

Kubánvázás építőelemeket tartalmazó fémorganikus vázszerkezetek

Földes Dávid, II. évf. vegyész mesterszakos hallgató

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szervetlen Kémiai Tanszék

Témavezető: Dr. Kováts Éva tudományos főmunkatárs
MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont, Szilárdtestfizikai és Optikai Intézet

Konzulens: Dr. Szepes László nyugdíjas egyetemi tanár
ELTE TTK, Szervetlen Kémiai Tanszék

A fémorganikus vázszerkezetek, azaz a MOF-ok (MOF = Metal Organic Framework) a jelenleg ismert legnagyobb fajlagos felülettel és legkisebb sűrűséggel rendelkező kristályos vegyületek. A nagy fajlagos felületük a pórusos szerkezetüknek köszönhető. A karboxilát-alapú fémorganikus vázszerkezetek olyan koordinációs polimerek, melyek csomópontjain merev, fém-oxigén-szén klasztereket, közöttük az éleken pedig szerves összekötőelemeket tartalmaznak. A csomóponton elhelyezkedő, merev, fémtartalmú klasztereket másodlagos építőelemeknek nevezik [1].

Az egyik legismertebb és legfontosabb fémorganikus vázszerkezet a köbös kristályszerkezetű, $Zn_4O(BDC)_3$ (BDC^{2-} = tereftalát) összetételű MOF-5, amely a csomópontokon található $Zn_4O(CO_2)_6$ klaszterekből és az éleken közöttük lévő szerves összekötőelemekből épül föl. A másodlagos építőelemek közepén egy oxigénatom helyezkedik el, melyet tetraédesen négy cink vesz közbe. A tetraéder éleinél egy-egy karboxiláthíd köti össze a négyes koordinációjú cinkeket [1].

Kutatómunkánk során irodalmi szintézisekből kiindulva különböző tereftálsav-alapú fémorganikus vázszerkezeteket állítottunk elő. Sikeresen előállítottuk a lapátkerékszerű, $Zn_2(CO_2)_4$ másodlagos építőelemeket tartalmazó MOF-1-et és MOF-2-t, illetve a köbös MOF-5-öt.

A tereftálsavhoz hasonló méretű, ám attól eltérő tulajdonságú és stabilitású kubán-1,4-dikarbonsavat felhasználva négy új anyagot is előállítottunk, különböző kísérleti körülmények mellett.

Az egyik új szerkezet több szerkezetileg azonos és független, egymásba ágyazódó makromolekulából áll, melyek egymagvú, tetraédes szimmetriájú $Zn(CO_2)_4$ másodlagos építőelemeket tartalmaznak.

Előállítottunk egy lapátkerékszerű, kétmagvú $Zn_2(CO_2)_4$ másodlagos építőelemeket tartalmazó sík polimerekből álló szerkezetet is, melyben a cinkatomok ötös koordinációjúak. A síkok közötti távolságot a cinkatomokhoz koordináló oldószermolekulák befolyásolják.

A legmagasabb szimmetriájú új szerkezet a MOF-5 kubántartalmú analógja, melynek csomópontjain négymagvú, oktaédes szimmetriájú, hatos csatlakozású $ZnO(CO_2)_6$ másodlagos építőelemek vannak.

Továbbá sikerült előállítanunk egy igen érdekes, kettősréteg jellegű szerkezetet, amelyben az egyes rétegek elhelyezkedését a szabályosan váltakozó erős kovalens, valamint a gyengébb másodrendű kötőerők határozzák meg. Ebben a szerkezetben egy eddig ismeretlen másodlagos építőelem található a csomópontokon, a négy cinkatomot tartalmazó, hetes csatlakozású $Zn_4O(CO_2)_7$. Ez a másodlagos építőelem a MOF-5-höz hasonlóan közepén egy oxigénatomot, körülötte pedig tetraédesen négy cink atomot tartalmaz. Azonban ebben a másodlagos építőelemen két négyes és két ötös koordinációjú cink található, amely hét irányú elágazást tesz lehetővé.

[1] H. Li, M. Eddaoudi, M. O'Keeffe, O.M. Yaghi, *Nature*, 402, 276-279 (1999)