



Braun Tibor

ELTE Kémiai Intézet, MTA Könyvtár és Információs Központ | braun@iif.mail.hu

Pillanatfelvétel a grafén utáni kétdimenziós kémia fejlődési lehetőségeiről és ígéreteiről

Előszó

Ahhoz, hogy ismertethessük, körvonalazzassuk a címben foglalt fejlődési ígéreteket, úgy véljük, hogy előbb röviden körbe kell járjuk a grafénkémia világát. Mint közismert, a grafént 2004-ben fedezték fel, és már felfedezésekor a nemzetközi tudományos érdeklődés középpontjába került. A felfedezőket, (A. K. Geim és V. S. Novoselov) azóta minden elképzelhető tudományos díjjal, beleértve a 2010. évi fizikai Nobel-díjat, kitüntették. Sőt, II. Erzsébet brit királynő mindkettőjüket *Sir* előnévvel lovaggá ütötte [1].

A grafén színrelépésének egyik legjellegzetesebb és legérdekesebb velejárója, kísérője a kétdimenzionalitás a természettudományban. A dimenziók fogalma végigkísérte a tudományt annak keletkezése óta, és ezzel a történelem folyamán megszámlálhatatlan műben foglalkoztak.

Érdekességként talán meg lehet itt említeni az angol *Edwin A. Abbott* 1884-ben *A. Square* (négyzet) álnéven publikált, a

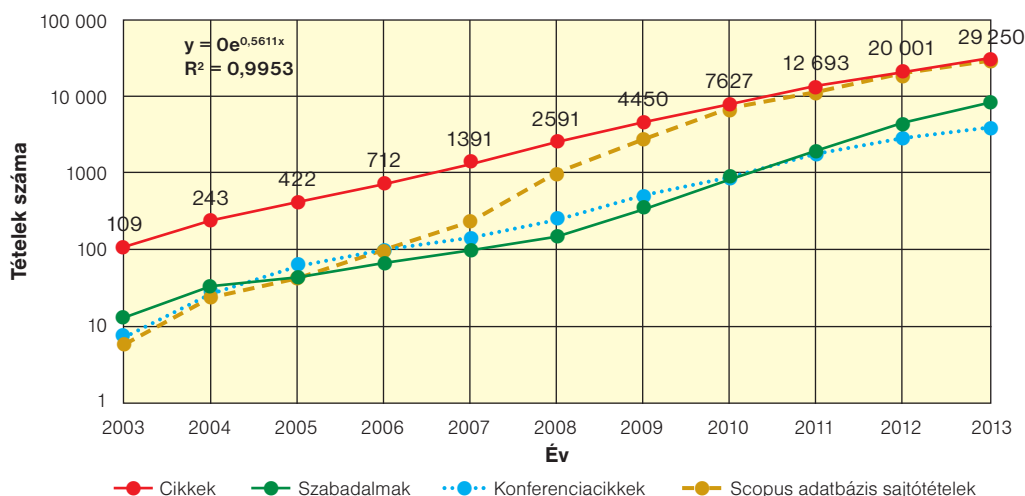
mértani két dimenzióra utaló *Flatland* (Sík-föld) című novelláját. Ebben a szerző bevezeti az olvasót a két dimenzió különleges jelenségeibe [2]. Ennek analógiájára utal *Geim* és *MacDonald* [3] azzal, hogy az egyatomnyi, méhsejtszerű rácsban elrendezett szénatomok által megtestesített grafén jelenti az alapvető síkföldet. Ez a síkföld képezi a világegyetemben található legvékonyabb anyagot. Abbott művéről írta *Isaac Asimov*, hogy „a dimenziók észlelésének legjobb bemutatása”. A könyv megjelenése óta számos kiadást ért meg, de mozifilmek és tv-műsorok is készültek belőle. A nagy sikerű „Cosmos” című tv-s előadás-sorozat egyik epizódjában Carl Sagan a *Flatland*-et analógiaként használja a három fizikai dimenziótól eltérő dimenziók értelmezésére [4].

A grafénkutatásról, annak átfogó sikereiről és eredményeiről eddig több tízezer cikket és sok száz szabadalmat publikáltak (1. ábra). A terület fejlődésének és fontosságának talán legjellemzőbb bizonyítéka, hogy 2013. január 8-án *Neelie Kroes*, az

Európai Bizottság akkori elnökhelyettese nyilvánossá tette minden idők legnagyobb európai kutatási támogatásának tekinthető összegét, az egyenként 1,3 milliárd eurót két kiemelt kutatási projektre. Az átfogó nemzetközi pályázatot [5] az EU „Future and Emerging Technologies Flagship Initiatives (FET)” néven hozta létre, és a szakmai szűrések után fennmaradt hat „zászlóshajó” közül emelte ki az említett megatámogatásra a grafénkutatást és az emberi agy kutatását. A grafénkutatási projektet több mint száz, többek között magyar kutatócsoport részvételével a Göteborgi Chalmers Műszaki Egyetemen dolgozó *Jari Kinaret* vezeti [6].

„A FET-projekt víziója szerint:

- A grafén zászlóshajó (FET) projekt törekvése olyan széles körű, fókuszált, interdiszciplináris európai kutatási közösség létrehozása, amely a grafén egyedülálló tulajdonságaira alapozott radikális technológiai elmozdulást kíván az információs és kommunikációs technológiában.



