Revista Internacional de Investigación e Innovación Tecnológica

Página principal: www.riiit.com.mx

# Uso de DFT en el desarrollo de sensores basados en semiconductores: una revisión
# Use of DFT in the Development of Semiconductor-Based Sensors: A Review

**Güido-Arroyo, O.I.[a]*, Gutiérrez-Ojeda, S.J.[b], Hernández-Torres, J.[a], Vázquez, A.[c], Nolasco, J.C.[a].**

[a] Centro de investigación en Micro y Nanotecnología (MICRONA). Universidad Veracruzana – Bv. Adolfo Ruíz Cortines 455, Costa Verde, 94294 Boca del Río, Ver., México. ORCID: https://orcid.org/0009-0002-9091-4713*, https://orcid.org/0000-0002-3517-1323, https://orcid.org/0000-0001-5589-2649.

[b] Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, CP 04510 Ciudad de México, México. ORCID: https://orcid.org/0000-0002-3464-2082.

[c] Centro de Investigación en Óptica, A.C. (CIO) – Col. Lomas del Campestre CP 37150, León, Guanajuato, México. ORCID: https://orcid.org/0000-0002-6955-7777.

ivanguidoarroyo@outlook.com*; sjulietago@fisica.unam.mx; julihernandez@uv.mx; avazquez@cio.mx; janolasco@uv.mx

**Aplicación Empresarial:** Sensado.
**Innovación tecnológica:** Sensores basados en semiconductores eco-amigables que aprovechan la afinidad electrónica molecular.

Recibido: 15 mayo 2025
Aceptado: 30 enero 2026

## Abstract

This review addresses fundamental concepts of Density Functional Theory (DFT) applied to semiconductor-based sensing. Specifically, it demonstrates that these sensors have been applied in critical areas for living organisms, such as human and animal health, as well as the protection of various ecosystems. Furthermore, several Quantum Molecular Descriptors (QMDs) that aid in describing molecular adsorption mechanisms are discussed, highlighting their relevance for the optimal design of efficient sensors. Additionally, the leading universities in Mexico that have conducted theoretical sensing research using DFT over the last six years are identified. Finally, a global overview of advancements over the last 30 years is presented, with China leading the research, followed by the United States and the United Kingdom, while Mexico ranks 30th.

**Keywords:** Eco-friendly sensors, DFT, Semiconductors, Molecular Adsorption, Gibbs Free Energy.

**Resumen**

Esta revisión aborda conceptos básicos de la teoría del funcional de la densidad (DFT) aplicada a sensado usando semiconductores. Específicamente, se muestra que dichos sensores se han aplicado en áreas fundamentales para los seres vivos como lo son la salud humana, animal, y la protección de diversos ecosistemas. También, se mencionan algunos descriptores moleculares cuánticos (QMDs) auxiliares en la descripción de mecanismos de la adsorción molecular, los cuales son relevantes para el óptimo diseño de sensores eficientes. Además, se muestran las universidades destacadas en México que han investigado el sensado de manera teórica usando DFT de los últimos seis años. Finalmente, se presenta un panorama global de los últimos 30 años sobre estos avances, donde China lidera las investigaciones, seguida por Estados Unidos y el Reino Unido, y donde México ocupa el lugar 30.

**Palabras clave:** Sensores eco-amigables, DFT, Semiconductores, Adsorción Molecular, Energía Libre de Gibbs.

## 1 Introducción

En el actual entorno de innovación constante, el uso de sensores (Fraden, 2016) es indispensable. Estos dispositivos son fundamentales en ámbitos que van desde la tecnología de consumo hasta la protección ambiental. La industria automotriz es un claro ejemplo de su integración para la eficiencia y la seguridad moderna: una red de sensores gestiona la combustión y las emisiones para reducir la huella ambiental, mientras monitorea parámetros críticos como los niveles de fluidos y la presión de los neumáticos (Wang et al., 2024; Zeng & Berecibar, 2025). Sin embargo, los métodos analíticos convencionales para detectar contaminantes como el $CO_2$ o pesticidas suelen utilizar la cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS), que presenta limitaciones operativas significativas. Aunque son estándares experimentales, requieren equipos voluminosos, alto consumo energético y temperaturas de operación elevadas (40°C - 280°C), lo que restringe su portabilidad y versatilidad (Corbally & Freye, 2023; Schanzmann et al., 2025).

Ante estos desafíos, surge la necesidad urgente de desarrollar sensores portátiles, precisos y energéticamente eficientes, basados en materiales abundantes y sostenibles que permitan una síntesis y deposición sencillas. Esta transición tecnológica es vital en áreas como la biomedicina; por ejemplo, para sustituir los métodos invasivos de medición de glucosa por dispositivos no invasivos basados en nanopartículas (Liu et al., 2018), mejorando la calidad de vida del paciente.

Simultáneamente, existe una problemática global crítica en la agricultura: el uso descontrolado de pesticidas especializados, como los neonicotinoides. Si bien son necesarios para ciertas plagas, su persistencia y falta de selectividad causan daños colaterales graves a polinizadores esenciales y a la salud de los ecosistemas (Martin-Culma & Arenas-Suárez, 2018; Tapia et al., 2019).

Esta clase de pesticidas limita su movilidad y reproducción al atacar su sistema nervioso central, lo que a menudo resulta en un colapso en sus poblaciones. La persistencia de esta clase de pesticidas en el aire, suelos y agua es un problema grave, afectando la cadena alimenticia (Alves Rocha et al., 2024; Tapia et al., 2019). La magnitud de esta contaminación se evidencia en diversas matrices ambientales. En un estudio sobre

cuerpos de agua dulce y salada en la zona costera de Sinaloa, México, donde (Leyva-Morales et al., 2024) mediante GC-MS, lograron identificar al menos 28 tipos de pesticidas, incluyendo organofosforados, piretroides y carbamatos. Encontraron concentraciones máximas que superaban los límites permitidos, como 1.233 µg/L de clorpirifós en agua dulce (límite: 0.083 µg/L) y 0.994 µg/L de endosulfán en agua salada (límite: 0.011 µg/L). A partir de sus hallazgos, recomendaron la rotación de cultivos, reducir el uso de pesticidas e implementar barreras vegetativas bajo la premisa de proteger la salud pública y la biodiversidad.

Este riesgo se extiende a la fauna y al aire que respiramos. Un hallazgo preocupante fueron los altos niveles de pesticidas encontrados en la tilapia, que alcanzaron los 0.05 mg/kg, superando el límite máximo aceptable para su consumo seguro según la Agencia de Protección Ambiental (EPA) de sus siglas en inglés y la Red de Acción sobre Plaguicidas y Alternativas (RAPAM) tal como lo menciona en su informe (Bejarano & Rojas-García, 2023) y comprobado por el estudio de (Ruiz-Arias et al., 2023). Por otro lado, (Du et al., 2024) realizaron un estudio sobre la presencia de neonicotinoides en el aire entre 2019 y 2021, y durante esos 3 años encontraron diversas concentraciones en regiones circundantes a las zonas del cultivo, incluso un tanto lejanas de la zona donde se emplearon estos pesticidas. A partir de sus hallazgos concluyeron el riesgo implicado en la salud humana debido a la inhalación de estos contaminantes, sobre todo en zonas donde el nivel superaba los límites permitidos por las autoridades de salud y donde se notaba un gran incremento en temporadas de cultivo.

El camino experimental no es el único para el desarrollo de sensores basados en materiales semiconductores para abordar estas problemáticas. Existen métodos teóricos que, mediante modelos y simulaciones computacionales, permiten obtener una buena aproximación sobre el comportamiento físico entre la superficie de un material y una o varias moléculas de interés en diversos medios. Estos métodos se basan en la interacción de la densidad electrónica entre ellos, donde la más conocida es la teoría del funcional de la densidad (DFT). Específicamente el estudio de óxidos semiconductores sustentables ha cobrado una gran importancia. El método DFT ha demostrado ser una herramienta versátil y robusta en la predicción de propiedades electrónicas más allá de las aplicaciones en sensores, abarcando diversos campos como el almacenamiento de energía. Por ejemplo, (Dayan et al., 2024), validaron el uso de esta metodología al analizar nanoestructuras de porfirinas empleadas en baterías de iones de potasio (KIBs). Sus simulaciones permitieron establecer una correlación entre la disminución del band gap y la mayor reactividad química y menor estabilidad, así como cambios directos en la electrofilicidad global y la dureza química. Además, lograron determinar energías de adsorción y distancias de reacción críticas para la eficiencia del cátodo. Estos hallazgos confirman la capacidad del DFT para describir con precisión la reactividad química y los fenómenos de adsorción superficial, lo que fundamenta que son directamente trasladables al diseño de sensores moleculares. Por lo tanto, en esta revisión se describen los conceptos básicos a tomar en cuenta en simulaciones moleculares y su uso a nivel nacional e internacional.

## 2 Conceptos básicos del DFT

### *2.1 Fundamentos Físicos del Sensado*

El principio operativo fundamental de los sensores basados en óxidos metálicos semiconductores (SMOx) se basa en la quimio resistencia. Cuando las moléculas del analito interactúan con la superficie activa del material, se modifica la densidad de los

portadores de carga en el semiconductor, lo que produce variaciones medibles en su resistencia eléctrica o impedancia. Comprender este mecanismo resulta crucial para optimizar la eficiencia energética y versatilidad de los dispositivos (Pathania et al., 2024). La naturaleza de esta interacción define la reversibilidad y sensibilidad del sensor. La energía de adsorción juega un papel importante en este proceso y define el tipo de interacción: puede tratarse de fisisorción, una interacción débil mayormente gobernada por fuerzas de Van der Waals sin cambios estructurales profundos, o de quimisorción, que da lugar a enlaces químicos fuertes que modifican la estructura electrónica significativamente. Los materiales más empleados para estos fines se clasifican según sus portadores de carga mayoritarios en tipo n o tipo p, cuyos valores de brecha energética (band gap) son determinantes para su conductividad intrínseca, tal como se resume en la Tabla 1, permitiendo estimar cantidad y cualidad de la sustancia adsorbida presente (Aljawfi et al., 2020; García-Hernández et al., 2021; Ginting et al., 2019; Thang & Pacchioni, 2019).

