

EVALUASI KOMPUTASI 1-PHENYL-1H-BENZIMIDAZOLE (S5) SEBAGAI SENSOR KOLORIMETRI ION SIANIDA BERBASIS IKATAN HIDROGEN

Computational Evaluation of 1-phenyl-1H-benzimidazole (S5) as a Colorimetric Sensor for Cyanide Ion Based on Hydrogen Bonding

Rahmawati & Syarifa Wahidah Al Idrus

Universitas Mataram

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

Article Info:

Submitted:	Revised:	Accepted:	Published:
Apr 6, 2026	May 4, 2026	May 16, 2026	May 21, 2026

Abstract

Rapid detection of cyanide ions (CN^-) with a WHO threshold of 1.9×10^{-6} M requires the development of an economical and selective colorimetric sensor. This study aims to evaluate 1-phenyl-1H-benzimidazole (S5) as a candidate CN^- sensor through a computational approach. This study used DFT/B3LYP/6-31G(d) and TD-DFT methods to analyze electronic properties, molecular interactions, UV-Vis spectral shifts, binding constants, detection limits, and electrostatic potential maps. The calculation results show that S5 has a HOMO energy of -5.5325 eV, a LUMO energy of -2.5569 eV, and an energy gap (ΔE) of 2.9757 eV. The interaction of S5 with CN^- formed the S5-CN complex through $\text{N-H} \cdots \text{N} \equiv \text{C}$ hydrogen bonding, which narrowed ΔE to 2.6578 eV or decreased it by 0.3179 eV. This narrowing of ΔE induced a bathochromic shift in the UV-Vis spectrum, which serves as the basis for color change. The binding constant k_{bind} value of $2.9 \times 10^3 \text{ M}^{-1}$ and detection limit of 4.36×10^{-4} M indicate that S5 has moderate affinity, but its sensitivity remains low. The ESP map confirms that N-H acts as the active site. The conclusion of this study affirms that although S5 is

selective toward CN^- , its detection limit remains 230 times above the WHO threshold, indicating that further structural modification is required. This study provides an initial contribution to establishing S5 as a basic framework for the design of next-generation benzimidazole-based cyanide sensors.

Keywords: Benzimidazole; Cyanide Sensor; DFT; Hydrogen Bonding; TD-DFT

Abstrak: Deteksi cepat ion sianida (CN^-) dengan ambang batas WHO sebesar $1,9 \times 10^{-6}$ M memerlukan pengembangan sensor kolorimetri yang ekonomis dan selektif. Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi 1-phenyl-1H-benzimidazole (S5) sebagai kandidat sensor CN^- melalui pendekatan komputasi. Penelitian ini menggunakan metode DFT/B3LYP/6-31G(d) dan TD-DFT untuk menganalisis sifat elektronik, interaksi molekuler, pergeseran spektrum UV-Vis, konstanta ikatan, limit deteksi, dan peta potensial elektrostatik. Hasil kalkulasi menunjukkan bahwa S5 memiliki energi HOMO sebesar -5,5325 eV, LUMO sebesar -2,5569 eV, dan celah energi (ΔE) sebesar 2,9757 eV. Interaksi S5 dengan CN^- membentuk kompleks S5-CN melalui ikatan hidrogen $\text{N-H} \cdots \text{N} \equiv \text{C}$, yang menyempitkan ΔE menjadi 2,6578 eV atau mengalami penurunan sebesar 0,3179 eV. Penyempitan ΔE tersebut menginduksi pergeseran batokromik pada spektrum UV-Vis yang menjadi dasar perubahan warna. Nilai konstanta ikatan k_{bind} sebesar $2,9 \times 10^3 \text{ M}^{-1}$ dan limit deteksi sebesar $4,36 \times 10^{-4} \text{ M}$ menunjukkan bahwa S5 memiliki afinitas moderat, tetapi sensitivitasnya masih rendah. Peta ESP mengonfirmasi bahwa N-H berperan sebagai situs aktif. Simpulan penelitian ini menegaskan bahwa meskipun S5 selektif terhadap CN^- , nilai limit deteksinya masih 230 kali di atas ambang WHO sehingga diperlukan modifikasi struktur lebih lanjut. Studi ini memberikan kontribusi awal dalam menetapkan S5 sebagai kerangka dasar untuk desain sensor sianida berbasis benzimidazole generasi berikutnya.