1. ábra. Grafén-folyóirat- és referenciatickek, valamint -szabadalmak kumulatív számának növekedése [10]

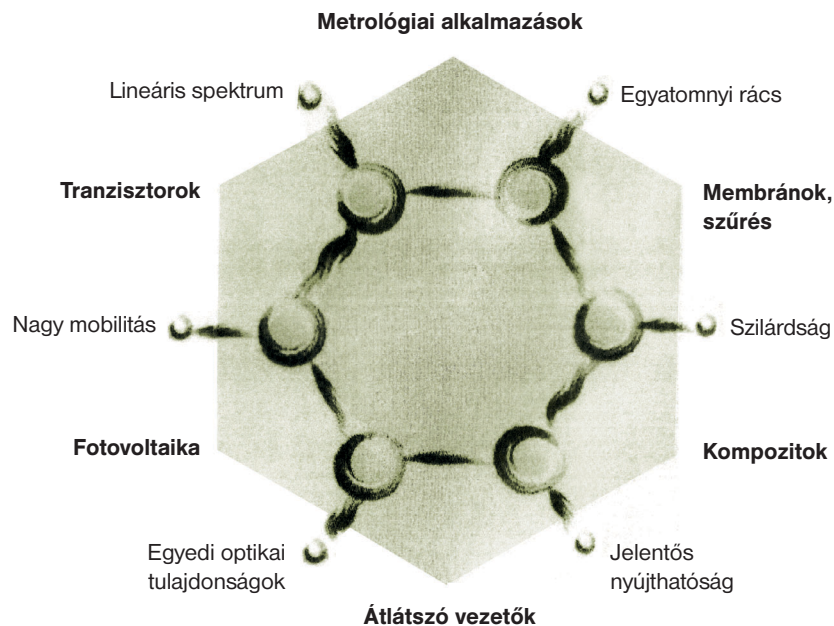


- A grafénben megvan az a potenciális erő, amely rövid és hosszú távon is mély hatással lehet az információs és kommunikációs technológiára (ICT). A grafén integrálása a szilíciumalapú elektronikával, és a szilíciumot helyettesítve bizonyos alkalmazásokban, nemcsak jelentős teljesítményjavulást tesz lehetővé, hanem még inkább elősegíti az új ICT-alkalmazásokat más területeken is.
- A grafénkutatás példázza azt az átfogó nanotechnológiát, amiben az alapvetési felfedezések gyorsan eljuttathatók az ipari alkalmazásokig és gyártási termékekig [4].”

A grafén tulajdonságait jól tükrözi a 2. ábra, amelynek kiegészítésére a 3. ábrán láthatók a grafénkutatásból várható hosszú távú alkalmazási tervek 2027-ig.

Bár a fentiek is bizonyos képet mutatnak be a grafén tulajdonságairól és a grafénkutatás és -alkalmazás, enyhe túlzással, korlátlan lehetőségeiről, feltétlenül ki kell emelni itt azt a tanulmányt, ami a már említett európai uniós (FET) grafénkutatási program egyik első produktumaként a program vezetője, Jari Kinaret vezetésével készült. Erről a 64 szerző által írt közleményről túlzás nélkül állítható, hogy monografikusan foglalja össze mindazt az ismeretet, ami a grafén felfedezése óta a grafénkutatás révén felmerült [8].

Ezen utóbbi tanulmányt nemcsak azért említettük, hogy teljesen egyértelművé tegyük a grafén felfedezése és a grafénkutatás korszakalkotó jelentőségét, hanem azért is, hogy tulajdonképpen visszatérhessünk jelen dolgozat címéhez és az abban foglaltakhoz. Amit ugyanis itt dióhéjban ismertetni szeretnénk, az a kétdimenziós kémia és ezen belül azok a kutatások és eredmények, amiket a grafénen túlmenően már felismert és a jövőben megismerni kíván. Hangsúlyozni szeretnénk, hogy ez távolról sem jelenti azt, hogy



2. ábra. Graféntulajdonságok és -alkalmazások

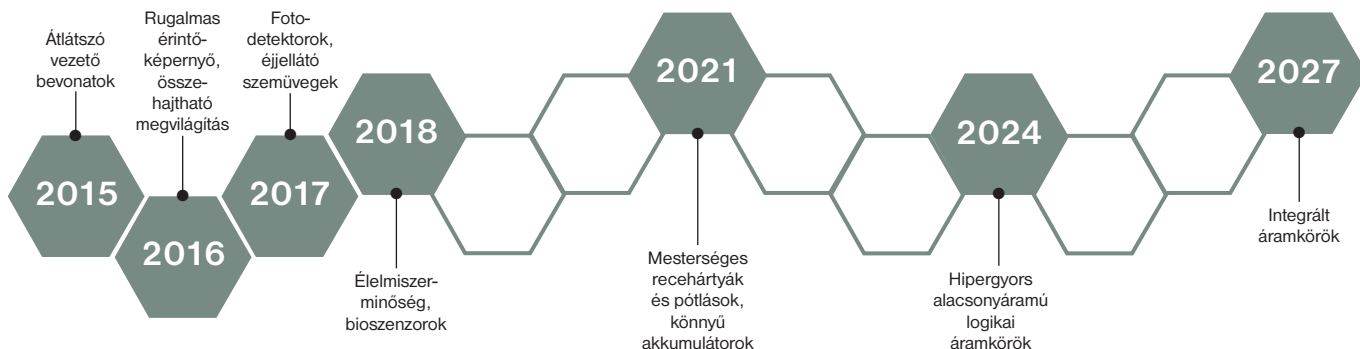
maga a grafénkutatás nem tartogat, illetve tartogathat jelentős, eddig még fel nem tárt eredményeket és ismereteket, hanem itt annak néznénk utána, hogy talán kicsit hangzatosan kimondva, van-e élet a grafénon túl. A következőkben célunk ennek a bemutatása, felvillantva az új 2D kémia változatos világát. Azért csak röviden felvillantva, mert egyetlen folyóiratcikk terjedelmében nem foglalhatók össze a több ezer, 2D kutatásról publikált cikk részletei.

