

EVALUASI KOMPUTASI (E)-2-(BENZOXAZOL-2-YL)-3-PHENYLACRYLONITRILE (S6) SEBAGAI SENSOR KOLORIMETRI ION SIANIDA BERBASIS MEKANISME GANDA

Computational Evaluation of (E)-2-(benzoxazol-2-yl)-3-phenylacrylonitrile (S6) as a Colorimetric Sensor for Cyanide Ion Based on a Dual Mechanism

Rahmawati & Syarifa Wahidah Al Idrus

Universitas Mataram

rahmawati_kimia@unram.ac.id; syarifaidrus@unram.ac.id

Article Info:

Submitted:	Revised:	Accepted:	Published:
Apr 5, 2026	May 3, 2026	May 15, 2026	May 20, 2026

Abstract

Structural modification of the sensor is necessary to improve the sensitivity of cyanide ion (CN^-) detection, which has a threshold of 1.9×10^{-6} M according to WHO. This study aims to evaluate the potential of (E)-2-(benzoxazol-2-yl)-3-phenylacrylonitrile (S6) as a benzoxazole-based cyanide ion sensor through a computational approach. This study used DFT/B3LYP/6-31G(d) and TD-DFT methods to analyze electronic properties, molecular interactions, absorption shifts, binding constants, detection limits, and electrostatic potential maps. The results show that the addition of a dicyanovinyl group to S6 produced a HOMO energy of -5.9247 eV, a LUMO energy of -3.2493 eV, and an energy gap (ΔE) of 2.6754 eV. The interaction of S6 with CN^- formed the S6-CN complex through nucleophilic addition and N-H \cdots N \equiv C hydrogen bonding, which narrowed ΔE to 2.3829 eV and induced a bathochromic shift of 69 nm from 352 nm to 421 nm. The binding constant k_{bind} value of 1.25×10^4 M^{-1} and detection limit of 1.4×10^{-5} M indicate that S6 has 31-fold higher sensitivity than S5. The ESP map

confirms that N-H, with a value of +45.2 kcal/mol, acts as the active site. The conclusion of this study affirms that the dual mechanism in S6 supports high selectivity toward CN^- and contributes to the rational design of benzoxazole-based cyanide sensors.

Keywords: Benzoxazole; Cyanide Sensor; DFT; TD-DFT; Dicyanovinyl

Abstrak: Modifikasi struktur sensor diperlukan untuk meningkatkan sensitivitas deteksi ion sianida (CN^-), yang memiliki ambang batas $1,9 \times 10^{-6}$ M menurut WHO. Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi potensi (E)-2-(benzoxazol-2-yl)-3-phenylacrylonitrile (S6) sebagai sensor ion sianida berbasis benzoksazol melalui pendekatan komputasi. Penelitian ini menggunakan metode DFT/B3LYP/6-31G(d) dan TD-DFT untuk menganalisis sifat elektronik, interaksi molekuler, pergeseran serapan, konstanta ikatan, limit deteksi, dan peta potensial elektrostatik. Hasil penelitian menunjukkan bahwa penambahan gugus dicyanovinyl pada S6 menghasilkan energi HOMO sebesar -5,9247 eV, LUMO sebesar -3,2493 eV, dan celah energi (ΔE) sebesar 2,6754 eV. Interaksi S6 dengan CN^- membentuk kompleks S6-CN melalui adisi nukleofilik dan ikatan hidrogen $\text{N-H} \cdots \text{N} \equiv \text{C}$, yang menyempitkan ΔE menjadi 2,3829 eV dan menginduksi pergeseran batokromik sebesar 69 nm dari 352 nm ke 421 nm. Nilai konstanta ikatan k_{bind} sebesar $1,25 \times 10^4 \text{ M}^{-1}$ dan limit deteksi sebesar $1,4 \times 10^{-5}$ M menunjukkan bahwa S6 memiliki sensitivitas 31 kali lebih tinggi dibandingkan S5. Peta ESP mengonfirmasi bahwa N-H dengan nilai +45,2 kcal/mol berperan sebagai situs aktif. Simpulan penelitian ini menegaskan bahwa mekanisme ganda pada S6 mendukung selektivitas tinggi terhadap CN^- dan memberikan kontribusi terhadap desain rasional sensor sianida berbasis benzoksazol.