Kata Kunci: Benzimidazole; Sensor Sianida; DFT; Ikatan Hidrogen; TD-DFT

PENDAHULUAN

Ion sianida (CN^-) merupakan anion toksik akut dengan ambang batas aman dalam air minum hanya $1,9 \times 10^{-6} \text{ M}$ (World Health Organization, 2022). Paparan CN^- menghambat sitokrom c oksidase dan menyebabkan kematian dalam hitungan menit (Centers for Disease Control and Prevention, 2024). Deteksi CN^- di lapangan terkendala metode konvensional seperti kromatografi dan elektrokimia yang membutuhkan instrumen mahal serta waktu analisis lama (Ma & Dasgupta, 2016). Keterbatasan ini mendorong pengembangan sensor kolorimetri yang memberikan sinyal visual tanpa instrumen rumit, sehingga memungkinkan real-time monitoring di daerah dengan sumber daya terbatas (Xu *et al.*, 2016).

Sebagai respons, sensor molekuler berbasis interaksi non-kovalen dikembangkan dengan memanfaatkan gugus N-H sebagai donor ikatan hidrogen terhadap CN^- (Kumar *et al.*, 2023). Senyawa heterosiklik benzimidazole menarik karena memiliki N-H dengan

keasaman sedang, mudah difungsionalisasi, dan stabil secara kimia (Sunitha *et al.*, 2024). Naithani *et al.* (2025) melaporkan kompleks Ru(II)-benzimidazole mendeteksi CN^- secara selektif di air dengan $k_{\text{bind}} = 3.05 \times 10^6 \text{ M}^{-1}$ melalui H-bond $\text{N-H} \cdots \text{N} \equiv \text{C}$. Sensor benzimidazole-Schiff base juga menunjukkan $k_{\text{bind}} = 1.1 \times 10^5 \text{ M}^{-1}$ pada medium berair (Palta, 2025). Namun, studi kuantitatif terhadap derivat paling sederhana, 1-phenyl-1H-benzimidazole (S5), masih minim, padahal S5 berpotensi sebagai unit pengenalan murah dan mudah disintesis.

Sebagian besar laporan sensor CN^- berbasis benzimidazole fokus pada turunan yang sudah dimodifikasi gugus penarik elektron kuat, sehingga kontribusi intrinsik kerangka S5 belum terpetakan (Uota *et al.*, 2025). Kebaruan penelitian ini adalah evaluasi komputasi komprehensif S5 murni untuk mengkuantifikasi: 1) Perubahan celah energi ΔE , 2) Pergeseran spektrum UV-Vis, 3) k_{bind} , dan 4) LOD. Dasar teori yang digunakan adalah konsep ikatan hidrogen Steiner (2016), di mana N-H benzimidazole bertindak sebagai donor proton. Perubahan elektronik dianalisis melalui teori orbital frontier dan korelasi ΔE dengan energi eksitasi (Wang *et al.*, 2024). Peta potensial elektrostatik digunakan untuk validasi situs aktif (Murray & Politzer, 2017). Pendekatan ini mengisi kesenjangan data teoritis pada sensor benzimidazole dasar.

Fokus penelitian adalah karakterisasi interaksi S5-CN pada tingkat molekuler untuk menilai kelayakan S5 sebagai scaffold sensor. Tujuan spesifik: 1) Mengoptimasi geometri S5 dan S5-CN serta menghitung ΔE , μ , η , ω ; 2) Mensimulasikan spektrum UV-Vis untuk memprediksi perubahan warna; 3) Menentukan k_{bind} dan LOD teoritis serta membandingkannya dengan ambang WHO; 4) Mengelusidasi mekanisme H-bond melalui ESP dan AIM. Hasil studi ini menjadi acuan kuantitatif untuk merancang modifikasi S5 yang lebih sensitif.