**Tabla 1.** Valores de Band gap ($E_g$) de los óxidos metálicos semiconductores (SMOx) en forma de nanomateriales o en masa, en estado puro, mayormente utilizados en sensores.

| Tipo | Óxido Semiconductor | Fórmula/Fase | BandGap ($E_g$) eV | Referencias |
|---|---|---|---|---|
| **n** | Dióxido de Estaño | $SnO_2$ Tetragonal (Rutilo) | **3.6 eV** | (Guillén, 2025) |
| **n** | Óxido de Zinc | ZnO Hexagonal (Wurzita/Zinc Blenda) | 3.37 eV - 3.4 eV | (Abisha Meji et al., 2025; Kang et al., 2021) |
| **n** | Dióxido de Titanio | $TiO_2$ (Anatasa/Rutilo) | 3.0 – 3.4 eV | (Dutta et al., 2023; Ezeakunne et al., 2025) |
| **n** | Trióxido de Tungsteno | $WO_3$ (Monoclínica) | 2.8 eV | (Marikutsa et al., 2021) |
| **n** | Óxido de Indio | $In_2O_3$ Cúbica (Bixbyita) | 2.8 – 3.7 eV | (Dutta et al., 2023; Marikutsa et al., 2021) |
| **p** | Óxido de Cobre | CuO Monoclínica (Tenorita) | 1.2 – 1.9 eV | (Alqahtani, 2023; Raizada et al., 2020) |
| **p** | Óxido Cuproso | $Cu_2O$ Cúbica (Cuprita) | 2.0 – 2.4 eV | (Dutta et al., 2023; Raizada et al., 2020) |
| **p** | Óxido de Níquel | NiO Cúbica (Fm3m) | 3.6 – 3.8 eV | (Aivalioti et al., 2021, 2024; Dutta et al., 2023) |

Es común emplear metales nobles debido a su alta conductividad y resistencia a la corrosión, dado que algunos sensores operan entre 200°C y 500°C. Dependiendo de la alineación de bandas, pueden formarse uniones No Óhmicas (Schottky), donde la transducción modula la altura de la barrera de potencial controlando el flujo de electrones, o uniones Óhmicas, preferidas para una transferencia de carga eficiente donde se mide directamente la modulación de la conductividad del canal, lo cual se puede integrar a Transistores de Efecto de Campo (FET). Una representación esquemática de este funcionamiento se aprecia en la Figura 1.

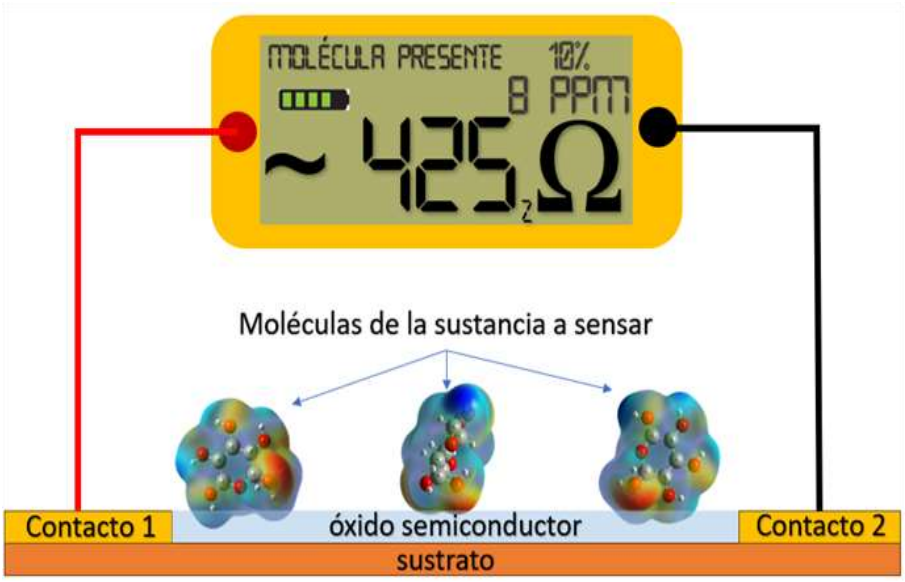



**Figura 1.** Representación esquemática del funcionamiento de un sensor.
Creado por el autor.

### *2.2 Modelado Computacional y Teoría*

Para predecir interacciones entre materiales o explicar el comportamiento experimental de estos, es importante el modelado del sistema, que consiste en recrear las geometrías y condiciones físicas a nivel atómico.

Debe destacarse que el nacimiento de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) surge de la necesidad de resolver el "problema de muchos cuerpos". Sin embargo, la complejidad de interpretar la interacción precisa entre todos los electrones y núcleos hace que resolver la ecuación de Schrödinger sea casi imposible para sistemas con muchos átomos. Por ello, en lugar de resolver la función de onda de todos los electrones, se propuso trabajar con la densidad electrónica, la cual es más simple al basarse en la probabilidad de encontrar un electrón en cierto punto del espacio. Hohenberg y Kohn (1964) demostraron que, en el estado fundamental, las propiedades del sistema se pueden determinar únicamente por su densidad electrónica (Burke, 2007; Engel & Dreizler, 2011). Posteriormente, Kohn y Sham (1965) desarrollaron un esquema práctico que utiliza un sistema auxiliar de electrones no interactuantes con la misma densidad que el sistema real. La interacción compleja se agrupa en el término "funcional de intercambio y correlación", cuya forma exacta se aproxima mediante métodos matemáticos que han mejorado progresivamente en precisión, como la Aproximación de la Densidad Local (LDA) o la Aproximación del Gradiente Generalizado (GGA) (Grimme, 2006; Hohenberg & Kohn, 1964; Kohn & Sham, 1965). En la actualidad, software de química computacional como Gaussian (enfocado a clústeres) y Quantum ESPRESSO (código abierto, enfocado a bulk) permiten ejecutar estas simulaciones.

#### 2.2.1 Configuración en Clústeres

Representa un sistema finito con un número limitado de átomos (similar a una molécula aislada o un racimo de uvas), donde los efectos de borde y superficie son predominantes al no existir continuidad periódica. Es útil para el estudio de propiedades locales y mecanismos de reacción específicos, con la ventaja de requerir menos recursos computacionales, lo que la hace viable su simulación en computadoras de escritorio actuales. Sin embargo, su limitación principal radica en la

dificultad para reproducir la estructura de bandas continua de los sólidos extendidos. La Figura 2 muestra clústeres de óxido de titanio de diferentes tamaños, junto con su potencial electrostático correspondiente. Esto nos permite identificar las zonas del clúster donde hay más electrones que pueden interactuar con los de otro clúster. En este caso, para modelar estos sistemas de la figura 2, se utilizó el software Gaussian con la interfaz gráfica GaussView. Se optimizó la geometría, los orbitales frontera (HOMO-LUMO) y la densidad de nube electrónica empleando el funcional híbrido B3LYP para el intercambio-correlación, junto con un conjunto de bases DGTZVP2. Y se usó una estación de trabajo local equipada con un procesador Intel Comet Lake de 10ª generación (3.30 GHz, 6 núcleos, 12 hilos, 12 MB Caché L3) y 16 GB de memoria RAM DDR4 (2666 MHz) en configuración de doble canal.

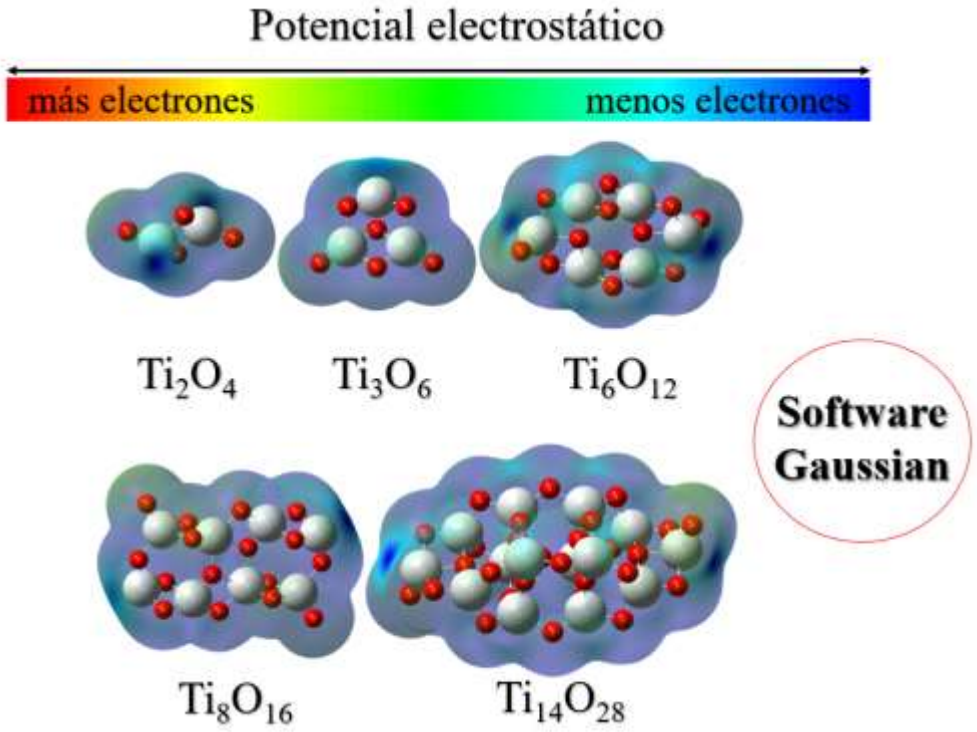



**Figura 2.** Evolución en el tamaño y complejidad de la configuración de tipo clúster y la representación de la nube electrónica de cada sistema.
Creado por el autor.

### 2.2.2 Configuración tipo Bulk (Periódica)

Se considera el material con periodicidad extendida en las tres direcciones espaciales, basándose en la celda unitaria o primitiva (Figura 3A). Esta configuración permite escalar a superceldas (Figura 3B), incluyendo modelos tipo "Slab" o de lámina, los cuales son útiles para estudiar defectos y fenómenos de adsorción con mayor precisión física al eliminar los efectos de borde artificiales propios de los clústeres. No obstante, este enfoque conlleva un costo computacional (HPC) significativamente mayor debido al tratamiento de las condiciones de frontera periódicas y el uso de bases de ondas planas para describir el inmenso número de interacciones consideradas.