Felsejlő kémia a grafén után

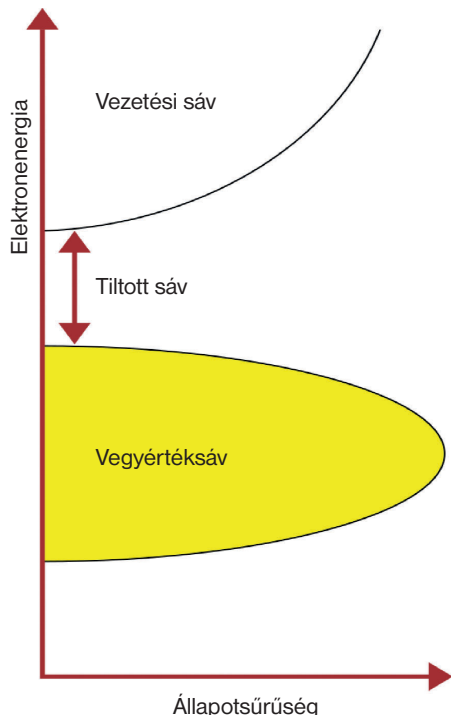
Az előszóban említett számtalan előnyös graféntulajdonság után szólnunk kell néhány olyan jellemzőről, amiket a grafén hiányosságai között említenek. Ugyanis a felfedezése óta a grafént, többek között, a szilícium helyettesítésére, pótlására is fel akarták használni a korszerű számítástechnikában. Ez a remény nem vált be. Sajnos, a grafén alkalmazhatatlannak bizonyult a digitális elektronika bizonyos területein. A

szilíciumpótláshoz igénybe vehető ideális anyagnak ugyanis félvezetőnek kell lennie, azaz olyan anyagnak, ami csak akkor vezet az elektromosságot, ha az elektronjait hőből, fényből vagy valamilyen külső forrásból származó kis energiámmal mozgásba lendítik. Az ehhez szükséges energia az illető anyag milyenségétől függ és értékét *energiarésnek (band gap)*, vagy *tiltott sávnak* nevezik (4. ábra). Az ilyen félvezető vezetőképességét, illetve az elektronok szabad áramlását ki- és bekapcsolva létrehozhatók a digitális bináris kódolt világ 0 és 1 állapotai. Ezen az elven működnek ugyanis a tranzisztorok. A fentiek értelmében adódó fő probléma az, hogy a grafén nem rendelkezik tiltott sávval, azaz elektronjai lényegében állandóan szabadon mozognak, és vezetnek az áramot.

Még mindig hangsúlyozottan gondolva a grafénra és vegyületeire, a grafínra (acetylénkötésekkel csatlakoztatott benzolgyűrűk) és a grafánra [(CH)_n összetételű szén-



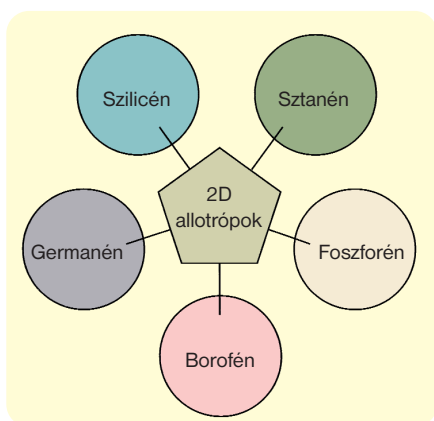
3. ábra. Hosszú távú grafénalkalmazási tervek 2015 és 2027 között [7]



4. ábra. Félvezetők sávszerkezete [9]

és hidrogén-polimer, amiben n nagy szám] és fentebb felsorolt tengernyi új alkalmazható tulajdonságaikra és jellemzőikre, és félretéve azt, amit hiányosságának említenek, azaz a tiltott sáv nemlétét, rögtön megemlítendő, hogy a grafént úttörőként ismerik el egy sor kétdimenziós anyag, illetve vegyület, így a 2D allotrópoknak a felfedezése során is (5. ábra). A 2D allotrópok elnevezésénél az angol nyelvből és a graféntól származik az a gyakorlat, hogy az érintett elem neve után az *-én* ragot illesztik. Ezt a gyakorlatot az 5. ábrán és a következőkben mi is elfogadtuk, kivéve természetesen a *sztanén* esetét. Ugyanis furcsán hangzott volna az angol *stanium* helyett a magyar *ón-t*, illetve *ónén-t* írni. Csak előzetes, bevezető példaként, a 2012-

5. ábra. 2D allotrópok



Graféncsalád	Grafén	Hexagonális bór-nitrid, „fehér grafén”	Köbös bór-nitrid	Fluorgrafén	Grafén-oxid
2D Kalkogének	MoS ₂ , WS ₂ , MoSe ₂ , WSe ₂	Félfezető dikalkogének: MoTe ₂ , WTe ₂ , ZrS ₂ , ZrSe ₂ , etc.		Fém-dikalkogének: NbSe ₂ , NbS ₂ , TaS ₂ , TiS ₂ , NiSe ₂ , etc.	
		Rétegelt réz-oxidok		Rétegelt félfezetők: GaSe, GaTe, InSe, Bi ₂ Se ₃ , etc.	
2D Oxidok	Csillámok, BSCCO	MoO ₃ , WO ₃	Perovszkit típusú: LaNb ₂ O ₇ , (Ca,Sr) ₂ Nb ₃ O ₁₀ , Bi ₄ Ti ₃ O ₁₂ , Ca ₂ Ta ₂ TiO ₁₀ , etc.		Hidroxidok: Ni(OH) ₂ , Eu(OH) ₂ , etc.
	Rétegelt réz-oxidok	TiO ₂ , MnO ₂ , V ₂ O ₅ , TaO ₃ , RuO ₂ , etc.			Más

Zöld: anyagok, amiknek 2D rétegei stabilnak bizonyultak a környezetben (levegő és szobahőmérséklet), vagy valószínűleg stabilak a környezetben.