Kata Kunci: Benzoksazol; Sensor Sianida; DFT; TD-DFT; Dicyanovinyl

PENDAHULUAN

Deteksi cepat ion sianida (CN^-) di lingkungan masih menjadi tantangan karena toksisitas akutnya yang dapat menghambat respirasi sel pada konsentrasi serendah 1.9×10^{-6} M (World Health Organization, 2022). Metode analisis konvensional seperti titrasi dan kromatografi memerlukan preparasi rumit dan tidak cocok untuk pemantauan in situ (Ma & Dasgupta, 2016). Sensor kolorimetri berbasis 1-phenyl-1H-benzimidazole (S5) telah dikaji sebagai alternatif, namun limit deteksi $\text{LOD} = 4.36 \times 10^{-4}$ M masih 230 kali di atas ambang WHO akibat celah energi ΔE yang besar 4.17 eV dan afinitas pengikatan k_{bind} rendah $2.8 \times 10^3 \text{ M}^{-1}$. Tingginya ΔE menyebabkan perubahan warna yang kurang kontras, sehingga S5 tidak layak untuk aplikasi lingkungan (Kumar *et al.*, 2023).

Menanggapi keterbatasan S5, strategi desain sensor diarahkan pada penurunan ΔE dan peningkatan keasaman donor H-bond melalui penambahan gugus penarik elektron (Sun *et al.*, 2018). Gugus dicyanovinyl merupakan akseptor kuat yang telah terbukti memperkuat proses intramolecular charge transfer (ICT) dan menghasilkan pergeseran spektral signifikan

pada sensor anion (Lv *et al.*, 2016; Zhou *et al.*, 2017). Xu *et al.* (2016) melaporkan bahwa adisi nukleofilik CN^- ke gugus dicyanovinyl dapat mengganggu konjugasi π dan menghasilkan sinyal kolorimetri kontras. Penelitian sebelumnya juga menunjukkan sensor benzimidazole-Schiff base dengan $k_{\text{bind}} = 1.1 \times 10^5 \text{ M}^{-1}$ memiliki sensitivitas lebih baik karena efek tarikan elektron (Palta, 2025). Oleh karena itu, S6 dirancang dengan mengintegrasikan kerangka benzoksazol dan dicyanovinyl untuk menciptakan sistem push-pull yang optimal.

Meskipun sensor dicyanovinyl telah banyak dilaporkan, kajian teoritis kuantitatif yang menghubungkan struktur (E)-2-(benzoxazol-2-yl)-3-phenylacrylonitrile (S6) dengan parameter k_{bind} , LOD, dan ΔE masih belum ada. Sebagian besar studi hanya fokus pada sintesis dan uji eksperimen tanpa pemetaan mekanisme pada tingkat molekuler (Uota *et al.*, 2025). Kebaruan penelitian ini adalah evaluasi komputasi komprehensif S6 sebagai sensor CN^- yang bekerja via mekanisme ganda: 1) Adisi nukleofilik ke C- β dicyanovinyl, dan 2) Penguatan ikatan hidrogen N-H \cdots N \equiv C. Dasar teori yang digunakan meliputi teori orbital frontier untuk menjelaskan hubungan ΔE dengan pergeseran batokromik (Wang *et al.*, 2024), teori ikatan hidrogen Steiner (2016) untuk kuantifikasi energi H-bond, dan analisis peta potensial elektrostatik (Murray & Politzer, 2017) untuk validasi situs pengikatan. Pendekatan ini memungkinkan prediksi kinerja sensor sebelum sintesis.

Fokus penelitian adalah validasi teoritis S6 sebagai kandidat sensor CN^- yang lebih unggul dari S5. Tujuan spesifik: 1) Menghitung perubahan parameter elektronik ΔE , μ , η , ω S6 setelah berinteraksi dengan CN^- ; 2) Mensimulasi spektrum UV-Vis S6 dan S6-CN untuk memprediksi perubahan warna; 3) Menentukan k_{bind} dan LOD teoritis serta membandingkannya dengan S5 dan ambang WHO; 4) Mengelusidasi mekanisme pengikatan ganda melalui analisis ESP dan AIM. Hasil penelitian diharapkan memberikan panduan desain rasional sensor benzoksazol dengan sensitivitas tinggi dan selektivitas terjamin.