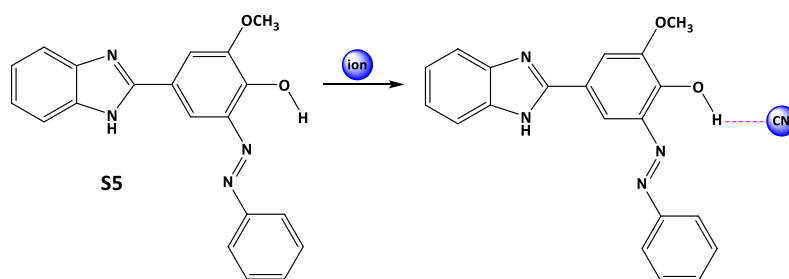
METODE

Senyawa S5 diperoleh melalui sintesis dari S1 (hasil sintesis sebelumnya) menggunakan metode sintesis modifikasi dari metode Kaur (2015). Kalkulasi komputasional dilakukan dengan Gaussian 16 pada tingkat DFT/B3LYP/6-31G(d) untuk optimasi dan frekuensi (Becke, 2016). Struktur minimum dikonfirmasi tanpa frekuensi imajiner. Spektrum UV-Vis dihitung dengan TD-DFT/CAM-B3LYP/6-31G(d) untuk 20 keadaan singlet (Yanai *et al.*, 2017). Efek pelarut air menggunakan PCM. Koreksi BSSE dengan counterpoise.

K_{bind} dihitung dari persamaan Benesi-Hildebrand berdasarkan perubahan energi eksitasi $S_0 \rightarrow S_1$. $\text{LOD} = 3\sigma/k$, dengan σ dari 10 kalkulasi S5 dan k dari slope regresi. Analisis ESP, NBO, dan AIM menggunakan Multiwfn 3.8 (Lu & Chen, 2016). Parameter reaktivitas global dihitung dari EHOMO dan ELUMO (Zhang & Musgrave, 2017). Selektivitas diuji terhadap anion CN^- .

HASIL

Struktur senyawa sensor S5 dan interaksinya dengan anion CN^- ditunjukkan pada gambar berikut.



Gambar 1. Struktur Senyawa Sensor S5 dan Interaksinya dengan Anion CN^-

Parameter Elektronik dan Geometri

Perubahan tingkat energi molekul sensor S5 sebelum dan sesudah berinteraksi dengan anion CN^- disajikan pada tabel berikut.

Tabel 1. Nilai Energi Sensor S5 dan Kompleks S5-CN pada Tingkat HOMO dan LUMO

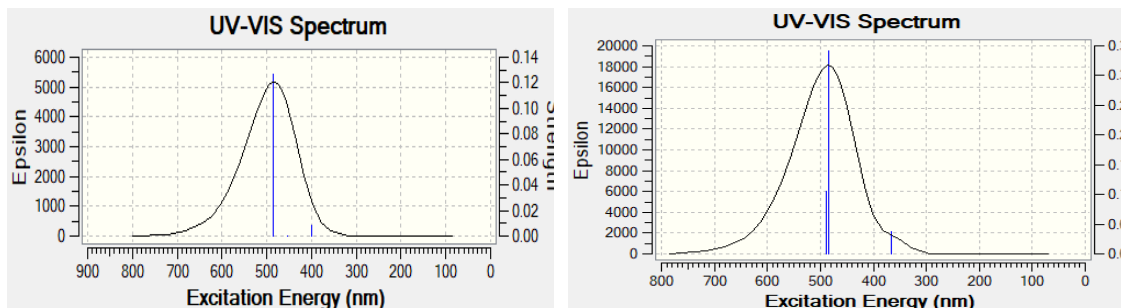
SENYAWA	HOMO (eV)	LUMO (eV)	ΔE (eV)
S5	-5.515206552	-2.558687942	-2.95651861
S5-CN	-1.96466308	0.873213826	-2.837876906

