



جذب سافرانال روی نانوقفسه $B_{12}N_{12}$ به کمک نظریه تابعیت چگالی

صغری یداللهی

گروه مهندسی منابع طبیعی، واحد آزادشهر، دانشگاه آزاد اسلامی، آزادشهر، ایران

تاریخ ثبت اولیه: ۱۴۰۲/۰۹/۰۶، تاریخ دریافت نسخه اصلاح شده: ۱۴۰۲/۱۱/۲۴، تاریخ پذیرش قطعی: ۱۴۰۲/۱۲/۱۱

چکیده

جذب مولکول سافرانال روی سطح نانوقفسه بورنیتريد ($B_{12}N_{12}$) با کمک نظریه تابعیت چگالی (DFT) و با استفاده از روش های M06-2X و B97D با مجموعه پایه 6-311G** توسط نرم افزار گوسین ۰۹ در دو فاز گازی و حلال اتانول مورد مطالعه قرار گرفت. در ابتدا به منظور یافتن پایدارترین حالت، جهت گیری های مختلف مولکول سافرانال روی سطح نانوقفسه بورنیتريد مورد بررسی قرار گرفت. محاسبات نشان داد که جذب مولکول سافرانال از طریق گروه کربونیل روی اتم B نانوقفسه، پایدارترین حالت بوده و مقادیر انرژی جذب آن کمپلکس با استفاده از روش های M06-2X و B97D به ترتیب در فاز گازی برابر ۲۶/۹۸۱- و ۲۶/۷۵۰- و در فاز اتانول برابر ۳۰/۹۰۱- و ۳۰/۶۷۰- کیلوکالری برمول بدست آمده است. مقادیر انرژی جذب در هر دو فاز نشان داد که سافرانال روی سطح $B_{12}N_{12}$ جذب شیمیایی شده است. سپس مقادیر شکاف انرژی، ممان دوقطبی، ساختار هندسی مولکول سافرانال، $B_{12}N_{12}$ و کمپلکس سافرانال/ $B_{12}N_{12}$ در هر دو فاز محاسبه شده است. نتایج محاسبات نشان داد که کمپلکس سافرانال- $B_{12}N_{12}$ می تواند به عنوان یک ترکیب جدید بالقوه در سنتز مورد استفاده قرار گیرد.

واژه های کلیدی: نانوقفسه بورنیتريد، سافرانال، جذب، DFT

۱. مقدمه

زعفران گیاهی با نام علمی *Crocus sativus*، از راسته مارچوبه سانان و تیره ی زنبقیان می باشد. به خاطر رنگ زرد و قیمت بالایی که دارد به ادویه طلایی معروف شده است. بیش از ۴ هزار سال است که از زعفران برای خوش بو و خوش طعم کردن غذاها استفاده می شود. امروزه بیش از ۹۰ درصد زعفران دنیا در ایران تولید می شود [۱]. طعم منحصر به فرد، عطر و رنگ قرمز متمایل به زرد زعفران به وجود سه ترکیب فعال زیستی اولیه نسبت داده می شود: پیکروکروسین، سافرانال و کروسین ها. پیکروکروسین مسئول طعم است، در حالی که سافرانال به عطر متمایز آن کمک می کند. از طرف دیگر کروسین ها رنگ مشخصی به زعفران می دهند [۲].

*عهده دار مکاتبات: صغری یداللهی

نشانی: گروه مهندسی منابع طبیعی، واحد آزادشهر، دانشگاه آزاد اسلامی، آزادشهر، ایران