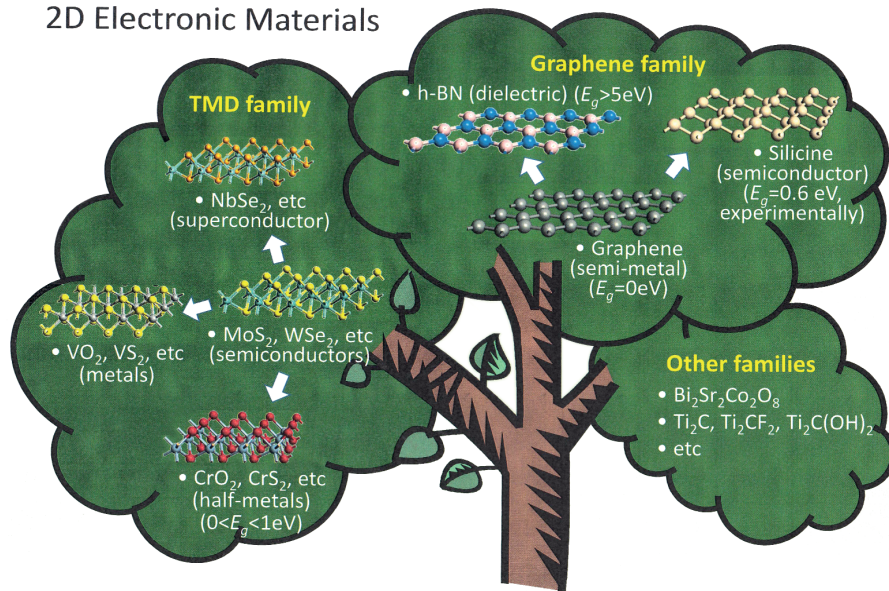
Rózsaszín: instabilak a környezetben, de stabilak lehetnek inert gázokban.

Szürke: 3D anyagok, amiket 2D-re lehetett hántolni. Hántolás és rétegezés után az oxidok és hidroxidok a 3D eredetűtől különböző stöchiometriát mutatnak (például Ti_{0,87}O₂ egy stöchiometriás egyatomos (monolayer) réteggé hámozható).

Más: különböző 2D kristályok, mint boridok, karbidok és mások, amik 2D réteggént valószínűleg előállíthatók.

1. táblázat. 2D anyagok

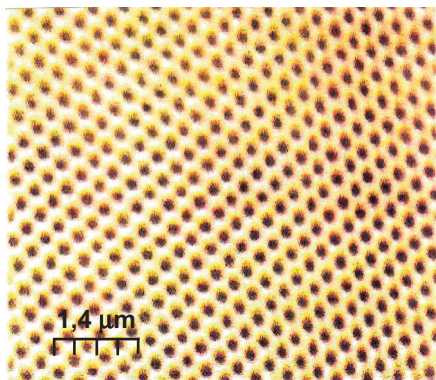
2D Electronic Materials



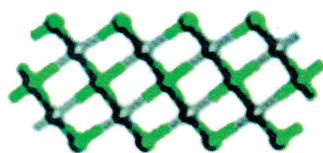
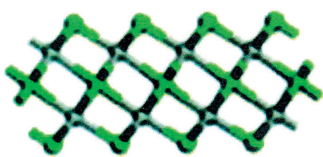
6. ábra. A 2D anyagok és vegyületek „családfája”

ben előállított *szilicén* a szilícium kétdimenziós változata, a *szilicén* ideálisnak tűnik a létező elektronikában való felhasználásra a szilícium karcsúsított változataként. A 2D allotrópokon túlmenően az úgynevezett kalkogénid és oxid típusú vegyületek kétdimenziós változatai már jelenleg is új grafénként kerülnek említésre (1. táblázat és 6. ábra). Szót kell ejtenünk még az úgynevezett MX anyagokról. Ezek átmenetifém-karbidok és -karbonidok. Az ilyen anyagok elnevezésénél a vegyület végéhez szintén az *-én* rag illesztendő (például MX-én, 7. ábra). Megjegyzendő, hogy semmilyen más anyag nem állítható elő vékonyabb, átlátszóbb változatban, mint az említettek. A 2D-s változatukban ezek elérhetik és el is érik azt a határt, ami a

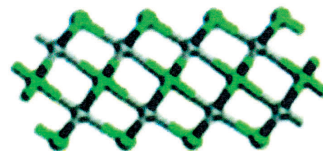
2D világában fizikailag és kémiailag lehetséges, s döntő módon ezek az anyagok rendelkezhetnek azzal, ami a grafénnál hiányzik: az energiával, azaz a tiltott sávval. Azonban itt a 2D kémia reménysegeinek ismertetésénél főleg a 2D allotrópokra helyezjük a hangsúlyt, de megemlítjük, hogy jelenleg világszerte jelentős kutatások folynak körülbelül 500 szilárd anyaggal, vegyülettel, amik szintén kezdetei vagy alapjai lehetnek új kétdimenziós kémiai alkalmazásoknak. Az ilyen anyagokat úgynevezett van der Waals-szerkezetekként (6. ábra) ismertették [11] annak folytán, hogy egymásra helyezett egyatomnyi rétegeiket gyenge van der Waals-kötések tartják össze, mint a grafént a grafitban (8. ábra). Az ilyen és hasonló kétdimenziós