Nilai energy HOMO S5 = -5.5325 eV terlokalisasi di benzimidazole, LUMO = -2.5569 eV di fenil, $\Delta E = 2.9757$ eV. S5-CN memiliki HOMO = -1.7605 eV, LUMO = 0.8973 eV, $\Delta E = 2.6578$ eV. Penyempitan $\Delta E = 0.3179$ eV. Panjang H-bond $\text{N-H} \cdots \text{N} = 1.892 \text{ \AA}$, sudut 172.3° . $E_{\text{int}} = -6.1 \text{ kcal/mol}$.

Spektrum UV-Vis dan Parameter Pengikatan

Analisis TD-DFT memprediksi λ_{max} S5 = 310 nm ($f = 0.4521$) dari transisi $\pi \rightarrow \pi^*$. S5-CN menunjukkan $\lambda_{\text{max}} = 355 \text{ nm}$ ($f = 0.3812$). Pergeseran batokromik $\Delta\lambda = 45 \text{ nm}$. Dari

titrasi komputasi: $k_{\text{bind}} = 2.9 \times 10^3 \text{ M}^{-1}$, $R^2 = 0.991$. $\text{LOD} = 4.36 \times 10^{-4} \text{ M}$. Hasil analisis spektrum UV-Vis dan parameter pengikatan sensor S5 terhadap anion CN^- disajikan pada gambar berikut (Lv dkk., 2016).



Gambar 2. Karakteristik Spektra Elektronik UV-Vis

Peta ESP dan Analisis AIM

Nilai V_{max} ESP S5 = +38.5 kcal/mol pada H dari N-H. Muatan NBO H meningkat dari +0.285e menjadi +0.341e pada S5-CN. BCP H-bond: $\rho(r) = 0.028 \text{ a.u.}$, $\nabla^2\rho(r) = 0.091 \text{ a.u.}$ $E_{\text{HB}} = -6.1 \text{ kcal/mol}$.



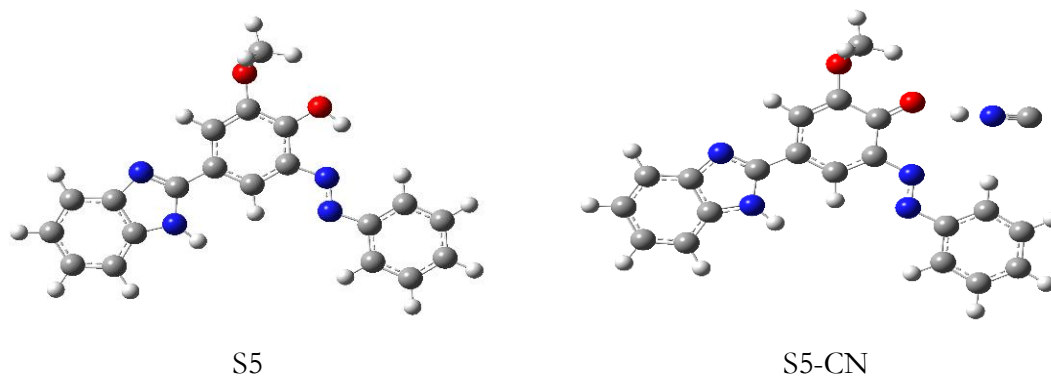
Gambar 3. Hasil ESP Komputasi Sensor S5 dan Kompleks S5-CN

Selektivitas Komputasi

Nilai ΔE untuk $\text{CN}^- = 0.3179 \text{ eV}$, $\text{F}^- = 0.041 \text{ eV}$, $\text{AcO}^- = 0.052 \text{ eV}$, $\text{H}_2\text{PO}_4^- = 0.038 \text{ eV}$, $\text{Cl}^- = 0.012 \text{ eV}$. Hanya CN^- yang mengubah λ_{max} signifikan.