پست الکترونیک: E-mail: s.yadollahi1353@gmail.com

تلفن: ۰۲۳۳۲۳۹۴۲۸۹

سافرانال که از نظر علمی به آن ۲،۶،۶-تری متیل-۱،۳-سیکلو هگزادین-۱-کربوکسالدئید می‌گویند، ترکیب فرار غالب موجود در زعفران است و تقریباً ۶۰ درصد از کل ترکیبات فرار موجود در این ادویه گرانها را تشکیل می‌دهد. این ترکیب ارگانیک با فرمول شیمیایی $C_{10}H_{14}O$ مسئول رایحه منحصر به فرد و جذابی است که زعفران را به یک ماده محبوب در غذاها و عطرها مختلف تبدیل می‌کند [۳]. تحقیقات در مورد خواص بیولوژیکی و دارویی مونومرهای زعفران عمدتاً حول ترکیبات کاروتنوئیدی کروسین و کروسیتین متمرکز شده است. با این حال اطلاعات جامعی در مورد تفصیل سافرانال وجود ندارد و باید به آن پرداخته شود [۴]. قابل ذکر است که زعفران اثرات امیدوارکننده‌ای بر سیستم عصبی مرکزی و سیستم عصبی محیطی از جمله بهبود حافظه، یادگیری و کاربردهای درمانی بالقوه برای بیماری‌هایی مانند آلزایمر و پارکینسون، افسردگی و اضطراب نشان داده است، تأثیرات مثبتی بر سلامت قلب و عروق و عملکرد کبد نشان داده و به دلیل خواص ضد سرطانی بالقوه آن مورد بررسی قرار گرفته است [۵]. از سوی دیگر، در دهه‌های اخیر، پیشرفت‌های چشمگیری در توسعه و پذیرش نانومواد به‌عنوان دارورسان‌ها صورت گرفته است. کربن، بور نیتريد (BN) و آلومینیوم نیتريد (AlN) به‌عنوان پایه‌ای برای نانومواد با ابعاد کم عمل می‌کنند و توجه خاصی را به خود جلب کرده اند [۶-۱۱]. علاوه بر این، داشتن یک درک جامع از نحوه تعامل نانومواد با مولکول‌های دارو قبل از استفاده از آنها در برنامه‌های کاربردی ضروری است. مطالعه روی سافرانال به‌عنوان یکی از مواد اصلی تشکیل دهنده زعفران و اثر جذب آن روی سطح نانو مواد بسیار مهم می‌باشد. با این وجود، در حال حاضر مشخص نیست که سافرانال هنگام جذب روی نانوقفسه‌های BN چگونه رفتار می‌کند. بنابراین، بررسی جذب سافرانال بر روی سطوح نانوقفسه $B_{12}N_{12}$ با استفاده از روش‌های DFT ضروری و جذب سافرانال روی سطح فولرن و مطالعه تاثیر آن روی ساختار $B_{12}N_{12}$ مورد بررسی و با استفاده از روش‌های محاسباتی، تعاملات بین سافرانال با نانوقفسه $B_{12}N_{12}$ به منظور ساخت ترکیبات جدید مورد ارزیابی قرار گرفت.

۲. روش‌های محاسباتی

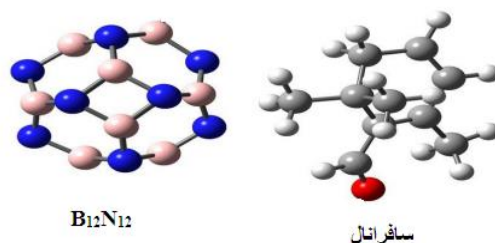
در سال‌های اخیر بررسی و مطالعه بر روی نانولوله‌ها و فولرن‌ها به‌طور گسترده‌ای مورد بررسی قرار گرفته‌اند [۱۲-۱۳]. در این تحقیق با استفاده از روش‌های کامپیوتری، برهمکنش مولکول سافرانال با سطح فولرن بورنیتريد مورد بررسی قرار گرفت. ساختار فولرن $B_{12}N_{12}$ و سافرانال (شکل ۱) را با کمک نرم‌افزار Gauss View ترسیم و سپس با نرم‌افزار Gaussian ۰۹ [۱۴] و با استفاده از روش‌های M06-2X [۱۵] و B97D [۱۶-۱۷] و سری پایه 6-311G** بهینه شده تا طول و زوایای آن به مقدار واقعی نزدیک و سپس انرژی هر یک از آن ساختارها محاسبه شد. پس از بهینه کردن کامل ساختارها، پارامترهای طول پیوند، انرژی‌های جذب، HOMO، LUMO، DOS و انرژی Gap آن ساختارها محاسبه و سپس با مقایسه این نتایج در هر موقعیت، تغییر خصوصیات آن مورد بررسی قرار گرفت. برای بدست آوردن انرژی جذبی از روش زیر استفاده گردید:

$$E(\text{adsorbition}) = E(\text{nano materials /safranal}) - [E(\text{nano materials}) + E(\text{safranal})] + \delta BSSE$$

در این روش خطای توابع پایه نیز در نظر گرفته می‌شود.

