

M.Ed. Tim Mattick erhält unter der Betreuung von Prof. Dr. Uwe Ruschewitz, Department Chemie – Institut für Anorganische Chemie, für seine Masterarbeit im Prüfungsfach Chemie mit dem Titel:
„Evaluation der Paarverteilungsfunktion (pdf) zur Analyse von Gästen in den Poren von MOFs“

Metallorganische Gerüstverbindungen (*metal-organic frameworks*, MOFs) sind nicht zuletzt aufgrund ihrer enormen Bandbreite an möglichen Anwendungen von großem Interesse. Fast alle diese Anwendungen beruhen auf der Einlagerung von Gastmolekülen in die Poren der MOFs. Da die eingelagerten Gäste im Gegensatz zur Wirt-Matrix jedoch nicht kristallin vorliegen, ist bisher nur wenig darüber bekannt, wie sie an das MOF binden. Eine Möglichkeit, sie dennoch zu untersuchen, liegt in der Totalstreuungsanalyse und der damit verbundenen Bestimmung von Paarverteilungsfunktionen (*pair distribution functions*, PDFs).

PDFs zeigen direkt die Abstände von Atompaaaren an und berücksichtigen dabei auch nicht-ferngeordnete Atome. Im Rahmen der Masterarbeit gelang es, PDFs von unterschiedlichen MOFs sowohl ohne Gäste als auch mit diversen Gästen beladen zu bestimmen. Um eine Interpretation der Daten zu erleichtern, wurden anschließend die PDFs der aktivierten MOFs von denen der beladenen subtrahiert; so konnte eine Funktion (Differenz-PDF, dPDF) erhalten werden, die nur von Gast-Korrelationen beeinflusst wird. Besonders aufschlussreich waren hier die dPDFs der Verbindungen MFM-300 sowie UoC-2. All diese dPDFs zeigen klare Maxima für einige begrenzte Bereiche von Abständen von weniger als 5 Å, danach sind keine Signale außer ein Grundrauschen erkennbar. Diese Maxima können sinnvoll intramolekulare Bindungen des Gastes sowie Abständen vom Gast zur Wirtsmatrix zugeordnet werden. Somit konnte die Bindung des Gastes in der Pore eindeutig nachgewiesen werden. Es wird kontinuierlich weiter daran gearbeitet, bessere Daten zu generieren, um weitere Aussagen über Bindungsmodi treffen zu können.



Foto: Thorsten Martin