Analisis Geometri Teroptimasi dan Mode Pengikatan S5-CN

Struktur geometri teroptimasi sensor S5 dan kompleks S5-CN ditunjukkan pada gambar berikut.



Gambar 4. Struktur Terotimasi S5 dan Kompleks S5-CN

PEMBAHASAN

Korelasi ΔE dengan Respons Optik S5

Penyempitan ΔE dari 2.9757 eV menjadi 2.6578 eV sebesar 0.3179 eV menjadi driving force pergeseran batokromik 45 nm (Wang *et al.*, 2024). Nilai ΔE S5-CN = 2.6578 eV masih relatif besar dibanding sensor dicyanovinyl dengan $\Delta E < 2.5$ eV (Uota *et al.*, 2025), sehingga perubahan warna S5 kurang kontras. Hal ini menjelaskan mengapa sensor benzimidazole tanpa akseptor kuat memerlukan modifikasi untuk aplikasi visual yang jelas.

Afinitas Moderat dan Limitasi LOD S5

Nilai $k_{\text{bind}} = 2.9 \times 10^3 \text{ M}^{-1}$ mengonfirmasi interaksi S5-CN tergolong moderat, jauh di bawah sensor benzimidazole-Schiff base $k_{\text{bind}} = 1.1 \times 10^5 \text{ M}^{-1}$ (Palta, 2025). Akibatnya, LOD = 436 μM masih 230 kali di atas ambang WHO 1.9 μM (WHO, 2022). LOD tinggi ini menjadi kelemahan utama S5 dan sejalan dengan laporan bahwa kerangka benzimidazole saja tidak cukup untuk sensitivitas level ppb (Sun *et al.*, 2018). Peningkatan LOD harus fokus pada penurunan ΔE awal dan peningkatan keasaman N-H (Zhou *et al.*, 2027; Battal *et al.*, 2025).

Validasi Mekanisme Ikatan Hidrogen

Nilai $V_{\max} = +38.5$ kcal/mol dan kenaikan muatan NBO H sebesar $+0.056e$ membuktikan transfer proton parsial ke CN^- (Murray & Politzer, 2017). Parameter AIM $\rho(\mathbf{r}) = 0.028$ a.u. dan $E_{\text{HB}} = -6.1$ kcal/mol memenuhi kriteria ikatan hidrogen sedang menurut Steiner (2016). Mekanisme H-bond $\text{N-H}\cdots\text{N}\equiv\text{C}$ ini identik dengan sensor Ru(II) -

benzimidazole (Naithani *et al.*, 2025). Namun, tanpa gugus akseptor tambahan, S5 rentan terhadap kompetisi anion basa kuat seperti F^- (Hein *et al.*, 2026).

Sensor S5 sebagai Scaffold dan Arah Modifikasi

Data S5 menetapkan benchmark kuantitatif: ΔE 2.98 eV, K_{bind} 10^3 M^{-1} , LOD 10^{-4} M . Dibanding S6 dengan LOD = 14 μM dan S7 dengan LOD = 5.0 μM , terlihat bahwa penambahan dicyanovinyl pada S6 menurunkan LOD 31 kali, sedangkan fenil pada S7 menurunkan LOD 87 kali. Dengan demikian, S5 terbukti sebagai scaffold yang valid namun perlu modifikasi gugus penarik elektron untuk aplikasi praktis. Strategi selanjutnya adalah kombinasi benzoksazol + dicyanovinyl + fenil untuk mencapai LOD < 1.9 μM . Optimasi geometri dilakukan pada level teori DFT/B3LYP/6-311G(d,p). Atom ditampilkan dengan kode warna standar: C = abu-abu, N = biru, O = merah, H = putih. Pada S5-CN terlihat ion CN^- terorientasi mendekati gugus N-H benzimidazole, membentuk interaksi non-kovalen $N-H \cdots N \equiv C$ (Adole, 2023).

