

چارچوب‌های آلی-فلزی و هوش مصنوعی: از طراحی و اصلاح مواد تا کاربردهای سنسوری و زیست‌محیطی

لیلا سادات علوی^۱، مهشید گلستانه^{۲*}

^۱ گروه شیمی تجزیه، دانشکده شیمی، دانشگاه کاشان، کاشان، ایران.

^۲ گروه آموزش شیمی، دانشگاه فرهنگیان، صندوق پستی ۸۸۹-۱۴۶۶۵ تهران، ایران.

چکیده

چارچوب‌های آلی-فلزی (MOFs) به دلیل سطح ویژه بالا، تخلخل قابل تنظیم، تنوع ساختاری گسترده و قابلیت عامل‌داری، به یکی از مهم‌ترین مواد پیشرفته در حوزه سنسوری الکتروشیمیایی تبدیل شده‌اند. این مواد به دلیل توانایی ایجاد برهم‌کنش‌های اختصاصی با گونه‌های هدف، امکان تشخیص حساس و گزینش‌پذیر آلاینده‌های محیطی، داروها، فلزات سنگین و زیست‌ناشناس‌ها را فراهم می‌کنند. با این حال، محدودیت‌هایی نظیر رسانایی الکتریکی پایین، پایداری محدود در محیط‌های آبی و دشواری مقیاس‌پذیری تولید، کاربرد گسترده آنها را با چالش مواجه ساخته است. در این مقاله مروری، راهبردهای کلیدی بهبود عملکرد سنسورهای مبتنی بر MOF، توسعه نانوکامپوزیت‌های مشتق از MOF، طراحی MOFهای دوفلزی و روش‌های عامل‌داری ساختاری بررسی شده است. همچنین کاربرد این سنسورها در تشخیص داروها و آلاینده‌های نوظهور مرور شده است. علاوه بر این، نقش فناوری‌های هوش مصنوعی و یادگیری ماشین در طراحی مواد، پیش‌بینی عملکرد سنسورها و تحلیل هوشمند داده‌های الکتروشیمیایی مورد بحث قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که ادغام MOFها با نانومواد رسانا، سامانه‌های پوشیدنی، اینترنت اشیا و الگوریتم‌های داده‌محور می‌تواند منجر به بهبود قابل توجه حساسیت و کاهش حد تشخیص در سنسورهای الکتروشیمیایی شود. با وجود چالش‌های مرتبط با پایداری، مقیاس‌پذیری و تجاری‌سازی، پیشرفت‌های اخیر نشان می‌دهد که MOFها ظرفیت بالایی برای توسعه سامانه‌های پایش هوشمند در حوزه‌های محیط‌زیست، ایمنی مواد غذایی و سلامت دارند.

واژه‌های کلیدی: چارچوب‌های آلی-فلزی (MOFs)، سنسورهای الکتروشیمیایی مبتنی بر MOF، آلاینده‌های نوظهور، هوش مصنوعی، یادگیری ماشین

ایمیل نویسنده مسئول: m.golestaneh@cfu.ac.ir

تاریخ دریافت: ۱۴۰۴/۱۲/۰۵ تاریخ بازنگری: ۱۴۰۵/۰۲/۱۷ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۵/۰۳/۲۰

۱-مقدمه

در دهه‌های اخیر، رشد سریع صنایع شیمیایی و افزایش تولید مواد مصنوعی موجب ورود طیف گسترده‌ای از ترکیبات شیمیایی به محیط‌زیست شده است. بخشی از این ترکیبات که اثرات زیست‌محیطی و مخاطرات بالقوه آنها برای سلامت انسان به‌تازگی شناخته شده است، تحت عنوان آلاینده‌های نوظهور (ECs) شناخته می‌شوند [۱]. این آلاینده‌ها شامل گروه‌های

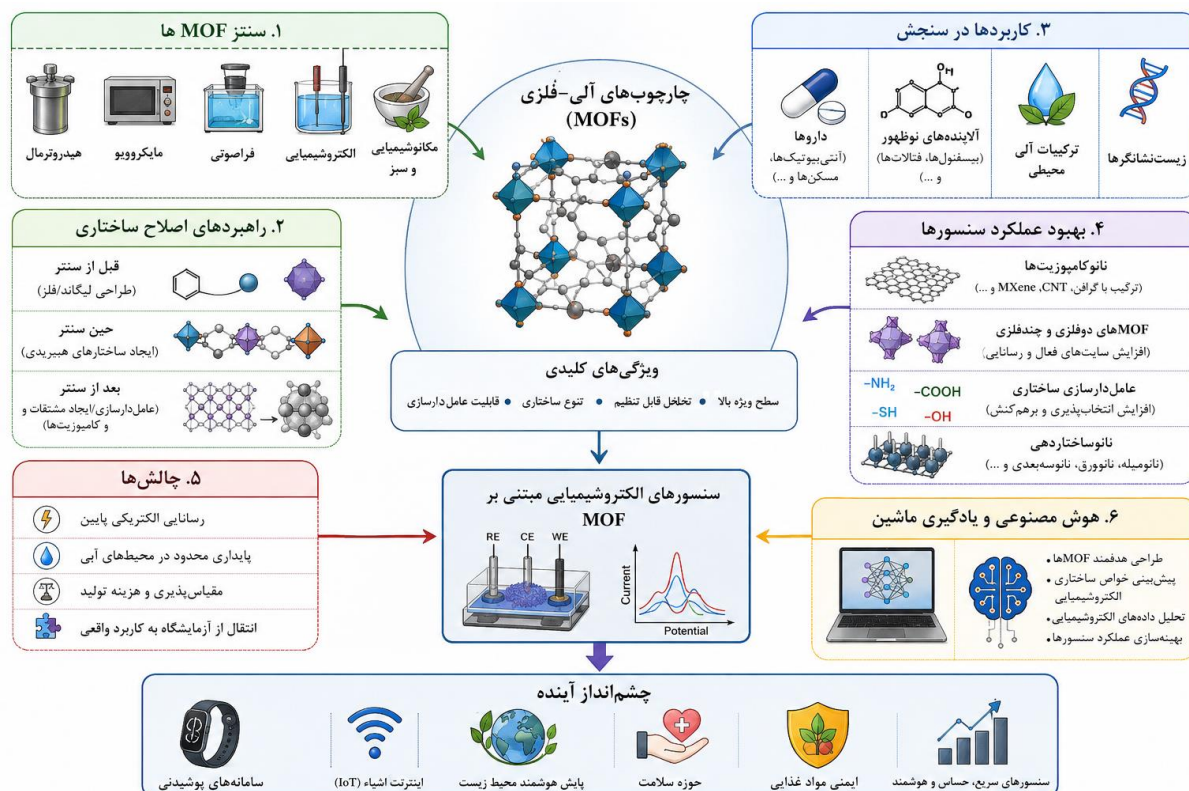
متنوعی نظیر آلاینده‌های آلی پایدار، ترکیبات مختل‌کننده غدد درون‌ریز، آنتی‌بیوتیک‌ها و میکرو پلاستیک‌ها هستند که به دلیل سمیت بالا، پایداری محیطی و قابلیت تجمع زیستی، تهدیدی جدی برای اکوسیستم‌ها و سلامت انسان محسوب می‌شوند [۲، ۱]. از این رو، توسعه روش‌های سریع، دقیق و قابل اعتماد برای شناسایی و پایش این ترکیبات به یکی از اولویت‌های مهم پژوهشی تبدیل شده است. در حال حاضر، تشخیص آلاینده‌های

قرار گرفته‌اند [۷]. با این حال، محدودیت‌هایی نظیر رسانایی الکتریکی پایین، پایداری ناکافی در محیط‌های آبی، گزینش پذیری محدود برخی ساختارها و دشواری تولید در مقیاس صنعتی، همچنان از موانع اصلی توسعه کاربردی آن‌ها به شمار می‌روند [۱۰،۹،۷]. به همین دلیل، راهبردهای مختلفی شامل نانوساختارسازی، عامل دارسازی لیگاندها، توسعه MOFهای دوفلزی، ساخت نانوکامپوزیت‌های مبتنی بر کربن و طراحی ناهم ساختارهای هیبریدی برای بهبود عملکرد این مواد توسعه یافته است. علاوه بر پیشرفت‌های حاصل در طراحی و اصلاح MOFها، ظهور فناوری‌های هوش مصنوعی نیز افق‌های جدیدی را در این حوزه گشوده است. هوش مصنوعی و به‌ویژه الگوریتم‌های یادگیری ماشین می‌توانند فرآیند کشف مواد، طراحی ساختارهای بهینه، تحلیل داده‌های پیچیده الکتروشیمیایی و توسعه سامانه‌های سنسوری هوشمند را تسریع کنند. ادغام MOFها با سامانه‌های پوشیدنی، اینترنت اشیا و ابزارهای تحلیل مبتنی بر هوش مصنوعی، امکان توسعه سامانه‌های پایش فوری، چندآنالیتی و خودبهینه‌شونده را فراهم ساخته است و مسیر جدیدی را برای کاربردهای زیست‌محیطی و زیست‌پزشکی این مواد ایجاد کرده است. بر این اساس، هدف این مقاله مروری بررسی جامع چارچوب‌های آلی-فلزی در سنسوری الکتروشیمیایی، مرور راهبردهای سنتز و اصلاح ساختاری آن‌ها، تبیین نقش MOFها در تشخیص آلاینده‌های نوظهور و بررسی فرصت‌های ناشی از همگرایی این مواد با فناوری‌های هوش مصنوعی است. همچنین، چالش‌های موجود در مسیر تجاری‌سازی و کاربردهای واقعی سنسورهای مبتنی بر MOF مورد بحث قرار گرفته و چشم‌اندازهای آینده این حوزه ارائه می‌شود. نقشه مفهومی مقاله در شکل ۱ مشاهده می‌شود.

نوظهور عمدتاً بر پایه روش‌های تحلیلی متداول نظیر کروماتوگرافی مایع-طیف‌سنجی جرمی (LC-MS) و کروماتوگرافی گازی-طیف‌سنجی جرمی (GC-MS) انجام می‌شود. اگرچه این روش‌ها از دقت بالایی برخوردارند، اما نیاز به تجهیزات گران‌قیمت، آماده‌سازی پیچیده نمونه و زمان تحلیل طولانی، کاربرد آن‌ها را برای پایش برخط و در محل محدود می‌سازد [۳]. در مقابل، سنسورهای الکتروشیمیایی به دلیل حساسیت بالا، هزینه کمتر، سرعت پاسخ مناسب و قابلیت استفاده در شرایط میدانی، به‌عنوان جایگزینی امیدوارکننده مطرح شده‌اند [۴]. عملکرد این سنسورها تا حد زیادی به ویژگی‌های سطح الکتروود و مواد اصلاح‌کننده مورد استفاده وابسته است؛ از این‌رو توسعه مواد جدید برای اصلاح الکتروودها، نقش تعیین‌کننده‌ای در افزایش حساسیت، گزینش‌پذیری و پایداری سامانه‌های سنسوری دارد [۵].

در میان مواد پیشرفته مورد استفاده در سنسوری، چارچوب‌های آلی-فلزی (Metal-Organic Frameworks; MOFs) توجه گسترده‌ای را به خود جلب کرده‌اند. این مواد بلوری متخلخل از اتصال خوشه‌های فلزی و لیگاندهای آلی تشکیل می‌شوند و به دلیل سطح ویژه بسیار بالا، تخلخل قابل تنظیم، ساختار انعطاف‌پذیر و قابلیت عامل‌دارسازی، بستر مناسبی برای طراحی سنسورهای الکتروشیمیایی پیشرفته فراهم می‌کنند [۷،۶]. ویژگی‌های ساختاری منحصر به فرد MOFها موجب شده است که علاوه بر ذخیره‌سازی انرژی، جذب گاز، دارورسانی و کاتالیز، در حوزه تشخیص مولکولی و سنسوری نیز کاربردهای گسترده‌ای پیدا کنند [۸،۷].

در حوزه سنسوری الکتروشیمیایی، MOFها به دلیل وجود سایت‌های فعال فراوان، قابلیت جذب انتخابی آنالیت‌ها و امکان اصلاح ساختاری، عملکرد بسیار مطلوبی از خود نشان داده‌اند. این مواد برای شناسایی طیف وسیعی از ترکیبات، از فلزات سنگین و آلاینده‌های آلی گرفته تا زیست‌نشانه‌های بیماری، مورد استفاده



شکل ۱- نقشه مفهومی تلفیق چارچوب‌های آلی-فلزی و هوش مصنوعی در طراحی و اصلاح مورد نیاز برای کاربردهای سنسوری و زیست‌محیطی

۲- روش پژوهش

این پژوهش از نوع مروری است که با هدف بررسی نظام‌مند مطالعات مرتبط با چارچوب‌های آلی-فلزی و کاربرد آن‌ها در سنسورهای الکتروشیمیایی انجام شده است. منابع علمی از پایگاه‌های ScienceDirect، Web of Science، Scopus، Google Scholar استخراج شده‌اند. جستجوی مقالات با استفاده از کلیدواژه‌هایی نظیر Metal-Organic Frameworks، MOF modification، Artificial، Electrochemical Sensors و Intelligence in materials در بازه زمانی ۲۰۱۵ تا ۲۰۲۶ انجام شد. انتخاب مقالات بر اساس ارتباط مستقیم با موضوع، کیفیت داده‌ها و میزان استناد علمی صورت گرفت.