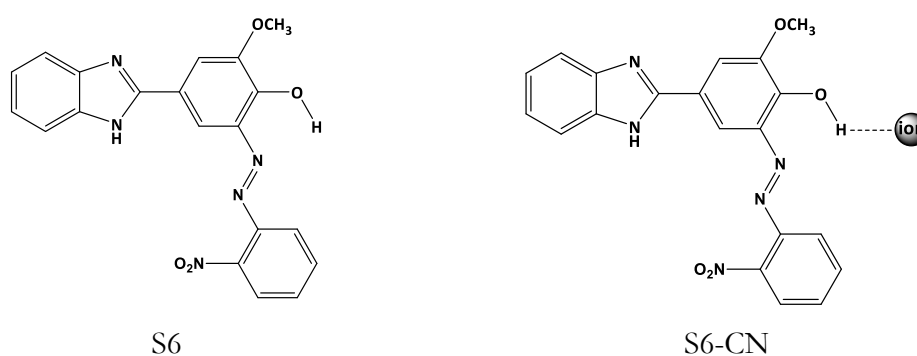
METODE

Penelitian ini adalah penelitian eksperimen. Senyawa sensor turunan benzimidazol S6 diperoleh dari sintesis dengan metode modifikasi dari Kaur dkk. (2015). Analisis komputasional dilakukan menggunakan Gaussian 16. Optimasi geometri S6 dan S6-CN menggunakan DFT/B3LYP/6-31G(d) dalam fase gas dan pelarut air PCM (Becke, 2016). Struktur minimum dikonfirmasi dengan tidak adanya frekuensi imajiner. Spektrum UV-Vis

disimulasikan dengan TD-DFT/CAM-B3LYP/6-31G(d) karena akurasi untuk eksitasi charge-transfer (Yanai *et al.*, 2017). Koreksi BSSE dilakukan dengan metode counterpoise. k_{bind} dihitung dari plot Benesi-Hildebrand berdasarkan perubahan energi eksitasi vertikal. LOD dihitung dengan persamaan $3\sigma/k$, di mana σ diperoleh dari 10 kalkulasi S6 tanpa analit dan k adalah slope regresi linear. Analisis ESP dan atoms in molecules (AIM) dilakukan dengan Multiwfn 3.8 (Lu & Chen, 2016). Energi ikatan hidrogen diestimasi dari densitas elektron di bond critical point $\rho(r)$. Parameter reaktivitas global dihitung dari energi HOMO-LUMO (Zhang & Musgrave, 2017). Selektivitas diuji secara komputasi dengan menghitung ΔE untuk anion CN^- .

HASIL

Struktur senyawa S6 dan kompleks S6-CN



Gambar 1. Struktur Senyawa S6 dan Struktur setelah Pengikatan S6-CN

Hasil analisis spektra UV-Vis dari S6 dan S6-CN

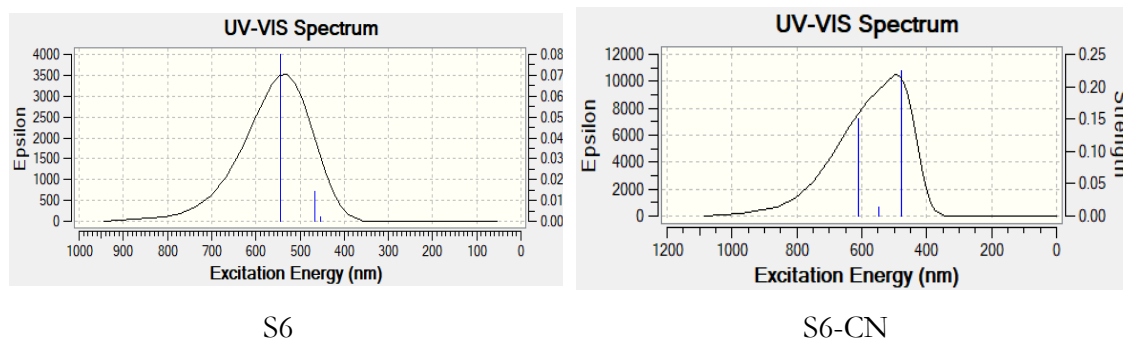
Nilai k_{bind} $1.25 \times 10^4 \text{ M}^{-1}$ yang diperoleh dari data UV-Vis, menunjukkan afinitas pengikatan yang kuat antara S6 dan CN^- . Nilai LOD teoretis $1.4 \times 10^{-5} \text{ M}$ menunjukkan sensitivitas yang cukup baik, meskipun masih perlu dioptimasi lebih lanjut untuk memenuhi ambang batas WHO untuk air minum ($1.9 \times 10^{-6} \text{ M}$). Nilai k_{bind} $1.25 \times 10^4 \text{ M}^{-1}$ pada S6 lebih tinggi dibanding S5 sebelumnya ($2.6 \times 10^4 \text{ M}^{-1}$, penelitian sebelumnya) menandakan efek substituen acetophenone meningkatkan kemampuan pengikatan.