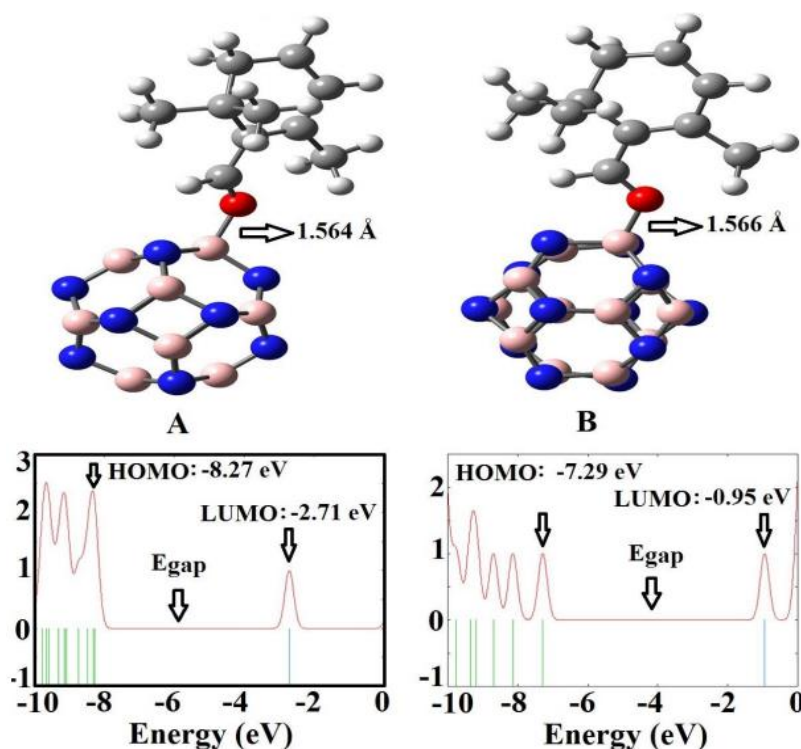
۳. نتایج و بحث

در شکل (۱) ساختار بهینه سافرانال و $B_{12}N_{12}$ نشان داده شده است.



شکل ۱. ساختار بهینه شده سافرانال و $B_{12}N_{12}$

پس از بهینه شدن هر یک از ساختارها، جذب سطحی مولکول سافرانال روی نانو قفسه بورنیتريد با استفاده از روش های M06-2X و B97D مورد بررسی قرار گرفت. به منظور یافتن پایدارترین ساختار مولکول سافرانال با نانو قفسه بورنیتريد، پیکربندی های مختلفی به عنوان حالت های اولیه، مدل سازی شده و تحت بهینه سازی ساختاری کامل قرار گرفت (شکل ۲). پیکربندی های اولیه شامل حالت های مختلفی از جای گیری مولکول سافرانال بر روی اتم بور موجود در سطح نانو قفسه از طریق گروه کربونیل (C=O) است.



شکل ۲. جذب سافرانال روی $B_{12}N_{12}$ و طیف DOS آن با استفاده از روش M06-2X (A) و روش B97D (B)

پس از بهینه سازی کامل، نتایج محاسبات با روش M06-2X در فازهای گاز و اتانول در جدول (۱) و با روش B97D در فاز حلال در جدول (۲) درج شده است.