۳- یافته‌ها

۳-۱- چارچوب‌های آلی-فلزی (MOFs)

چارچوب‌های آلی-فلزی دسته‌ای از مواد هیبریدی بلوری و متخلخل هستند که از اتصال یون‌های فلزی یا خوشه‌های فلزی (مانند Cu، Ni، V و Co) با اتصال‌دهنده‌های آلی چنددندانه (از جمله کربوکسیلات‌های پلی‌دندانه و ترکیبات آروماتیک

هتروسیکلیک) از طریق پیوندهای هم‌آرایی تشکیل می‌شوند و در نهایت ساختارهایی منظم با شبکه‌های یک‌بعدی، دو‌بعدی یا سه‌بعدی و تخلخل کاملاً تعریف‌شده ایجاد می‌کنند [۱۱]. این خانواده از مواد به دلیل انعطاف‌پذیری بالای ساختاری و عملکردی از قابلیت تنظیم هم‌آرایی میان خوشه‌های فلزی و همچنین تنوع در تعداد و جهت‌گیری لیگاندهای آلی بهره‌مند هستند [۱۰].

از نظر ویژگی‌های ساختاری، MOFها دارای مجموعه‌ای از خصوصیات منحصر به فرد هستند که آن‌ها را به مواد بسیار جذاب برای کاربردهای پیشرفته تبدیل کرده است. این مواد سطح ویژه بسیار بالا، تعداد زیادی سایت‌های فلز-لیگاند فعال و تخلخل قابل تنظیم در محدوده حدود ۰ تا ۹۸ نانومتر را ارائه می‌دهند. همچنین ساختار آن‌ها به گونه‌ای قابل مهندسی است که امکان سفارشی‌سازی دقیق ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی را فراهم می‌سازد [۱۲]. همین ویژگی‌ها باعث شده است MOFها در طیف گسترده‌ای از کاربردها شامل ذخیره‌سازی انرژی، جذب گاز، حذف آلاینده‌ها، کاتالیز ناهمگن و سنسوری مولکولی مورد توجه قرار گیرند [۱۳].

ساختار در محیط‌های مرطوب، اسیدی، بازی یا محلول‌های پیچیده آسیب‌پذیر هستند [۱۷]. دوم، پایداری حرارتی که نشان می‌دهد اکثر MOF ها تنها قادر به تحمل دماهای حدود ۱۵۰ تا ۳۵۰ درجه سانتی‌گراد هستند و در دماهای بالاتر دچار ناپایداری ساختاری می‌شوند [۱۹]. سوم، پایداری مکانیکی که به دلیل شکنندگی ذاتی چارچوب‌های متخلخل، باعث می‌شود این مواد در شرایط استفاده طولانی‌مدت یا در چرخه‌های الکتروشیمیایی دچار تخریب ساختاری شوند [۲۰]. در نتیجه این ناپایداری‌ها، گونه‌های فعال واقعی مشاهده شده در بسیاری از سیستم‌ها، در واقع مشتقاتی هستند که از طریق تخریب یا بازآرایی ساختار اولیه تشکیل می‌شوند؛ مانند اکسیدها یا هیدروکسیدهای فلزی. این پدیده می‌تواند تفسیر دقیق رابطه بین ساختار و فعالیت را با چالش‌های جدی مواجه سازد [۳].

علاوه بر این، گزینش‌پذیری بسیاری از MOF ها نسبت به آنالیت‌های هدف کافی نیست؛ این مسئله می‌تواند ناشی از عدم تطابق اندازه منافذ با آنالیت‌ها یا نبود برهم‌کنش‌های اختصاصی در سطح MOF باشد که در نهایت عملکرد آن‌ها را در ماتریس‌های پیچیده محدود می‌کند. از سوی دیگر، چالش‌های مرتبط با تولید در مقیاس بزرگ، هزینه‌های بالای سنتز و پیچیدگی فرآیندهای ساخت نیز مانع جدی در مسیر تجاری‌سازی این مواد محسوب می‌شوند [۲۱]؛ بنابراین، رفع این محدودیت‌ها از طریق طراحی و اصلاح هدفمند مواد برای افزایش کارایی، پایداری و قابلیت استفاده در شرایط واقعی، برای توسعه سنسورهای الکتروشیمیایی مبتنی بر MOF کاملاً ضروری است.

۳-۲- تکنیک‌های سنتز MOFs

چارچوب‌های آلی-فلزی را می‌توان از طریق روش‌های سنتزی متنوعی تولید کرد که هر یک بر ویژگی‌هایی مانند اندازه بلور، مورفولوژی، تخلخل، میزان نقص‌های ساختاری و در نهایت عملکرد الکتروشیمیایی آن‌ها اثر می‌گذارند. از آنجا که عملکرد سنسورهای مبتنی بر MOF ارتباط مستقیمی با این ویژگی‌ها دارد، انتخاب روش سنتز به یکی از مراحل کلیدی در طراحی این مواد تبدیل شده است. امروزه روش‌هایی نظیر آبی-حرارتی، کمک‌گرفته از مایکروویو، فراصوتی، الکتروشیمیایی و مکانیکوشیمیایی بیشترین کاربرد را در سنتز MOF ها دارند. جدول ۱ مقایسه‌ای از مهم‌ترین ویژگی‌های این روش‌ها را ارائه می‌کند.

در حوزه سنسوری الکتروشیمیایی، MOF ها به‌طور گسترده به‌عنوان مواد اصلاح‌کننده سطح الکترود مورد استفاده قرار گرفته‌اند و پتانسیل بالایی در ارتقای عملکرد سنسورها نشان داده‌اند. این عملکرد ممتاز عمدتاً ناشی از ویژگی‌های ساختاری و عملکردی ویژه آن‌ها است. آرایش منظم مراکز فلزی صلب در کنار اتصال دهنده‌های آلی انعطاف‌پذیر، موجب ایجاد چگالی بالایی از سایت‌های فعال گسسته و در دسترس می‌شود. علاوه بر این، تخلخل ساختاری MOF ها امکان جذب، تثبیت و حتی حذف هم‌زمان یون‌های فلزی و مولکول‌های آلی را بدون تغییر در توپولوژی چارچوب فراهم می‌کند و از این طریق به بهبود انتقال بار و تقویت سیگنال کمک می‌کند [۱۴].

برهم‌کنش‌های بین‌مولکولی قوی مانند پیوند هیدروژنی، برهم‌کنش‌های $\pi-\pi$ و نیروهای الکترواستاتیک نیز نقش مهمی در تسهیل اتصال و تجمع انتخابی آنالیت‌های هدف در سطح MOF ها ایفا می‌کنند [۱۵]. علاوه بر این، ترکیب سطح ویژه بالا، تخلخل قابل توجه و برهم‌کنش‌های فلز-لیگاند، موجب افزایش جذب و تشخیص کارآمد آنالیت‌ها می‌شود. وجود سایت‌های عملکردی متنوع شامل مراکز فلزی فعال، اندازه منافذ قابل تنظیم، ویژگی‌های آب‌دوستی/آب‌گریزی قابل کنترل و سایت‌های اسید-باز لویس، امکان طراحی سامانه‌های سنسوری با قابلیت تشخیص مولکولی انتخابی را فراهم می‌سازد [۱۶].

با وجود این ویژگی‌های جذاب، MOF ها همچنان با محدودیت‌های اساسی در کاربردهای سنسوری الکتروشیمیایی مواجه هستند. مهم‌ترین چالش، رسانایی الکتریکی ضعیف در اکثر MOF های خالص است که عمدتاً ناشی از دو عامل می‌باشد: (۱) محدودیت‌های ساختاری ذاتی ناشی از فقدان سیستم π مزدوج در لیگاندهای آلی عایق و همچنین همپوشانی مداری ضعیف بین مراکز فلزی و لیگاندها [۱۷]؛ و (۲) محدودیت در مکانیسم‌های انتقال بار در ساختارهای شبکه‌ای [۱۸]. لازم به تأکید است که این محدودیت عمدتاً مربوط به MOF های خالص است. در مقابل، در سال‌های اخیر توسعه MOF های رسانا و به‌ویژه MOF های دوبعدی توانسته است تا حد زیادی خواص انتقال بار را در این مواد بهبود دهد [۳].

دومین چالش مهم، پایداری ناکافی بسیاری از MOF ها است که کاربردهای عملی آن‌ها را محدود می‌کند. این مسئله در سه جنبه اصلی قابل بررسی است: نخست، پایداری شیمیایی که به استحکام پیوندهای هم‌آرایی فلز-لیگاند وابسته است؛ در این زمینه، MOF های حاوی گره‌های فلزی با ظرفیت پایین مانند Zn^{2+} و Cu^{2+} در برابر هیدرولیز، از دست دادن لیگاند یا فروپاشی

جدول ۱ - مقایسه جامع روش‌های سنتز MOF

روش	مصرف انرژی	مصرف حلال	زمان (ساعت)	بازده (%)	یکنواختی ذرات	مقیاس پذیری	مرجع
آب گرمایی	بالا	بالا (آلی)	۱۵-۲۴	۶۰-۸۰	متوسط	متوسط	[۴]
کمک شده با میکروویو	متوسط	متوسط	۰,۵-۱,۵	۷۰-۸۵	بالا	بالا	[۵]
الکتروشیمیایی	کم	کم (آبی)	۰,۱-۰,۵	۵۰-۷۰	کم (فقط لایه نازک)	بالا	[۲۲]
فراصوتی	متوسط	کم	۰,۳-۱,۰	۷۵-۹۰	متغیر	متوسط	[۲۳]
مکانیکوشیمیایی	کم	هیچ/حداقل	۰,۵-۲,۵	۸۰-۹۵	متوسط	بالا	[۲۴]
مکانیکوشیمیایی سبز	بسیار کم	هیچ	۰,۵-۱,۵	۹۰-۹۸	بالا	بسیار بالا	[۶]

روش آبی حرارتی/حلال حرارتی: سنتز آبی حرارتی و حلال حرارتی همچنان متداول‌ترین مسیر سنتز MOFها محسوب می‌شود. در این روش، پیش‌ماده‌های فلزی و لیگندهای آلی در راکتورهای بسته و تحت دما و فشار کنترل‌شده متبلور می‌شوند. مهم‌ترین مزیت این روش، تولید بلورهای با کیفیت و تخلخل منظم است، هرچند زمان سنتز نسبتاً طولانی و مصرف انرژی بالا از محدودیت‌های آن به شمار می‌رود. این روش همچنان برای تولید بسیاری از MOFهای مورد استفاده در سنسورهای الکتروشیمیایی به کار می‌رود [۲۵].

روش کمک‌گرفته از میکروویو: در این روش، انرژی تابشی میکروویو به عنوان منبع گرمایی سریع عمل کرده و موجب تسریع چشمگیر فرآیند تبلور می‌شود. این روش علاوه بر کاهش زمان سنتز، به دلیل ایجاد هسته‌زایی سریع، منجر به تولید ذرات با اندازه کوچک‌تر و ساختار متخلخل یکنواخت‌تر می‌شود [۲۶]. به‌طور کلی، این تکنیک نسبت به روش‌های سنتی، زمان واکنش بسیار کوتاه‌تر و کنترل بهتری بر ساختار نهایی فراهم می‌کند.

روش الکتروشیمیایی: در روش الکتروشیمیایی، تشکیل MOFها مستقیماً بر روی سطح الکترود و معمولاً در قالب لایه‌های نازک انجام می‌شود. این روش دارای مزایایی همچون شرایط واکنش ملایم، زمان سنتز کوتاه، طراحی ساده سیستم و امکان رسوبدهی مستقیم MOF بر روی سطح انتخابی است. در این فرآیند، به جای استفاده از نمک‌های فلزی، اکسیداسیون الکترود می‌تواند کاتیون‌های فلزی مورد نیاز را تولید کند که در حضور لیگاندها به تشکیل MOF منجر می‌شود [۲۷]. با این حال، یکی از محدودیت‌های مهم این روش، نیاز به استفاده از حلال‌های آلی برای حل لیگاندها است که می‌تواند بر پایداری و سازگاری محیطی اثرگذار باشد [۱۸]. این روش به‌ویژه برای تولید لایه‌های نازک و کاربردهای سنسوری الکتروشیمیایی در مقیاس وسیع مورد توجه قرار گرفته است.

روش فراصوت: این روش یکی از رویکردهای نوین و سازگار با محیط‌زیست برای سنتز MOFها محسوب می‌شود که در آن انرژی حاصل از امواج صوتی به عنوان نیروی محرک برای تسریع تشکیل هسته‌های بلوری عمل می‌کند. این فرآیند موجب کاهش زمان تبلور و افزایش یکنواختی تشکیل ساختارهای MOF می‌شود [۲۸]. این روش برای سنتز انواع MOFها و کامپوزیت‌ها از نمک‌های فلزی و لیگندهای مختلف مورد استفاده قرار گرفته و در برخی موارد، مانند MOF-5، منجر به تولید ساختارهای نانومتری در محدوده ۵-۲۰ نانومتر شده است. همچنین این روش به دلیل کاهش نیاز به حلال‌های خطرناک، با اصول شیمی سبز هم‌راستا است.

روش مکانیکوشیمیایی: روش مکانیکوشیمیایی با استفاده از انرژی مکانیکی و بدون نیاز یا با حداقل مصرف حلال انجام می‌شود و به دلیل سازگاری با اصول شیمی سبز، مصرف انرژی پایین و قابلیت مقیاس‌پذیری، در سال‌های اخیر مورد توجه قرار گرفته است. توسعه رویکردهای مکانیکوشیمیایی سبز، امکان تولید اقتصادی‌تر MOFها را برای کاربردهای صنعتی فراهم کرده است [۲۹-۳۲].

هم‌اکنون، رویکردهای هیبریدی که ترکیبی از مکانیکوشیمیایی سبز با روش‌های کمک‌گرفته از میکروویو یا فراصوت هستند، در حال توسعه‌اند. این سیستم‌های ترکیبی با بهره‌گیری هم‌زمان از انرژی مکانیکی و انرژی تابشی یا صوتی، می‌توانند سرعت واکنش را افزایش داده و یکنواختی و کیفیت محصولات نهایی را بهبود دهند و در نتیجه مسیر جدیدی برای سنتز پایدار و کارآمد MOFها فراهم سازند. جدول ۲ نمونه‌های مختلف MOF سنتز شده از طریق تکنیک‌های گوناگون را ارائه کرده است.