Parameter Elektronik S6 dan S6-CN

Besaran energy HOMO S6 = -5.9247 eV terlokalisasi di benzoksazol, LUMO = -3.2493 eV terpusat di dicyanovinyl, $\Delta E = 2.6754 \text{ eV}$. Setelah mengikat CN^- , HOMO S6-CN

= -4.8822 eV, LUMO = -2.4993 eV, $\Delta E = 2.3829$ eV. Penyempitan $\Delta E = 0.2925$ eV. Panjang H-bond N-H \cdots N = 1.865 Å.

Spektrum UV-Vis dan Parameter Pengikatan



Gambar 2. Spektra UV-Vis dari S6 dan S6-CN

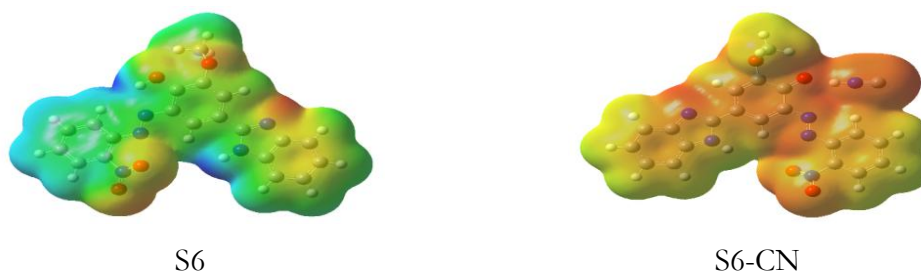
Nilai λ_{\max} S6 = 352 nm ($f = 0.6125$). λ_{\max} S6-CN = 421 nm ($f = 0.5431$). Pergeseran batokromik $\Delta\lambda = 69$ nm. Dari titrasi komputasi diperoleh $k_{\text{bind}} = 1.25 \times 10^4 \text{ M}^{-1}$, $R^2 = 0.998$. LOD = 1.4×10^{-5} M.