جدول ۱. مقادیر ساختار هندسی، انرژی جذب، انرژی هومو و لومو، شکاف انرژی و تغییرات آن، ممان دوقطبی و فاصله تعادلی بین مولکول سافرانال و نانوقفسه

بور نیتريد، در سطح محاسباتی M06-2X

Property	Gas				Solvent			
	SF	B ₁₂ N ₁₂	A	B	SF	B ₁₂ N ₁₂	A	B
C-O/Å	1.226	-	1.249	1.250	1.216	-	1.265	1.264
C-H/Å	1.109	-	1.093	1.092	1.104	-	1.090	1.091
B-N/Å	-	1.483	1.568	1.567	-	1.483	1.576	1.574
B-N-B/°	-	98.580	83.600	82.870	-	80.100	83.590	83.710
N-B-N/°	-	80.030	92.440	92.490	-	98.560	91.500	91.510
Diameter/Å	-	3.920	4.160	4.160	-	3.920	4.190	4.190
D/Å	-	-	1.564	1.566	-	-	1.526	1.526
E _b /Kcal/mol	-	-	-26.981	-26.750	-	-	-30.901	-30.670
DM/Debye	3.260	0.000	12.750	12.740	4.320	0.000	16.710	16.700
EH/eV	-7.750	-9.490	-8.270	-7.290	-7.570	-9.440	-8.250	-8.250
EL/eV	-1.020	-0.010	-2.710	-0.950	-1.110	0.070	-2.400	-2.400
E _{gap} /eV	6.550	9.450	5.560	6.340	6.460	9.510	5.850	5.850
ΔE _{gap} (%)	-	-	32.910	41.160	-	-	38.490	38.490

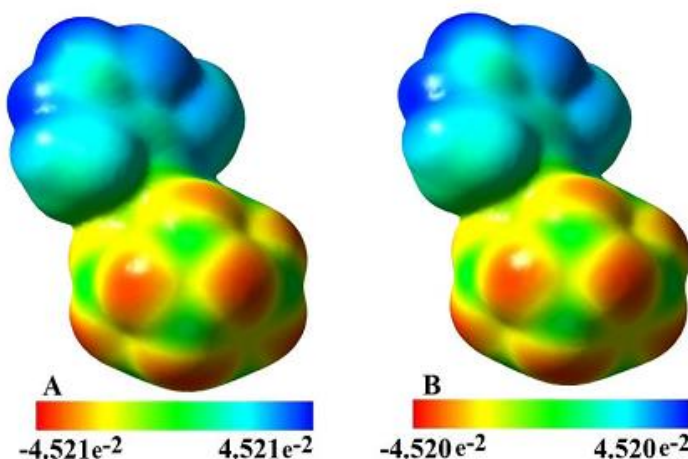
جدول ۲. انرژی جذب، ممان دوقطبی و فاصله تعادلی بین مولکول سافرانال و نانو قفسه بور نیتريد در سطح محاسباتی B97D

Property	Solvent			
	SF	B ₁₂ N ₁₂	A	B
C-O/Å	1.234	-	1.284	1.283
C-H/Å	1.113	-	1.093	1.092
B-N/Å	-	1.494	1.592	1.590
B-N-B/°	-	80.41	84.160	83.140
N-B-N/°	-	98.25	90.800	90.820
Diameter/Å	-	3.95	3.930	3.930
D/ Å	-	-	1.540	1.542
E _b /Kcal/mol	-	-	-29.979	-29.517
DM/Debye	4.830	0.000	17.900	17.810

نتایج جدول بالا نشان می‌دهد که کمپلکس A دارای بیشترین انرژی جذب بوده و به عنوان پایدارترین حالت به لحاظ انرژی انتخاب می‌شود. در این کمپلکس بین اتم اکسیژن در سافرانال با اتم بور موجود در قفسه بورنیتريد، پیوند کووالانسی برقرار شده است. انرژی جذب در این ساختار در حدود ۲۶/۹۸۱- کیلوکالری بر مول می‌باشد، در حالیکه مقدار انرژی جذب در کمپلکس B در حدود ۲۶/۷۵۰- کیلوکالری بر مول است. فاصله تعادلی بین اتم اکسیژن از مولکول سافرانال و اتم بور از نانو قفسه در کمپلکس‌های