می‌دهد که انتخاب روش سنتز از یک مسئله صرفاً شیمیایی فراتر رفته و به ابزاری برای مهندسی خواص عملکردی سنسورهای مبتنی بر MOF تبدیل شده است [۲۴-۳۲].

۳-۳- راهبردهای اصلاح عملکردی MOF

برای توسعه کاربردهای پیشرفته چارچوب‌های آلی-فلزی (MOFs) در حوزه‌هایی مانند سنسوری الکتروشیمیایی، کاتالیز و حذف آلاینده‌ها، رفع محدودیت‌های ذاتی این مواد و بهینه‌سازی عملکرد آن‌ها ضروری است. در همین راستا، راهبردهای اصلاح عملکردی MOFها بر اساس وضعیت چارچوب در زمان اعمال تغییرات به سه دسته اصلی شامل اصلاح پیش از سنتز، اصلاح حین سنتز و اصلاح پس از سنتز تقسیم‌بندی می‌شوند (جدول ۳). این طبقه‌بندی امکان درک سیستماتیک از زمان، مکان و نحوه اعمال تغییرات ساختاری و عملکردی در MOFها را فراهم می‌سازد.

تحلیل مقایسه‌ای روش‌های سنتز

بررسی روش‌های مختلف سنتز نشان می‌دهد که هیچ روش واحدی برای تمامی کاربردهای سنسوری بهترین گزینه محسوب نمی‌شود و انتخاب مسیر سنتز باید بر اساس ویژگی مورد انتظار سنسور انجام گیرد. روش‌های آب‌گرمایی و حلال‌گرمایی معمولاً بلورهایی با کیفیت ساختاری بالا تولید می‌کنند، اما زمان سنتز طولانی و مصرف انرژی بیشتری دارند. در مقابل، روش‌های کمک‌گرفته از مایکروویو و فراصوت زمان سنتز را به طور قابل توجهی کاهش داده و امکان تولید نانوذرات یکنواخت‌تر را فراهم می‌کنند. از سوی دیگر، روش الکتروشیمیایی به دلیل امکان رشد مستقیم MOF بر سطح الکترود، برای ساخت سنسورهای الکتروشیمیایی مزیت قابل توجهی دارد، زیرا نیاز به مراحل اضافی تثبیت ماده فعال روی الکترود را کاهش می‌دهد. همچنین، روش‌های مکانیکوشیمیایی و مکانیکوشیمیایی سبز به دلیل مصرف ناچیز حلال، هزینه کمتر و قابلیت مقیاس‌پذیری، گزینه‌های امیدوارکننده‌ای برای تجاری‌سازی سنسورهای مبتنی بر MOF محسوب می‌شوند. بنابراین، روند مطالعات اخیر نشان

جدول ۲ - نمونه‌های مختلف MOF سنتز شده از طریق تکنیک‌های گوناگون

نمونه MOF	نمک فلزی	لیگاند	حلال	دما (°C)	زمان	مرجع
سنتز آب‌گرمایی						
UiO-66	ZrCl ₄	H ₂ BDC	DMF	۱۲۰	۲۴ ساعت	[۳۳]
Ni-MOF	Ni(NO ₃) ₂ ·6 H ₂ O	H ₂ BTC	DMF	۸۰	۱۸ ساعت	[۳۴]
MIL-101	Cr(NO ₃) ₃ ·9 H ₂ O	H ₂ BDC	آب دیونیزه	۱۸۰	۵ ساعت	[۳۵]
روش فراصوت						
ZIF-8	Zn(NO ₃) ₂ ·6 H ₂ O	MeIM	DMF	-	۱ ساعت	[۳۶]
MOF-74	Mg(NO ₃) ₂ ·6 H ₂ O	Hdthp	DMF	-	۱ ساعت	[۳۷]
HKUST-1	Cu(NO ₃) ₃ ·5 H ₂ O	H ₂ BTC	DMF	-	۱ ساعت	[۳۸]
کمک‌شده با مایکروویو						
Ni-MOF-74	Ni(NO ₃) ₂ ·6 H ₂ O	DOT	DMF	۱۰۰	۹۰ دقیقه	[۳۹]
Mg-MOF	Mg(NO ₃) ₂ ·6 H ₂ O	DOT	DMF	۱۲۵	۹۰ دقیقه	[۴۰]
MOF-177	Zn(NO ₃) ₂ ·6 H ₂ O	H ₂ BTB	NMP	-	۳۵ دقیقه	[۴۱]
الکتروشیمیایی						
Co-MOF	Co(NO ₃) ₂ ·6 H ₂ O	H ₂ BTC	H ₂ O، اتانول	-	-	[۴۲]
HKUST-1	الکترود Cu	H ₂ BTC	متانول	-	-	[۴۳]
Cu-MOF	Cu(NO ₃) ₃ ·3 H ₂ O	H ₂ BTC	DMF، H ₂ O	-	-	[۴۴]
مکانیکوشیمیایی						
Cu-MOF	Cu(OAc) ₂ ·H ₂ O	H ₂ BTC	بدون حلال	-	-	[۴۵]
MIL-88 A	FeCl ₃ ·6 H ₂ O	فومارات	بدون حلال	-	-	[۴۶]
MOF-505	Cu(OAc) ₂ ·H ₂ O	H ₂ bptc	DMF	-	-	[۴۷]

جدول ۳. طبقه‌بندی و مقایسه راهبردهای اصلاح عملکردی MOFها

راهبرد	تعریف	زمان	نمونه‌های معمولی
اصلاح پیش از سنتز	اصلاح لیگاندها/فلزات/قالب‌ها قبل از سنتز MOF	قبل از هسته‌زایی/رشد بلور	واسطه‌گری قالب، عامل‌دار کردن لیگاند
اصلاح حین سنتز	معرفی و جفت‌سازی درجا اجزای عملکردی در طول رشد MOF	در طول رشد بلور	دوپینگ گره فلزی
اصلاح پس از سنتز	معرفی اجزای عملکردی از طریق عملیات ثانویه پس از تشکیل بلور MOF	پس از تشکیل بلور	جفت‌سازی دینامیک سطح مشترک، تنظیم چندمقیاسه

الف) اصلاح پیش از سنتز

اصلاح پیش از سنتز به رویکردی اشاره دارد که در آن اطلاعات و ویژگی‌های عملکردی پیش از آغاز فرایند رشد بلور، از طریق کنترل پیش‌ماده‌ها یا محیط واکنش در ساختار MOF کدگذاری می‌شود. در این روش، کنترل در سطح «مبدأ شکل‌گیری بلور» انجام می‌شود و امکان طراحی هدفمند ویژگی‌های ساختاری و شیمیایی فراهم می‌گردد. مزیت اساسی

این راهبرد در امکان برنامه‌ریزی عملکرد مواد در سطح مولکولی پیش از تشکیل ساختار نهایی نهفته است. این رویکرد شامل سه مسیر اصلی است: (۱) روش با واسطه قالب، (۲) عامل‌دار کردن لیگاند و (۳) دوپینگ گره فلزی [۴۸].

در روش با واسطه قالب، از قالب‌های مولکولی یا ساختاری برای تعریف فضای رشد پیش از هسته‌زایی MOF استفاده می‌شود. این قالب‌ها می‌توانند هندسه، اندازه منافذ و مسیرهای رشد بلور را از ابتدا تعیین کنند و از این طریق کنترل دقیقی بر مورفولوژی و ساختار نهایی ایجاد نمایند. این روش امکان مهندسی دقیق دینامیک رشد بلور و تنظیم ساختار متخلخل را فراهم می‌سازد. در عامل‌دار کردن لیگاند، گروه‌های عاملی مشخص مانند، -COOH و -NH₂ در مرحله طراحی لیگاند وارد ساختار می‌شوند تا خواص سطحی و شیمیایی MOF از همان ابتدا تنظیم گردد [۴۹]. این راهبرد امکان تنظیم برهم‌کنش‌های سطحی و بهبود انتخاب‌پذیری را فراهم می‌کند. در دوپینگ گره فلزی نیز، واحدهای ساختمانی ثانویه (SBUs) با مراکز چندفلزی در مرحله اولیه سنتز طراحی و وارد ساختار می‌شوند. این کار منجر به افزایش فعالیت‌های کاتالیزوری و بهبود قابلیت‌های تشخیصی MOFها می‌شود [۵۰].

سنتز با واسطه قالب

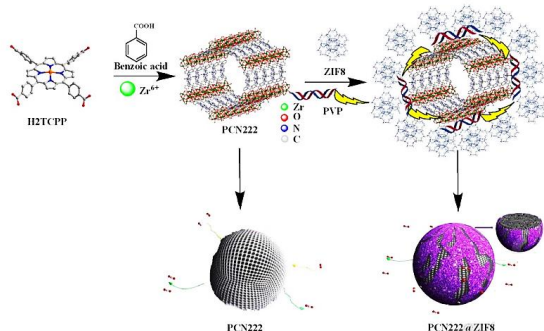
در فرایند سنتز MOF، ساختار معمولاً از طریق مونتاژ بلوک‌های ساختمانی مولکولی یا واحدهای ساختمانی ثانویه (SBU) و اتصال آن‌ها به لیگاندها شکل می‌گیرد. در این میان، استفاده از قالب‌ها

امکان کنترل پیش‌دستانه بر رشد بلور را فراهم می‌کند؛ به‌طوری که محیط محصور یا سطح مشترک از پیش تعریف‌شده می‌تواند به‌طور مستقیم بر ریخت‌شناسی، اندازه بلور و توزیع منافذ اثر بگذارد. بر اساس ماهیت، قالب‌ها به دو دسته قالب‌های سخت و قالب‌های نرم تقسیم می‌شوند.

در قالب‌های سخت، از بسترهایی با ساختار پایدار و هندسه مشخص مانند فوم نیکل یا پارچه کربنی استفاده می‌شود. این بسترها به دلیل محدودیت‌های هندسی و پایداری ساختاری، محیطی قابل پیش‌بینی برای هسته‌زایی اولیه فراهم می‌کنند و در نتیجه جهت‌گیری رشد بلورها را کنترل می‌نمایند. در این میان، فوم نیکل یکی از قالب‌های سخت رایج است که با افزایش سطح فعال و بهبود انتقال یون، عملکرد الکتروکاتالیزوری را ارتقا می‌دهد [۴۸]. به‌عنوان نمونه، اومش و همکاران [۵۱] نانوصفحه‌های فوق‌نازک Ni-Co-MOF را بر روی فوم نیکل برای سنسوری الکتروشیمیایی نورفلوکساسین سنتز کردند (شکل ۲). در این سامانه، فوم نیکل به‌عنوان قالب سخت و بستر رشد جهت‌دار عمل کرده و از تجمع ساختاری جلوگیری می‌کند. این امر موجب افزایش سطح فعال و بهبود پاسخ جریان در فرآیند سنسوری شد.

پارچه کربنی نیز یکی دیگر از قالب‌های سخت پرکاربرد است. در مطالعه‌ای، وانگ و همکاران، MOFهای مبتنی بر Co را به صورت یک مرحله‌ای بر روی پارچه کربنی و در دمای محیط سنتز کردند که منجر به افزایش رسانایی و دستیابی به حد تشخیص پایین برای تترابروموبیسفنول A شد [۵۲]. همچنین، دونگ و همکاران [۵۳] نانوصفحه‌های دوفلزی NiCo-MOF را بر روی پارچه کربنی رشد دادند که این امر از تجمع ذرات جلوگیری کرده و انتقال الکترون را بهبود بخشید.

توسعه یافت (شکل ۴). پلیمر PVP هم به عنوان پوشش اولیه و هم به عنوان هدایت کننده رشد پوسته ZIF-8 عمل می کند. این عملکرد دوگانه باعث تشکیل ساختار تخم مرغی یکنواخت و ایجاد هم افزایی بین دو MOF شد.

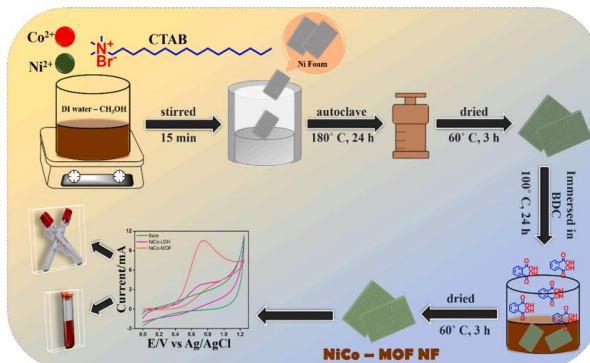


شکل ۴- نمودار شماتیک تهیه نانوساختارهای پوسته تخم مرغی PCN-222@ZIF-8 [۵۵].

عامل دار کردن لیگاند

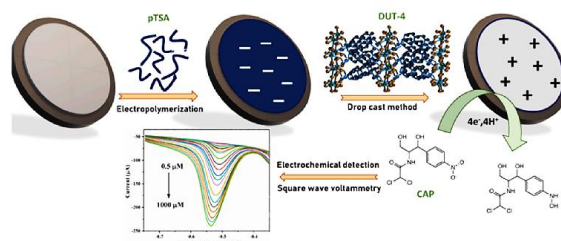
فعالیت الکتروکاتالیزوری MOF ها عمدتاً از واحدهای ساختمانی ثانویه (SBU) و لیگاندهای آلی ناشی می شود؛ بنابراین، اصلاح هدفمند لیگاندها یکی از مؤثرترین راهبردها برای بهینه سازی عملکرد سنسوری الکتروشیمیایی محسوب می شود. با وارد کردن گروه های عاملی مانند هیدروکسیل یا آمین، می توان برهم کنش میان MOF و آنالیت هدف را به طور قابل توجهی تقویت کرد [۴۹]. به طور خاص، لیگاندهای غنی از گروه های آمینی و ساختارهای آروماتیک الکترون غنی قادرند ظرفیت کمپلکس سازی و رفتار ردوکس را در برابر یون های فلزات سنگین بهبود دهند. یکی از مکانیسم های مهم در این فرآیند، مشارکت گروه های آمینی در واکنش های کمپلکس سازی و انتقال الکترون است.