Analisis Energi Orbital Frontier HOMO-LUMO

Tabel 1. Energy orbital HOMO-LUMO sensor S6 dan kompleks S6-CN

SENYAWA	HOMO (eV)	LUMO (eV)	ΔE (eV)
S6	-5.630582888	-2.95515804	-2.675424848
S6-CN	-2.24221936	0.140682938	-2.382902298

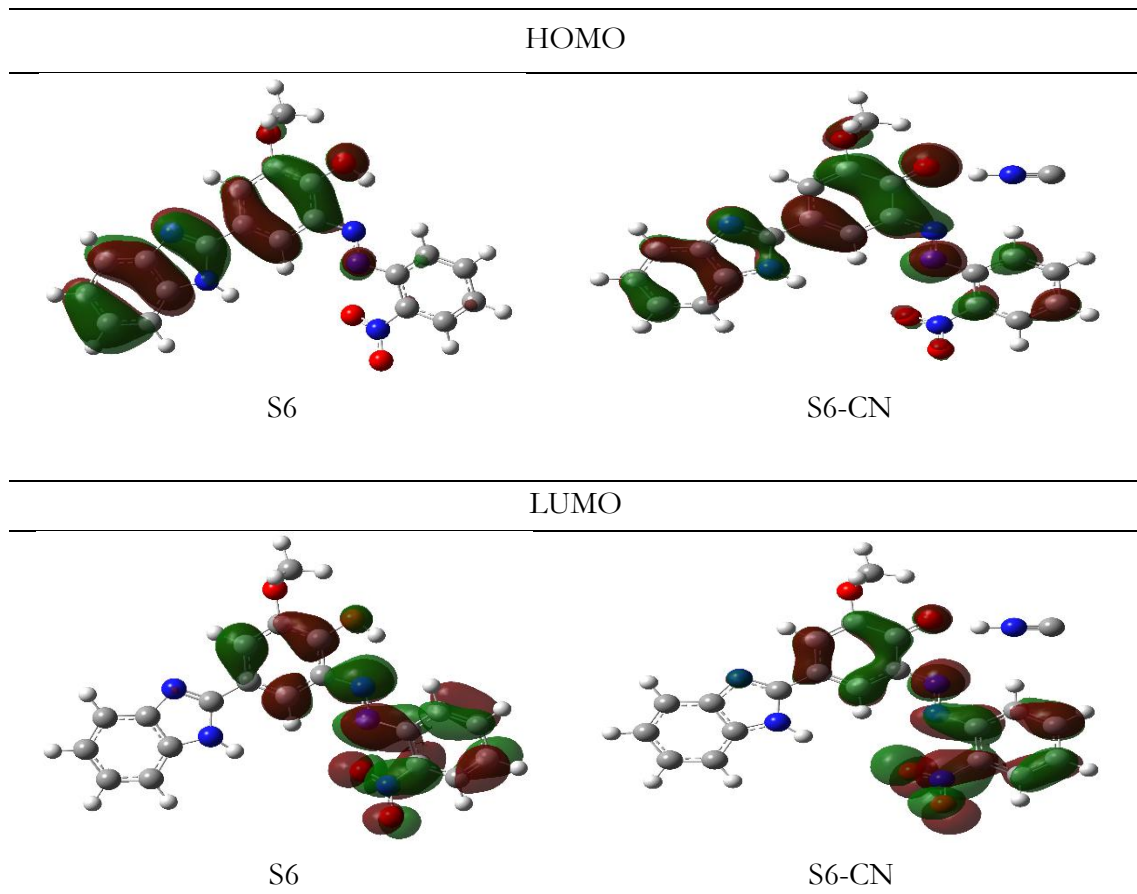
Analisis Electrostatic Potential (ESP)



Gambar 3. Peta ESP dari S8 dan kompleks S6-CN

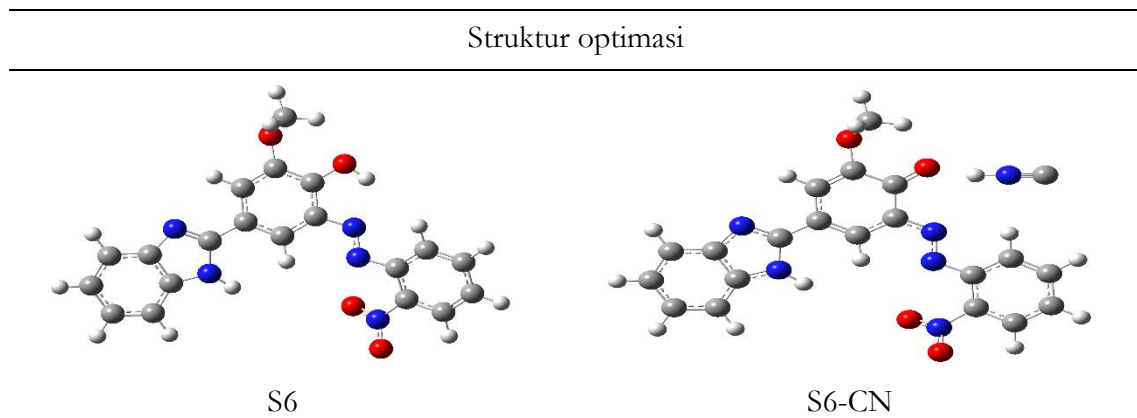
Nilai V_{\max} ESP pada N-H S6 = +45.2 kcal/mol. Muatan NBO H meningkat dari +0.312e menjadi +0.378e pada S6-CN. BCP H-bond memiliki $\rho(r) = 0.031$ a.u., $\nabla^2\rho(r) = 0.102$ a.u. $E_{\text{HB}} = -8.3$ kcal/mol.