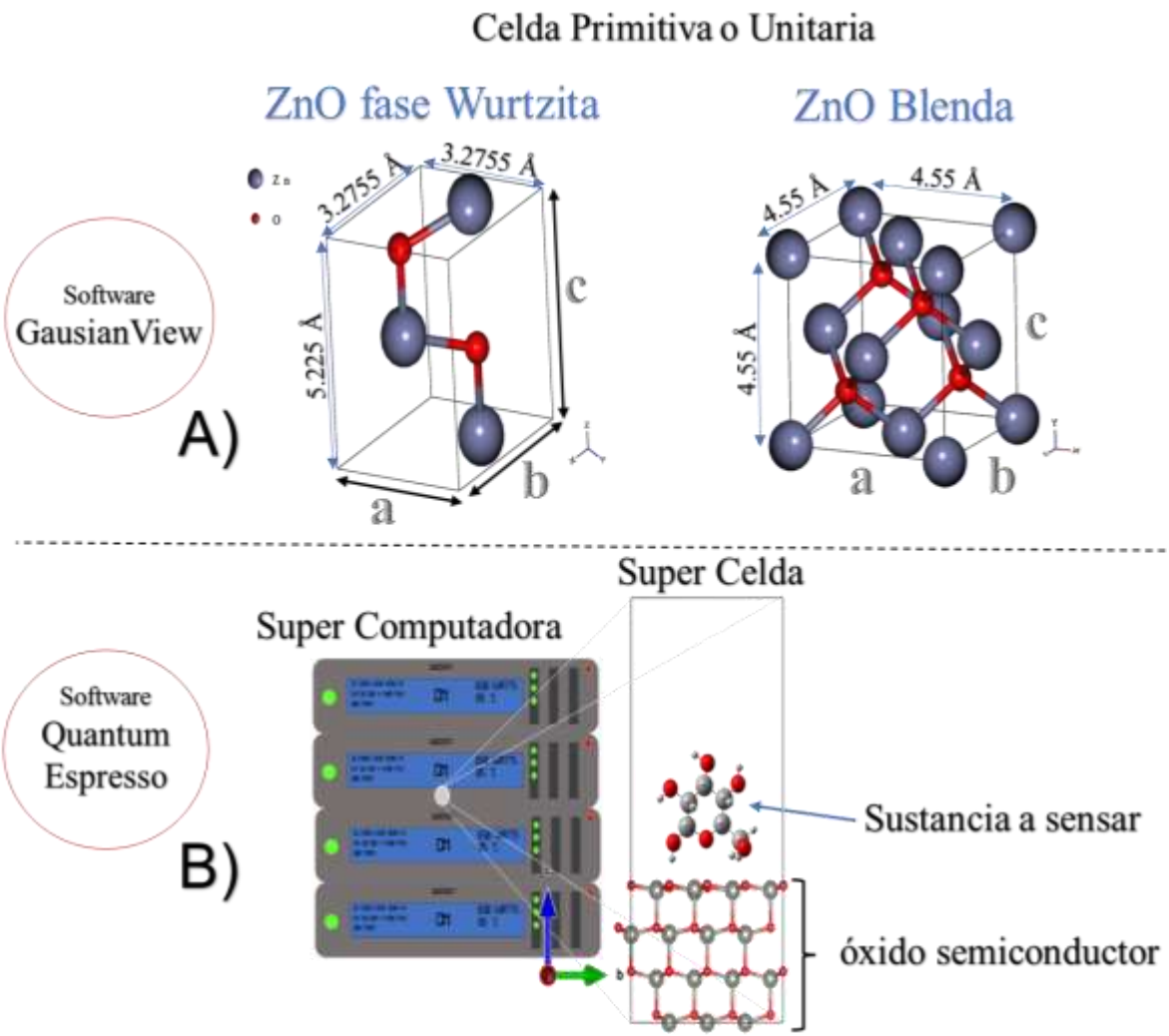



**Figura 3.** A) Estructura cristalina del ZnO en bulk en fase Wurzita y Zinc Blenda. B) Representación de una supercelda en la dirección (0001) de la fase hexagonal del ZnO.
Creado por el autor.

El sistema periódico de la Fig. 3B se empleó el paquete de software de código abierto Quantum ESPRESSO (Giannozzi et al., 2009, 2017, 2020). Específicamente, se modeló el óxido de zinc (ZnO) en configuración bulk y en supercelda (0001) con superficie 4x4 (dos bicapas). Los cálculos de energía total y optimización geométrica se ejecutaron mediante el código PWscf, utilizando la Aproximación del Gradiente Generalizado (GGA) con la parametrización PBE (Perdew et al., 1996) para la función de intercambio-correlación. Las interacciones electrón-núcleo se describieron mediante pseudopotenciales Ultrasuaves (USPP) con correcciones relativistas escalares (Vanderbilt, 1990). Existen otros programas computacionales de DFT para sistemas periódicos como VASP que modela propiedades de estado sólido. Estos cálculos involucran más átomos, por lo que se requieren equipos de cómputo con mayores capacidades de cálculo. Por ejemplo, para optimizar la configuración geométrica de la supercelda de la Fig. 3B, se utilizó un clúster de supercómputo compuesto por procesadores Intel Xeon (16 núcleos, 32 hilos) y 128 GB de memoria RAM DDR4 RDIMM/ECC.

### *2.3 Descriptores Moleculares Cuánticos (QMDs)*

Existen estudios de *relación cuantitativa de actividad o propiedad estructurada* (QSAR/QSPR, por sus siglas en inglés). Estos estudios, relacionados con el análisis del comportamiento de sistemas cuánticos, suelen emplear el cálculo de propiedades electrónicas mediante DFT. Dichas propiedades son conocidas como *descriptores moleculares cuánticos (QMDs* de sus siglas en inglés), utilizados en métodos de la mecánica cuántica. Los QMDs se usan para caracterizar, comparar y predecir el cómo se comportan las moléculas y materiales en relación con su estructura electrónica, su reactividad química, y sus propiedades físicas, químicas o biológicas. A continuación, se describen los QMDs fundamentales.

#### 2.3.1 Orbitales Frontera y Estructura de Bandas (HOMO-LUMO)

La reactividad y las propiedades electrónicas del material sensor están determinadas por los estados energéticos frontera, cuya descripción varía según la periodicidad del sistema. En *sistemas finitos* (Moléculas y Clústeres) se emplea la teoría de orbitales moleculares. Los elementos determinantes son el orbital ocupado de mayor energía (HOMO) y el orbital desocupado de menor energía (LUMO). La brecha energética (HOMO-LUMO) define la estabilidad química y la dureza del sistema: una brecha amplia es indicativo de una alta estabilidad y baja reactividad. En *sistemas periódicos* (Semiconductores Bulk) debido al número macroscópico de átomos y la periodicidad de la red, los niveles discretos se superponen formando regiones continuas o "bandas". Aquí, el HOMO equivale al borde superior de la Banda de Valencia ($E_V$), mientras que el LUMO equivale al borde inferior de la Banda de Conducción ($E_C$). La separación entre estas bandas constituye el ancho de banda (band gap $E_g$), parámetro crítico que gobierna la conductividad intrínseca.

Existe un estado intermedio entre ambos regímenes descrito por el efecto de confinamiento cuántico, el cual se ilustra en la Figura 4. Como se observa en el esquema, al aumentar el tamaño del sistema desde una molécula aislada hacia nano clústeres, la aparición de nuevos estados electrónicos provoca que los niveles discretos HOMO y LUMO converjan progresivamente. Esta evolución culmina en la formación de las bandas continuas del material masivo (bulk), donde la brecha HOMO-LUMO se convierte efectivamente en el band gap ($E_g$). Esta transición entre el tamaño del clúster y la estructura de bandas es fundamental para el diseño de sensores nanoestructurados y ha sido validada en revisiones recientes sobre modelado computacional (Alqahtani, 2023; Matyszczak et al., 2025).

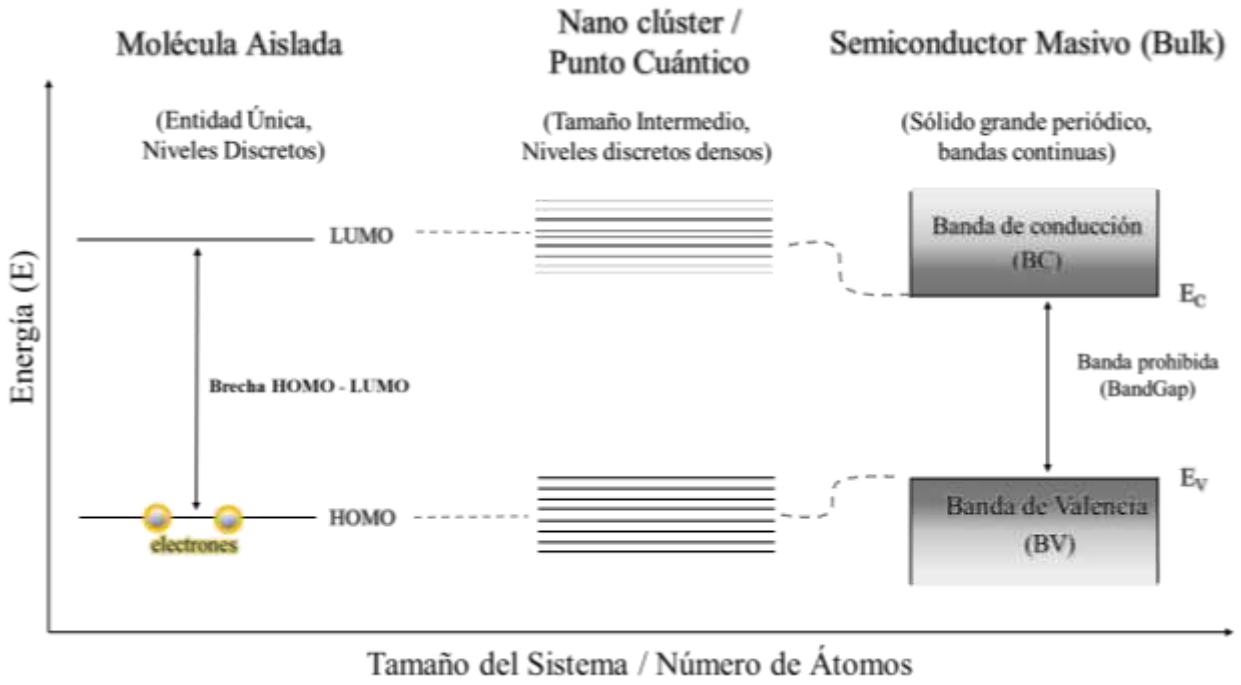



**Figura 4.** Esquema de la transición desde orbitales moleculares discretos (HOMO-LUMO) hasta la formación de bandas de energía continuas (Valencia-Conducción) al aumentar el tamaño del sistema desde moléculas hasta material masivo (bulk).
Creado por el autor.