فرا تر از ساختارهای سه بعدی، MOF های دوبعدی رسانا (cMOFs) به دلیل ساختار لایه ای و قابلیت تنظیم خواص الکترونی، عملکرد بسیار بهتری در سنسوری نشان می دهند. به عنوان نمونه، در ساختار $\text{Cu}_3(\text{THQ})_2$ که توسط نیو و همکاران سنتز شد [۵۶]، لیگاند تتراهیدروکسی کینون (THQ) موجب ایجاد ریزحفره های ۱٫۱ نانومتری و سایت های فعال متراکم می شد که رسانایی بالاتری نسبت به ساختارهای مبتنی بر HHTP ایجاد کرد. این سامانه در تشخیص پاراکسون عملکرد بسیار بالایی نشان داد و حد تشخیص آن به حدود ۱٫۳ nM رسید که نسبت به روش های مرسوم بهبود قابل توجهی را نشان می دهد.



شکل ۲- تصویر شماتیک آماده سازی نانوساختار Ni-Co-MOF و ساخت سنسورهای نورفلوکساسین [۵۱]

در مقابل، قالب های نرم از طریق برهم کنش های ضعیف، محیط های سطح مشترک یا ساختارهای انعطاف پذیر، بر فرایند هسته زایی و رشد بلور اثر می گذارند. پلیمرها یکی از مهم ترین قالب های نرم محسوب می شوند، زیرا همزمان دارای انعطاف پذیری طراحی، قابلیت دوپینگ و حتی رسانایی الکتریکی هستند [۴۸]. این مواد می توانند پیش و پس از هسته زایی بر اندازه، مورفولوژی و ویژگی های سطحی MOF ها اثر گذار باشند. در مطالعه ای توسط راف و همکاران [۵۴]، الکتروکاتالیزور DUT-4 برای تشخیص کلرامفنیکل به کار رفت و افزایش قابل توجهی در حساسیت مشاهده شد (شکل ۳). این بهبود به دلیل وجود گروه های سولفونیل با چگالی الکترونی بالا در پارا تولوئن سولفونیک اسید (pTSA) و تقویت برهم کنش الکترواستاتیک با MOF باردار مثبت بود. در ساختارهای پیچیده تر مانند MOF-on-MOF، نقش قالب های پلیمری اهمیت بیشتری پیدا می کند.



شکل ۳- شماتیک الکتروپلیمر کاربردی و کامپوزیت DUT-4 برای تشخیص کلرامفنیکل [۵۴].

برای مثال، در سامانه PCN-222@ZIF-8 اصلاح شده با پلی وینیل پیرولیدون (PVP) که توسط کائو و همکاران [۵۵]

ب) اصلاح حین سنتز

اصلاح حین سنتز (in situ) به رویکردی اشاره دارد که در آن اجزای عملکردی هم‌زمان با رشد بلورهای MOF وارد ساختار می‌شوند. برخلاف اصلاح پیش از سنتز که بر طراحی اولیه پیش‌ماده‌ها متکی است، در این روش، اجزای عملکردی در طول فرایند شکل‌گیری ساختار به‌طور فعال در تکامل MOF مشارکت دارند. این راهبرد شامل دو مکانیسم اصلی است: (۱) جفت‌سازی دینامیک سطح مشترک و (۲) تنظیم چندمقیاسه. در جفت‌سازی دینامیک، مواد رسانا مانند نانولوله‌های کربنی یا گرافن به‌عنوان بستر رشد عمل کرده و هم‌زمان با تشکیل MOF، یک سطح مشترک هم‌زیست و پایدار ایجاد می‌کنند. در تنظیم چندمقیاسه نیز، با کنترل پارامترهای واکنش مانند دما، حلال و غلظت، می‌توان ساختار بلوری، توزیع منافذ و ویژگی‌های سطحی را در زمان واقعی تنظیم کرد [۵۷]. با وجود مزایای قابل توجه در بهبود رسانایی و فعالیت کاتالیزوری، این روش با چالش‌هایی نظیر رقابت هم‌زمان بین رشد MOF و بسترهای رسانا، دشواری در کنترل انرژی سطح مشترک و کاهش تکرارپذیری در شرایط پیچیده واکنش مواجه است. علاوه بر این، پایداری بلندمدت این ساختارهای هیبریدی هنوز به‌طور کامل روشن نشده است.

ج) اصلاح پس از سنتز

اصلاح پس از سنتز شامل اعمال تغییرات ثانویه بر روی MOFهای تشکیل‌شده است. در این مرحله، ساختار اولیه MOF حفظ می‌شود یا به ساختار جدیدی تبدیل می‌گردد. این روش به دو دسته اصلی تقسیم می‌شود: (۱) کامپوزیت‌های MOF و (۲) مشتقات MOF. در کامپوزیت‌های MOF، ساختار اصلی حفظ شده و اجزای عملکردی جدید به آن افزوده می‌شوند. در مقابل، در مشتقات MOF، ساختار اولیه تحت عملیات حرارتی یا شیمیایی تغییر یافته و به مواد جدیدی مانند اکسیدها یا هیدروکسیدهای فلزی تبدیل می‌شود [۴۸].

۳-۴- سنسورهای مبتنی بر MOF

سنسورهای الکتروشیمیایی به‌طور سنتی از ظرفیت بالای MOF ها به دلیل سطح ویژه زیاد، تخلخل قابل تنظیم و تنوع ساختاری بهره می‌برند. این ویژگی‌ها MOFها را به بستری مناسب برای شناسایی مؤثر انواع آنالیت‌ها تبدیل کرده است. پیشرفت‌های اخیر در حوزه طراحی، سنتز و عامل‌داری MOFها بر بهینه‌سازی حساسیت، گزینش‌پذیری و پایداری این سنسورها متمرکز بوده است. حساسیت یک سنسور الکتروشیمیایی تابعی از سطح

الکتروفعال الکترود و کارایی انتقال جرم گونه‌های هدف است. کاهش اندازه ذرات به مقیاس نانو منجر به افزایش سطح فعال و بهبود دسترسی آنالیت به سایت‌های واکنش می‌شود [۵۸]. علاوه بر این، MOFهای دارای ساختارهای تخلخل سلسله‌مراتبی و معماری‌های پیچیده مانند نانوصفحات دوبعدی یا ساختارهای هیبریدی، مسیرهای انتقال جرم و الکترون را تسهیل می‌کنند. در نتیجه، توسعه نانوساختارهای MOF با طراحی‌های مهندسی‌شده، نقش کلیدی در کاهش زمان پاسخ سنسورها دارد.

۳-۵- روش‌های بهبود سنسورهای مبتنی بر MOF

MOFهای نانوساختار: در مقایسه با نمونه‌های میکرومتری، MOFهای نانوساختار دارای سطح فعال در دسترس بیشتری هستند و انتقال جرم آنالیت را به سایت‌های واکنش تسهیل می‌کنند. این ویژگی‌ها منجر به افزایش کارایی الکتروکاتالیزوری و حساسیت سنسور می‌شوند. به‌طور کلی، این نانوساختارها حد تشخیص را به مقیاس‌های نانومولار و حتی پیکومولار کاهش داده‌اند. به‌عنوان مثال، لی و همکاران نشان دادند که کاهش اندازه ذرات $\text{NH}_2\text{-Ni-MOF}$ از ۱٫۵۱ میکرومتر به ۳۰۰ نانومتر موجب افزایش ۲٫۷ برابری فعالیت الکتروکاتالیزوری شد [۵۹]. نمونه‌های متعددی از MOFهای نانومقیاس مانند Ni-MOF و Cu-MOF برای تشخیص آنالیت‌های مختلف گزارش شده‌اند. همچنین یان و همکاران از یک Zr-MOF نانوساختار به‌عنوان آند شبه‌خازنی در سامانه‌های هیبریدی استفاده کردند [۶۰].

نانوکامپوزیت‌های مشتق از MOF: ترکیب MOFها با مواد کربنی و ترکیبات فلزی منجر به ایجاد نانوکامپوزیت‌هایی با رسانایی بالا و فعالیت الکتروشیمیایی تقویت‌شده می‌شود. به‌عنوان نمونه، ترکیب مس و اکسید مس با ساختارهای کربنی موجب افزایش چشمگیر رسانایی الکتریکی و در نتیجه بهبود حساسیت و گزینش‌پذیری سنسور می‌شود. این نانوکامپوزیت‌ها از یک سو سطح ویژه بالای MOFها و از سوی دیگر ویژگی‌های انتقال الکترون مواد کربنی مانند گرافن یا نانولوله‌های کربنی را هم‌زمان در اختیار دارند. این هم‌افزایی منجر به انتقال بار سریع‌تر، پاسخ الکتروشیمیایی قوی‌تر و تشخیص دقیق‌تر آنالیت‌ها می‌شود. همچنین این ساختارها به دلیل پایداری شیمیایی بالا، برای کاربردهای طولانی‌مدت مناسب هستند [۶۱].

MOFهای دوفلزی: MOFهای دوفلزی به دلیل وجود دو مرکز فلزی متفاوت، فعالیت الکتروکاتالیزوری بالاتری نسبت به MOFهای تک‌فلزی دارند. هم‌افزایی بین فلزات مختلف مانند Cu و Ni موجب افزایش تعداد سایت‌های فعال و بهبود انتقال

سال‌های اخیر، توسعه سنسورهای مبتنی بر MOF امکان تشخیص این ترکیبات را در غلظت‌های بسیار پایین فراهم کرده است. جدول ۴ و ۵ نمونه‌هایی از سنسورهای مبتنی بر MOF اصلاح شده را در تشخیص و اندازه‌گیری آلاینده‌های نوظهور نشان می‌دهد.

تحلیل مقایسه‌ای عملکرد سنسورهای مبتنی بر MOF

مطالعه نمونه‌های ارائه شده در جدول‌های ۴ و ۵ نشان می‌دهد که صرف استفاده از یک چارچوب آلی-فلزی، تضمین کننده عملکرد برتر سنسور نیست، بلکه نوع طراحی ساختار، روش اصلاح و نحوه یکپارچه‌سازی MOF با سایر مواد نقش تعیین کننده‌ای در عملکرد نهایی دارد. بررسی مطالعات اخیر نشان می‌دهد که بیشترین بهبود حساسیت معمولاً در سامانه‌هایی مشاهده می‌شود که MOF با مواد رسانای کربنی، نانوذرات فلزی یا پلیمرهای رسانا ترکیب شده است. این مواد با افزایش رسانایی الکتریکی، کاهش مقاومت انتقال بار و فراهم کردن مسیرهای سریع‌تر برای انتقال الکترون، محدودیت ذاتی بسیاری از MOF‌های خالص را برطرف می‌کنند [۳۶۱].

از نظر حد تشخیص (LOD)، اختلاف قابل توجهی میان ساختارهای مختلف مشاهده می‌شود. به عنوان مثال، سنسور Ag_2SiF_6 -MOF برای اندازه‌گیری پنی سیلین به حد تشخیص در مقیاس پیکوگرم بر میلی لیتر دست یافته است، در حالی که بسیاری از سنسورهای مبتنی بر MOF‌های تک‌فلزی دارای حدود تشخیص در محدوده نانومولار یا میکرومولار هستند. این اختلاف نشان می‌دهد که انتخاب نوع فلز، طراحی ساختار متخلخل و استفاده از نانوکامپوزیت‌های رسانا تأثیر مستقیمی بر حساسیت سنسور دارد [67].

از سوی دیگر، مقایسه نتایج نشان می‌دهد که MOF‌های دوفلزی معمولاً عملکرد بهتری نسبت به MOF‌های تک‌فلزی ارائه می‌کنند. حضور هم‌زمان دو مرکز فلزی موجب ایجاد اثر هم‌افزایی، افزایش تعداد سایت‌های فعال، بهبود انتقال الکترون و تسریع فرآیندهای الکتروکاتالیزوری می‌شود. به همین دلیل، ساختارهایی مانند $Cu-Ni$ ، $Ni-Co$ و $Co-Fe$ در سال‌های اخیر به یکی از مهم‌ترین گزینه‌ها برای طراحی سنسورهای نسل جدید تبدیل شده‌اند [۳، ۵۰].

یکی دیگر از روندهای قابل توجه، حرکت از ساختارهای سه‌بعدی متداول به سمت MOF‌های دوبعدی و نانوساختارهای فوق‌نازک است. کاهش ضخامت ساختار موجب کوتاه‌تر شدن مسیر انتقال الکترون، افزایش سطح فعال در دسترس و تسریع نفوذ آنالیت می‌شود. مطالعات گزارش کرده‌اند که MOF‌های دوبعدی رسانا (Conductive 2D MOFs) نسبت به بسیاری از ساختارهای

الکترون می‌شود. این ویژگی باعث شده است MOF‌های دوفلزی در سنسورهای زیست‌محیطی و زیست‌پزشکی کاربرد گسترده‌ای داشته باشند. برای مثال، ترکیب $Cu-Ni$ توانایی بالایی در تشخیص گلوکز و یون‌های فلزات سنگین نشان داده است. همچنین طراحی‌های پیشرفته مانند ساختارهای $M-NiS_4$ پایداری چرخه‌ای بالایی را در سامانه‌های الکتروشیمیایی ارائه کرده‌اند [۳].

MOF‌های عامل دار شده: عامل دارسازی MOF‌ها با پلیمرهای رسانا، گرافن یا نانولوله‌های کربنی یکی از مؤثرترین روش‌ها برای افزایش رسانایی و بهبود عملکرد سنسوری است. این اصلاحات موجب افزایش سطح فعال، بهبود سینتیک انتقال الکترون و افزایش ظرفیت جذب آنالیت می‌شود. ترکیب MOF با مواد کربنی نه تنها حساسیت را افزایش می‌دهد، بلکه پایداری شیمیایی سنسور را نیز تقویت می‌کند. این ویژگی‌ها امکان طراحی ساختارهای قابل تنظیم از نظر ابعاد، مورفولوژی و ترکیب را فراهم می‌سازد [۶۲]. همچنین روش‌هایی مانند سنتز لیزری نیز برای تولید ساختارهای متخلخل رسانا مبتنی بر MOF توسعه یافته‌اند.