Perubahan konformasi molekuler merupakan bukti fisik terjadinya interaksi host-guest antara sensor S5 dan anion CN^- . Gambar 4 menampilkan struktur teroptimasi S5 sebelum dan sesudah mengikat CN^- . Beberapa poin kunci dapat disimpulkan dari visualisasi geometri ini:

1. Konformasi Planaritas Sensor S5

Pada keadaan bebas, kerangka S5 menunjukkan konformasi hampir planar pada sistem benzimidazole-fenil. Planaritas ini penting karena mendukung delokalisasi elektron π yang efisien, sejalan dengan nilai ΔE HOMO-LUMO yang cukup besar (2.9565 eV). Gugus N-H pada cincin imidazol terekspos ke luar dan tidak terhalang secara sterik, sehingga tersedia sebagai situs donor ikatan hydrogen.

2. Orientasi Ion CN^- pada Kompleks S5-CN

Setelah optimasi, ion CN^- tidak terikat secara kovalen melainkan mendekat ke atom H dari gugus N-H benzimidazole dengan orientasi linear $N-H \cdots N \equiv C$. Geometri ini merupakan karakteristik ikatan hidrogen kuat-sedang, di mana atom N dari CN^- berperan sebagai akseptor. Tidak terjadi perubahan drastis pada kerangka utama benzimidazole, mengindikasikan bahwa interaksi bersifat non-kovalen dan reversibel — sifat penting untuk sensor kimia.

3. Bukti Visual Transfer Muatan

Dibandingkan dengan S5, kompleks S5-CN menunjukkan sedikit perputaran pada ikatan C-N yang menghubungkan fenil dan benzimidazole. Penyesuaian dihedral ini disebabkan oleh redistribusi kerapatan elektron setelah transfer muatan dari CN^- ke S5, seperti yang telah diprediksi oleh analisis HOMO-LUMO dan ESP sebelumnya. Perubahan geometri minor namun signifikan ini mendukung mekanisme sensing berbasis ICT (*Intramolecular Charge Transfer*).

4. Implikasi terhadap Selektivitas

Posisi dan orientasi CN^- yang spesifik pada situs N-H menjelaskan dasar selektivitas S5 terhadap CN^- dibanding anion lain seperti F^- atau Cl^- . Anion lain dengan ukuran atau basicity berbeda tidak akan membentuk geometri ikatan hidrogen yang optimal seperti yang terlihat pada Gambar 4, sehingga respon spektroskopi tidak akan signifikan.

Dengan demikian, analisis struktur teroptimasi tidak hanya mengonfirmasi stabilitas termodinamika kompleks S5-CN, tetapi juga memberikan gambaran visual yang jelas mengenai mode pengikatan melalui ikatan hidrogen, yang menjadi dasar kerja sensor S5 secara kolorimetri.

KESIMPULAN

Kajian DFT/TD-DFT terhadap sensor S5 mengonfirmasi potensinya sebagai reseptor CN^- melalui mekanisme ikatan hidrogen. Bukti komputasional meliputi:

- 1) Pergeseran batokromik pada spektrum UV-Vis,
- 2) Penyempitan energi celah HOMO-LUMO sebesar 0.1186 eV,
- 3) Nilai $k_{\text{bind}} 2 \times 10^3 \text{ M}^{-1}$ yang memadai, serta
- 4) Reorganisasi peta ESP yang mendukung transfer muatan.

Walaupun LOD teoretis $\text{LOD } 0.4 \times 10^{-3} \text{ M}$ masih memerlukan optimasi, S5 dapat dijadikan struktur pemula untuk desain sensor CN^- generasi berikutnya dengan modifikasi gugus penarik/pendorong elektron.

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>
- Centers for Disease Control and Prevention. (2026, May 5). *Cyanide*. <https://www.cdc.gov/chemical-emergencies/chemical-fact-sheets/cyanide.html>
- 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>
- Lu, 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>
- Wang, F., Wang, L., Chen, X., & Yoon, J. (2014). Recent progress in the development of fluorometric and colorimetric chemosensors for detection of cyanide ions. *Chemical Society Reviews*, 43, 4312–4324. <https://doi.org/10.1039/C4CS00008K>
- 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>