### 2.3.2 Afinidad Electrónica (EA) y Potencial de Ionización (IP)

Estos son parámetros energéticos fundamentales definidos por la energía al agregar o quitar electrones del sistema. El Potencial de Ionización (IP) se define como la energía requerida para remover un electrón desde el HOMO al nivel de vacío, y la Afinidad Electrónica (EA) desde el LUMO. En la práctica, mediante la aproximación de Koopmans, estos valores se pueden estimar como $IP \approx E_{HOMO,}$ y $EA \approx E_{LUMO}$, sirviendo estos como base para el cálculo de otros descriptores globales de reactividad (Sharma et al., 2024).

### 2.3.3 Dureza Global (η)

En el marco de la DFT conceptual, la dureza química se formaliza como la segunda derivada de la energía con respecto al número de electrones ($N$) a un potencial externo constante, y se aproxima operacionalmente mediante diferencias finitas como $\eta \approx (IP - EA)/2$ . Este descriptor, denominado de manera explícita como dureza global para distinguirlo de sus contrapartes locales que evalúan sitios específicos, caracteriza la resistencia de todo el sistema químico a la deformación de su nube electrónica o a la transferencia de carga, relacionándose directamente con la brecha energética HOMO-LUMO. Es por ello por lo que, la dureza global es el indicador clave de la estabilidad general del semiconductor o la molécula. De acuerdo con el principio de máxima dureza, los sistemas tienden a evolucionar hacia estados de mayor estabilidad; en consecuencia, un sensor con alta dureza global (gran band gap) será menos reactivo por sí mismo y menos propenso a presentar inestabilidades espontáneas sin la interacción con un estímulo específico (Sharma et al., 2024).

### 2.3.4 Potencial Químico (μ)

El potencial químico es un indicador crítico de la reactividad global y se define termodinámicamente como la derivada de la energía respecto al número de electrones: $\mu=(\partial E/\partial N)$. Físicamente, mide la tendencia de los electrones a escapar de la nube electrónica en equilibrio. Se relaciona inversamente con la electronegatividad $\chi = -\mu$ y se calcula operacionalmente como $\mu \approx -(IP+EA)/2$. En el diseño de sensores, un valor de potencial químico más negativo (mayor electronegatividad) en el material adsorbente favorece la atracción de densidad electrónica desde la molécula objetivo, facilitando una adsorción eficiente y estable (Burke, 2007; Sharma et al., 2024).

### 2.3.5 Índice de Electrofilicidad (ω)

Este descriptor global cuantifica la capacidad de un sistema para aceptar electrones y estabilizarse energéticamente tras la transferencia de carga. Se define mediante la relación $\omega = \mu^2/2\eta$, combinando la propensión a adquirir electrones (potencial químico, μ) con la resistencia a dicho flujo (dureza, η). Un alto índice de electrofilicidad indica que el semiconductor actúa como un fuerte aceptor de electrones (electrófilo). Especies con alta Afinidad Electrónica (EA > 3.0 eV) suelen exhibir un alto carácter electrofílico, lo cual es deseable en la superficie del sensor para interactuar con analitos donadores de electrones (nucleófilos) (Sharma et al., 2024).

### 2.3.6 Carga de Mulliken

El análisis de población de Mulliken es uno de los métodos más establecidos para cuantificar la distribución de la densidad electrónica en sistemas moleculares y periódicos. Se fundamenta en el esquema de partición de la función de onda, donde la densidad electrónica se asigna a los núcleos atómicos basándose en los coeficientes de la combinación lineal de orbitales atómicos (LCAO). Aunque es sabido que este método presenta una dependencia del conjunto de bases utilizado, sigue siendo una herramienta estándar en el diseño de sensores por su eficiencia computacional y su capacidad para describir cualitativamente la Transferencia de Carga (Charge Transfer, Q). En el contexto del sensado, la carga de Mulliken permite calcular la transferencia neta de electrones (Q) entre el analito (molécula a sensar) y la superficie del sensor mediante la diferencia de carga del analito antes y después de la adsorción ($Q = Q_{adsorbido}-Q_{aislado}$). Un valor de Q positivo indica que la molécula de gas ha perdido electrones (actuando como donador) hacia la superficie del sensor. Un valor de Q negativo implica que el analito ha aceptado electrones de la superficie.

Esta transferencia altera la resistencia eléctrica del material semiconductor, constituyendo el mecanismo físico de detección. Estudios recientes en materiales 2D, como MXenes y calcogenuros, han validado el uso de las cargas de Mulliken para correlacionar la magnitud de esta transferencia con la sensibilidad final del dispositivo. La visualización de estas cargas se realiza mediante mapas de colorimetría (Figura 5), donde las zonas rojas indican alta densidad electrónica (centros nucleofílicos) y las zonas azules indican deficiencia de electrones (centros electrofílicos), facilitando la predicción de los sitios activos de adsorción (Cui et al., 2023; Islam et al., 2025; North et al., 2023).

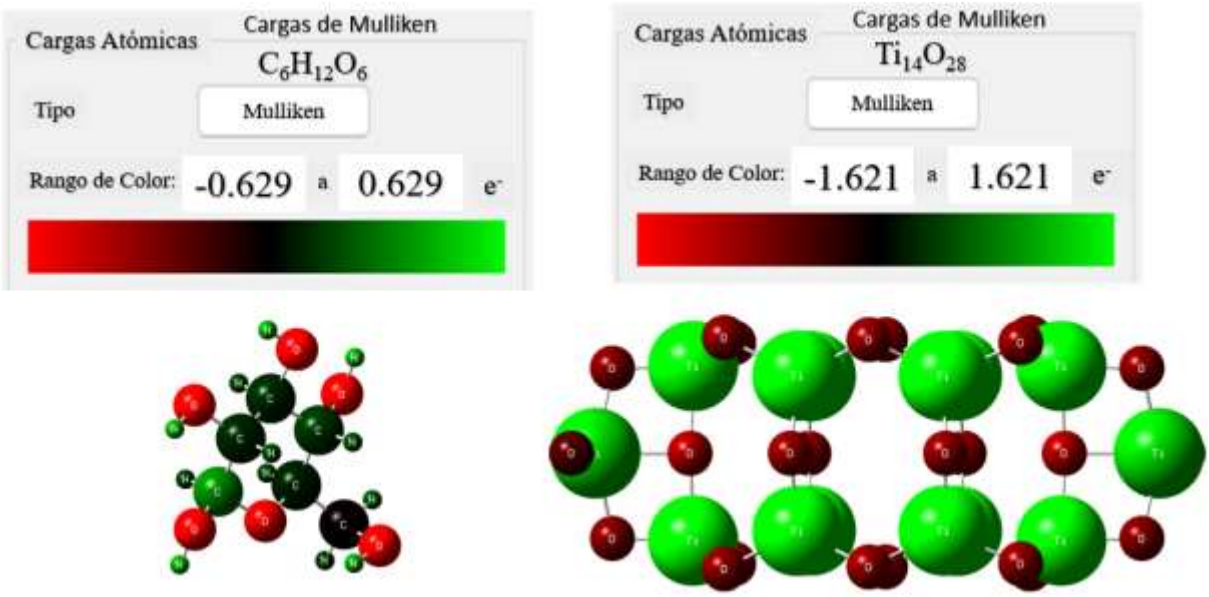



**Figura 5.** Distribución de cargas Mulliken en la molécula de glucosa y un clúster del semiconductor de óxido de titanio.
Creado por el autor.

### 2.3.7 Energía Libre de Gibbs (ΔG)

La Energía libre de Gibbs es el criterio termodinámico definitivo para evaluar la espontaneidad y estabilidad de la interacción sensor-analito bajo condiciones experimentales reales (presión y temperatura constantes). Se define fundamentalmente mediante la ecuación $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$. Para obtener una precisión química rigurosa que trascienda la simple energía electrónica a 0°K, resulta necesario considerar las contribuciones de la entalpía (ΔH) y, crucialmente, los términos entrópicos (-TΔS) derivados de las frecuencias vibracionales del sistema, tal como validaron (Galimberti & Sauer, 2021) en sus estudios sobre la precisión química en termodinámica de adsorción. En el contexto del diseño de sensores, la variación de energía libre se calcula generalmente mediante la diferencia entre la energía libre del complejo total y la suma de las energías libres de los componentes aislados $\Delta G_{ads} = G_{sensor\text{-}analito} - (G_{sensor} + G_{analito})$. La interpretación física de este parámetro es determinante para predecir el funcionamiento del dispositivo. Un valor de $\Delta G_{ads}$ negativo indica que la reacción ocurrirá *espontáneamente* e implica una liberación de energía favorable para el sistema. Como demuestran (de Sousa Sousa et al., 2024) en su estudio sobre sensores de cadaverina, este cálculo permite confirmar la estabilidad termodinámica del complejo formado, diferenciando las interacciones viables de aquellas que no ocurrirán experimentalmente. Además, la magnitud de $\Delta G_{ads}$ permite clasificar la naturaleza de la interacción. Valores moderadamente negativos sugieren fisisorción (interacciones débiles, útiles para sensores reversibles), mientras que valores altamente negativos indican quimisorción (enlaces fuertes y alta sensibilidad). Este criterio se utiliza eficazmente en dichas investigaciones para predecir no solo la reactividad, sino también la selectividad del sensor frente a moléculas interferentes como agua o gases atmosféricos.

