



Magyar Tudományos Akadémia

KOORDINÁCIÓS KÉMIAI MUNKABIZOTTSÁG

*Munkabizottsági ülés: Az MTA DAB székház, 4032 Debrecen, Thomas Mann u. 49.,
2025. november 28.*

FÉM-SZERVES VÁZSZERKEZETEK: KIHÍVÁSOK ÉS ALKALMAZÁSOK

Tisztelt Kolléga és Kolléganő!

A Magyar Tudományos Akadémia, Koordinációs Kémiai Munkabizottságának 2025. évi második ülésére 2025. november 28.-án kerül sor „Fém-szerves vázszerkezetek: kihívások és alkalmazások” címmel, melyre tisztelettel meghívjuk Önt. Az ülés az MTA DAB székház (cím: 4032 Debrecen, Thomas Mann u. 49. Telefon: +36 52 412-177. Fax: +36 52 410-909. E-mail: dab@tab.mta.hu.) Csokonay Termében kerül megrendezésre az alábbi programponthoz szerint:

11.00 Megnyitó

Enyedy Éva A. a Koordinációs Kémiai Munkabizottság elnöke (Szegedi Tudományegyetem, Molekuláris és Analitikai Kémiai Tanszék)

11.10 **Udvardy Antal** (Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar, Fizikai Kémiai Tanszék):

Kémiai Nobel-díj 2025: a fém-szerves vázszerkezetek (MOF-ok) kifejlesztéséért

11.40 **Kováts Éva¹, Földes Dávid^{1,2}, Pekker Sándor^{1,2}** (1: HUN-REN Wigner Fizikai Kutatóközpont, Szilárdtestfizikai és Optikai Intézet; 2: Óbudai Egyetem):

Fémorgánikus vázszerkezetek: szerkezeti kitékintés

12.10 **Bombicz Petra, Holczbauer Tamás, Sourav De, May Nóra, Bereczki Laura, Békei Botond, Besenyi Gábor** (HUN-REN Természettudományi Kutatóközpont, Szerkezetkutató Központ, Kémiai Kristallográfia Kutatólaboratórium):

Hidrogén kötésű szerves vázgyűletek, és kristályosításuk mikrogravitációban

12.40 **Balog Edina¹, Bene Kinga¹, Varga Gábor², Schuster Gábor¹** (1: Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék; 2: Szegedi Tudományegyetem, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék):

ZIF-ek polimorf szelektív előállítása és hasznosítása

13.10 Elnöki és titkári zárszó

Tisztelettel,

Dr. Enyedy Éva A., a Munkabizottság elnöke és Dr. Tircsó Gyula, a Munkabizottság titkára

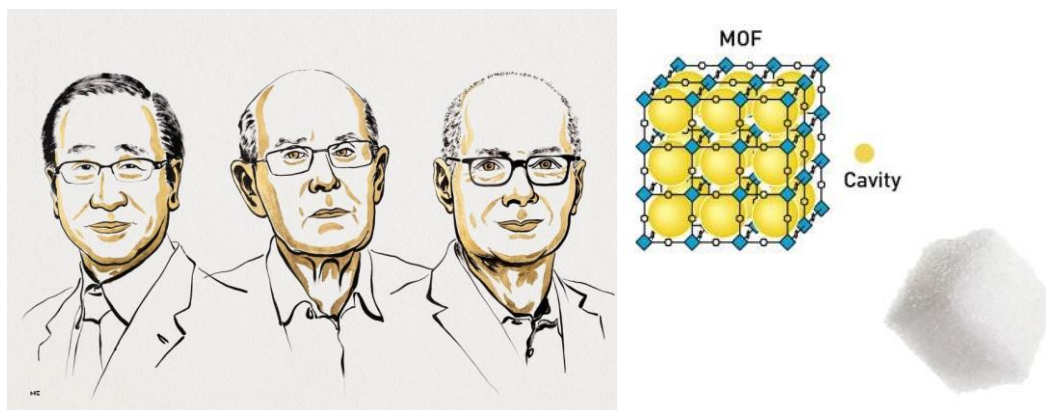
Kémiai Nobel-díj 2025: a fém-szerves vázszervezetek (MOF-ok) kifejlesztéséért

Udvardy Antal

Debreceni Egyetem, Fizikai Kémiai Tanszék, Homogén Katalízis Kutatócsoport

e-mail: udvardya@unideb.hu

A 2025-ös kémiai Nobel-díjat Susumu Kitagawa (Japán, Kyoto Egyetem), Richard Robson (Ausztrália, Melbourne Egyetem) és Omar M. Yaghi (USA, Kaliforniai Egyetem, Berkeley) vegyészeknek megosztva ítélte oda „a fém-szerves vázszervezetek (MOF-ok) kifejlesztéséért” a Svéd Királyi Tudományos Akadémia.