MX



A



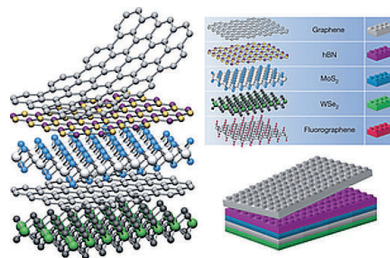
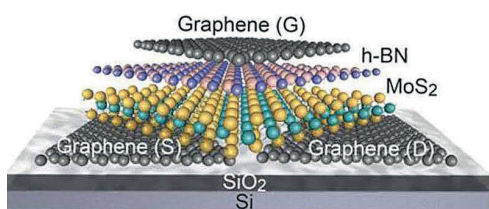
7. ábra. 2D MAX-én rétegek

M (zöld pont): átmenetifém

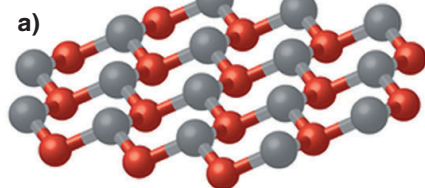
A (piros pont): IIIA vagy IVA elem

X (szürke pont): szén és/vagy nitrogén

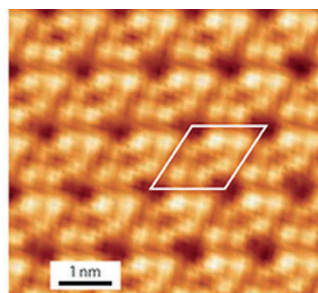
8. ábra. Van der Waals-heteroszerkezetek [11]



9. ábra. Szilícén [15]. a) 2D modellréteg, b) Ag(111) felületen epitaxiálisan kialakított 2D réteg



b)

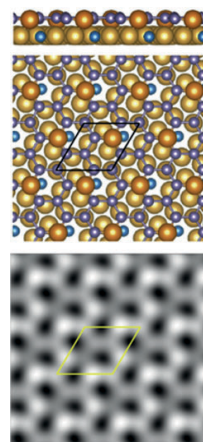


rétegt szerkezetek kutatásának, egyesek véleménye szerint, igazi célja nemcsak olyasminek a megismerése és továbbfejlesztése, ami már létezik, hanem olyan megvalósítók, amikről eddig még senki sem álmodott [7]. Ez például olyan alkalmazásokra vonatkozik, amelyek előre nem látott területeken valósulnak meg.

A grafén utáni 2D kémia eddig elért fejlődési ígéreteinek tömör ismertetését, mint feljebb tettük, a 2D allotrópok, az 1. táblázat és 6. ábra példáján akár itt elvégzettnek tekinthetnénk. Van azonban két kérdés, amire a következőkben még szeretnénk térni. Az első példák említése lenne 2D allotrópok előállításának jelenlegi helyzetére, a második rövid, közép- és hosszú távú kutatási ígéretekhez és reménysekhez köthető prognosztikai elemzések, amik jelenleg a 2D allotrópok kémiaiával kapcsolatosak.

Epitaxiás előállítások

Ami a 2D egyatomnyi rétegek előállítását illeti, az már a grafén esetében sem bizonyult egyszerűnek [12, 13] főleg a nagy tömegű gyakorlati, ipari alkalmazásokhoz megfelelően. Ez teljesen kielégítően mind a mai napig sincs még megoldva [14]. Annál is inkább indokolt a 2D allotrópok esetében az előállításuknál röviden elidőzni, és példaképpen elsőként megemlíteni a szilícén esetét. Ez utóbbi a graféntól (grafitól) eltérően ugyanis nem létezik a természetben, így 2D lapjai méhsejtszerű topo-



10. ábra. Epitaxiálisan kialakított méhsejt-szerkezetű 2D germanén rétegt kristályos Ge₂Pt szubsztráton [16]

lójájának [15] előállítását más technikával kellett megoldani. Ez az eljárás az epitaxia [16] jelenségét veszi igénybe. Az epitaxia kristályos réteg kialakítását, lerakását jelenti egy másik kristályos rétegen. A szilícén 2D kristályos réteget Ag(111) vagy cirkónium-diborid kristályos felületen alakították ki (9. ábra). De ugyancsak epitaxiálisan sikerült előállítani 2D germanénréteget aranysubstráton [16], illetve germanén 2D réteget építettek Ge₂Pt nanokristályok legkülső rétegein [17] is (10. ábra). Még az epitaxiális előállításnál időzve megemlíthető a sztanén előállítása kristályos bizmut-tellurid-rétegen [18] és a borofén kialakítása ezüstfelületen (12. ábra) [19].