### 2.3.8 Energía de Adsorción ($E_{ads}$)

A energía de adsorción ($E_{ads}$) es el descriptor cuantitativo fundamental que mide la fuerza de la interacción entre el analito y el material sensor. Este parámetro se calcula generalmente mediante la diferencia entre la

energía total del sistema combinado y la suma de las energías de las partes aisladas, expresándose comúnmente con la siguiente ecuación: $E_{ads} = E_{sistema} - (E_{superficie} + E_{molécula})$.

Donde $E_{sistema}$ corresponde a la energía total del complejo adsorbido, $E_{superficie}$ a la energía de la superficie del semiconductor libre y $E_{molécula}$ a la energía de la molécula del analito aislado en el vacío. Su magnitud permite distinguir numéricamente entre fisisorción (interacciones débiles, regularmente con valores absolutos < 1 eV) y quimisorción (interacciones fuertes, > 1 eV), permitiendo así la predicción, estabilidad y reversibilidad de la adhesión molecular en el dispositivo (López et al., 2018; Qu et al., 2023).

### *2.4 Casos de cálculos de QMDs aplicados a sensado*

Los QMDs se han usado para analizar y predecir como interactuarán distintos materiales. Por ejemplo, la Figura 6 muestra dos clústeres interactuando entre sí, en ellos se puede apreciar zonas con un rojo cuya intensidad creciente representa alta probabilidad de encontrar electrones, mientras que zonas azules indican la ausencia de estos. Las tonalidades grises representan zonas relativamente neutras. Los clústeres corresponden al oxido de Titanio y una molécula de glucosa. En este caso se incorporó la corrección de dispersión de Grimme (DFT-D) para describir adecuadamente las interacciones de Van der Waals (Grimme et al., 2010). Como se puede observar la $E_{ads}$ resultó negativa indicando una interacción de fisisorción favorable.




**Figura 6.** Nubes de densidad electrónica de un clúster de óxido de titanio y de una molécula de glucosa, y la colorimetría de sus densidades.
(Los valores son de carácter ilustrativo y no representan valores reales de la interacción mostrada, Creado por el autor).

Click or tap here to enter text.

Liu et al., 2018 desarrollaron un novedoso método de fabricación para biosensores medidores de glucosa de alta eficiencia. Estos se basan en transistores en una cinta nanométrica llamada nanoribbon, compuesta de óxido de indio ($In_2O_3$). Los autores mencionan que una de sus grandes cualidades es su versatilidad, al ser fácilmente integrables en diversas superficies, como relojes o prótesis, lo que permite una medición constante de glucosa en diferentes tipos de fluidos corporales, como la saliva o el sudor. Además de proporcionar gran comodidad al usuario, sugieren que estos podrían revolucionar la manera en que se monitorean los niveles de glucosa en la sangre, sobre todo en personas con diabetes.

Por otra parte, un ejemplo de uso mediante el análisis de los valores de la energía libre de Gibbs ΔG se aprecia en el trabajo de (Averin et al., 2021), donde predijeron el comportamiento en diversas soluciones, definiendo regiones de estados estables. El uso de las cargas de Mulliken se observa en el trabajo de (Mawwa et al., 2021), quienes estudiaron nano hojas de grafeno prístino (PG) y nitruro de boro prístino (PBN), así como otros compuestos, utilizando cálculos DFT para analizar su capacidad de adsorción de moléculas de gases tóxicos como $SO_2$ y CO. Empleando un análisis mediante las cargas de Mulliken, determinaron en que zonas ocurría la transferencia de carga y concluyeron que esta ocurría desde las moléculas de gas hacia las nano hojas. Asimismo, observaron que esta transferencia de carga aumentaba al modificar el grafeno con PBN. Algunos trabajos como el de Ema et al., 2021, estudiaron mediante cálculos de DFT la adsorción superficial del fármaco anticancerígeno nitrosourea (NU) sobre nano hojas de nitruro de boro (BNNS) en estado puro y dopadas con aluminio, galio e indio. Los autores mencionan que el *potencial químico (μ)* describe la reactividad química del sistema y, por tanto, la tendencia de un electrón a escapar de la posición de equilibrio.

Además, (Kose & Fellah, 2024) utilizando cálculos de DFT, investigaron las propiedades de adsorción, desorción y el almacenamiento de hidrógeno en nano conos de nitruro de boro (NBBCs) mejorados mediante el dopaje con Cu en sensores de hidrogeno. Concluyeron que el análisis de la energía libre de Gibbs es fundamental para determinar que este podría funcionar sin la necesidad de energía adicional, ya que obtuvieron valores negativos de ΔG. Estos valores fueron comparados con resultados teóricos de estudios similares y con valores experimentales, lo cual es indicativo de una adsorción favorable bajo las condiciones del estudio. Los valores obtenidos de dichas nano hojas antes de la adsorción de NU fueron alrededor de -3.6 eV en fase gaseosa. Una vez adsorbida la NU, los valores de $\mu$ fueron de -4.40 eV en estado puro, -5.44eV dopado con aluminio, -5.16eV dopado con galio y -5.25eV dopado con indio. Eso demostró la alta reactividad tras el dopaje en todos los casos. Además, relacionaron directamente estos valores con la energía de adsorción obtenidas, que fueron de -0.49 eV, -1.28eV, -1.07eV y -2.58eV, respectivamente. Cabe mencionar que el trabajo consideró tres posiciones para la interacción de la NU con las BNNS, los valores mostrados corresponden a las configuraciones más favorables.

También, en un estudio realizado por (Ramírez et al., 2024) se estudió el comportamiento del semiconductor $MoO_3$ en estado puro y modificado con cobalto ($Co_3O_4$) para evaluar su desempeño como sensor del gas monóxido de carbono (CO). La deposición se realizó utilizando pirólisis por nebulización (NSP). Adicionalmente, se avaluó la influencia en la composición del solvente, los tiempos de deposición y la concentración de Co en la respuesta del

sensor (parte experimental). A su vez, el estudio incluyó una parte teórica mediante simulaciones computacionales por DFT mediante el software ORCA. Como aproximación de los efectos de correlación-intercambio electrónico, emplearon el funcional B3LYP y las bases LANL2DZ para describir matemáticamente los orbitales atómicos, especialmente los de valencia, donde estos emplean un potencial de núcleo efectivo para los electrones internos de los átomos más pesados. En sus resultados, calcularon energías de adsorción ($E_{ads}$) para el Co en el $MoO_3$ en diferentes fases: Una $E_{ads}$ de -9.60eV para la fase amorfa (A), una $E_{ads}$ de -14.37eV para la fase hexagonal (h) y una $E_{ads}$ de -12.86eV para la fase alfa. Para el $MoO_3$ modificado con Co, la $E_{ads}$ calculada fue de -2.65eV, siendo este el menor valor. Esto demuestra la importancia y utilidad del DFT como una excelente aproximación en la predicción del comportamiento de películas y como su eficiencia se ve afectada o favorecida al variar la composición de los materiales.

Finalmente, un ejemplo integral se aprecia en el estudio reciente realizado por (Bin Iqbal et al., 2024) donde se evaluó una nano hoja de carburo de silicio pura (SiC) en forma de monocapa plana como transportadora de dos fármacos anticancerígenos: nitrosourea (NU) y carmustina (BCNU). Para la adsorción, modelaron seis configuraciones denominadas (S1 hasta S6). En S1 a S3, la molécula fue colocada de solo lado de la nano hoja: S1 con la molécula en paralelo a la superficie de la nano hoja; S2 y S3 de manera perpendicular variando el átomo cercano a la nano hoja. En S4 a S6 se colocó una molécula de manera simétrica por arriba y otra por debajo de la nano hoja siguiendo las orientaciones de S1 a S3, respectivamente. La naturaleza de la interacción se determinó analizando el valor absoluto de la energía de adsorción ($|E_{ads}|$), clasificando como fisisorción a los valores menores a 1 eV y como quimisorción mayores a 1 eV; encontraron que ocurrieron ambos tipos de interacción. La energía de adsorción más favorable fue de -1.998eV para NU en S6 y de -1.865eV para BCNU en S4. Asimismo, se reportaron otras energías de adsorción para la interacción con la fase gaseosa de los fármacos de -0.514eV para NU en S3 y -1.263eV para BCNU en S6. Calcularon diversos QMDs, tales como el potencial químico ($\mu$), dureza global ($\eta$), electrofilicidad ($\omega$) $E_{HOMO}$, $E_{LUMO}$ y $E_g$. Concluyeron que la adsorción redujo la dureza global ($\eta$). En particular, la adsorción de BCNU resultó en el aumento del potencial químico ($\mu$) cerca de siete veces con BCNU en agua, en comparación con la nano hoja pura de SiC. Esto demostró que tras una adsorción favorable aumenta la reactividad de la nano hoja de SiC, convirtiéndola en buena candidata para sistemas donde se busca entregar fármacos dirigidos dentro del cuerpo hacia zonas cancerosas.

## 3 Uso del DFT a nivel nacional e internacional

Un análisis realizado mediante la base de datos web Lens, (Figura 7A). muestra los trabajos relacionados con el sensado y DFT aplicados al estudio del comportamiento de diversos materiales en México durante los últimos 6 años. Lens es una base de datos de acceso libre y permite extraer datos de geolocalización y estadísticas de publicación. En la Figura 7A se puede observar que en 2020 se alcanzaron cerca de 23 trabajos referentes a este tema, lo que representó dos tercios de lo publicado en 2019 con 30 trabajos, posiblemente debido a la pandemia. Sin embargo, en 2021, se registró el mayor número de trabajos publicados. Para 2022 se apreció un comportamiento muy similar al promedio. En 2023 se alcanzaron 20 trabajos. Para 2024 se observó nuevamente una ligera caída en el número de trabajos, con solo 16, de los cuales 2 son de preimpresión. El año 2025 cierra con una persistencia del interés en

estos temas con 16 trabajos publicados como artículo de revista. Por otra parte, la Figura 7B muestra el top 10 de las universidades en México, donde la Universidad Autónoma de México (UNAM) es predominante con 90 trabajos en los últimos 6 años, seguida por el Instituto Politécnico Nacional (IPN) con 34 trabajos. En tercer y cuarto lugar se encuentran la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (BUAP) y el Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey (ITESM) con 12 y 11 trabajos, respectivamente.