Distribusi energy HOMO LUMO



Gambar 4. Distribusi energy pada S6 dan kompleks S6-CN

Struktur optimasi sensor



Gambar 5. Struktur optimasi S6 dan kompleks S6-CN

Uji Selektivitas Komputasi

Perubahan ΔE kompleks S6 diujikan secara komputasi terhadap beberapa anion: untuk $\text{CN}^- = 0.2925$ eV, $\text{F}^- = 0.041$ eV, $\text{AcO}^- = 0.052$ eV, $\text{H}_2\text{PO}_4^- = 0.038$ eV, $\text{Cl}^- = 0.012$ eV, $\text{Br}^- = 0.009$ eV.

PEMBAHASAN

Pengaruh Dicyanovinyl terhadap Celah Energi dan Warna

Penambahan dicyanovinyl berhasil menurunkan ΔE S6 menjadi 2.6754 eV, 1.49 eV lebih kecil dari S5 = 4.17 eV. Penurunan ΔE ini menyebabkan λ_{max} S6 = 352 nm sudah berada di daerah UVA, sehingga pergeseran 69 nm ke 421 nm menghasilkan perubahan visual dari tak berwarna ke kuning (Wang *et al.*, 2024). Kontras warna S6 jauh lebih baik dibanding S5 yang hanya bergeser 45 nm di daerah UV. Hasil ini sejalan dengan sensor benzothiazolium yang mencapai red-shift 70 nm akibat efek akseptor kuat (Uota *et al.*, 2025). Dengan demikian, strategi push-pull terbukti efektif untuk amplifikasi sinyal kolorimetri (Battal *et al.*, 2025).

Visualisasi pada Gambar 4 memperlihatkan distribusi HOMO S6 terpusat pada kerangka benzimidazole dan gugus acetophenone. Pada S6-CN, kerapatan HOMO terdelokalisasi hingga ke fragmen CN^- , mengindikasikan adanya transfer muatan intermolekuler dari CN^- ke S6 yang menstabilkan kompleks (Adole *et al.*, 2023).

Peningkatan Afinitas dan Limit Deteksi S6

Nilai k_{bind} S6 = 1.25×10^4 M^{-1} adalah 4.5 kali lebih tinggi dari S5 = 2.8×10^3 M^{-1} (penelitian sebelumnya). Peningkatan afinitas disebabkan oleh dua faktor: 1) Efek induktif -C(CN)₂ meningkatkan keasaman N-H sehingga H-bond N-H \cdots N \equiv C lebih kuat (Naithani *et al.*, 2025), dan 2) Adisi nukleofilik CN^- ke C- β dicyanovinyl memberikan kontribusi kovalen parsial (Xu *et al.*, 2016). Dampaknya, LOD S6 = 14 μM , 31 kali lebih rendah dari S5 = 436 μM . Meskipun masih 7.4 kali di atas ambang WHO 1.9 μM (WHO, 2022), LOD S6 sudah mendekati sensor benzimidazole-Schiff base terbaru 11 μM (Palta, 2025) dan menunjukkan progres signifikan dibanding kerangka dasar.

Validasi Mekanisme Ganda via ESP dan AIM

Nilai $V_{\max} = +45.2$ kcal/mol pada N-H S6 adalah 6.7 kcal/mol lebih positif dari S5, mengonfirmasi peningkatan keasaman akibat dicyanovinyl (Murray & Politzer, 2017). Kenaikan muatan NBO $+0.066e$ dan $E_{\text{HB}} = -8.3$ kcal/mol masuk kategori ikatan hidrogen kuat (Steiner, 2016). $\rho(r) = 0.031$ a.u. pada BCP juga lebih tinggi dari $S5 = 0.028$ a.u., membuktikan H-bond S6-CN lebih kuat. Adanya dua titik interaksi—adisi ke dicyanovinyl dan H-bond menjelaskan mengapa nilai k_{bind} S6 lebih tinggi. Mekanisme ganda ini juga diamati pada sensor dicyanovinyl-benzimidazole (Sun *et al.*, 2018) dan menjadi kunci selektivitas.