1.a ábra: Susumu Kitagawa, Richard Robson és Omar M. Yaghi¹ 1.b ábra: A MOF-5 szerkezete²

Ezek a különleges, rendkívül porózus kristályos anyagok átmentifém-ionokból és polifunkciós szerves ligandumokból épülnek fel szabályos hálózatot alkotva. A MOF-ok belső felülete általában óriási – akár egyetlen gramm anyagé is elérheti egy futballpálya méretét –, így kiválóan alkalmasak gázok tárolására (pl. hidrogén, szén-dioxid), a víz kinyerésére a sivatag levegőjéből és katalitikus folyamatokban való alkalmazásra.

A díjazottak úttörő munkája egy új irányt nyitott az anyagtudományban. Mára már több különféle stabilis MOF-szerkezet ismert, amelyekben pl. a pórusméret pontosan tervezhető. A felfedezés hosszú távon hozzájárulhat az energiahatékony technológiák és a környezetbarát anyagok fejlesztéséhez, bizonyítva, hogy a modern kémia nemcsak vegyületekkel, hanem térrel is operál – molekuláris szinten. A MOF-ok változatos szerkezetüknek köszönhetően nemcsak hasznosak, hanem szépek is.

Köszönetnyilvánítás: A kutatás az RRF-2.3.1-21-2022-00009 azonosítószámú, Megújuló Energiák Nemzeti Laboratórium megnevezésű projekt a Széchenyi Terv Plusz program keretében, az Európai Unió Helyreállítási és Ellenállóképességi Eszközének támogatásával valósult meg.

¹ Illusztrátor: Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach

² Yaghi, Omar M. et al. Science **2003**, 300, 1127; Illusztrátor: © Johan Jarnestad/The Royal Swedish Academy of Sciences

Fémorganikus vázszerkezetek: szerkezeti kitekintés

Kováts Éva¹, Földes Dávid^{1,2}, Pekker Sándor^{1,2}

¹ HUN-REN Wigner Fizikiai Kutatóközpont, Szilárdtestfizikai és Optikai Intézet

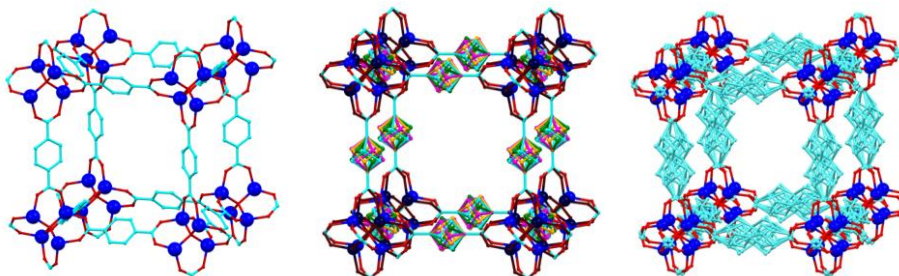
² Óbudai Egyetem, Budapest

e-mail: kovats.eva@wigner.hun-ren.hu

A fémorganikus vázszerkezetek (metal–organic frameworks, MOF-ok) olyan nagy szimmetriájú, térhálós, kristályos anyagok, amelyek nagyméretű pórusokat tartalmaznak. Felépítésük és tulajdonságaik előre tervezhetők, ami nagymértékben elősegíti gyakorlati alkalmazásukat.

Előadásomban általános áttekintést nyújtok e vegyületek szerkezeti sajátosságairól. A MOF-ok térszerkezetének kialakítását két fő építőelem határozza meg: a csomópontokat alkotó fémionok vagy fémklaszterek, valamint az ezeket összekötő, merev, multidentát szerves ligandumok. A hálózatot erős koordinációs kötések tartják össze. A kialakuló szerkezetben az üregek mérete, alakja és belső felülete előre meghatározható.