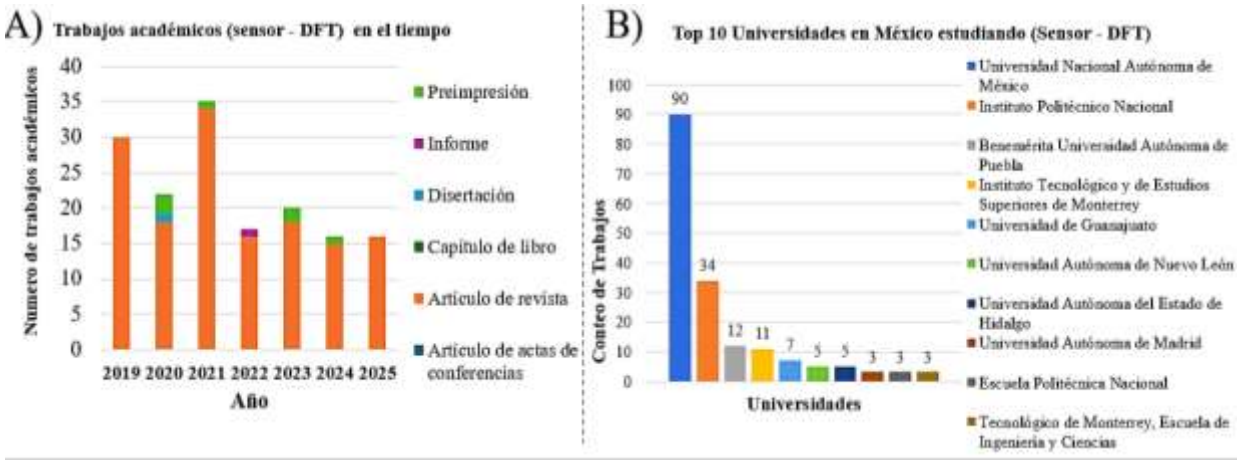



**Figura 7.** A) Número de publicaciones por año en México. B) Top 10 de las Universidades con mayor número de publicaciones basadas en el sensado mediante el uso de DFT.
Creado con la base de datos de LENS WEB.

El interés mundial en investigaciones sobre sensado y el uso de DFT ha ido en aumento. En los últimos 30 años, el número de trabajos académicos ha crecido considerablemente (Figura 8), destacando el crecimiento de artículos de revista, que pasaron de cerca de una decena en 1995 a 2,995 al cierre de 2025 y con un comienzo de presencia con 74 a enero de 2026.

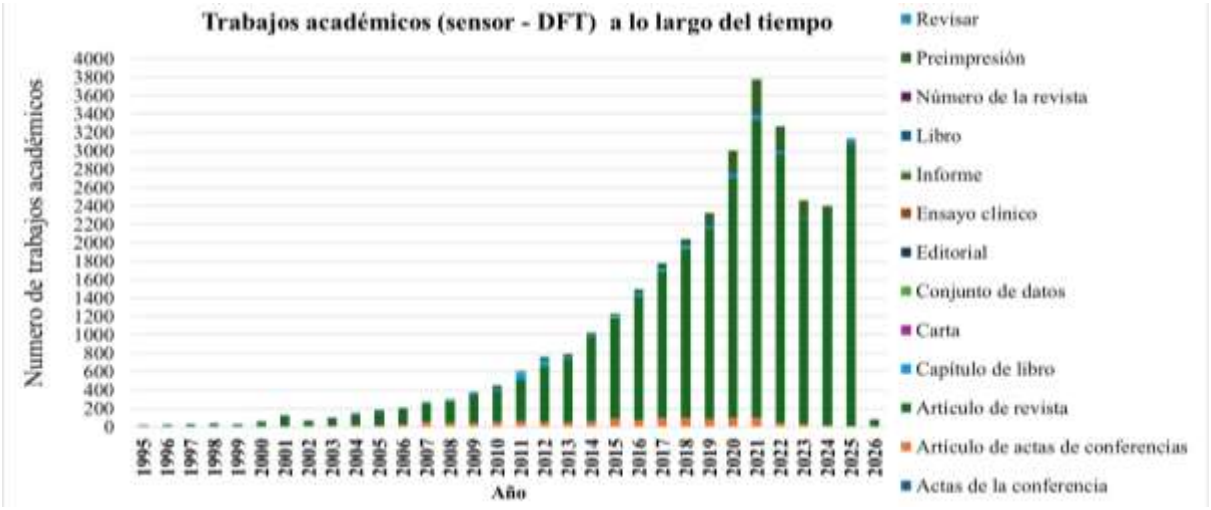



**Figura 8.** Evolución de los trabajos de investigación referentes a sensado y DFT de los últimos 30 años a nivel mundial.
Gráfico creado con base de datos de LENS WEB.

En contraste, al enfocar el análisis en los países líderes (Tabla II), se observa que China encabeza la lista con 6,126 trabajos, seguido por Estados Unidos y Reino Unido con 5,107 y 2,443 trabajos respectivamente. México ocupa el lugar 30 en 2026 con 221 trabajos.

**Tabla II.** Top de los 30 países más importantes y número de trabajos en los últimos 30 años.

| Posición | País de la institución/Region | Conteo de Trabajos |
|---|---|---|
| 1 | China | 6126 |
| 2 | Estados Unidos | 5107 |
| 3 | Reino Unido | 2443 |
| 4 | Alemania | 2069 |
| 5 | India | 1578 |
| 6 | Japón | 1215 |
| 7 | España | 1105 |
| 8 | Francia | 1079 |
| 9 | Italia | 1017 |
| 10 | Corea, República de | 877 |
| 11 | Australia | 795 |
| 12 | Canadá | 660 |
| 13 | Irán | 657 |
| 14 | Suecia | 604 |
| 15 | Suiza | 591 |
| 16 | Países Bajos | 539 |
| 17 | Arabia Saudita | 520 |
| 18 | Polonia | 508 |
| 19 | Rusia | 500 |
| 20 | Brasil | 495 |
| 21 | Hong Kong | 417 |
| 22 | Singapur | 358 |
| 23 | Bélgica | 348 |
| 24 | Taiwán | 316 |
| 25 | Turquía | 305 |
| 26 | Austria | 297 |
| 27 | Finlandia | 267 |
| 28 | República Checa | 253 |
| 29 | Dinamarca | 223 |
| 30 | México | 221 |

Se muestra una vista del panorama mundial (Figura 9), sobre trabajos basados en el sensado y el uso de la DFT, donde a mayor intensidad del color azul, hace referencia a mayor concentración de dichos trabajos en cada uno de los países en el mundo.

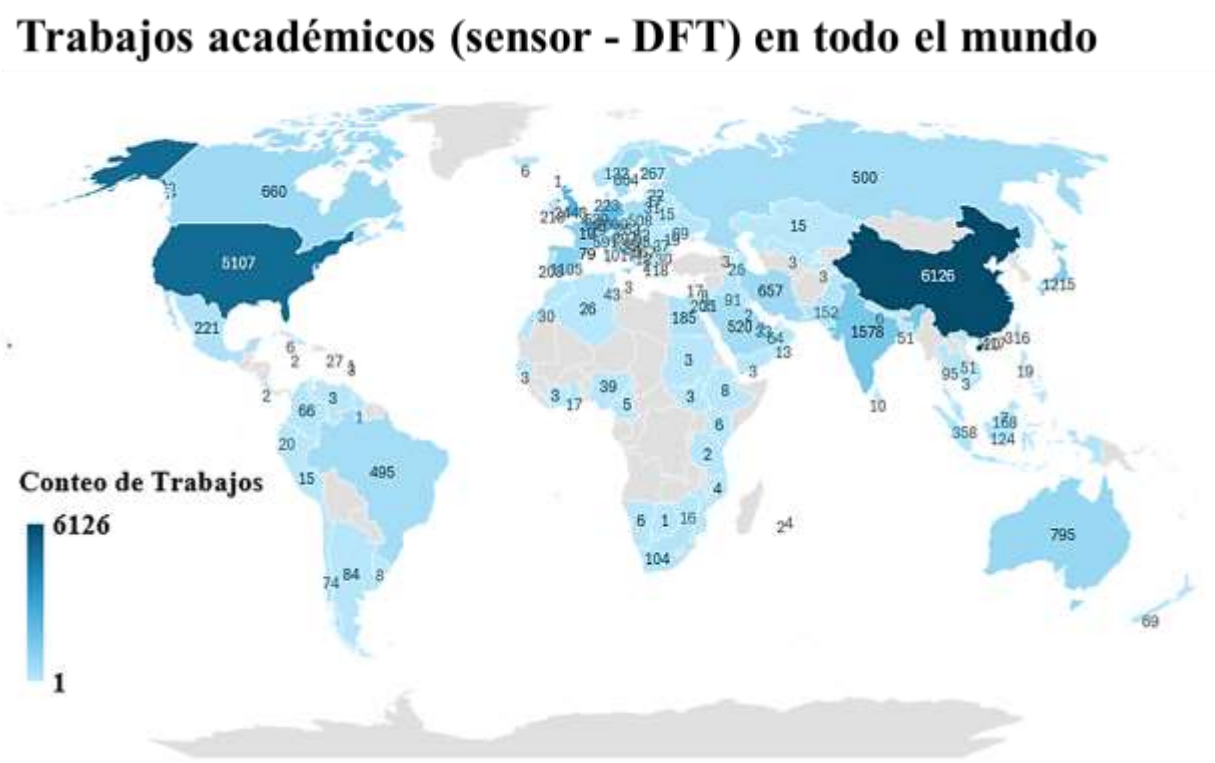



**Figura 9.** Trabajos académicos en los últimos 30 años sobre sensado y DFT a nivel mundial.
Gráfico creado con base de datos de LENS WEB,

Como se aprecia en este panorama global, existen numerosos grupos de investigadores dedicados a la búsqueda de sensores eficientes, menos invasivos y precisos. Sin embargo, la gran mayoría de estos desarrollos se logran después de una larga experimentación que requiere una gran cantidad de recursos, incluyendo materiales complejos para la síntesis, metales nobles de alto costo y equipo científico especializado (Ben Arbia et al., 2024; Dadkhah & Tulliani, 2022). A menudo, incluso una vez fabricados, las pruebas de eficiencia y sensibilidad no arrojan los resultados esperados, lo que subraya la necesidad de herramientas predictivas antes de la etapa experimental.

