



19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA

11 Número de publicación: **2 349 337**

51 Int. Cl.:
C07F 3/00 (2006.01)
C07F 19/00 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

96 Número de solicitud europea: **07712171 .3**
96 Fecha de presentación : **08.02.2007**
97 Número de publicación de la solicitud: **1984378**
97 Fecha de publicación de la solicitud: **29.10.2008**

54 Título: **Método para la producción de materiales estructurales orgánicos porosos.**

30 Prioridad: **10.02.2006 EP 06101535**

45 Fecha de publicación de la mención BOPI:
30.12.2010

45 Fecha de la publicación del folleto de la patente:
30.12.2010

73 Titular/es: **BASF SE**
67056 Ludwigshafen, DE

72 Inventor/es: **Mattenheimer, Hendrick;**
Müller, Ulrich y
Schubert, Markus

74 Agente: **Carvajal y Urquijo, Isabel**

ES 2 349 337 T3

Aviso: En el plazo de nueve meses a contar desde la fecha de publicación en el Boletín europeo de patentes, de la mención de concesión de la patente europea, cualquier persona podrá oponerse ante la Oficina Europea de Patentes a la patente concedida. La oposición deberá formularse por escrito y estar motivada; sólo se considerará como formulada una vez que se haya realizado el pago de la tasa de oposición (art. 99.1 del Convenio sobre concesión de Patentes Europeas).

MÉTODO PARA LA PRODUCCIÓN DE MATERIALES ESTRUCTURALES ORGÁNICOS POROSOS

DESCRIPCIÓN

- 5 La presente invención se refiere a un método para la producción de materiales estructurales orgánicos porosos.
- Los materiales estructurales orgánicos porosos forman una interesante categoría de sustancias que pueden ser una alternativa a las zeolitas inorgánicas para las más diversas aplicaciones. Tales aplicaciones están por ejemplo en el campo de la retención, separación o entrega controlada de
- 10 sustancias químicas, como por ejemplo de gases o en el campo de la catálisis. En particular aquí juega un papel decisivo, la porosidad del material orgánico. Mediante los poros presentes en forma definida en el material estructural orgánico, por un lado se aumenta la superficie específica del material y se hace posible una separación selectiva de mezclas. Lo mismo vale para tales materiales cuando éstos son empleados en reacciones químicas como por ejemplo en reacciones catalíticas.
- 15 Un grupo especial de estos materiales estructurales orgánicos porosos son los denominados materiales estructurales organometálicos. Estos son conocidos en el estado de la técnica y típicamente contienen un compuesto orgánico por lo menos bidentado unido de manera coordinada a un ión metálico. Tales materiales estructurales organometálicos (MOF = estructurales organometálicos) son descritos por ejemplo en US-A 5,648,508, EP-A 0 790 253, M.O. Keeffe, J. Sol. State Chem., 152 (2000), 3-20;
- 20 H.Li et al., Nature 402 (1999), 276; M. Eddaoudi, Topics in catalysis 9 (1999), 105-111; B. Chen et al., Science 291 (2001), 1021-1023 y DE-A 101 11 230.
- Como un grupo especial de estos materiales estructurales organometálicos son descritos en la literatura más reciente los así denominados materiales estructurales "limitados", en los que la estructura no se extiende infinitamente mediante la elección especial del compuesto orgánico sino que
- 25 lo hace por formación de poliedros. A.C. Sudik, et al., J. Am. Chem. Soc. 127 (2005), 7110-7118, describen tales materiales estructurales especiales. Aquí se menciona esta delimitación como poliedros organometálicos (MOP = poliedros órgano metálicos).
- Otra modificación de tales materiales estructurales orgánicos porosos representa las así llamadas estructuras orgánicas covalentes (COF = estructuras orgánicas covalentes). Aquí son materiales
- 30 estructurales, en los cuales en comparación con los materiales estructurales organometálicos el átomo central metálico ha sido reemplazado por un compuesto orgánico de boro, aquellos que preferiblemente tienen cambiados por lo menos dos grupos boro (R-B(OH)₂, donde R representa un radical orgánico). A.P. Côté, et al. Science 310 (2005), 1116-1170, describen por ejemplo tales materiales estructurales.
- 35 Todos estos materiales estructurales orgánicos tienen una porosidad común. Estrechamente ligada con la porosidad de tales materiales está la superficie específica, la cual influye fuertemente en sus propiedades. Como una medida de la caracterización de tales superficies se toma la superficie específica según Langmuir.
- De allí que para la producción de tales materiales, aparte de un buen rendimiento, también es de gran
- 40 importancia la generación de altas superficies específicas así como la reproducibilidad en la producción. Esto vale en particular para la producción de grandes cantidades de material estructural. Por ejemplo, para los materiales estructurales organometálicos como MOF-5 (IRMOF-1) se describen en la literatura numerosos métodos de síntesis.
- Así por ejemplo H. Li, et al., Nature 402 (1999), 276-279 describen la síntesis de MOF-5 donde pudo
- 45 alcanzarse una superficie Langmuir de aproximadamente 2900 m²/g.