A retikuláris kémia alapelveit figyelembe véve azonos topológiájú, hasonló tulajdonságú anyagcsaládok állíthatók elő¹. A szerves linker méretének módosításával szabályozható az üregek mérete, míg azonos méretű, de eltérő kémiai tulajdonságú linkerek alkalmazásával hasonló szerkezetű, ugyanakkor jelentősen különböző tulajdonságú térhálók hozhatók létre. Például a MOF-5 szerkezetéhez hasonló rácsot kapunk kubán-dikarboxilát vagy spiroheptánszármazék beépítésével, azonban a keletkező anyagok stabilitása és fizikai tulajdonságai jelentősen eltérnek egymástól^{2,3}.



1. ábra. MOF-5 és hasonló szerkezetek

1. Yaghi, O., O'Keeffe, M., Ockwig, N. et al. *Nature* **2003**, 423, 705–714.

2. Földes D., Kováts, É., Bortel, G., Klébert, S., Jakab, E., Pekker, S., *10.26434/chemrxiv.11854389.v1*

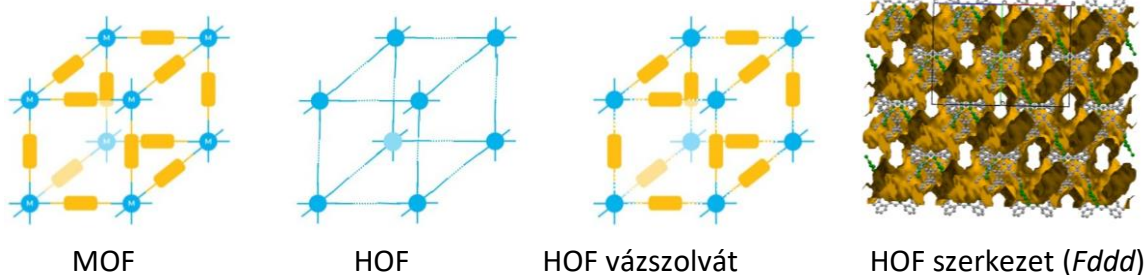
3. Földes, D., Kováts, É., Bortel, G., Kamarás, K., Tarczay, G., Jakab, E., Pekker, S., *J. Mol. Struct.*, **2022**, 1257, 132538.

Hidrogén kötéses szerves vázszerkezetek, és kristályosításuk mikrogravitációban

*Bombicz Petra, Holczbauer Tamás, Sourav De, May Nóra, Bereczki Laura, Békei Botond,
Besenyei Gábor*

HUN-REN Természettudományi Kutatóközpont, Szerkezetkutató Központ, Kémiai
Krisztallográfia Kutatólaboratórium
e-mail: bombicz.petra@ttk.hu

2025-ben a kémiai Nobel-díjat „egy új típusú molekuláris architektúra kifejlesztéséért” (MOF) adományozták, „az általuk létrehozott szerkezetek – fém-organikus vázszerkezetek – nagy üregeket tartalmaznak, amelyekbe a molekulák be- és kiúszhatnak”. Ezek felhasználhatók molekulák tárolására, szelektív szorpcióra, molekulakeverékek szétválasztására, de katalitikus tulajdonságaik is lehetnek. A Cambridge-i Szerkezeti Adatbázisban (CSD) napjainkban majdnem 1,4 millió szerkezet található meg, amelynek 10 %-a MOF. A vázszerkezetek tanulmányozására a CSD Mercury software részeként külön modulokat fejlesztettek. A vázszerkezetekben a szerves építőelemeket összeköthetik koordinációs kötések (MOF), kovalens kötések (COF), legújabban hidrogén kötések (HOF). A HUN-REN TTK Szerves Kémiai Intézetének munkatársai az elsők között állítottak elő olyan molekulákat, melyekből hidrogénkötéses szerves vázszerkezetek építhetők fel (1. ábra), lehetőséget teremtve, hogy tanulmányozzuk a HOF vázszerkezet kialakulásának feltételeit³. Ezen munka alapján kaptuk a felkérést, hogy HOF vegyületet kristályosítsunk a Nemzetközi Űrállomás fedélzetén. Ehhez módszert fejlesztettünk, mert szerves molekulák kristályosítása mikrogravitációban nincs a gyakorlatban. A küldetés során sikeresen nőtt HOF egykristály az ISS-en, melynek szerkezetét meghatároztuk.