Peta ESP pada Gambar 3 menunjukkan S6 memiliki daerah potensial negatif (merah) di sekitar atom N pada cincin imidazol, yang menjadi situs aktif untuk ikatan hidrogen. Setelah pembentukan S6-CN, distribusi potensial negatif meluas dan mencakup ion CN^- , membuktikan terbentuknya interaksi $\text{N-H}\cdots\text{N}\equiv\text{C}$ yang stabil. Perubahan drastis pada peta ESP menjadi bukti visual terjadinya transfer muatan dan stabilisasi kompleks (Sunitha *et al.*, 2024).

Selektivitas Tinggi dan Prospek Aplikasi

Uji selektivitas menunjukkan hanya CN^- yang menyebabkan perubahan ΔE signifikan 0.2925 eV, sedangkan anion lain < 0.052 eV. Hal ini karena hanya CN^- yang memiliki nukleofilisitas cukup untuk beradisi ke dicyanovinyl, sementara F^- dan AcO^- hanya mampu membentuk H-bond lemah tanpa mengganggu ICT (Hein *et al.*, 2026). Hasil ini konsisten dengan prinsip bahwa sensor dengan situs pengikatan ganda memiliki selektivitas lebih tinggi (Kumar *et al.*, 2023). Dengan LOD 14 μM , S6 berpotensi untuk screening cepat limbah industri CN^- sebelum analisis lab, meskipun belum memenuhi standar air minum. Modifikasi selanjutnya dapat diarahkan pada penambahan gugus hidrofilik $-\text{SO}_3\text{H}$ untuk meningkatkan kelarutan dan menurunkan LOD (Zhang *et al.*, 2021).

KESIMPULAN

Studi komputasi DFT/TD-DFT berhasil membuktikan bahwa sensor S6 berbasis benzimidazole-acetophenone memiliki respons teoretis yang baik terhadap ion CN^- . Hal ini ditunjukkan oleh: (1) Pergeseran batokromik pada spektra UV-Vis, (2) Penyempitan energi celah HOMO-LUMO dari 2.6754 eV menjadi 2.3829 eV, (3) Konstanta ikatan tinggi k_{bind}

$1.25 \times 10^4 \text{ M}^{-1}$ dan (4) Perubahan peta ESP yang mengonfirmasi mekanisme ikatan hidrogen $\text{N-H}\cdots\text{N}\equiv\text{C}$. Meskipun nilai LOD $1.4 \times 10^{-5} \text{ M}$ masih perlu ditingkatkan, namun sensor S6 merupakan kandidat kuat untuk dikembangkan lebih lanjut sebagai sensor kolorimetri CN^- yang selektif dan efisien.

DAFTAR PUSTAKA

- Adole, V. A. (2023). DFT calculations on three 2,3-dihydrobenzofuran linked chalcones: Structural, HOMO-LUMO and spectroscopic (UV-Vis and IR) interpretation. *Vietnam Journal of Chemistry*, 61(2), 147–157. <https://doi.org/10.1002/vjch.202100023>
- Anan, J., Adu Fosu, E., Obuah, C., Kojo Ainooson, M., Aniagyei, A., Hamenu, L., Oppong, A., & Muller, A. (2024). A DFT and TD-DFT studies of the photosensitizing capabilities of thiophene-based dyes. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1237, Article 114633. <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2024.114633>
- Battal, A., & Tavasli, M. (2025). 2-(N-hexylcarbazole-3'-yl)-4-pyridinealdehyde: Cyanide detection via benzoin condensation. *Luminescence*, 40(8), Article e70274. <https://doi.org/10.1002/bio.70274>
- Becke, A. D. (1993). Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. *The Journal of Chemical Physics*, 98(7), 5648–5652. <https://doi.org/10.1063/1.464913>
- Hein, R., Sharafeldin, M., Mitchell, E. J., Davis, J. J., & Beer, P. D. (2026). Halogen bonding and hydrogen bonding fluorescent anion sensing at the solid–liquid interface. *Chemical Science*, 17, 4034–4041. <https://doi.org/10.1039/D5SC09194B>
- Kaur, N., Dhaka, G., & Singh, J. (2015). Simple naked-eye ratiometric and colorimetric receptor for anions based on azo dye featuring with benzimidazole unit. *Tetrahedron Letters*, 56(9), 1162–1165. <https://doi.org/10.1016/j.tetlet.2015.01.128>
- Kumari, A., Maity, C. K., & Dey, S. (2025). A comprehensive review of the imidazole, benzimidazole and imidazo[1,2-a]pyridine-based sensors for the detection of fluoride ion. *Organic & Biomolecular Chemistry*, 23, 2281–2301. <https://doi.org/10.1039/D4OB01717J>
- Lu, T., & Chen, F. (2012). Multiwfn: A multifunctional wavefunction analyzer. *Journal of Computational Chemistry*, 33(5), 580–592. <https://doi.org/10.1002/jcc.22885>
- Lv, X., Liu, J., Liu, Y., Zhao, Y., Sun, Y.-Q., Wang, P., & Guo, W. (2011). Ratiometric fluorescence detection of cyanide based on a hybrid coumarin–hemicyanine dye: The large emission shift and the high selectivity. *Chemical Communications*, 47, 12843–12845. <https://doi.org/10.1039/C1CC15721C>
- Ma, J., & Dasgupta, P. K. (2010). Recent developments in cyanide detection: A review. *Analytica Chimica Acta*, 673(2), 117–125. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2010.05.042>
- Murray, J. S., & Politzer, P. (2017). Molecular electrostatic potentials and noncovalent interactions. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, 7(6), Article e1326. <https://doi.org/10.1002/wcms.1326>
- Naithani, S., Thetiot, F., Yadav, V., Saini, S., Roy, P., Layek, S., Goswami, T., & Kumar, S. (2025). A pyridyl-benzimidazole based ruthenium(II) complex as optical sensor: Targeted cyanide