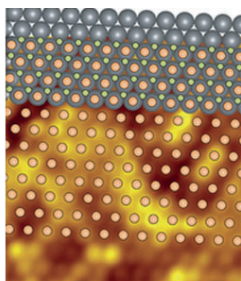
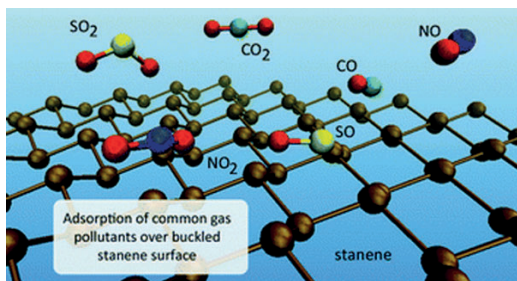
Ami a fenti és más 2D rétegek előállítását illeti, csak röviden térnék ki arra, hogy általában a kémiai (magas hőmérsékletű és/vagy plazma) párologtatást (*chemical vapor deposition*) [22] veszik igénybe. Az e célra alkalmazható készülék egy változatát mutatja be a 13. ábra [22].

Réteghasítás, hántolás (exfoliation) előállítás

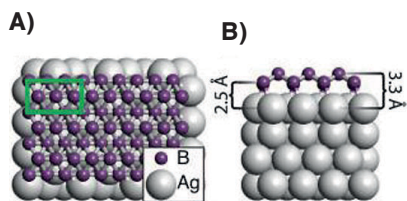
Ugyan a foszforénról a fentiekben csak az 5. ábrán tettünk említést, most azonban előállításának kapcsán példaként megemlítjük. Ugyanis eltérően az epitaxiás, illetve kémiai párologtatástól, és hasonlóan a grafénhoz a fekete foszforból cellulxréteghasítással (réteghasítással) a 14. ábrán láthatóan 2D foszforénréteg hántolható le.

Alkalmazási remények és ígéretek

Az előbbieken már hivatkoztunk arra a tanulmányra [8], amiben 2015-ig foglalták össze az ismereteket a grafénről és az új 2D anyagokról és vegyületekről. Ugyancsak hivatkozást érdemel egy másik, szín-

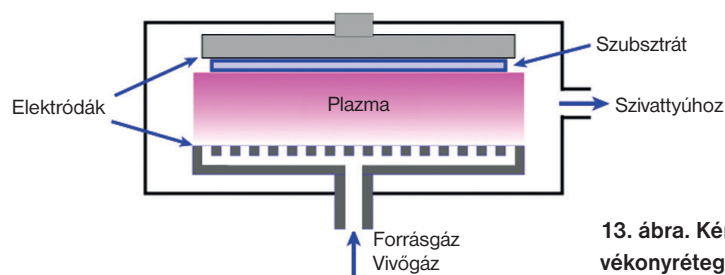


11. ábra. 2D meggörbült sztanénréteg önállóan és adszorbeálható gázmolekulákkal az epitaxiális Bi₂Te₃ felületen [19, 21]



12. ábra. 2D borofén réteg ezüstfelületen [20].

A) Hasított nézet, a tömbi foszfor többszörös foszforénlapokból áll. B) Oldalnézet, a piros (kék) gömbök a foszfort jelzik a felső és alsó rétegben



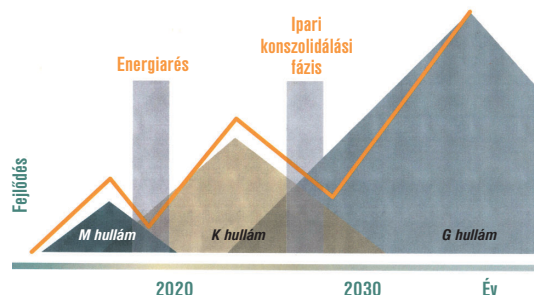
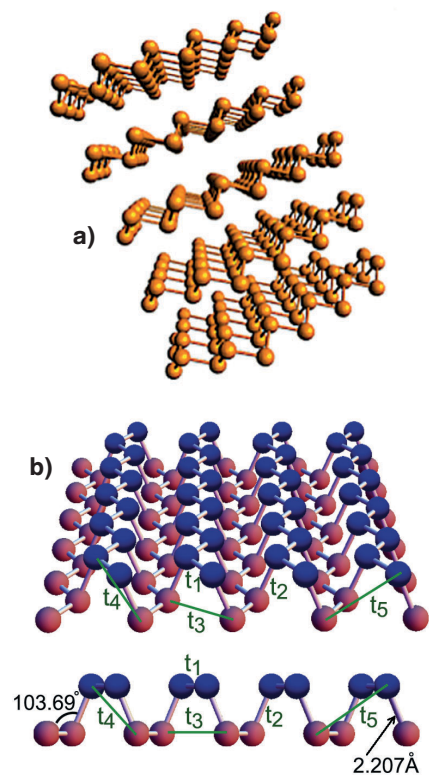
13. ábra. Kémiai vékonyréteg-párolgató [22]

tén nagyon alapos összefoglaló 2013-ból [24]. Jelen dolgozat címeként említett pilanutfelvételre utalunk akkor, amikor hang-

súlyozni kívánjuk, hogy itt csak valóban villanásnyit tudunk bemutatni az ismeretek tárházából, amiket a fent említett dolgozatok összefoglaltak.