1. ábra MOF és HOF vázszerkezetek sematikus ábrázolása, valamint egy SXRD módszerrel meghatározott HOF kristályszerkezet üresen bemutatott üregekkel

Köszönetnyilvánítás: A szerzők köszönetüket fejezik ki a Space Application Services, Japan Manned Space Systems és Confocal Science szervezeteknek, valamint a HUNOR programnak.

³Horváth D.V., Holczbauer T., Bereczki L., Palkó R., May N.V., Soós T., Bombicz P., *CrystEngComm*, **2018**, 20, 1779-1782.

ZIF-ek polimorf szelektív előállítása és hasznosítása

Balog Edina¹, Bene Kinga¹, Varga Gábor², Schusztér Gábor¹

¹ Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

² Szegedi Tudományegyetem, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

e-mail: schusztig@chem.u-szeged.hu

A szerves-fémkoordinációs vázszerkezetek kristályosodásának kinetikai jellemzői alapvető jelentőségűek olyan szintézismódszerek tervezése során, melyek egyensúlytól távoli körülményeket alkalmaznak, mint például az áramlásos, a mikrofluidikai vagy a gélreaktorokra épülő rendszerek. Jelen kísérleti munkában a ZIF-ek képződését vizsgáljuk a cink(II)-, illetve a kobalt(II)ionok és 2-metilimidazol között lejátszódó reakciókban. A szintézist szobahőmérsékleten, egyéb adalékanyag nélkül, vizes fázisban játsztuk le. A hagyományostól eltérő körülmények ellenére a termék kristályossági foka és a kitermelés mértéke egyaránt megfelelő volt. A folyamat elejére jellemző kinetikai paramétereket egy nagy időfelbontású kamera segítségével határoztuk meg, melyeket UV-vis fotométerrel végzett turbiditás mérésekkel egészítettünk ki. Alacsony reagenskoncentráció és kis linker felesleg esetén, melyek viszonylag lassú koordinálódást és csapadékképződést tesznek lehetővé, gyorsan kialakul egy kolloid rendszer, melyben időben késleltetve jelentős átkristályosodás megy végbe. Ilyen körülmények között a vizsgált ZIF-ek DIA polimorfja képződik. Noha ez a termodinamikailag kedvezményezett reakció, a csekély mértékben pórusos termék keletkezése miatt elkerülendő a folyamat. Arányait tekintve ugyanezt a linker felesleget, de nagyobb koncentrációkat alkalmazva lehetőség nyílik a termodinamikailag kedvezőtlenebb, nagy fajlagos felülettel rendelkező termékek (SOD ZIF-ek) előállítására. Ezen kísérleti tapasztalatokat mind a ZIF-8, mind a ZIF-67 rendszerek alátámasztják, így más MOF-ok esetén is hasznos információként szolgálhatnak. Kinetikai eredményeinket pásztázó elektronmikroszkópiás felvételekkel, polikristályos röntgendiffrakcióval, nitrogénadszorpcióval, valamint FTIR és Raman mérésekkel támasztottuk alá.⁴

Kinetikai méréseink eredményeiből kiindulva összetett, „vegész virágoskertje”-szerű csapadékszerkezeteket is növesztettünk áramlásos rendszerben, melyek külső, illetve belső felszínét egyaránt ZIF kristályokkal dekoráltuk. A szintézis folyamatához keresztdiffúziós technikát használtunk. A kidolgozott eljárás prototípusként szolgálhat önszerveződéssel létrehozott mikrofluidikai reaktorok előállításához.⁵

⁴ Balog E., Varga G., Kukovecz Á., Tóth Á., Horváth D., Lagzi I., Schusztér G., *Cryst. Growth. Des.*, **2022**, 22, 4268.

⁵ Balog E., Bene K., Schusztér G., *Sci. Rep.*, **2025**, 15, 13241.