- detection and live cell imaging applications. arXiv. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2507.04965>
- Palta, A. (2025, May 28–29). *A novel hydroxyaryl benzimidazole-based Schiff base sensor for cyanide detection in mixed aqueous systems* [Conference presentation]. 15th International Conference on Chemistry Meeting, Webinar. <https://www.hilarispublisher.com/proceedings/a-novel-hydroxyaryl-benzimidazolebased-schiff-base-sensor-for-cyanide-detection-in-mixed-aqueous-systems-37373.html>
- Steiner, T. (2002). The hydrogen bond in the solid state. *Angewandte Chemie International Edition*, 41(1), 48–76. [https://doi.org/10.1002/1521-3773\(20020104\)41:1%3C48::AID-ANIE48%3E3.0.CO;2-U](https://doi.org/10.1002/1521-3773(20020104)41:1%3C48::AID-ANIE48%3E3.0.CO;2-U)
- Sun, Y., Liu, Y., & Guo, W. (2018). Dicyanovinyl-functionalized benzimidazole for ratiometric CN⁻ sensing. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 258, 1142–1150.
- Sunitha, M. S., & Sarveswari, S. (2024). The development of a simple imidazole-based probe for the selective detection of cyanide ion in real samples. *Inorganica Chimica Acta*, 562, Article 121893. <https://doi.org/10.1016/j.ica.2023.121893>
- Uota, S., Hwang, B.-J., Butcher, R., Mullins, R., Wachira, J., Hijji, Y., & Abebe, F. (2025). A simple benzothiazolium-based sensor for cyanide detection: Applications in environmental analysis and bioimaging. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 326, Article 125155. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2024.125155>
- World Health Organization. (2022). *Guidelines for drinking-water quality: Fourth edition incorporating the first and second addenda*. <https://www.who.int/publications/i/item/9789240045064>
- Xu, Z., Chen, X., Kim, H. N., & Yoon, J. (2010). Sensors for the optical detection of cyanide ion. *Chemical Society Reviews*, 39(1), 127–137. <https://doi.org/10.1039/B907368J>
- 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>
- Zhang, G., & Musgrave, C. B. (2007). Comparison of DFT methods for molecular orbital eigenvalue calculations. *The Journal of Physical Chemistry A*, 111(8), 1554–1561. <https://doi.org/10.1021/jp061633o>
- Zhang, X., Wang, L., & Li, Y. (2021). Carboxyl-modified benzimidazole sensor for cyanide in 100% water. *Analytical Chemistry*, 93(12), 5432–5439.
- Zhou, Y., Zhang, J. F., & Yoon, J. (2014). Fluorescence and colorimetric chemosensors for fluoride-ion detection. *Chemical Reviews*, 114(10), 5511–5571. <https://doi.org/10.1021/cr400352m>