A gyakorlati technológiai alkalmazások kidolgozására világszerte végzett 2D kutatások elsősorban a digitális elektronikára, a nanoelektronikára és optoelektronikai felhasználásokra összpontosítottak. Azonban amiért részben a grafénra vonatkozó eredmények jövőbeni előrelátását, prognosztizálását bemutattuk a 3. ábrán, érdemesnek tartunk itt megemlíteni egy hasonló jövőbeli próbálkozást, amit egy egyesült államokbeli cég publikált a grafén, szilícén, foszforén és germanén jövőbeni alkalmazásainak reményeiről [25]. Ebben a cég által felkért, nemzetközileg elismert szakértők meglátásait egy Silicene Labor Pyramid Waves™-nek nevezett növekedési grafikonban összegezték a 2010 és 2030 közötti évekre vonatkozóan (15. ábra). Az általánosított grafikai elképzelés szerint a fejlődés időbeni haladása három piramisszerű hullámban nyilvánul meg. Az M hullám valamilyen technológiai első áttörést jelent. A 2D témánál a csúcspontot a grafén felfedezése jelentette, ami után az időbeni energiarés áthidalását jelentős technológiák és újítások jelentik a K hullám során (2020 és 2030 között). A G hullám az alkalmazások, az ipari

14. ábra. Foszforén vékonyréteg [23]. a) Felülnézet, b) oldalnézet



15. ábra. A Silicene Labs (USA) cég „2D materials road-heat map”™ prognosztikai grafikonja [25]

gyártás megvalósításának és a konszolidálásnak az időszakát jövendőli, aminek csúcsát 2030-ra, esetleg 2035-re remélik. ●●●

IRODALOM

[1] <https://en.wikipedia.org/wiki/Graphene>
 [2] E.A.Abbott, Flatland: A Romance of Many Dimensions, Seeby & Co., 1894.
 [3] A. K. Geim, A. H. MacDonald, Graphene: Exploring carbon flatland, Phys. Today, August (2007) 35.
 [4] Braun Tibor, A Nobel-díjra érdemes taxisofőr, Lexica Kiadó, 2015, 168.
 [5] K. Kupferschmidt, Graphene and Brain Projects Win European Jackpot, Science (2013) 497.
 [6] https://ec.europa.eu/research/industrial_technologies/pdf/graphene-presentations/4-5-kinaret-22032011_en.pdf
 [7] K. Sanderson, Carbon and ... on, New Scientist, 25 October (2014) 40.
 [8] Andrea C. Ferrari, Francesco Bonaccorso, Vladimir Fal'ko, Konstantin S. Novoselov, Stephan Roche, Peter Bøggild, Stefano Borini, Frank H. L. Koppens, Vincenzo Palermo, Nicola Pugno, José A. Garrido, Roman Sordan, Alberto Bianco, Laura Ballerini, Maurizio Prato, Eleftherios Lidorikis, Jani Kivioja, Claudio Marinelli, Tapani Ryhänen, Alberto Morpurgo, Jonathan N. Coleman, Valeria Nicolosi, Luigi Colombo, Albert Fert, Mar Garcia-Hernandez, Adrian Bachtold, Grégory F. Schneider, Francisco Guinea, Cees Dekker, Matteo Barbone, Zhipei Sun, Costas Galiotis, Alexander N. Grigorenko, Gerasimos Konstantatos, Andras Kis, Mikhail Katsnelson, Lieven Vandersypen, Annick Loiseau, Vittorio Morandi, Daniel Neumaier, Emanuele Treossi, Vittorio Pellegrini, Marco Polini, Alessandro Tredicucci, Gareth M. Williams, Byung Hee Hong, Jong-Hyun Ahn, Jong Min Kim, Herbert Zirath, Bart J. van Wees, Herre van der Zant, Luigi Occhipinti, Andrea Di Matteo, Ian A. Kinloch, Thomas Seyller, Etienne Quesnel, Xinliang Feng, Ken Teo, Nalin Rupasinghe, Pertti Hakonen, Simon R. T. Neil, Quentin Tannock, Tomas Löfwander and Jari Kinaret, Science and technology roadmap for graphene, related two-dimensional crystals, and hybrid systems, Nanoscale (2015), 7, 4598.



- [9] https://hu.wikipedia.org/wiki/Tiltott_s%C3%A1v
- [10] K. Klinecicz, The emergent dynamics of a technological research topic: the case of graphene, *Scientometrics* (2016) 106, 319.
- [11] A. K. Geim, I. V. Grigorieva, Van der Waals heterostructures, *Nature* (2013), 499, 419.
- [12] Braun Tibor, A kétdimenziós kémia ígéretes világa. Grafén: a grafit hántolásától a szénnanocsövek kicipzázásáig, *Magy. Kém. Lapja* (2009) 64, 371.
- [13] Braun Tibor, A Nobel-díjra érdemes taxifóór. Interdiszciplináris kémiai kaleidoszkóp, *Lexica Kiadó*, 2015, 167.
- [14] Ron Mertens, The graphene handbook, *Graphene-info*, 2016.
- [15] P. Vogt, P. De Padova, C. Quaresima, J. Avila, E. Franzoskakis, M. C. Asensio, A. Resta, B. Ealet, G. Le Lay, Silicene: Compelling Experimental Evidence for Graphenelike Two-Dimensional Silicon, *Phys. Rev. Letters*, (2012) 108, art. no. 155501.
- [16] M.E. Dávila, L. Xian, S. Cahangirov, A. Rubio, G. Le Lay, Germanene: a novel two-dimensional germanium allotrope akin to graphene and silicene, *N. J. Phys.* (2014) 16, 095002.
- [17] P. Bampoulis, L. Zhang, A. Safaei, R. van Gastel, B. Poelsema, H. J. W. Zandvliet, Germanene termination of Ge2Pt crystals on Ge(110), *J. Phys. Cond. Matter*, (2014) 26, 44200.
- [18] F. F. Zhu, W.-J. Chen, Y. Xu, Ch.-L. Gao, D.-D. Guan, C.-H. Liu, D. Qian, Sh.-Ch. Zhang, J.-F. Jia, Epitaxial growth of two-dimensional stanene, <http://www.nature.com/nmat/journal/v14/n10/full/nmat4384.html>
- [19] F.-f. Zhu, W.-j. Chen, Y. Xu, Ch.-l. Gao, D.-d. Guan, C.-h. Liu, D. Qian, Sh.-Ch. Zhang, J.-f. Jia, Epitaxial growth of two-dimensional stanene, *Nature Materials*, (2015) 14, 1020.
- [20] A. J. Mannix, X.-F. Zhou, B. Kiraly, J. D. Wood, D. Alducin, B. D. Myers, X. Liu, B. L. Fisher, U. Santiago, J. R. Guest, M. J. Yacaman, A. Ponce, A. R. Oganov, M. C. Hersam, N. P. Guisinger, Synthesis of borophenes: Anisotropic, two-dimensional boron polymorphs, *Science*, (2015) 351, 1513.
- [21] L. Takahashi, K. Takahashi, Low temperature pollutant trapping and dissociation over two-dimensional tin, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, (2015) 17, 21394.
- [22] https://en.wikipedia.org/wiki/Chemical_vapor_deposition
- [23] <https://en.wikipedia.org/wiki/Phosphorene>
- [24] M. Xu, T. Liang, M. Shi, H. Chen, Graphene-Like Two-Dimensional Materials, *Chem. Reviews*, (2013), 113, 3766.
- [25] Silicene Labs, 2D Materials Briefing Book, 2014.