## 4 Conclusiones

El desarrollo de nuevos sensores eco-amigables, estables, económicos y con relativa facilidad de fabricación resulta vital para el control de diversos propósitos en la vida moderna, con un énfasis especial en la seguridad ambiental y en la salud pública. Las simulaciones basadas en la Teoría del Funcional de la Densidad han demostrado ser eficaces para describir los mecanismos de sensado a nivel atómico. El análisis de descriptores como la Energía de Adsorción ($E_{ads}$), la Energía Libre de Gibbs ($\Delta G$) y la transferencia de carga (Mulliken) permite discriminar teóricamente entre fisisorción y quimisorción, optimizando la selección de semiconductores nanoestructurados antes de su síntesis experimental. Desde una perspectiva de aplicación, la revisión resalta la viabilidad de estos materiales para la detección de contaminantes persistentes, como los pesticidas, y metabolitos de interés clínico. Esto posiciona a la modelación computacional como una potente herramienta para el desarrollo de dispositivos de monitoreo ambiental y de salud que sean económicamente accesibles y de alta sensibilidad. Fomentar la integración de

estudios teóricos (DFT) con validaciones experimentales puede fortalecer la capacidad de investigación nacional, permitiendo abordar problemas complejos con una infraestructura optimizada y menores costos operativos.

La revisión de los trabajos de investigación referenciados demuestra que las simulaciones computacionales, enfocadas al estudio de QSAR/QSPR y utilizando DFT, constituyen una valiosa herramienta para predecir de manera aproximada, mediante los QMDs, la interacción entre especies dentro de un sistema. Desde un enfoque teórico inicial, el uso de semiconductores en forma de óxidos metálicos emerge como una alternativa eco amigable y sustentable, como un primer acercamiento teórico.

El análisis bibliométrico confirma que, aunque China lidera la producción científica global, México mantiene una tendencia de crecimiento sostenido en este campo. Es evidente el creciente interés en el uso del DFT a nivel mundial, incluyendo a México con un crecimiento relativamente constante en este campo de la investigación, donde el recurso computacional, al generar resultados, abre las puertas a futuros estudios experimentales, brindando una gran versatilidad en la exploración de nuevos materiales y sistemas complejos.

## 5 Agradecimientos

A la Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación (SECIHTI) por el apoyo en modalidad beca otorgado durante mi preparación doctoral.

## 6 Referencias

Abisha Meji, M., Usha, D., Ashwin, B. M., Yardily, A., & Dennison, M. S. (2025). Microwave-assisted green synthesized ZnO nanoparticles: an experimental and computational investigation. *Discover Applied Sciences*, *7*(3). https://doi.org/10.1007/s42452-025-06563-8

Aivalioti, C., Manidakis, E. G., Pelekanos, N. T., Androulidaki, M., Tsagaraki, K., & Aperathitis, E. (2024). Anion and Cation Co-Doping of NiO for Transparent Photovoltaics and Smart Window Applications. *Crystals*, *14*(7), 629. https://doi.org/10.3390/cryst14070629

Aivalioti, C., Papadakis, A., Manidakis, E., Kayambaki, M., Androulidaki, M., Tsagaraki, K., Pelekanos, N. T., Stoumpos, C., Modreanu, M., Crăciun, G., Romanitan, C., & Aperathitis, E. (2021). Transparent All-Oxide Hybrid NiO:N/TiO2 Heterostructure for Optoelectronic Applications. *Electronics*, *10*(9), 988. https://doi.org/10.3390/electronics10090988

Aljawfi, R. N., Alam, M. J., Rahman, F., Ahmad, S., Shahee, A., & Kumar, S. (2020). Impact of annealing on the structural and optical properties of ZnO nanoparticles and tracing the formation of clusters via DFT calculation. *Arabian Journal of Chemistry*, *13*(1), 2207–2218. https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2018.04.006

Alqahtani, A. (2023). Modeling optical gap of cupric oxide nanomaterial semiconductor using hybrid intelligent method. *Cogent Engineering*, *10*(2). https://doi.org/10.1080/23311916.2023.2283287

Averin, I. A., Karmanov, A. A., Moshnikov, V. A., Yakushova, N. D., & Pronin, I. A. (2021). Sol-gel system evolution control for the synthesis of gas-sensitive nanomaterials based on semiconductor oxides. *Journal of Physics: Conference Series*, *2059*(1), 012002.

https://doi.org/10.1088/1742-6596/2059/1/012002

Bejarano, F., & Rojas-García, A. (2023, March). *Informe sobre Clorpirifós México razones para su prohibición (RAPAM-IPEN)*. https://www.rapam.org/wp-content/uploads/2021/09/Informe-Clorpirifos-Mexico-RAPAM-IPEN-Digitalred.pdf

Ben Arbia, M., Helal, H., & Comini, E. (2024). Recent Advances in Low-Dimensional Metal Oxides via Sol-Gel Method for Gas Detection. In *Nanomaterials* (Vol. 14, Issue 4). Multidisciplinary Digital Publishing Institute (MDPI). https://doi.org/10.3390/nano14040359

Bin Iqbal, A. J., Shahriar, R., & Zubair, A. (2024). First-principles study of a SiC nanosheet as an effective material for nitrosourea and carmustine anti-cancer drug delivery. *Nanoscale Advances*, *6*(11), 2968–2979. https://doi.org/10.1039/d4na00050a

Burke, K. (2007). *The ABC of DFT*. http://chem.ps.uci.edu/˜kieron/dft/book/

Corbally, M. A., & Freye, C. E. (2023). Development of a Gas Chromatography with High-Resolution Time-of-Flight Mass Spectrometry Methodology for BDNPA/F. *ACS Omega*, *8*(33), 30330–30334. https://doi.org/10.1021/acsomega.3c03382

Cui, H., Gao, C., Wang, P., Li, L., Ye, H., Wen, Z., & Liu, Y. (2023). DFT Study of Zn-Modified SnP3: A H2S Gas Sensor with Superior Sensitivity, Selectivity, and Fast Recovery Time. *Nanomaterials*, *13*(20). https://doi.org/10.3390/nano13202781

Dadkhah, M., & Tulliani, J. M. (2022). Green Synthesis of Metal Oxides Semiconductors for Gas Sensing Applications. In *Sensors* (Vol. 22, Issue 13). MDPI. https://doi.org/10.3390/s22134669

Dayan, F., Shahzad, A., & Ud, I. (2024). *DESIGNING AND INVESTIGATING ELECTRONIC STATES OF PORPHYRIN SCHIFF BASES NANOFLAKES, CATHODE MATERIAL FOR K + ION BATTERIES*. https://doi.org/http://dx.doi.org/10.2139/ssrn.4905657

de Sousa Sousa, N., Pereira Silva, R., de Jesus Gomes Varela Júnior, J., & Pereira Maciel, A. (2024). Advances in Selective Detection of Cadaverine by Electronic, Optical, and Work Function Sensors Based on Cu-Modified B12N12 and Al12N12 Nanocages: A Density Functional Theory (DFT) Study. *Langmuir*, *40*(44), 23310–23323. https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.4c02699

Du, H., Zhu, X., Yao, Y., & Yao, W. (2024). Occurrence and inhalation health risk of neonicotinoid pesticides in outdoor air particulate matters from 2019 to 2021 in China. *Environmental Systems Research*, *13*(1), 18. https://doi.org/10.1186/s40068-024-00342-x

Dutta, T., Noushin, T., Tabassum, S., & Mishra, S. K. (2023). Road Map of Semiconductor Metal-Oxide-Based Sensors: A Review. *Sensors*, *23*(15), 6849. https://doi.org/10.3390/s23156849

Ema, S. N., Khaleque, M. A., Ghosh, A., Piya, A. A., Habiba, U., & Shamim, S. U. D. (2021). Surface adsorption of nitrosourea on pristine and doped (Al, Ga and In) boron nitride nanosheets as

anticancer drug carriers: The DFT and COSMO insights. *RSC Advances*, *11*(58), 36866–36883. https://doi.org/10.1039/d1ra07555a

Engel, E., & Dreizler, R. M. (2011). *Density Functional Theory an Advanced Course*. Springer Berlin Heidelberg. https://doi.org/10.1007/978-3-642-14090-7

Ezeakunne, C., Lamichhane, B., & Kattel, S. (2025). Integrating density functional theory with machine learning for enhanced band gap prediction in metal oxides. *Physical Chemistry Chemical Physics*, *27*(10), 5338–5358. https://doi.org/10.1039/d4cp03397c

Fraden, J. (2016). *Handbook of Modern Sensors* (5th, Ed.; Vol. 5). Springer International Publishing. https://doi.org/10.1007/978-3-319-19303-8

Galimberti, D. R., & Sauer, J. (2021). Chemically Accurate Vibrational Free Energies of Adsorption from Density Functional Theory Molecular Dynamics: Alkanes in Zeolites. *Journal of Chemical Theory and Computation*, *17*(9), 5849–5862. https://doi.org/10.1021/acs.jctc.1c00519

García-Hernández, E., Palomino-Asencio, L., Catarino-Centeno, R., Nochebuena, J., Cortés-Arriagada, D., & Chigo-Anota, E. (2021). In silico study of the adsorption of acetamiprid on functionalized carbon nanocones. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, *128*, 114516. https://doi.org/10.1016/j.physe.2020.114516

Giannozzi, P., Andreussi, O., Brumme, T., Bunau, O., Buongiorno Nardelli, M., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., Ceresoli, D., Cococcioni, M., Colonna, N., Carnimeo, I., Dal Corso, A., de Gironcoli, S., Delugas, P., DiStasio, R. A., Ferretti, A., Floris, A., Fratesi, G., … Baroni, S. (2017). Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO. *Journal of Physics: Condensed Matter*, *29*(46), 465901. https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa8f79

Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., Ceresoli, D., Chiarotti, G. L., Cococcioni, M., Dabo, I., Dal Corso, A., de Gironcoli, S., Fabris, S., Fratesi, G., Gebauer, R., Gerstmann, U., Gougoussis, C., Kokalj, A., Lazzeri, M., … Wentzcovitch, R. M. (2009). QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of Physics: Condensed Matter*, *21*(39), 395502. https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502

Giannozzi, P., Baseggio, O., Bonfà, P., Brunato, D., Car, R., Carnimeo, I., Cavazzoni, C., de Gironcoli, S., Delugas, P., Ferrari Ruffino, F., Ferretti, A., Marzari, N., Timrov, I., Urru, A., & Baroni, S. (2020). QUANTUM ESPRESSO toward the exascale. *The Journal of Chemical Physics*, *152*(15), 154105. https://doi.org/10.1063/5.0005082

Ginting, L. Y., Refino, A. D., & Nulhakim, L. (2019). DFT Investigation on the Adsorption of KCl on the Surface of ZnO. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, *258*(1). https://doi.org/10.1088/1755-1315/258/1/012045

Grimme, S. (2006). Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction.