۳-۶- کاربردهای سنسورهای مبتنی بر MOF

تشخیص داروها با استفاده از فناوری MOF: کاربرد MOF‌ها در سنسورهای دارویی به دلیل حساسیت بالا، گزینش پذیری مناسب و امکان طراحی ساختارهای هدفمند، رشد چشمگیری داشته است [63, 64]. این سنسورها قادر به تشخیص داروهایی مانند آنتی بیوتیک‌ها، ضدافسردگی‌ها و مسکن‌ها در نمونه‌های زیست‌محیطی و بیولوژیکی هستند. برای مثال، سیستم سنسوری Ciprofloxacin مبتنی بر کامپوزیت $NH_2-UiO-66/RGO$ نشان داد که ترکیب سایت‌های فعال MOF با رسانایی بالای گرافن احیاء شده موجب افزایش چشمگیر سیگنال الکتروشیمیایی می‌شود [65].

تشخیص آلاینده‌های نوظهور با استفاده از MOF: آلاینده‌های نوظهور شامل داروها، آفت‌کش‌ها و ترکیبات مختل کننده غدد درون ریز هستند که تهدید جدی برای سلامت انسان و محیط زیست محسوب می‌شوند. این آلاینده‌ها که یا به تازگی سنتز شده‌اند یا اخیراً به دلیل اثرات زیست‌محیطی و سلامت انسانی مورد توجه قرار گرفته‌اند [۲]. معمولاً در غلظت‌های بسیار پایین (در حد $1 \mu g L^{-1}$) در محیط یافت می‌شوند، اما با وجود غلظت کم، به دلیل ویژگی‌هایی مانند پایداری بالا، قابلیت تجمع زیستی و امکان انتقال در فواصل طولانی، تهدیدی جدی برای سلامت انسان و اکوسیستم‌ها محسوب می‌شوند [66]. در

غذایی و نمونه‌های زیستی ارائه دهند که بیانگر قابلیت کاربرد عملی این حسگرها است [67-73]. در مجموع، مرور مطالعات نشان می‌دهد که روند توسعه سنسورهای مبتنی بر MOF از استفاده از ساختارهای ساده به سمت طراحی سامانه‌های چندجزئی، نانوکامپوزیتی و هوشمند در حال حرکت است؛ سامانه‌هایی که در آن‌ها طراحی ساختار، اصلاح سطح، انتخاب مراکز فلزی و بهره‌گیری از الگوریتم‌های هوش مصنوعی به صورت هم‌زمان برای دستیابی به بیشترین حساسیت، کمترین حد تشخیص و بیشترین پایداری به کار گرفته می‌شود. این روند، مسیر توسعه نسل آینده سنسورهای الکتروشیمیایی مبتنی بر MOF را به خوبی ترسیم می‌کند.

سه‌بعدی، پاسخ سریع‌تر، حساسیت بیشتر و پایداری الکتروشیمیایی بالاتری ارائه می‌کنند و از گزینه‌های بسیار امیدوارکننده برای توسعه سنسورهای پوشیدنی و قابل حمل به شمار می‌روند [۳، ۵۶]. از نظر نوع کاربرد نیز تفاوت‌هایی مشاهده می‌شود. سنسورهای مورد استفاده برای اندازه‌گیری داروها معمولاً بر افزایش گزینش‌پذیری نسبت به مولکول هدف تمرکز دارند، در حالی که در سنسورهای زیست‌محیطی، علاوه بر حساسیت، پایداری شیمیایی در محیط‌های آبی، مقاومت در برابر تداخل یون‌های مختلف و قابلیت اندازه‌گیری در نمونه‌های واقعی اهمیت بیشتری پیدا می‌کند. بررسی داده‌های جدول‌های ۴ و ۵ نشان می‌دهد که بسیاری از سامانه‌های معرفی شده توانسته‌اند بازیابی بالاتر از ۹۵ درصد را در نمونه‌های واقعی مانند آب‌های محیطی، شیر، مواد

جدول ۴ - کاربردهای منتخب سنسورهای الکتروشیمیایی برای تعیین داروها

ترکیب	سنسور	MOF	روش	محدوده خطی	حد تشخیص (LOD)	نمونه واقعی	بازیابی (%)	مرجع
پنی سیلین	Ag ₂ SiF ₆ -MOF	Ag-MOF	EIS	0.001-0.05 ng mL ⁻¹	0.849 pgmL ⁻¹	شیر خام	۹۹,۲۶-۱۰۴,۸	[67]
تتراسایکلین	ErGO/Cu-MOF/PtNPs	Cu-MOF	CV	1.0-200.0 μM	0.03 μM	آب دریاچه	۹۶,۰-100.0	[68]
دیکلوفناک	Co ₃ Cu ₄ Se@NC/GCE	CoCu-MOF	DPV	0.1-10.0 μM	۰,۰۲۴ μM	آب رودخانه	۹۳,۲-112.7	[69]
استامینوفن	CB/Ce-MOF/GCE	Ce-MOF	DPV	۲۵۲,۰-۰,۳ μM	۰,۱۱۷۰ μM	محلول استامینوفن	۹۷,۳۸-103.7	[70]
مورفین	CHM@MWCNTs	Cu-Hemin	DPV	0.09 - 30 μM	۹,۲ nM	ادرار انسان	۹۱,۲-98.1	[71]

جدول ۵ - کاربردهای منتخب سنسورهای الکتروشیمیایی برای تعیین آلاینده‌های صنعتی نوظهور

ترکیب	سنسور	MOF	روش	محدوده خطی	حد تشخیص (LOD)	نمونه واقعی	بازیابی (%)	مرجع
بیسفنول A	Au-AgMSs@Cu-MOF	Cu-MOF	DPV	۲,۰-۲۰,۰ mM	۲,۹ mM	گوجه‌فرنگی منجمد	۹۴,۰-۱۰۰,۸	[72]
بیسفنول S	Au-AgMSs@Cu-MOF	Cu-MOF	DPV	۱,۰-۱۰,۰ mM	۳,۲ mM	تن ماهی کنسروی	۹۴,۰-۱۰۰,۸	[72]
هیدروکینون	MCHS ₃ /Co@CNTs/GCE	ZIF-67	DPV	۱,۰-۱۵۰,۰ μM	۰,۲۷ μM	نمونه آب محیطی	۹۵,۲-۱۰۶,۴	[73]
رزورسینول	MCHS ₃ /Co@CNTs/GCE	ZIF-67	DPV	۲۰-۱۰۰۰ μM	۴,۲۱ μM	نمونه آب محیطی	۹۵,۲-۱۰۶,۴	[73]

برای مثال، در طراحی MOF های دوفلزی مورد استفاده در الکتروکاتالیز و سنسورهای الکتروشیمیایی، الگوریتم های یادگیری ماشین برای تعیین نوع و نسبت بهینه فلزات به کار گرفته شده اند که در نهایت منجر به افزایش فعالیت الکتروکاتالیزوری و بهبود عملکرد سنسورها شده است [75].

نقش هوش مصنوعی در توسعه سنسورهای الکتروشیمیایی مبتنی بر MOF

کاربرد AI تنها به طراحی مواد محدود نمی شود، بلکه در مراحل مختلف توسعه سنسورهای الکتروشیمیایی نیز نقش مهمی ایفا می کند. این فناوری می تواند در انتخاب ترکیب مناسب کامپوزیت ها، بهینه سازی شرایط ساخت، تحلیل سیگنال های الکتروشیمیایی، حذف نویز، شناسایی الگوهای پیچیده و حتی تصمیم گیری هوشمند برای تشخیص آنالیت ها مورد استفاده قرار گیرد.

به عنوان نمونه، در آرایه های سنسوری مبتنی بر MOF نانولوله های کربنی چنددیواره، ترکیب طیف سنجی امپدانس الکتروشیمیایی با الگوریتم های یادگیری ماشین امکان شناسایی بلادرنگ و دقیق ترکیبات آلی فرار میکروبی را فراهم کرده است [76]. این نتایج نشان می دهد که AI علاوه بر طراحی ساختار MOF ها، می تواند معماری سامانه های سنسوری و پردازش داده های حاصل از آن ها را نیز بهینه سازی کند و زمینه توسعه سنسورهای هوشمند، خودآموز و متصل به اینترنت اشیا را فراهم آورد.

سایر کاربردهای هوش مصنوعی در توسعه MOF ها

اگرچه تمرکز اصلی این مقاله بر کاربردهای سنسوری MOF ها است، اما مرور سایر کاربردهای AI در توسعه این مواد می تواند چشم انداز وسیع تری از ظرفیت این فناوری ارائه دهد. در سال های اخیر، الگوریتم های هوش مصنوعی در حوزه هایی مانند جذب گاز، جداسازی، کاتالیز و تصفیه آب نیز نقش مهمی در طراحی و غربالگری سریع ساختارهای MOF ایفا کرده اند و بسیاری از این دستاوردها در آینده می توانند به توسعه مواد مناسب برای سنسورهای محیط زیستی نیز منجر شوند.

الف) جذب گاز

در حوزه جذب گاز، الگوریتم های هوش مصنوعی برای پیش بینی رفتار جذب و انتخاب هدفمند ساختارهای MOF مورد استفاده قرار گرفته اند. مدل های داده محور با ترکیب اطلاعات حاصل از

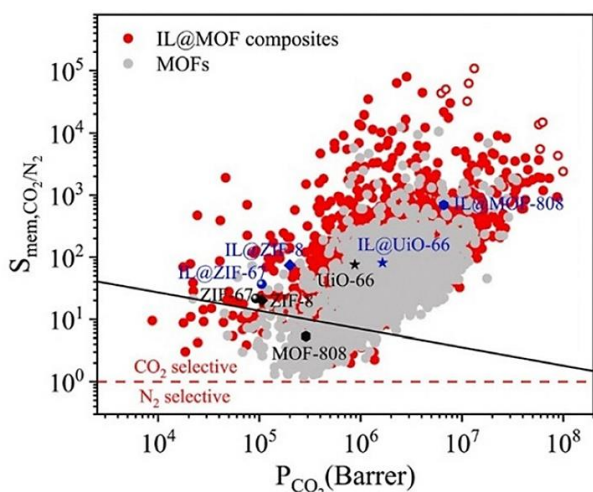
سنسورهای MOF پوشیدنی و یکپارچه با اینترنت اشیا: ادغام MOF ها در سامانه های پوشیدنی و اینترنت اشیا، امکان پایش بلادرنگ سلامت و محیط زیست را فراهم کرده است. برای مثال، کامپوزیت UiO-66-NH₂@PDMS توانست کورتیزول را در عرق با حد تشخیص ۰.۱ نانومولار و زمان پاسخ ۳۰ ثانیه شناسایی کند. همچنین سنسورهای گلوکز مبتنی بر نانوصفحات Fe(II)-MOF عملکرد مناسبی در محیط های اسیدی عرق نشان داده اند و حد تشخیص ۱۷.۶ μM را ارائه کرده اند [74]. این فناوری ها نشان دهنده حرکت به سمت سنسورهای زیستی هوشمند، قابل حمل و متصل به سیستم های داده محور هستند.

۳-۷- سنسورهای الکتروشیمیایی مبتنی بر MOF با هدایت هوش مصنوعی

در سال های اخیر، هوش مصنوعی، به ویژه یادگیری ماشین (ML) و مدل های زبانی بزرگ (LLMs)، به یکی از فناوری های کلیدی در توسعه مواد پیشرفته و سامانه های سنسوری تبدیل شده است. در حوزه چارچوب های آلی-فلزی، این فناوری ها نه تنها فرآیند کشف و طراحی مواد جدید را تسریع کرده اند، بلکه در بهینه سازی عملکرد سنسورهای الکتروشیمیایی، تحلیل داده های پیچیده، انتخاب ترکیبات مناسب و توسعه سامانه های هوشمند نقش مهمی ایفا می کنند. در نتیجه، توسعه سنسورهای مبتنی بر MOF از یک رویکرد تجربی و مبتنی بر آزمون و خطا، به سمت طراحی داده محور و پیش بینی پذیر حرکت کرده است.

نقش هوش مصنوعی در طراحی و اصلاح چارچوب های آلی-فلزی

یکی از مهم ترین کاربردهای AI در حوزه MOF ها، طراحی هدفمند ساختارهای جدید و پیش بینی عملکرد آن ها پیش از سنتز آزمایشگاهی است. استفاده از پایگاه های داده گسترده MOF ها همراه با الگوریتم های یادگیری ماشین، امکان استخراج روابط پیچیده میان ساختار، ترکیب شیمیایی و عملکرد مواد را فراهم کرده است. در این رویکرد، مدل هایی مانند جنگل های تصادفی (Random Forests) و شبکه های عصبی گرافی (Graph Neural Networks; GNNs) قادرند ویژگی هایی نظیر تخلخل، پایداری، رسانایی، گزینش پذیری جذب و فعالیت الکتروشیمیایی MOF ها را با دقت قابل قبول پیش بینی کنند. این قابلیت موجب می شود انتخاب نوع لیگاند، گرهِ فلزی و معماری چارچوب بر اساس نیاز هر کاربرد به صورت هدفمند انجام گیرد و هزینه و زمان آزمون و خطا به میزان قابل توجهی کاهش یابد.

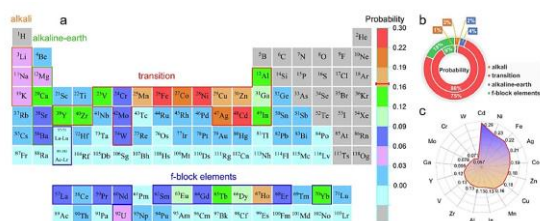


شکل ۵- کاربردهای MOF مبتنی بر هوش مصنوعی برای پیش‌بینی تراوایی CO₂ و گزینش‌پذیری CO₂/N₂ برای ۳۵۹۳ غشای IL@MOF [77].

