

## چکیده

این پروژه به سنتز و شناسایی و مطالعه الکتروشیمیایی پلیمرهای نانومواد فلز-آلی متخلخل نئودیمیم و بیسموت، انجام مطالعات سیستماتیک و کاربرد آنها در زمینه جذب گازها می‌پردازد. ساختار این کمپلکس‌ها بوسیله تکنیک‌های FTIR ، SEM ، BET ، MAP ، EDX ،  $H^1NMR$  ، TGA مورد شناسایی و بوسیله ولتامتری چرخه‌ای مورد مطالعه الکتروشیمیایی قرار گرفت. با توجه به کاربردهای مختلف چارچوب فلز-آلی (MOF) در زمینه‌های پزشکی، صنعتی و زیست‌محیطی، ساختار جدید نئودیمیم و بیسموت از طریق یک مسیر جدید ناشی از توسعه روش امواج اولتراسونیک و مایسل معکوس ساخته شد. محصولات نهایی با تکنیک‌های مرتبط مانند  $H^1NMR$ ، SEM، XRD، TG/DSC، FTIR، BET و CHNS/O مشخص شدند. برای درک بهتر شکل‌گیری، مطالعات محاسباتی با استفاده از محاسبات DFT انجام می‌شود. به منظور بررسی تأثیر پارامترهای آزمایشی بر ویژگی‌های مختلف محصولات و همچنین مطالعه سیستماتیک رویه، طراحی آزمایشی انجام می‌شود. نتایج آنالیز واریانس نشان داد که پارامترهای تجربی نقش مهمی در تولید محصولات با ویژگی‌های متمایز دارند. با توجه به طراحی آزمایشی پارامترها، روش سطح پاسخ، احتمال تولید نمونه‌هایی را با توزیع اندازه ذرات کوچک، پایداری حرارتی بالا و سطح بالا بهینه می‌کند. این مقدار بهینه شرایطی را برای استفاده از این ترکیبات در زمینه‌های مختلف فراهم می‌کند. به عنوان مثال، مطالعات جذب نشان داد که در شرایط بهینه، محصولات Nd-MOF ظرفیت جذب بالایی برای  $N_2$  داشتند. برخی از خواص محصولات از جمله بلورینگی، پایداری حرارتی و ویژگی‌های بافتی با آنالیزهای مربوطه مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که Nd و Bi-MOF در مقایسه با Nd خالص و Bi-MOF مساحت سطح بالا، تخلخل قابل توجه و پایداری بالا را نشان می‌دهند. همچنین در زمینه الکتروشیمیایی هم ثابت شد که الکترودهای اصلاح شده از نمونه‌های سنتز شده فعالیت الکتروکاتالیستی داشته و همچنین الکترودهای اصلاح شده از نمونه سنتز شده دو هسته‌ای فعالیت الکتروکاتالیستی و از طرفی امیدانس کمتری نسبت به الکترودهای دیگر دارد. همچنین برای مطالعه اثر ناخالصی بر خواص چهارچوب‌های فلز-آلی کتیکول و انادات در ساختار Cu-BTC دوپ شد و نتایج نشان داد که افزودن ناخالصی باعث افزایش فعالیت الکتروکاتالیستی چهارچوب فلز-آلی می‌شود.

**کلمات کلیدی:** چهارچوب‌های فلز-آلی، نئودیمیم، بیسموت، متخلخل، طراحی آزمایشی، فعالیت الکتروکاتالیستی،

ولتامتری چرخه‌ای، جذب گاز، دوپ کردن، وانادیم (III)