model.*, 25, 21. <https://doi.org/10.1007/s00894-018-3902-6>.
- Shtansky, D.V., Matveev, A.T., Permyakova, E.S., Leybo, D.V., Konopatsky, A.S. & Sorokin, P.B. (2022). Recent Progress in Fabrication and Application of BN Nanostructures and BN-Based Nanohybrids, *Nanomaterials*. 12, 2810. <https://doi.org/10.3390/nano12162810>.
- Villanueva, M.S., Hernandez, A.B., Shakerzadeh, E. & Anot, E.C. (2023). Effect of global charge on stability and electronic properties of  $B_{36}N_{36}$  cage and isomers, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 152, 115758. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2023.115758>.
- Weng, Q.H., Wang, X.B., Wang, X., Bando, Y. & Golberg, D. (2016). Functionalized hexagonal boron nitride nanomaterials: emerging properties and applications, *Chem. Soc. Rev.* 45 (14), 3989-4012. <https://doi.org/10.1039/C5CS00869G>.
- Yanai, T., Tew, D.P. & Handy, N.C. (2004). A new hybrid exchange-correlation functional using the Coulomb-attenuating method (CAM-B3LYP), *Chemical Physics Letters*. 393(1-3), 51-57. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2004.06.011>.
- Yang, Y., Peng, Y., Saleem, M.F., Chen, Z. & Sun, W. (2022). Hexagonal Boron Nitride on III-V Compounds: A Review of the Synthesis and Applications, *Materials*. 15, 4396. <https://doi.org/10.3390/ma15134396>.
- Yu, X., Zhang, X., Wang, H., Wang, Z. & Feng, G. (2017). High-Coverage H<sub>2</sub> Adsorption on the Reconstructed Cu<sub>2</sub>O (111) Surface, *J. Phys. Chem. C*. 121, 22081-22091. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b06361>.
- Zadeh, M.A.A., Lari, H., Kharghanian, L., Balali, E., Khadivi, R., Yahyaei, H., Mollaamin, F. *et al.* (2015). Density Functional Theory Study and Anti-Cancer Properties of Shyshaq Plant: In View Point of Nano Biotechnology, *J. Comput. Theor. Nanosci.* 12, 4358. <https://doi.org/10.1166/jctn.2015.4366>.