Bruckner-termi előadás

Hell Zoltán

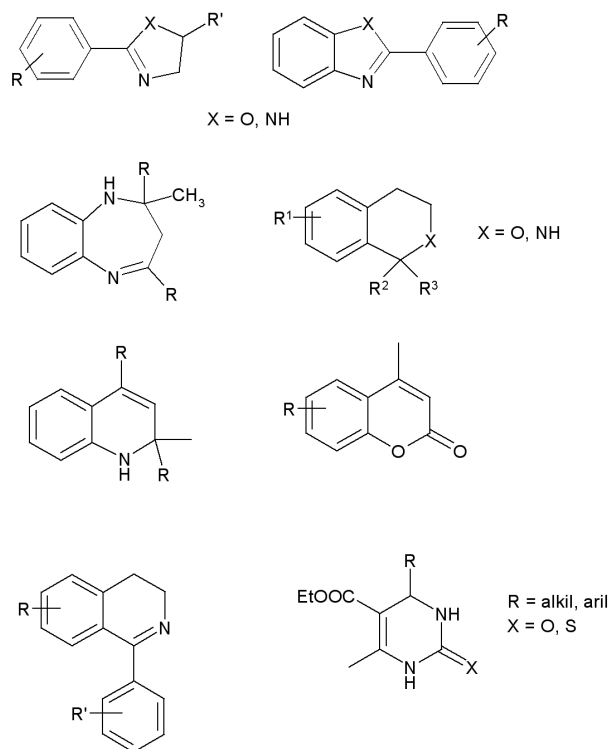
■ BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Heterogén katalizátorok alkalmazása szerves kémiai reakciókban

Az elmúlt évtizedek egyik fontos kutatási iránya szerves kémiai reakciók heterogén katalitikus megvalósítása. A reakcióelegyek egyszerűbb feldolgozhatósága, a kevesebb szennyvíz, illetve egyéb hulladék, a nem korrozív, környezetre kevésbé ártalmas, legtöbbször nem mérgező katalizátorok, az újrahaználhatóság/visszaforgathatóság, valamint az egyes típusokkal elérhető regio- vagy sztereoselektivitás, továbbá a reakciók atomhatékonyságának növelése a heterogén katalitikus eljárásokat a zöld kémiai irányelvek által is preferált módszerré tette. A számos kifejlesztett katalizátorcsalád között természetes és mesterséges ásványi típusú anyagok is szerepelnek.

Egy gyengén savas karakterű, természetes klinoptilolit-alapú, mikropórusos zeolit termékcsalád (Ersorb®) katalitikus hatását vizsgáltuk vízkilépéssel járó reakciókban. Az elsősorban adszorbensként történő felhasználásra tervezett anyagok segítségével egyszerű és kondenzált gyűrűs heterociklusokat (1. ábra) állítottunk elő egy lépésben, magas hozammal [1–10]. A célként kiválasztott heterociklusok farmakológiai aktivitásukról ismertek, amelyeket hagyományos módon erős sav katalizátorokkal, esetenként több lépésben állítanak elő. Több esetben a klasszikus reakciókra leírtaknál jelentősen rövidebb reakcióidő alatt értünk el magas hozamot. A reakcióelegyből kinyert katalizátorok többször újrafelhasználhatóak voltak számottevő aktivitáscsökkenés nélkül.

A réteges kettős hidroxidok (hidrotalcitok) számos képviselője hatékony bázikus katalizátor. Bázikus karakterük mellett speciális réteges szerkezetük is fontos szerepet játszhat a reakciók lejátszódásában, különösen a regio- vagy sztereoselektivitásban. Vizsgáltuk a Mg:Al hidrotalcit különböző típusait báziskatalizált reakciókban. Megállapítottuk, hogy a malonsav-allil-észterek jó jelenlétében végrehajtott intramolekuláris ciklizációjának diasztereoselektivitása megváltozik, ha kálium-karbonát és fázistransz-



1. ábra. Egyszerű és kondenzált gyűrűs heterociklusok előállítása

fer katalizátor [11] helyett nem aktivált Mg:Al 3:1 hidrotalcit jelenlétében, fázistranszfer katalizátor nélkül játszhatjuk le. Az izomerarány a kisebb térigényű *exo*-izomer felé tolódott el, amiből arra következtettünk, hogy a reakció a hidrotalcit rétegei között