ب) جداسازی

در فرایندهای جداسازی نیز هوش مصنوعی امکان استخراج روابط ساختار-عملکرد و غربالگری سریع هزاران ساختار MOF را فراهم کرده است. این مدل‌ها با یادگیری از پایگاه‌های داده بزرگ، روابط پیچیده ساختار-عملکرد را استخراج کرده و امکان غربالگری سریع مواد برای جداسازی گاز، فاز مایع و سیستم‌های کایرال را فراهم می‌کنند.

جداسازی فاز گاز: جداسازی صنعتی گاز معمولاً انرژی‌بر است، اما MOF‌ها با کمک AI به پلتفرم‌های هوشمند تبدیل شده‌اند. Yan و همکاران با ترکیب شبیه‌سازی و ML نشان دادند که سایت‌های فلزی باز نقش کلیدی در گزینش‌پذیری O₂/N₂ دارند (شکل ۶) [81]. Ren و همکاران نیز مدل ML برای حذف رادون توسعه دادند که بیش از ۸۵٪ راندمان حذف در سیستم‌های Rn/N₂ و Rn/O₂ ارائه داد [82]. این نتایج نشان‌دهنده قدرت AI در طراحی هدفمند MOF‌ها است.



شکل ۶- کاربردهای مبتنی بر هوش مصنوعی MOF‌ها در جداسازی. (a) تحلیل توزیع عنصری که احتمال حضور فلزات مختلف در پایگاه داده CoRE-MOF را نشان می‌دهد. (b) توزیع نوع فلز در ۱۰۰۰ MOF برتر (دایره داخلی) در مقایسه با کل MOF‌ها (دایره خارجی). (c) توزیع احتمالی فلزات واسطه در زیرمجموعه انتخاب‌شده [81].

شبیه‌سازی‌های مولکولی و داده‌های تجربی، امکان طراحی سریع‌تر جاذب‌های کارآمد را فراهم کرده‌اند. MOF‌ها به دلیل ساختار بلوری قابل طراحی، سطح ویژه بسیار بالا و شیمی منافذ قابل تنظیم، از بهترین گزینه‌ها برای جذب و جداسازی گاز محسوب می‌شوند. مدل‌های AI می‌توانند ویژگی‌هایی مانند قطبیت، قطر جنبشی و آنتالپی جذب را از داده‌های شبیه‌سازی و تجربی استخراج و ادغام کنند و در نتیجه بهینه‌سازی ساختار را تسریع نمایند. ادغام داده‌های چندوجهی و مدل‌های تفسیرپذیر، مسیر صنعتی‌سازی MOF‌ها در ذخیره‌سازی انرژی پاک و جداسازی گاز را تقویت می‌کند.

جذب کربن: کربن دی‌اکسید یکی از مهم‌ترین گازهای گلخانه‌ای و محصول جانبی اصلی فعالیت‌های صنعتی است. جذب مؤثر CO₂ برای کاهش تغییرات اقلیمی ضروری است. Zhang و همکاران پایگاه داده IL@MOF را توسعه دادند و با استفاده از شبیه‌سازی مولکولی، کامپوزیت IL@ZIF-67 را به‌عنوان گزینه برتر برای جذب CO₂ معرفی کردند (شکل ۵) [77]. سپس الگوریتم‌های یادگیری ماشین برای تحلیل گزینش‌پذیری CO₂/N₂ به کار گرفته شدند و عوامل کلیدی مؤثر بر جذب شناسایی گردید.

جذب هیدروژن: هیدروژن به‌عنوان حامل انرژی پاک با چگالی انرژی بالا شناخته می‌شود، اما ذخیره‌سازی آن به دلیل برهم‌کنش‌های ضعیف با مواد میزبان چالش برانگیز است. یادگیری ماشین نقش مهمی در حل این مسئله دارد. Liu و همکاران با استفاده از مدل‌های یادگیری عمیق، محدودیت‌های میدان نیروی کلاسیک را در مدل‌سازی برهم‌کنش H₂ با سایت‌های فلزی باز برطرف کردند [78]. Salehi و همکاران مدل ترکیبی CMIS را توسعه دادند و نشان دادند که سطح ویژه و حجم منافذ مهم‌ترین عوامل ذخیره‌سازی هیدروژن هستند [79]. همچنین Cao و همکاران با بررسی ۶۶۰ مدل مختلف، شبکه عصبی GRNN را به‌عنوان دقیق‌ترین مدل معرفی کردند (R² = 0.9946)، خطای نسبی ۵.۳۴٪ [80].

سنسورهای هوشمند، خودتنظیم و قابل استفاده در پایش محیط زیست را هموار کرده است. از این رو، انتظار می رود هوش مصنوعی در سال های آینده به یکی از ارکان اصلی طراحی و توسعه سنسورهای مبتنی بر MOF تبدیل شود.

چشم انداز و مسیرهای آینده همگرایی MOF ها، هوش مصنوعی و سنسورهای الکتروشیمیایی

در سال های اخیر، همگرایی میان چارچوب های آلی-فلزی، فناوری های هوش مصنوعی و کاربردهای سنسوری-زیست محیطی، یک پارادایم جدید در طراحی مواد پیشرفته ایجاد کرده است. در این چارچوب، MOF ها دیگر صرفاً به عنوان مواد متخلخل عملکردی در نظر گرفته نمی شوند، بلکه به عنوان پلتفرم های قابل برنامه ریزی برای توسعه سامانه های سنسوری هوشمند مطرح هستند که در آن ها خواص ساختاری، الکترونی و سطحی می تواند به صورت هدفمند برای یک آنالیت خاص تنظیم شود.

از منظر طراحی مواد، هوش مصنوعی و الگوریتم های یادگیری ماشین نقش کلیدی در تسریع فرآیند کشف و بهینه سازی MOF ها ایفا می کنند. این ابزارها با استخراج روابط غیرخطی میان ویژگی های ساختاری (مانند تخلخل، نوع فلز، انرژی سطحی و اندازه منافذ) و عملکرد سنسوری (حساسیت، حد تشخیص و گزینش پذیری)، امکان طراحی معکوس مواد را فراهم کرده اند. در نتیجه، به جای آزمون و خطای تجربی گسترده، مسیر طراحی سنسورهای مبتنی بر MOF به سمت مدل های داده محور و پیش بینی پذیر حرکت کرده است.

در سطح سامانه های سنسوری، ادغام MOF ها با نانومواد رسانا، پلیمرهای هوشمند و معماری های هیبریدی، همراه با تحلیل داده های مبتنی بر AI، منجر به توسعه سنسورهایی شده است که قادر به پردازش فوری سیگنال های الکتروشیمیایی هستند. این هم افزایی به ویژه در آرایه های سنسوری چندگانه و سامانه های متصل به اینترنت اشیا اهمیت دارد، جایی که الگوریتم های یادگیری ماشین می توانند الگوهای پیچیده پاسخ الکتروشیمیایی را تفسیر کرده و تشخیص دقیق آلاینده ها را در ماتریس های واقعی امکان پذیر سازند.

از منظر کاربردهای زیست محیطی، این همگرایی نقش مهمی در پایش آلاینده های نوظهور ایفا می کند. ترکیب سنسورهای مبتنی بر MOF با مدل های پیش بینی داده محور، امکان تشخیص سریع و کم هزینه ترکیباتی مانند داروها، آفت کش ها و ترکیبات مختل کننده غدد درون ریز را در غلظت های بسیار پایین فراهم

جداسازی فاز مایع: در فاز مایع، پیچیدگی ناشی از شباهت مولکولی بسیار بالاست. Mohd Aqib و همکاران با ترکیب یادگیری فعال و مونت کارلو، MOF هایی با اندازه منافذ کوچک تر از ۶ Å برای جداسازی پارا-زایلن شناسایی کردند [83]. این روش علاوه بر کاهش هزینه محاسباتی، دقت پیش بینی بالا (0.9 ± 0.09 mmol g⁻¹) و گزینش پذیری قابل توجه ارائه داد.

ج) کاتالیز

در طراحی کاتالیزورهای مبتنی بر MOF، الگوریتم های یادگیری ماشین مسیر انتخاب ترکیبات بهینه را کوتاه کرده و وابستگی به آزمون و خطا را کاهش داده اند. Zhou و همکاران با ترکیب داده کاوی و MOF، DFT، چندفلزی Ni₃Fe₁ را به عنوان کاتالیزور برتر OER با اضافه پتانسیل 208mV شناسایی کردند [84]. Mou و همکاران نیز برای احیای CO₂، توصیف گرهای کلیدی مانند ویژگی فلز و اثرات الکترونی لیگاند را استخراج کردند [85]. در حوزه فوتوکاتالیز، Bhavya Jaksani و همکاران با بهینه سازی بلادرنگ در سیستم جریان پیوسته، نرخ تولید متانول mol g⁻¹ h⁻¹ ۲,۳ را گزارش کردند [86] که ۲ تا ۱۰۰ برابر بالاتر از روش های معمول است.

د) تصفیه آب

در کاربردهای زیست محیطی، به ویژه تصفیه آب، مدل های هوش مصنوعی برای پیش بینی ظرفیت جذب، انتخاب جاذب مناسب و بهینه سازی عملکرد MOF ها مورد استفاده قرار گرفته اند. Wei و همکاران با ANN دو لایه، جذب Pb و Cd را با R² بزرگ تر از 0.999 مدل سازی کردند [87]. Abdi و همکاران نیز برای جذب As(V) به دقت ۰.۹۹۵۸ دست یافتند [88]. در آلاینده های آلی، Yu و همکاران با ترکیب MOF دو فلزی In-Eu و یادگیری ماشین، تشخیص تراسایکلین را در بازه ۰.۰-۱۲.۰ μM با R² = 0.96 امکان پذیر کردند [89]. همچنین یادگیری انتقالی برای بهینه سازی ساختار منافذ جهت حذف همزمان چند آلاینده به کار گرفته شده است.

در مجموع، اگرچه بسیاری از کاربردهای هوش مصنوعی در MOF ها تاکنون در حوزه هایی مانند جذب گاز، جداسازی، کاتالیز و تصفیه آب توسعه یافته اند، اما دانش حاصل از این مطالعات به طور مستقیم در طراحی نسل جدید سنسورهای الکتروشیمیایی نیز قابل استفاده است. پیش بینی ویژگی های ساختاری، انتخاب ترکیب های بهینه، تحلیل هوشمند داده های الکتروشیمیایی و یکپارچه سازی سنسورها با سامانه های اینترنت اشیا، مسیر توسعه

کرده است. این رویکرد نه تنها دقت اندازه‌گیری را افزایش داده، بلکه امکان پایش پیوسته و بلادرنگ کیفیت آب و محیط را نیز فراهم می‌سازد.

در نهایت، مسیر آینده این حوزه در گرو ادغام عمیق‌تر سه مؤلفه اصلی یعنی طراحی مواد مبتنی بر MOF، تحلیل داده‌های هوشمند مبتنی بر AI و کاربردهای واقعی سنسوری-زیست‌محیطی است. چنین همگرایی زمینه‌ساز توسعه نسل جدیدی از سامانه‌های سنسوری خودیادگیر، کم‌هزینه و مقیاس‌پذیر باشد که نقش مهمی در پایش سلامت انسان و محیط‌زیست ایفا خواهند کرد.

۴- نتیجه‌گیری

چارچوب‌های آلی-فلزی با دارا بودن سطوح ویژه منحصر به فرد، تخلخل قابل تنظیم و شیمی سطح تطبیق‌پذیر، به عنوان موادی دگرگون‌کننده در حوزه سنسوری الکتروشیمیایی ظهور کرده‌اند. در سال‌های اخیر، این مواد به دلیل قابلیت مهندسی ساختار و عملکرد، جایگاه ویژه‌ای در طراحی سنسورهای پیشرفته پیدا کرده‌اند. توسعه سنتز سبز، همراه با طراحی‌های راهبردی مواد، با موفقیت به چالش‌های رسانایی و پایداری پرداخته و تشخیص با حساسیت بالا را برای گونه‌های هدف ممکن ساخته است. این دستاوردها نشان می‌دهد که MOFها با غلبه بر محدودیت‌های ذاتی خود از طریق کنترل دقیق ساختار الکترونی، محیط منافذ و خواص شیمیایی سطح، می‌توانند به سنسورهایی با حساسیت و ویژگی بالا در شناسایی ترکیبات ناچیز تبدیل شوند.

در چند سال اخیر، ادغام هوش مصنوعی و یادگیری ماشین به‌طور عمیقی کشف، طراحی و کاربرد MOFها را تسریع کرده است. ترکیب داده‌های تجربی در مقیاس بزرگ، شبیه‌سازی‌های محاسباتی و الگوریتم‌های داده‌محور به طور قابل توجهی هزینه‌های آزمون و خطا را کاهش داده و کارایی توسعه مواد را بهبود بخشیده است. هم‌افزایی بین یادگیری ماشین و MOFها به عنوان یک موتور مرکزی برای نوآوری عمل کرده است؛ به‌طوری که این هم‌افزایی در طراحی هدفمند الکتروکاتالیزورهای MOF دوفلزی، غربالگری با توان بالا برای جذب گازهای خاص، و توسعه سامانه‌های سنسوری هوشمند به خوبی مشهود است. در این میان، نقش داده‌محوری در تبدیل فرآیندهای سنتی طراحی مواد به رویکردهای قابل پیش‌بینی و هوشمند کاملاً برجسته شده است.

