

TU Graz löst Rätsel um Struktur von MOF-Dünnsfilmen

2.7.2026 - Falko Schoklitsch | Technische Universität Graz

MOF-Dünnsfilme spielen als poröse Materialien für viele potentielle Anwendungen eine zentrale Rolle. Forschende der TU Graz konnten nun zeigen, dass der prototypische Vertreter dieser Materialform eine völlig andere Struktur hat als bislang angenommen.

Wegen ihrer hohen Porosität gelten metallorganische Gerüststrukturen, sogenannte Metal Organic Frameworks (MOFs), als vielversprechende Materialien für innovative Anwendungen, weshalb für Ihre Entdeckung der Chemienobelpreis im Jahr 2025 vergeben wurde. Sie dienen etwa zur Speicherung von Gasen, zur Abscheidung von CO₂ oder zum gezielten Transport von Medikamenten. Während sich die Struktur von MOFs in Form von Einkristallen vergleichsweise einfach bestimmen lässt, blieb sie bei Dünnsfilmen weitgehend rätselhaft. Dabei ist gerade die Struktur entscheidend für die Eigenschaften und für mögliche Anwendungen.

Die Lösung dieses Rätsels hat ein Team um Roland Resel und Egbert Zojer vom Institut für Festkörperphysik der TU Graz gemeinsam mit Kolleg*innen des Instituts für Physikalische Chemie um Paolo Falcaro und des Karlsruher Instituts für Technologie um Christof Wöll nun gefunden. In einer Publikation im angesehenen Fachjournal Advanced Functional Materials zeigen die Forschenden am Beispiel des intensiv untersuchten Dünnsfilms Kupfer-Benzoldicarboxylat Cu(bdc), dass alle bisher vorgeschlagenen Strukturmodelle nicht zutreffen. Stattdessen haben sie eine Struktur identifiziert, die alle beobachteten Eigenschaften erklärt und eine Überraschung liefert: Cu(bdc)-Dünnsfilme sind gar nicht porös, wie man es von MOFs eigentlich erwartet.

Strukturmodelle müssen neu bewertet werden

„Unsere Ergebnisse legen nahe, dass zahlreiche veröffentlichte Strukturmodelle für MOF-Dünnsfilme nicht korrekt sind und neu bewertet werden müssen“, sagt Egbert Zojer. Der Durchbruch gelang durch die Kombination komplexer quantenmechanischer Simulationen mit einer speziellen Messmethode am Synchrotron Elettra in Triest, der sogenannten rotierenden Röntgenbeugung unter streifendem Einfall (rotating-GIXD). Im Gegensatz zu herkömmlichen Messungen, die die Röntgenbeugung in eine bestimmte Richtung messen und damit nur eine begrenzte Datenmenge bereitstellen, liefert die rotating-GIXD-Methode ein nahezu vollständiges Bild der Kristallperiodizität. Daraus können die Forschenden auf die atomare Struktur des Cu(bdc)-Dünnsfilms schließen. Die Kombination der Messungen mit den genannten quantenmechanischen Simulationen und einer Bestimmung der Dichte der Dünnsfilme mittels Röntgenreflektometrie erlaubte es dem Team, die große Zahl bisher in der Literatur vorgeschlagener Strukturen auszuschließen und schließlich mittels Simulationen die wahre Identität des Films zu enthüllen.

Dicht gepackt statt hochporös

Das Ergebnis widerspricht den bislang vorherrschenden Vorstellungen: Die Fachliteratur hatte die Struktur als hochporös beschrieben, wobei dies schon in der Vergangenheit mit einigen Beobachtungen nur schwer in Einklang zu bringen war. Nun zeigt sich aber: Statt hochporös ist der Cu(bdc)-Dünnsfilm dicht gepackt und enthält zusätzliche Hydroxid-Gruppen, die in den meisten bisherigen Modellen fehlten. Die gefundene Struktur erklärt, wieso sich die Filme kaum mit

Gastmolekülen beladen lassen, wieso sie eine ungewöhnlich hohe Stabilität gegenüber Wasser zeigen und wieso sie magnetische Eigenschaften besitzen, die es in den bisher vermuteten Strukturen nicht geben dürfte.

Neues Anwendungspotenzial

Die nun identifizierte, nicht-poröse Struktur erklärt nicht nur die chemische Robustheit des Materials, sondern bestätigt auch dessen ferromagnetischen Grundzustand. Damit verlagert sich das Anwendungspotenzial dieser Filme zu physikalischen Phänomenen, die in der Sensorik, Mikroelektronik oder in magnetischen Speichersystemen relevant sein könnten. Zudem enthält die Struktur Kupferoxidlagen, die an Hochtemperatur-Supraleiter erinnern; welche Anwendungen sich daraus ergeben könnten, ist Grundlage für weitere Forschung.

„Mit unserer Arbeit konnten wir zeigen, dass eine zuverlässige Strukturbestimmung von MOF-Dünnschichten nur durch die Kombination moderner Beugungsmethoden und theoretischer Modellierung möglich ist“, sagt Egbert Zojer. „Die federführend von der Gruppe von Roland Resel etablierte Beugungsmethodik gemeinsam mit der an der TU Graz entwickelten Software zur Auswertung der Synchrotron-Daten liefert dafür ein wichtiges Werkzeug. Sie schafft die Grundlage, künftig auch die Struktur weiterer MOF-Dünnschichten aufzuklären und sie anschließend gezielt für neue Anwendungen in Sensorik und Mikroelektronik nutzbar zu machen.“

Publikation: Resolving the Cu(bdc) Conundrum: Identifying Non-Porous Packing of Prototypical Coordination-Network Thin Films Combining Advanced Diffraction Techniques and Computational Modelling

Autor*innen: Narges Taghizade, Mario Fratschko, Robbin Steentjes, Mercedes Linares-Moreau, Paolo Falcaro, Christof Wöll, Roland Resel, Egbert Zojer

In: Advanced Functional Materials

DOI: <https://doi.org/10.1002/adfm.76075>

Kontakt

Egbert ZOJER
Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.
TU Graz | Institut für Festkörperphysik
Tel.: +43 316 873 8475
egbert.zojernoSpam@tugraz.at

Roland RESEL
A.o. Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn.
TU Graz | Institut für Festkörperphysik
Tel.: +43 316 873 8476
roland.reselnoSpam@tugraz.at

<https://www.tugraz.at/news/artikel/mof-duennfilme-cubdc>