A و B در حدود ۱/۵۶۴ و ۱/۵۶۶ آنگستروم می‌باشد. مقادیر منفی و بالای انرژی برای هر دو کمپلکس جذب در جدول (۱) نشان می‌دهند که فرآیند جذب مولکول سافرانال بر روی سطح خارجی نانو قفسه بورنیتريد از نوع شیمیایی بوده و از لحاظ تجربی امکان پذیر است. در فاز حلال انرژی جذب کمپلکس بورنیتريد- سافرانال در کمپلکس A و B توسط روش M06-2X در حدود ۳۰/۹۰۱- و ۳۰/۶۷۰- کیلوکالری بر مول محاسبه شده است، که نشان دهنده برهمکنش قوی مولکول سافرانال با نانو قفسه بورنیتريد در محیط اتانول می‌باشد. نتایج روش B97D در جدول (۲) نیز موارد بالا را تایید می‌کند. برای بررسی بیشتر در شکل (۲) طول پیوند C=O در ساختار سافرانال بعد از فرایند جذب بر روی بور از ۱/۲۴۹ به ۱/۲۵۰ آنگستروم افزایش داشته است. همچنین طول پیوند C-H متصل به گروه کربونیل در ساختار سافرانال، بعد از جذب دارو بر روی اتم بور از ۱/۰۹۳ به ۱/۰۹۲ آنگستروم کاهش یافته است. برای بررسی میزان قدرت جذب میان دو گونه، آنالیز بار مولیکن بعد از فرآیند جذب انجام شد و نتایج نشان داد که مقدار ۰/۴۵۹ الکترون از سافرانال به سطح نانو قفسه بورنیتريد منتقل شده است. جهت اطمینان بیشتر آنالیز انتقال بار اوربیتال پیوند طبیعی (NBO) که دارای دقت بیشتری است نیز محاسبه شد که این میزان برابر با ۰/۲۷۰ الکترون ولت است. همه موارد بالا، جذب قوی سافرانال روی نانو قفسه $B_{12}N_{12}$ را نشان می‌دهد.

در ادامه، تغییرات سطوح انرژی اوربیتال‌های HOMO (بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده) و LUMO (پایین‌ترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده) در برهمکنش بین نانو قفسه بور نیتريد و مولکول سافرانال محاسبه شد. اختلاف انرژی بین هومو و لومو (شکاف انرژی) برای مولکول سافرانال در حدود ۷/۷۵- و ۱/۰۲- الکترون ولت در فاز گازی و مقدار ۷/۵۷- و ۱/۱۱- الکترون ولت در فاز اتانول محاسبه شده است. شکاف انرژی برای نانو قفسه بور نیتريد در حدود ۹/۴۵ الکترون ولت در فاز گازی و ۹/۵۱ الکترون ولت در فاز اتانول محاسبه شده است (جدول ۲). بعد از فرایند جذب مولکول سافرانال در فاز گازی و اتانول، همانطور که طیف DOS آنها در شکل (۱) نشان داده است، شکاف انرژی در کمپلکس‌های A و B با تغییرات قابل توجهی همراه بوده است. از این رو نتایج حاصل نیز نشان دهنده جذب قوی مولکول سافرانال روی نانو قفسه $B_{12}N_{12}$ می‌باشد.



شکل ۳. تصویر پتانسیل الکترواستاتیک مولکولی برای سیستم سافرانال / نانو قفسه بورنیتريد

آنالیز سطح پتانسیل الکترواستاتیک مولکولی (MEP) نیز محاسبه شد که تصویر آن در شکل (۳) قابل مشاهده است. مناطق منفی (قرمز رنگ) MEP مربوط به واکنش پذیری الکتروفیلی و مناطق مثبت (آبی) مربوط به واکنش پذیری نوکلئوفیلی است. این بخش‌ها اطلاعاتی در مورد مناطقی از مولکول که می‌توانند برهمکنش‌های درون مولکولی داشته باشند، در اختیار می‌گذارند. در شکل (۳) بخشی که امکان دارد در آنجا حملات الکتروفیلی رخ دهد، مربوط می‌شود به اتم اکسیژن با بیشترین مقدار پتانسیل الکترواستاتیک منفی. در این بخش، الکتروفیلی که در سطح M06-2X محاسبه شده است در حدود ۰/۲۷۰- در کمپلکس A و مقدار ۰/۲۷۲- در کمپلکس B می‌باشد همچنین بیشترین تراکم بار مثبت بر روی اتم‌های کربن و هیدروژن مشخص شده است که امکان حمله نوکلئوفیلی را میسر می‌سازد. نقشه MEP نشان می‌دهد که بخش‌هایی با پتانسیل منفی بر روی اتم‌های الکترون‌گاتیو از سافرانال قرار دارند و همچنین بخش‌هایی با پتانسیل مثبت در اطراف اتم‌های بور از نانو قفسه قرار دارند. به هر حال یک ناحیه مشخص شده با بیشترین ناحیه مثبت بر روی بور وجود دارد که مشخصاً احتمال حمله نوکلئوفیلی را نشان می‌دهد. در مجموع آنالیز MEP نیز نشان دهنده جذب قوی مولکول سافرانال روی نانو قفسه B₁₂N₁₂ می‌باشد.