با وجود پیشرفت‌های قابل توجه، برای دستیابی کامل به کاربردهای عملی، سنسورهای الکتروشیمیایی مبتنی بر MOFهای اصلاح شده هنوز با چالش‌های متعددی در انتقال از

تحقیقات آزمایشگاهی به محیط‌های پیچیده عملی مواجه هستند. این چالش‌ها شامل بهینه‌سازی راهبردهای اصلاح با رویکردهای یکپارچه و مبتنی بر مشخصه‌یابی درجا، غلبه بر محدودیت‌های تشخیص آلاینده‌های با ساختار پیچیده، آشکارسازی بینش‌های مکانیسمی با استفاده از تکنیک‌های طیفسنجی درجا و مدل‌سازی محاسباتی، هدف قرار دادن کاربردهای عملی از طریق تلاش‌های هم‌افزا در سه سطح مواد، سطوح مشترک و دستگاه‌ها، تضمین ایمنی محیطی با استفاده از گره‌های فلزی با سمیت کم و طراحی‌های سازگار با بازیافت و زیست‌تخریب‌پذیری و در نهایت تسریع تجاری‌سازی از طریق سنتز سبز، کاهش هزینه‌ها و توسعه سکوها یکپارچه چندمنظوره می‌باشند. در نتیجه، مسیر توسعه این فناوری نیازمند یکپارچگی میان طراحی مواد، مهندسی دستگاه و ملاحظات زیست‌محیطی است.

با وجود اینکه پذیرش صنعتی MOFها همچنان محدود است، اما استفاده هم‌افزای هوش مصنوعی و یادگیری ماشین مسیری کارآمد برای غلبه بر موانع فعلی فراهم کرده است. با پرداختن به چالش‌های هزینه و پایداری در عین پیشبرد کیفیت داده، شفافیت الگوریتم و اتوماسیون، راهبردهای هدایت‌شده توسط هوش مصنوعی در نهایت می‌توانند MOFها را به کاربردهای مقیاس‌پذیر، پایدار و تجاری نزدیک‌تر کنند. این تلاش‌های میان‌رشته‌ای، سنسورهای الکتروشیمیایی مبتنی بر MOF را به ابزاری ضروری برای مراقبت‌های بهداشتی، پایش محیط‌زیست و کاربردهای ایمنی صنعتی تبدیل خواهد کرد. در مجموع، آینده این حوزه در گرو همگرایی هوشمند میان مواد پیشرفته و سامانه‌های داده‌محور است.

۵- تشکر و قدردانی

نویسندگان از دانشگاه فرهنگیان و دانشگاه کاشان به خاطر حمایت از این پژوهش، تشکر و قدردانی می‌کنند.

۶- تعارض منافع

هیچ تعارض منافی توسط نویسندگان ابزار نشده است.

۷- منابع

- [1] Escher BI, Stapleton HM, Schymanski EL. Tracking complex mixtures of chemicals in our changing environment. Science. 2020;367(6476):388–92. <https://doi.org/10.1126/science.aay6636>
- [2] Wang F, Xiang L, et al. Emerging contaminants: a one health perspective. The



- [10] Li K, Yang J, Gu J. Hierarchically porous MOFs synthesized by soft-template strategies. *Accounts of chemical research*. 2022;55:2235–2247.
<https://doi.org/10.1021/acs.accounts.2c00262>
- [11] Shen M, Forghani F, Kong X, Liu D, Ye X, Chen S, Ding T. Antibacterial applications of metal-organic frameworks and their composites. *Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety*. 2020;19:1397–1419.
<https://doi.org/10.1111/1541-4337.12515>
- [12] Hao X, Song W, Wang Y, et al. Recent advancements in electrochemical sensors based on MOFs and their derivatives. *Small*. 2024:e2408624.
<https://doi.org/10.1002/sml.202408624>
- [13] Dai Y, Zhang G, Peng Y, et al. Recent progress in 1D MOFs and their applications in energy and environmental fields. *Advances in Colloid and Interface Science*. 2023;321:103022.
<https://doi.org/10.1016/j.cis.2023.103022>
- [14] Cruz-Navarro JA, Hernandez-Garcia F. Novel applications of metal-organic frameworks as redox-active materials for elaboration of carbon-based electrodes with electroanalytical uses. *Coordination chemistry reviews*. 2020;412:213263.
<https://doi.org/10.1016/j.ccr.2020.213263>
- [15] Jahangiri-Dehaghani F, Zare HR, Shekari Z. Measurement of aflatoxin M1 in powder and pasteurized milk samples by using a label-free electrochemical aptasensor based on platinum nanoparticles loaded on Fe-based metal-organic frameworks. *Food Chemistry*. 2020;310:125820.
<https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2019.125820>
- [16] Karmakar A, Velasco E, Li J. Metal-organic frameworks as effective sensors and scavengers for toxic environmental pollutants. *National Science Review*. 2022; 9: nwac091.
<https://doi.org/10.1093/nsr/nwac091>
- Innovation. 2024;5(4):100612.
<https://doi.org/10.1016/j.xinn.2024.100612>
- [3] Yousaf A, Zhao Z, Boota MW. Enhancing electrochemical detection with metal-organic frameworks: advances in functionalization, synthesis, and application. *Journal of Solid State Electrochemistry*. 2025;15:1–24.
<https://doi.org/10.1007/s10008-025-06477-w>
- [4] Yang W, Li X, Zhang M, et al. N/O co-doping porous biomass carbon constructed electrochemical sensor for universal and sensitive detection of mycotoxins. *Food Chemistry*. 2025;475:143397.
<https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2025.143397>
- [5] Chen J, Ding X, Zhang D. Challenges and strategies faced in electrochemical biosensing analysis of neurochemicals in vivo: a review. *Talanta*. 2024;266:124933.
<https://doi.org/10.1016/j.talanta.2023.124933>
- [6] Huang XC, Lin YY, Zhang JP, et al. Ligand-directed strategy for zeolite-type metal-organic frameworks: zinc(II) imidazoles with unusual zeolitic topologies. *Angew Chem*. 2006;45:1557–1559.
<https://doi.org/10.1002/anie.200503778>
- [7] Roth J, Trukhina O, Allouss D, Stoian T, Schertenleib T, Felder T, Queen WL. Post-synthetic modification of a MOF via continuous flow methods for gold E-waste recycling. *ChemSusChem*. 2024;18:e202401642.
<https://doi.org/10.1002/cssc.202401642>
- [8] Chui S, Lo S, et al. Frameworks for commercial success. *Nature Chemistry*. 2016;8:987.
<https://doi.org/10.1038/nchem.2661>
- [9] Duan D, Si X, Ding Y, et al. A novel molecularly imprinted electrochemical sensor based on MOF/CNTs and Prussian blue for detection of 17 β -estradiol. *Bioelectrochemistry*. 2019;129:211–217.
<https://doi.org/10.1016/j.bioelechem.2019.04.014>

material $[\text{Cu}_3(\text{TMA})_2(\text{H}_2\text{O})_3]_n$. *Science*. 1999;283:1148–1150.

<https://doi.org/10.1126/science.283.5405.1148>

[25] Yousaf A, Zhao Z, Wu L, et al. Sensitive detection of bisphenol A and S in plastic-packaged frozen meat using trimetallic MOF-coated electrospun nanofibers. *Process Safety and Environmental Protection*. 2024;191:102–111.

<https://doi.org/10.1016/j.psep.2024.08.132>

[26] Jabbar Khan A, Gao L, Numan A, et al. Recent advancements in the tailoring of nanomaterials via microwave-assisted synthesis: a comprehensive review. *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences*. 2024;50(1):515–538.

<https://doi.org/10.1080/10408436.2024.2446049>

[27] Liu Y, Wei Y, Liu M, et al. Electrochemical synthesis of large area two-dimensional metal–organic framework films on copper anodes. *Angewandte Chemie International Edition*. 2021;60:2887–2891.

<https://doi.org/10.1002/anie.202012971>

[28] Chatterjee T, Rahaman SKK, Alam SM. Sonochemical synthesis of metal–organic frameworks. In: Azim Y, Rather S-U, Bhawani SA, Bhatt PM, editors. *Synthesis of Metal–Organic Frameworks via Water-based Routes*. Elsevier. 2024;121–142.

<https://doi.org/10.1016/B978-0-323-95939-1.00015-0>

[29] Nath B. Mechanochemical synthesis of metal–organic frameworks. In: *Synthesis of Metal–Organic Frameworks Via Water-based Routes* 2024;(pp. 93-120). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-323-95939-1.00014-9>

[30] Pathak DD, Grover V. Mechanochemistry: synthesis that uses force. In: Tyagi AK, Ningthoujam RS, editors. *Handbook on synthesis strategies for advanced materials: Volume I*:

[17] Bai J, Wu M, He Q, et al. Emerging doped metal–organic frameworks: recent progress in synthesis, applications, and first-principles calculations. *Small*. 2024; 20: e2306616.

<https://doi.org/10.1002/sml.202306616>

[18] Li J, Kumar A, Johnson BA. Experimental manifestation of redox-conductivity in metal-organic frameworks and its implication for semiconductor/insulator switching. *Nature communications*. 2023; 14:4388.

<https://doi.org/10.1038/s41467-023-40110-6>

[19] Healy C, Patil KM, Wilson BH, et al. Tuning electrical and mechanical properties of metal–organic frameworks by metal substitution. *Coordination chemistry reviews*. 2020;419.

<https://doi.org/10.1021/acsami.3c08470>

[20] Shi Y, Yang B, Song G, et al. Rubik's cube PBA frameworks for optimizing the electrochemical performance in alkali metal-ion batteries. *Science*. 2024; 673:807–816.

<https://doi.org/10.1016/j.jcis.2024.06.032>

[21] Luo HB, Qiu R, Wang P, Zhang J, Wang L, Ren XM. Materials, interfaces, high proton conductivity achieved by encapsulation of imidazole molecules into proton-conducting MOF-808. *ACS Applied Materials & Interfaces*. 2019;11:9164–9171.

<https://doi.org/10.1021/acsami.9b01075>

[22] Yaghi OM, Li G, Li HL. Selective binding and removal of guests in a microporous metal–organic framework. *Nature*. 1995;378:703–706.

<https://doi.org/10.1038/378703a0>

[23] Li HL, Eddaoudi M, O'Keeffe M, Yaghi OM. Design and synthesis of an exceptionally stable and highly porous metal-organic framework. *Nature*. 1999;402:6759.

<https://doi.org/10.1038/46248>

[24] Chui SY, Lo MF, Charmant JPH, et al. A chemically functionalizable nanoporous



- [38] Timofeeva M, Mitusova KA, Akhmetova DR, Marukhnich PA, Davydenko VK, Povarov SA, Timin AS, Milichko VA, Shipilovskikh SA. Control morphology and biological properties of HKUST-1 MOFs using an ultrasound-assisted approach. *ACS Applied Bio Materials*. 2024;7(9):6201-12. <https://doi.org/10.1021/acsabm.4c00765>
- [39] Givirovskaia D, Givirovskiy G, Laitinen V, Park Y, Amin P, ur Rehman A, Rezaei N, Repo E. Efficient water splitting with a MOF-74 (Ni)-derived composite electrocatalyst prepared via microwave-and laser-assisted synthesis. *Nano Res*. 2025;18(2):94907100. <https://doi.org/10.26599/NR.2025.94907100>
- [40] Xie L, Ding J, Kong X, Qin J, Wang J. Microwave-assisted synthesis of Mg-gallate for efficient CO₂ capture. *Materials Today Sustainability*. 2023;22:100356. <https://doi.org/10.1016/j.mtsust.2023.100356>
- [41] Główniak S, Szczeńniak B, Choma J, Jaroniec M. Advances in microwave synthesis of nanoporous materials. *Advanced Materials*. 2021;33(48):2103477. <https://doi.org/10.1002/adma.202103477>
- [42] Zhang Y, Li N, Xu Y, Yang M, Luo X, Hou C, Huo D. An ultra-sensitive electrochemical aptasensor based on Co-MOF/ZIF-8 nano-thin-film by the in-situ electrochemical synthesis for simultaneous detection of multiple biomarkers of breast cancer. *Microchemical Journal*. 2023;187:108316. <https://doi.org/10.1016/j.microc.2022.108316>
- [43] Beladona SU, Rochliadi A, Patah A. A facile synthesis of hkust-1 MOF through reductive electrosynthesis method. *Key Engineering Materials*. 2021;874:3-12. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/KEM.874.3>
- [44] Shakeel N, Khan J, Al-Kahtani AA. Morphology-driven electrochemical attributes of Cu-MOF: a high-performance anodic material for battery supercapacitor techniques and fundamentals. Singapore: Springer Singapore. 2021;657–682. https://doi.org/10.1007/978-981-16-1807-9_20
- [31] Chen D, Zhao J, Zhang P, Dai S. Mechanochemical synthesis of metal-organic frameworks. *Polyhedron*. 2019;162:59–64. <https://doi.org/10.1016/j.poly.2019.01.024>
- [32] Wenger SR, Kearns ER, Miller KL, D'Alessandro DM. Green, one-step mechanochemical synthesis and techno-economic analysis of UiO-66-NH₂. *ACS Applied Energy Materials*. 2022;6:9074–9083. <https://doi.org/10.1021/acsaem.2c02460>
- [33] Li W, Zhou C, Li C, Zhu W, Shi J, Liu G. Synthesis of UiO-66 series metal-organic framework composites and the adsorption effect on gallium. *Chemical Engineering Journal*. 2023;455:140881. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2022.140881>
- [34] Campbell MG, Liu SF, Swager TM, Dinca M. Chemiresistive sensor arrays from conductive 2D metal-organic frameworks. *Journal of the American Chemical Society*. 2015;137(43):13780-3. <https://doi.org/10.1021/jacs.5b09600>
- [35] Niu K, Sun P, Chen J, Lu X. Dense conductive metal-organic frameworks as robust electrocatalysts for biosensing. *Analytical Chemistry*. 2022;94(49):17177-85. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.2c03766>
- [36] Du PD, Hieu NT, Thien TV. Ultrasound-Assisted Rapid ZIF-8 Synthesis, Porous ZnO Preparation by Heating ZIF-8, and Their Photocatalytic Activity. *Journal of Nanomaterials*. 2021;2021(1):9988998. <https://doi.org/10.1155/2021/9988998>
- [37] Yi J, Lee G, Park SS. Solvent-Induced Structural Rearrangement in Ultrasound-Assisted Synthesis of Metal-Organic Frameworks. *Small Methods*. 2024;8(12):2400363. <https://doi.org/10.1002/smtd.202400363>

serum using a flexible Ni foam based Ni-Co-MOF ultrathin nanosheets derived from Ni-Co-LDH. *Microchemical Journal*. 2021;160:105747.

