



Skepping van addisionele spasie onder hoë CO₂-druk in 'n metaal-organiese raamwerk

Authors:

I. Grobler¹
C. Esterhuyzen¹
L.J. Barbour¹

Affiliations:

¹Department of Chemistry and Polymere Science, Stellenbosch University, South Africa

Correspondence to:

I. Grobler

Email:

ilne@sun.ac.za

Postal address:

Private Bag X1, Matieland 7602, South Africa

How to cite this abstract:

Grobler, I., Esterhuyzen, C. & Barbour, L.J., 2014, 'Skepping van addisionele spasie onder hoë CO₂-druk in 'n metaal-organiese raamwerk', *Suid-Afrikaanse Tydskrif vir Natuurwetenskap en Tegnologie* 33(1), Art. #1197, 1 page. <http://dx.doi.org/10.4102/satnt.v33i1.1197>

Note:

A selection of conference proceedings: Student Symposium in Science, 07 and 08 November 2013, University of Pretoria, South Africa. Organising committee: Mr Rudi W. Pretorius (Department of Geography, University of South Africa) and Ms Andrea Lombard (Department of Geography, University of South Africa), Dr Hertzog Bisset (South African Nuclear Energy Corporation [NECSA]) and Prof. Philip Crouse (Department of Chemical Engineering, University of Pretoria).

Read online:

Scan this QR code with your smart phone or mobile device to read online.

Creation of additional space under high CO₂ pressure in a metal-organic framework. A two-dimensional metal-organic framework with transformable void space doubles its carbon dioxide capacity upon exposure to high pressure. MOFs with gate-opening sorption behaviour are rare and this study is distinctive, as it combines high pressure differential scanning calorimetry with single-crystal X-ray diffraction experiments under gas pressure.

'n Aantal poreuse metaal-organiese materiale is berei met die doel om die vastetoestand-dinamika wat by gassorpsieprosesse betrokke is, te ondersoek. Metaal-organiese raamwerke is oneindige raamwerke van strukturele eenhede wat met mekaar verbind is (Cheetham *et al.* 2006; Ockwig *et al.* 2005; Yaghi *et al.* 2003). Die raamwerke word berei deur organiese ligande met metaaleenhede of nodusse te kombineer om tweedimensionele (2D) of driedimensionele (3D) koördinasiepolimere te vorm. Die chemiese en termiese stabiliteit, permanente porositeit en hoë interne oppervlak van metaal-organiese raamwerke word tans omvattend ondersoek. Poreuse materiale wat gasse berg, kan in 'n verskeidenheid industriële prosesse, byvoorbeeld by gasopname na die verbranding van fossielbrandstowwe, benut word.

Die struktuur van 'n 2D metaal-organiese raamwerk wat met die organiese ligand 4-(1H-bensimidazool-1-piridiel)-bensoësuur en Zn(NO₃)₂ gevorm is, verander drasties tydens gasuitruilings- en gassorpsieprosesse weens die wedersydse verplasing van die 2D lae. Hierdie metaal-organiese raamwerk kan as 'n derdegenerasie, sagte, poreuse materiaal geklassifiseer word (Horike *et al.* 2009) en kan vir selektiewe gasopname, vir die stoor van gas vir bepaalde tye, sowel as vir doeleinades van beheerde vrystelling (Chapman *et al.* 2011) gebruik word.

Enkelkristal-X-straaldiffraksie-eksperimente is met 'n kristal van die 2D metaal-organiese raamwerk in verskillende koolstofdioksied- (CO₂) drukkondisies uitgevoer. Die X-straaldiffraksie-eksperimente is deur middel van termo-analise- en sorpsie-eksperimente aangevul. Daar is bevind dat die raamwerk vervormbare leemtes bevat, en dat dit by blootstelling aan 'n hoë CO₂-druk in 'n laer digtheidfase met dubbeld die CO₂-kapasiteit verander. Metaal-organiese raamwerke wat 'hekkoopmaak'-sorpsiegeldrag openbaar, is skaars, en hierdie studie is in 'n sekere mate uniek, aangesien dit hoëdruk-differensiële kalorimetrie met X-straaldiffraksie onder gasdruk combineer. Die metaal-organiese raamwerk berg die CO₂ in afsonderlike holtes in die struktuur, waar dit deur talle gasheer-gas-interaksies gestabiliseer word. Gevolglik vind daar tydens die desorpsie van CO₂ uiterste histerese plaas. Daar is bevind dat die gasopname en strukturele transformasie, wat bykomende ruimte binne die struktuur skep, selektief met CO₂ by kamertemperatuur plaasvind, relatief tot stikstof (N₂) of metaangas (CH₄).

Literatuurverwysings

- Chapman, K.W., Sava, D.F., Halder, G.J., Chupas, P.J. & Nenoff, T.M., 2011, 'Trapping Guests within a Nanoporous Metal–Organic Framework through Pressure-Induced Amorphization', *Journal of American Chemical Society* 133(46), 18583–18585.
 Cheetham, A.K., C.N.R. Rao, C.N.R. & Feller, R.K., 2006, 'Structural diversity and chemical trends in hybrid inorganic–organic framework materials', *Chemical communication* 46, 4780–4795.
 Horike, S., Shimomura, S. & Kitagawa, S., 2009, 'Soft porous crystals', *Nature Chemistry* 1, 695–704.
 Ockwig, N.W., Delgado-Friedrichs, O., O'Keeffe, M., Yaghi, O.M., 2005, 'Reticular Chemistry: Occurrence and Taxonomy of Nets and Grammar for the Design of Frameworks', *Accounts of Chemical Research* 38, 176–182.
 Yaghi, O.M., O'Keeffe, M.O., Ockwig, Chae, H.K., Eddaoudi, M. & Kim, J., 2003, 'Reticular synthesis and the design of new materials', *Nature* 423, 705–714.