تتشرف كلية الدراسات العليا و كلية العلوم بدعوتكم لحضور

مناقشة أطروحة الدكتوراه

العنوان

اللانثانيدات من أكاسيد الفلزات المختلطة إلى الأطر المعدنية العضوية: التوليف والتوصيف والأداء التحفيزي

للطالبة

ريم حسن الزرد

المشرف

د.أحمد الزاملي، قسم الكيمياء
كلية العلوم

المكان والزمان

10:00 صباحا

الجمعة، 9 يونيو 2023

غرفة 40 -F3مبنى

الملخص

اكتسبت معادن اللانثانيدات (Ln) المعروفة أيضا باسم العناصر الأرضية النادرة (REE)، والموجودة في كتل f من الجدول الدوري، اهتمامًا كبيرًا بسبب خصائصها الفريدة بما في ذلك المغناطيسية والتلألؤ الضوئي والتحفيز. بوجود مجموعة متنوعة من الأشكال الهندسية للتنسيق، يمكن أن ينتج عن اللانثانيدات مجمعات ومواد مختلفة. هنا، تم فحص ثلاث فئات من المواد التي تحتوي على اللانثانيدات المختارة مثل أكاسيد المعادن المختلطة لأنثانيد البزموث (أكاسيد Ln-Bi)، وبوليمرات تنسيق اللانثانيد (1D Ln-CPs) والأطر المعدنية العضوية اللانثانيدية (Ln-MOFs). تم استخدام طريقة sol-gel البسيطة لتحضير أكاسيد Ln-Bi بينما تم تحضير Ln-CPs وMOFs بواسطة ظروف المذيب الحرارية. تم توصيف المواد باستخدام تقنيات تحليلية وطيفية وحسابية متعددة لدراسة خواصها الكيميائية والفيزيائية. بناءً على قيم فجوة النطاق، أظهرت أكاسيد Ln-Bi وLn-CPs إمكانات كبيرة للتحفيز الضوئي في المناطق المرئية والأشعة فوق البنفسجية على التوالي. من ناحية أخرى، أظهرت Ln-MOFs خصائص تلألؤ ضوئي فريدة مع عوائد كمومية فعالة واضمحلال طويل للتوهج الفلوري. تم استخدام نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) و التي كشفت عن نمط جديد من اللمعان في هذه المواد الذي تم استكشافه لأول مرة. تمت دراسة السلوك المغناطيسي لـ Ln-MOFs وLn-CPs أيضًا بواسطة DFT التي وُجد أنها تتفق أيضا مع النتائج التجريبية. تمهد النتائج المقدمة هنا الطريق لبناء مواد متميزة باستخدام اللانثانيدات كميزة لفحص المزيد من الخصائص والتطبيقات الفريدة.

كلمات البحث الرئيسية: اللانثانيدات، بزموث، أكاسيد معادن مختلطة، البوليمرات المنسقة، الأطر المعدنية العضوية، المغناطيسية، التلألؤ الضوئي، التحفيز الضوئي، فجوة النطاق، العائد الكمِي، القياسات الزمنية للتوهج الفلوري، نظرية الكثافة الوظيفية.