۴. نتیجه گیری

نتایج حاصل از محاسبات DFT نشان داد که مولکول سافرانال می‌تواند بر روی سطح خارجی نانو قفسه بورنیتريد با انرژی و انتقال بار قابل توجهی جذب شود. تغییرات قابل توجه در ازای شکاف هر یک از کمپلکس‌های نانو قفسه بورنیتريد نشان دهنده جذب قوی مولکول سافرانال روی سطح B₁₂N₁₂ می‌باشد. جذب مولکول سافرانال روی سطح نانو قفسه بورنیتريد در فاز اتانول می‌تواند منجر به افزایش ممان دوقطبی در مقایسه با فاز گازی شده و به عبارتی منجر به افزایش قطبیت کمپلکس شود. ممان دوقطبی مولکول سافرانال نسبت به کمپلکس سافرانال / B₁₂N₁₂ کمتر است بنابراین حلالیت آن در اتانول به مقدار قابل توجهی افزایش پیدا کرده است. مقادیر انرژی جذب و نتایج بالا نشان می‌دهد که جذب سافرانال روی نانو قفسه B₁₂N₁₂ یک جذب شیمیایی بوده و این کمپلکس می‌تواند به عنوان یک ترکیب جدید در سنتز، مورد استفاده قرار گیرد.

۵. مراجع

- [۱] قرآنی، بهروز، کدخدایی، رسول، عمادزاده، بهاره و صادقیان، علیرضا. (۱۳۹۶). ارزیابی شرایط استخراج عصاره زعفران در سیستم‌های حلال دوتایی و سه تایی و تعیین شرایط بهینه. علوم غذایی و تغذیه، ۱۴(۲) (پیاپی ۵۴)، ۶۳-۷۶.
- [۲] آخوندزاده، شاهین، محمدی، محمدرضا، خانی، موسی، جمشیدی، امیرحسین، دلیری همپا، علی و باستانی، شهریار. (۱۳۸۲). عصاره گیری، فرمولاسیون و اثر بخشی گیاه زعفران (*Crocus sativus* L.) به عنوان یک داروی ضد افسردگی در مقایسه با ایمی پرامین. گیاهان دارویی، ۲(۸)، ۵۵-۶۲.