<https://doi.org/10.1016/j.microc.2020.105747>

[52] Wang S, Chen Y, Long M, Li W, Huang Y, Lai S, Yang G, Song Y, Chen J, Yu G. Fabrication of well-aligned Co-MOF arrays through a controlled and moderate process for the development of a flexible tetrabromobisphenol A sensor. *Analyst*. 2024;149(6):1807-16.

<https://doi.org/10.1039/D3AN01950K>

[53] Dong Y, Li J, Zeng H, Li T, Hu D, Li Z, Fu Q, Bateer B. Construction of bimetallic MOF derived nickel-cobalt selenide on carbon cloth as integrated electrode for acetaminophen sensing. *Microchemical Journal*. 2025;208:112400. <https://doi.org/10.1016/j.microc.2024.112400> [54] Rafi J, Daniel M, Neppolian B. Ultrasensitive detection of chloramphenicol in water using functionalized polymers with an aluminium organic framework. *Chemosphere*. 2024;357:141981.

<https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2024.141981>

[55] Cao Q, Xiao Y, Liu N, Huang R, Ye C, Huang C, Liu H, Han G, Wu L. Synthesis of Yolk/Shell heterostructures MOF@MOF as biomimetic sensing platform for catechol detection. *Sensors and Actuators B: Chemical*. 2021;329:129133. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2020.129133>

[56] Niu K, Sun P, Chen J, Lu X. Dense conductive metal-organic frameworks as robust electrocatalysts for biosensing. *Analytical Chemistry*. 2022;94(49):17177-85.

<https://doi.org/10.1021/acs.analchem.2c03766>

[57] Karmakar A, Velasco E, Li J. Metal-organic frameworks as effective sensors and scavengers for toxic environmental pollutants. *National science review*. 2022;9(7):nwac091.

<https://doi.org/10.1093/nsr/nwac091>

hybrids. *RSC advances*. 2024;14(46):33941-51.

<https://doi.org/10.1039/D4RA05790B>

[45] Mason JR, Weyrich JN, Yang H. Mechanistic study of porosity formation in liquid-assisted mechanochemical synthesis of metal-organic framework Cu₃ (BTC) 2 for adsorption-based applications. *Sustainability*. 2022;14(15):9150.

<https://doi.org/10.3390/su14159150>

[46] Gao Q, Sheng Q, Zhang S, Tang Y. Recent trends on MIL-88 (Fe) metal-organic frameworks: synthesis and applications in pollutant removal and detection. *RSC advances*. 2025;15(32):26184-200.

<https://doi.org/10.1039/D5RA03049H>

[47] Swain J, Priyadarshini A, Panda S, Hajra S, Das N, Vivekananthan V, Mistewicz K, Samantray R, Joon Kim H, Sahu R. Metal-organic frameworks: synthesis methods and multifunctional applications. *Energy Technology*. 2025;13(5):2402354.

<https://doi.org/10.1002/ente.202402354>

[48] Li M, Bu T, Liang Y, Zou Y, Wen K, Shen Y, Shao B. Functionalized MOFs for electrochemical sensing of emerging contaminants: From design to deployment. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*. 2026:118891.

<https://doi.org/10.1016/j.trac.2026.118891>

[49] Mamaghani AH, Liu J, Zhang Z, Gao R, Wu Y, Li H, Feng M, Chen Z. Promises of MOF-based and MOF-derived materials for electrocatalytic CO₂ reduction. *Advanced Energy Materials*. 2024;14(39):2402278.

<https://doi.org/10.1002/aenm.202402278>

[50] Cui Y, He B, Liu X, Sun J. Ionic liquids-promoted electrocatalytic reduction of carbon dioxide. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. 2020;59(46):20235-52.

<https://doi.org/10.1021/acs.iecr.0c04037>

[51] Umesh NM, Jesila JA, Wang SF, Vishnu N, Yang YJ. Novel voltammetric detection of norfloxacin in urine and blood



- some magnetic metal-organic framework nano composites for pharmaceutical applications. *Inorganic Chemistry Communications*. 2022;138:109251. <https://doi.org/10.1016/j.inoche.2022.109251>
- [66] Li X, Shen X, Jiang W, Xi Y, Li S. Comprehensive review of emerging contaminants: Detection technologies, environmental impact, and management strategies. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 2024;278:116420. <https://doi.org/10.1016/j.ecoenv.2024.116420>
- [67] He H, Wang SQ, Han ZY, Tian XH, Zhang WW, Li CP, Du M. Construction of electrochemical aptasensors with Ag (I) metal- organic frameworks toward high-efficient detection of ultra-trace penicillin. *Applied Surface Science*. 2020;531:147342. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2020.147342>
- [68] Xu H, Zhang D, Weng X, Wang D, Cai D. Electrochemically reduced graphene oxide/Cu-MOF/Pt nanoparticles composites as a high-performance sensing platform for sensitive detection of tetracycline. *Microchimica Acta*. 2022;189. <https://doi.org/10.1007/s00604-022-05304-7>
- [69] Dong Y, Li T, Su H, Zhang X, Zhang J. Cobalt-copper bimetallic selenides embedded in nitrogen-doped porous carbon nanocubes for diclofenac electrochemical sensing. *Journal of hazardous materials*. 2024;477:135281. <https://doi.org/10.1016/j.microc.2023.109430>
- [70] Wang X, Ma Y, Zhou Z, Zhang Z, Zhang J, Fan L, Du X, Lu X. Ultrarapid synthesis of dumbbell-shaped carbon black-doped Ce(III,IV)-MOF composites for fabrication of simultaneous electrochemical sensor of dopamine and acetaminophen. *Microchemical Journal*. 2023;195:109430. <https://doi.org/10.1016/j.microc.2023.109430>
- [71] Mousaabadi KZ, Ensafi AA, Rezaei B. Simultaneous determination of some opioid
- [58] Beaver K, Dantanarayana A, Minteer SD. Materials approaches for improving electrochemical sensor performance. *The Journal of Physical Chemistry B*. 2021;125(43):11820-34. <https://doi.org/10.1021/acs.jpccb.1c07063>
- [59] Zhang J. Electrodeposition of novel nanostructured and porous materials for advanced applications: synthesis, structural characterization and physical/chemical performance. *Universitat Autònoma de Barcelona*; 2016. <https://ddd.uab.cat/record/167813>
- [60] Yan W, Su J, Yang ZM, Lv S, Jin Z, Zuo JL. High-performance lithium-ion capacitors based on porosity-regulated zirconium metal- organic frameworks. *Small*. 2021;17(22):2005209. <https://doi.org/10.1002/sml.202005209>
- [61] Yousaf A, Zhao Z, Boota MW. Enhancing electrochemical detection with metal-organic frameworks: advances in functionalization, synthesis, and application. *Journal of Solid State Electrochemistry*. 2025:1-24. <https://doi.org/10.1007/s10008-025-06477-w>
- [62] Rizwan K, Bilal M. Metal-organic frameworks-based emerging platforms for recognition and monitoring of environmentally hazardous organic contaminants. *InMetagenomics to Bioremediation* 2023(pp. 577-593). Academic Press. <https://doi.org/10.1016/B978-0-323-96113-4.00002-0>
- [63] Mousavi SM. Metal-Organic Frameworks (MOFs): An Analysis of Synthesis Methods and Their Applications. *Nanomeghyas*. 2024;11(4):56-43 (In Persian).
- [64] Mandanipour V. 'Preparation of MIL-53(Fe)-COOH@PANI composite and its use for the removal of tetracycline'. *Nanomeghyas*. 2024;11(3):35-45 (In Persian).
- [65] Abu-Dief AM, Alrashedee FM, Emran KM, Al-Abdulkarim HA. Development of

<https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2026.141493>

[77] Zhang Z, Cao X, Geng C, Sun Y, He Y, Qiao Z, Zhong C. Machine learning aided high-throughput prediction of ionic liquid@ MOF composites for membrane-based CO₂ capture. *Journal of Membrane Science*. 2022;650:120399.

<https://doi.org/10.1016/j.memsci.2022.120399>

[78] Liu S, Dupuis R, Fan D, Benzaria S, Bonneau M, Bhatt P, Eddaoudi M, Maurin G. Machine learning potential for modelling H₂ adsorption/diffusion in MOFs with open metal sites. *Chemical Science*. 2024;15(14):5294-302.

<https://doi.org/10.1039/D3SC05612K>

[79] Salehi K, Rahmani M, Atashrouz S. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2023;48:33260–33275.

<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.33260-33275>

[80] Cao Y, Dhahad HA, Zare SG, Farouk N, Anqi AE, Issakhov A, Raise A. Potential application of metal-organic frameworks (MOFs) for hydrogen storage: Simulation by artificial intelligent techniques. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2021;46(73):36336-47.

<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.08.167>

[81] Yan Y, Shi Z, Li H, Li L, Yang X, Li S, Liang H, Qiao Z. Machine learning and in-silico screening of metal-organic frameworks for O₂/N₂ dynamic adsorption and separation. *Chemical Engineering Journal*. 2022;427:131604.

<https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.131604>

[82] Ren J, Wang S, Bi K, Cheng M, Liu C, Zhou L, Xue X, Ji X. Machine learning-enabled framework for high-throughput screening of MOFs: application in radon/indoor air separation. *ACS Applied Materials & Interfaces*. 2022;15(1):1305-16. <https://doi.org/10.1021/acsami.2c19207>

[83] Osaro E, LaCapra M, Colon YJ. Harmonizing adsorption and diffusion in active learning campaigns of gas

drugs using Cu-hemin MOF@MWCNTs as an electrochemical sensor. *Chemosphere*. 2022;303:135149.

<https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2022.135149>

[72] Nandhini C, Huang CH, Mani G, Arul P, Huang ST. Development of ternary hybrid composites of transition metal and noble metal-based heterostructures: ultrasensitive simultaneous electrochemical detection of bisphenol A and bisphenol S in food samples. *Food Chemistry*. 2024;459:140451.

<https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2024.140451>

[73] Zhang L, Li J, Yang Y, Wang C, Wang Y, Zhao P, Xie Y, Fei J. A novel electrochemical sensor based on mesoporous carbon hollow spheres/ZIF-67-derived Co-embedded N-doped carbon nanotubes composite for simultaneous determination of dihydroxybenzene isomers in environmental water samples. *Microchemical Journal*. 2023;191:108754.

<https://doi.org/10.1016/j.microc.2023.108754>

[74] Koukouviti E, Plessas AK, Pagkali V, Economou A, Papaefstathiou GS, Kokkinos C. 3D-printed electrochemical glucose device with integrated Fe (II)-MOF nanozyme. *Microchimica Acta*. 2023;190(7):274.

<https://doi.org/10.1007/s00604-023-05860-6>

[75] Zafar F, El-Bahy SM, Sami A, et al. Machine-learning-assisted synthesis of bimetallic metal-organic frameworks for the optimized oxygen evolution reaction. *ACS Applied Materials & Interfaces*. 2025; 17:25289–25298.

<https://doi.org/10.1021/acsami.5c00455>

[76] Choi Y, Kim S, Kim D. Machine learning-integrated metal-organic frameworks/multi-walled carbon nanotubes sensor array for real-time detection of fungal VOCs. *Journal of hazardous materials*. 2026;505:141493.



<https://doi.org/10.1016/j.snb.2023.133678>

separations in a MOF. The Journal of Physical Chemistry C. 2025;129(21):9877-91.

<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5c00922>

[84] Zhou J, Xu L, Gai H, Xu N, Ren Z, Hou X, Chen Z, Han Z, Sarker D, Levchenko SV, Huang M. Interpretable Data-Driven Descriptors for Establishing the Structure-Activity Relationship of Metal–Organic Frameworks Toward Oxygen Evolution Reaction. *Angewandte Chemie*. 2024;136(36):e202409449.

<https://doi.org/10.1002/anie.202409449>

[85] Mou LH, Du J, Li Y, Jiang J, Chen L. Effective screening descriptors of metal–organic framework-supported single-atom catalysts for electrochemical CO₂ reduction reactions: a computational study. *ACS Catalysis*. 2024;14(17):12947-55.

<https://doi.org/10.1021/acscatal.4c03937>

[86] Jaksani B, Chauhan R, Kshirsagar SD, Rana A, Pal U, Singh AK. A MOF-derived CuO/TiO₂ photocatalyst for methanol production from CO₂ reduction in an AI-assisted continuous flow reactor. *Chemical Communications*. 2024;60(96):14212-5.

<https://doi.org/10.1039/D4CC05008H>

[87] Wei Y, Yu J, Du Y, Li H, Su CH. Artificial intelligence simulation of Pb (II) and Cd (II) adsorption using a novel metal organic framework-based nanocomposite adsorbent. *Journal of Molecular Liquids*. 2021;343:117681.

<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2021.117681>

[88] Abdi J, Mazloom G. Machine learning approaches for predicting arsenic adsorption from water using porous metal–organic frameworks. *Scientific Reports*. 2022;12(1):16458.

<https://doi.org/10.1038/s41598-022-20762-y>

[89] Yu L, Li X, Lu Y, et al. Simulation monitoring of tetracyclines in wastewater based on fluorescence image processing and machine learning classifier. *Sensors and Actuators B: Chemical*. 2023;385:133678.

فصلنامه

ISC

انجمن

نانو

فناوری

ایران

دنیای نانو

۱۲۰