*Journal of Computational Chemistry*, *27*(15), 1787–1799. https://doi.org/10.1002/jcc.20495

Grimme, S., Antony, J., Ehrlich, S., & Krieg, H. (2010). A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu. *The Journal of Chemical Physics*, *132*(15). https://doi.org/10.1063/1.3382344

Guillén, C. (2025). Determination of the Band Gap Energy of SnO2 and ZnO Thin Films with Different Crystalline Qualities and Doping Levels. *Electronic Materials*, *6*(1), 3. https://doi.org/10.3390/electronicmat6010003

Hohenberg, P., & Kohn, W. (1964). Inhomogeneous Electron Gas. *Physical Review*, *136*(3B), B864–B871. https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864

Islam, M., Shamim, S. U. D., Dash, B. K., Ananna, A. A., Rahman, M. S., Arefin, T., & Piya, A. A. (2025). DFT insights into the gas sensing performance of M 2 X (M = Zr, Hf; X = C, N) MXenes and their Janus derivatives for toxic gases. *Materials Advances*, *6*(22), 8701–8712. https://doi.org/10.1039/d5ma00568j

Kang, Y., Yu, F., Zhang, L., Wang, W., Chen, L., & Li, Y. (2021). Review of ZnO-based nanomaterials in gas sensors. *Solid State Ionics*, *360*. https://doi.org/10.1016/j.ssi.2020.115544

Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Physical Review*, *140*(4A), A1133–A1138. https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133

Kose, A., & Fellah, M. F. (2024). Hydrogen adsorption, desorption, sensor and storage properties of Cu doped / decorated boron nitride nanocone materials: A density functional theory and molecular dynamic study. *International Journal of Hydrogen Energy*, *79*, 1086–1099. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.07.100

Leyva-Morales, J. B., Bastidas-Bastidas, P. de J., Salvatierra-Stamp, V. del C., González-Márquez, L. C., Davizon, Y. A., Márquez-Pacheco, H., Amillano-Cisneros, J. M., Cruz-Acevedo, E., Amézquita-López, B. A., Romo Gómez, C., De la Torre Espinosa, Z. Y., & Rodríguez-Aguilar, B. A. (2024). Temporal distribution and ecological risk assessment for pesticides in water from the north-central coastal zone of Sinaloa, Mexico. *Heliyon*, *10*(15), e35207. https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e35207

Liu, Q., Liu, Y., Wu, F., Cao, X., Li, Z., Alharbi, M., Abbas, A. N., Amer, M. R., & Zhou, C. (2018). Highly Sensitive and Wearable In2O3 Nanoribbon Transistor Biosensors with Integrated On-Chip Gate for Glucose Monitoring in Body Fluids. *ACS Nano*, *12*(2), 1170–1178. https://doi.org/10.1021/acsnano.7b06823

López, Y. C. V., Carrión, S. M., & López, M. B. (2018). Adsorption and oxidation of carbon monoxide in a sheet of β-graphyne: Theoretical study. *Revista Materia*, *23*(2). https://doi.org/10.1590/S1517-707620180002.0445

Marikutsa, A., Rumyantseva, M., Konstantinova, E. A., & Gaskov, A. (2021). The Key Role of Active Sites in

the Development of Selective Metal Oxide Sensor Materials. *Sensors*, *21*(7), 2554. https://doi.org/10.3390/s21072554

Martin-Culma, N. Y., & Arenas-Suárez, N. E. A.-S. E. (2018). Daño colateral en abejas por la exposición a pesticidas de uso agrícola. *Entramado*, *14*(1), 232–240. https://doi.org/10.18041/entramado.2018v14n1.27113

Matyszczak, G., Krawczyk, K., & Yedzikhanau, A. (2025). Computational Modeling of Properties of Quantum Dots and Nanostructures: From First Principles to Artificial Intelligence (A Review). In *Nanomaterials* (Vol. 15, Issue 4). Multidisciplinary Digital Publishing Institute (MDPI). https://doi.org/10.3390/nano15040272

Mawwa, J., Shamim, S. U. D., Khanom, S., Hossain, M. K., & Ahmed, F. (2021). In-plane graphene/boron nitride heterostructures and their potential application as toxic gas sensors. *RSC Advances*, *11*(52), 32810–32823. https://doi.org/10.1039/D1RA06304A

North, S. C., Jorgensen, K. R., Pricetolstoy, J., & Wilson, A. K. (2023). Population analysis and the effects of Gaussian basis set quality and quantum mechanical approach: main group through heavy element species. *Frontiers in Chemistry*, *11*. https://doi.org/10.3389/fchem.2023.1152500

Pathania, A., Dhanda, N., Verma, R., Sun, A. C. A., Thakur, P., & Thakur, A. (2024). Review—Metal Oxide Chemoresistive Gas Sensing Mechanism, Parameters, and Applications. In *ECS Sensors Plus* (Vol. 3, Issue 1). Institute of Physics. https://doi.org/10.1149/2754-2726/ad2152

Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letters*, *77*(18), 3865–3868. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865

Qu, N., Chen, M., Liao, M., Cheng, Y., Lai, Z., Zhou, F., Zhu, J., Liu, Y., & Zhang, L. (2023). Accelerating Density Functional Calculation of Adatom Adsorption on Graphene via Machine Learning. *Materials*, *16*(7). https://doi.org/10.3390/ma16072633

Raizada, P., Sudhaik, A., Patial, S., Hasija, V., Parwaz Khan, A. A., Singh, P., Gautam, S., Kaur, M., & Nguyen, V.-H. (2020). Engineering nanostructures of CuO-based photocatalysts for water treatment: Current progress and future challenges. *Arabian Journal of Chemistry*, *13*(11), 8424–8457. https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2020.06.031

Ramírez, G. M., Correa, R., García, B., Olvera, M. de la L., Vargas, C., & Karthik, T. V. K. (2024). CO gas-sensing properties and DFT investigation of pure and Co-modified MoO3 nanostructures: effect of solvent composition, deposition time, and cobalt concentration. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, *35*(10). https://doi.org/10.1007/s10854-024-12501-y

Rocha, R. A., Diniz, T. de O., Silva, B. G. da, Gigliolli, A. A. S., & Ruvolo-Takasusuki, M. C. C. (2024). Toxicological, morphological and cytochemical effects caused by the agrochemical Fastac Duo in africanized Apis mellifera tolerant to neonicotinoid thiamethoxam. *OBSERVATÓRIO DE LA ECONOMÍA LATINOAMERICANA*,

*22*(6), e5129. https://doi.org/10.55905/oelv22n6-069

Ruiz-Arias, M. A., Medina-Díaz, I. M., Bernal-Hernández, Y. Y., Barrón-Vivanco, B. S., González-Arias, C. A., Romero-Bañuelos, C. A., Verdín-Betancourt, F. A., Herrera-Moreno, J. F., Ponce-Vélez, G., Gaspar-Ramírez, O., Bastidas-Bastidas, P. de J., González, F. B., & Rojas-García, A. E. (2023). The situation of chlorpyrifos in Mexico: a case study in environmental samples and aquatic organisms. *Environmental Geochemistry and Health*, *45*(8), 6323–6351. https://doi.org/10.1007/s10653-023-01618-4

Schanzmann, H., Gaar, S., Keip, S., Telgheder, U., & Sielemann, S. (2025). Comparison of the quantification performance of thermal desorption GC-IMS and GC-MS in VOC analysis. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, *417*(18), 4179–4198. https://doi.org/10.1007/s00216-025-05933-w

Sharma, P., Ranjan, P., & Chakraborty, T. (2024). Applications of conceptual density functional theory in reference to quantitative structure–activity / property relationship. In *Molecular Physics* (Vol. 122, Issue 23). Taylor and Francis Ltd. https://doi.org/10.1080/00268976.2024.2331620

Tapia, M., González, J., Octavio, M. J., Tapia, C., Rivera, J., Nuñez Maciel, O., & Rodríguez López, E. (2019). Pesticidas: insecticidas neonicotinoides y el futuro de las abejas y otros insectos polinizadores. *Revista Latinoamericana El Ambiente y Las Ciencias*, *10*, 165–174.

Thang, H. V., & Pacchioni, G. (2019). H2 Adsorption on Wurtzite ZnO and on ZnO/M(111) (M=Cu, Ag and Au) Bilayer Films. *ChemNanoMat*, *5*(7), 932–939. https://doi.org/10.1002/cnma.201900195

Vanderbilt, D. (1990). Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism. *Physical Review B*, *41*(11), 7892–7895. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.41.7892

Wang, W., Ruan, Y., Zhou, Z., & Liu, M. (2024). Design and Fabrication of Micro/Nano Sensors and Actuators, Volume II. *Micromachines*, *15*(6), 667. https://doi.org/10.3390/mi15060667

Zeng, X., & Berecibar, M. (2025). Emerging sensor technologies and physics-guided methods for monitoring automotive lithium-based batteries. *Communications Engineering*, *4*(1), 44. https://doi.org/10.1038/s44172-025-00383-9