

# Poorsete metall-orgaaniliste võrgustike monokristallide röntgendifraktsioonanalüüs ning kristallstruktuuride püsivuse uurimine solvendivahetusel

Bakalaureusetöö

Autor: Jevgenija Martõnova

Juhendaja: Sandra Kaabel, keemia ja biotehnoloogia instituut, doktorant

Kaasjuhendaja: Kirill Shubin, Läti Orgaanilise Sünteesi Instituut, juhtivteadur

Käesolevas lõputöös uuriti kolme metall-orgaanilise võrgustiku  $\text{Cu}_3(\text{btc})_2$  ehk HKUST-1,  $\text{Zn}_4\text{O}(\text{bdc})_3$  ehk MOF-5 ning  $\{[\text{Zn}_3(\text{HCOO})_6]\cdot\text{DMF}\}_n$  kristallide struktuure röntgendifraktsioonanalüüsil ning nende võrgustike struktuuride püsivust solvendivahetuse teostamisel.

Monokristallide röntgendifraktsioonanalüüsiga näidati, et antud töös kasutatud metall-orgaaniliste võrgustike struktuurid vastavad sünteetil eeldatud struktuuridele. Antud analüüsiga näidati, et HKUST-1 ning MOF-5 on väga poorsed võrgustikud. Kristallstruktuuridelt määrati pooride suurus, asetus ning neist moodustunud kanalite võrgustik. Seejuures analüüsiti külalismolekulide mahtuvust kanalites liikuma ning võimalikke interaktsioone pooride seintega. *SQUEEZE* meetodil analüüsiti kanalites sisalduva solvendi kogust.  $\{[\text{Zn}_3(\text{HCOO})_6]\cdot\text{DMF}\}_n$ , analüüsil leiti, et see on vähem poorne kui HKUST-1 ja MOF-5, ning selle poorides oli solvent fikseeritud asendis.

Solvendivahetuse käigus uuriti, kas HKUST-1, MOF-5 ja  $\{[\text{Zn}_3(\text{HCOO})_6]\cdot\text{DMF}\}_n$  metall-orgaanilised võrgustikud säilivad sünteetil kasutatud solvendi vahetamisel apolaarsema tsükloheksaani vastu. Solvendivahetusel säilinud monokristallide röntgendifraktsioonanalüüsil leiti, et solvendivahetus ei kutsu esile uue metall-orgaanilise võrgustiku teket ning võrgustiku struktuur säilib.  $\{[\text{Zn}_3(\text{HCOO})_6]\cdot\text{DMF}\}_n$  puhul leiti, et esialgne solvent DMF ei ole pooridest välja vahetunud. Analüüsiks solvendi vahetuse toimumist ning määra HKUST-1 ning MOF-5 poorides prooviti *SQUEEZE* meetodil määrata elektrontihedust enne ja peale solvendivahetust määramaks solvendivahetuse toimumist. Selgus, et antud meetodiga ei ole võimalik määrata, kas solvent on poorides vahetunud ning mis määral, mistõttu järelitati, et täpsemaks solvendivahetuse vaatlemiseks on vaja rakendada teisi meetodeid.