- [3] Lage, M., & Cantrell, C. L. (2009). Quantification of saffron (*Crocus sativus* L.) metabolites crocins, picrocrocin and safranal for quality determination of the spice grown under different environmental Moroccan conditions. *Scientia horticultrae*, 121(3), 366-373.
- [4] Hosseini, A., Razavi, B. M., & Hosseinzadeh, H. (2018). Pharmacokinetic properties of saffron and its active components. *European Journal of Drug Metabolism and Pharmacokinetics*, 43, 383-390.
- [5] Akaberi, M., Boghrati, Z., Amiri, M. S., & Emami, S. A. (2019). Saffron: the golden spice. *Science of spices and culinary herbs-latest laboratory, pre-clinical, and clinical studies*, 1, 1-29.
- [6] Baei, M. T., Taghartapeh, M. R., Lemeski, E. T., & Soltani, A. (2014). A computational study of adenine, uracil, and cytosine adsorption upon AlN and BN nano-cages. *Physica B: Condensed Matter*, 444, 6-13.
- [7] Yao, X., Mu, J., Zheng, Y., Wu, J., Zhu, W., & Wang, K. (2023). Tailoring the adsorption behaviors of flucytosine on BnNn (n= 12, 16, 20, and 24) nanocage scaffolds: A computational insight on drug delivery applications. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 678, 132481.
- [8] Hossain, M. R., Hasan, M. M., Shamim, S. U. D., Ferdous, T., Hossain, M. A., & Ahmed, F. (2021). First-principles study of the adsorption of chlormethine anticancer drug on C24, B12N12 and B12C6N6 nanocages. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1197, 113156.
- [9] Zhang, Y., Luo, Y., Tang, L., Mingyan, E., & Hu, J. (2024). Unveiling regularities of B12N12-X nanocages as a drug delivery vehicle for the nitrosource: The influence of periods and groups. *Journal of Molecular Liquids*, 393, 123607.
- [10] Mejía, N., Santos, D. K. C., Herrera, C. A. M., Kumar, A., Kaur, H., Shaker, R. N., ... & Elawady, A. (2024). The eugenol functionalized B12N12 and B16N16 cages as potential inhibitors of TNF- α and HER2 receptors. *Polyhedron*, 254, 116935.
- [11] Baei, M. T. (2013). Remove of toxic pyridine from environmental systems by using B12N12 nano-cage. *Superlattices and Microstructures*, 58, 31-37.
- [۱۲] بائی، محمد تقی. (۱۴۰۱). مطالعه داکینگ مولکولی و مکانیک کوانتومی برهمکنش کوئرستین بر سطح فولرن B₁₂N₁₂ شیمی کوانتومی و اسپکتروسکوپی، ۳۱-۴۵، ۱۲(۴۰).
- [۱۳] بائی، محمد تقی، توکلی هفشجانی، خدیجه. (۱۴۰۱). بررسی جذب و خاصیت آنتی اکسیدانی گالیک اسید روی سطح فولرن B₁₂N₁₂ باروش مکانیک کوانتومی DFT و داکینگ مولکولی، شیمی کوانتومی و اسپکتروسکوپی، ۵۱-۶۶، ۱۲(۳۹).
- [14] Frisch, M. J. E. A. (2009). gaussian 09, Revision d. 01, Gaussian. Inc, Wallingford CT, 201.
- [15] Zhao, Y., & Truhlar, D. G. (2008). The M06 suite of density functionals for main group thermochemistry, thermochemical kinetics, noncovalent interactions, excited states, and transition elements: two new functionals and systematic testing of four M06-class functionals and 12 other functionals. *Theoretical chemistry accounts*, 120, 215-241.
- [16] Grimme, S. (2006). Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction. *Journal of computational chemistry*, 27(15), 1787-1799.
- [17] Grimme, S. (2011). Density functional theory with London dispersion corrections. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, 1(2), 211-228.

Adsorption of safranal on B₁₂N₁₂ nanocluster surface by using density functional theory

Soghra Yadollahi

Department of Natural Resources Engineering, Azadshahr Branch, Islamic Azad University, Azadshahr, Iran

Submitted: 27 November 2023, Revised: 13 February 2024, Accepted: 01 March 2024

Abstract

Adsorption of safranal molecule on the boron nitride (B₁₂N₁₂) nanocluster surface has been investigated by using density functional theory (DFT) with M06-2X and B97D /6-311G** methods by Gaussian 09 software in gas and ethanol phases. First, various possibility states were considered for adsorption of safranal on the boron nitride nanocluster. The calculations showed that the adsorption of safranal through the carbonyl group on the B atom of the nanocluster is the most stable state and the adsorption energy values of the complex using M06-2X and B97D methods are -26.981 and -26.750 kcal/mole in the gas phase and -30.901 and -30.670 kcal/mole in the ethanol phase, respectively. The adsorption energy values in both phases showed that safranal is chemisorbed on the B₁₂N₁₂ surface. Then the values of gap energy, dipole moment, and geometric structures of safranal, B₁₂N₁₂, and safranal/B₁₂N₁₂ complex have been calculated in both phases. The calculation results showed that safranal/B₁₂N₁₂ complex can be used as a potential new compound in synthesis.

Keywords: Boron Nitride nanocluster, Safranal, Adsorption, DFT.