En WO-A 02/070526 se emplearon por ejemplo solventes especiales para producir MOF-5. Con esto resultó una superficie específica de 1063 m²/g.

También en WO-A 02/088148 se manifiestan diferentes métodos para la producción de IRMOF-1 (MOF-5).

- 5 La producción de MOF-5, en la cual pudo alcanzarse una superficie específica particularmente alta, es descrita en WO-A 03/102000 así como de J.L.C. Rowsell, et al., J. Am. Chem. Soc. 126 (2004), 5666-5667.

Todas estas citas de literatura muestran que a pesar de conducciones de reacción en principio iguales, se obtienen materiales estructurales orgánicos porosos que exhiben superficies específicas fuertemente diferentes y con ello pueden tener propiedades diferentes.

10 De allí que existe una necesidad para poner a disposición métodos de producción que, en particular en la producción de grandes cantidades de materiales estructurales orgánicos porosos, eviten las desventajas arriba descritas.

De allí que es un objetivo de la presente invención poner a disposición métodos de producción de materiales estructurales orgánicos porosos, que suministren cantidades suficientemente grandes de tales materiales estructurales, donde estos exhiben una superficie específica tan alta como es posible y pueden ser producidos con una alta reproducibilidad.

15 Se logró el objetivo mediante un método para la producción de un material estructural organometálico poroso, dado el caso limitado, donde contiene la etapa:

20 Reacción de una mezcla de reacción en una fase líquida a partir de por lo menos un compuesto metálico con por lo menos un compuesto orgánico por lo menos bidentado, el cual puede estar ligado al metal de manera coordinada, en presencia de un solvente orgánico no acuoso en presencia y/o bajo liberación de agua, donde el compuesto orgánico exhibe por lo menos dos átomos elegidos en cada caso independientemente uno de otro de entre el grupo compuesto por oxígeno, azufre y nitrógeno, sobre el que el compuesto orgánico puede estar ligado de manera coordinada sobre el metal, caracterizado porque durante la transformación se elimina el agua de la fase líquida de la mezcla de reacción.

25 Además el objetivo es solucionado mediante un método para la producción de un material estructural boro-orgánico poroso, dado el caso limitado, donde contiene la etapa:

30 Reacción de una mezcla de reacción en fase líquida de por lo menos un compuesto que exhibe por lo menos dos grupos boro con por lo menos un compuesto orgánico que tiene por lo menos dos grupos funcionales, el cual puede enlazarse de modo covalente sobre un grupo, en presencia de un solvente orgánico no acuoso, donde el compuesto orgánico que tiene por lo menos dos grupos funcionales exhibe por lo menos dos átomos elegidos en cada caso independientemente uno de otro de entre el grupo compuesto por oxígeno, azufre y nitrógeno, sobre el cual el compuesto orgánico que tiene dos grupos funcionales puede estar enlazado de modo covalente sobre un grupo boro, caracterizado porque durante la transformación se elimina el agua de la fase líquida de la mezcla de reacción.

35 Se encontró el modo sorprendente que los materiales estructurales orgánicos porosos arriba descritos (MOF, MOP, COF), en los cuales se presenta una desviación estándar inferior a la del estado de la técnica, pueden ser materializados con superficies específicas comparativamente altas y valores con buena reproducibilidad mediante la eliminación del agua de la mezcla de reacción en la formación del material estructural orgánico poroso.

40 En el caso de materiales estructurales organometálicos, esta agua puede estar presente en la mezcla de reacción en forma de agua de cristalización del compuesto metálico. Después de la reacción del

45

compuesto metálico, el agua de cristalización ya no se encuentra enlazada de manera coordinada en la mezcla de reacción y puede ser eliminada de esta. Además existe la posibilidad de emplear solvente orgánico que no es totalmente anhidro. También aquí puede eliminarse el agua presente por ello en la mezcla de reacción. Por último puede también formarse agua en la reacción. Esto aplica por ejemplo
 5 entonces cuando el compuesto metálico está presente en la mezcla de reacción en forma de un hidróxido metálico o un óxido metálico y ocurre una reacción con el compuesto orgánico por lo menos bidentado, el cual puede ser por ejemplo un ácido carboxílico orgánico. Aquí se libera agua por la formación del compuesto complejo metálico. En ello tiene que evitarse añadir el compuesto metálico a la mezcla de reacción como hidróxido o como óxido. Más bien este puede también estar
 10 presente en forma de una sal metálica, donde los iones hidróxido necesarios para la formación de agua puede ser generados mediante la formación de una base, como por ejemplo soda cáustica, o mediante el solvente.

En el caso de materiales estructurales orgánicos de boro, el agua se genera en particular mediante la reacción de ácido bórico con, por ejemplo, un alcohol.

15 La eliminación del agua de la mezcla de reacción puede ocurrir en particular mediante destilación, mediante arrastre con vapor o mediante agentes de adsorción. Son agentes adecuados de adsorción por ejemplo el óxido de aluminio, gel de sílice o un tamiz molecular en particular un tamiz molecular de 3 Å o 4 Å.

En el arrastre con vapor (o llamada expulsión) se eliminan desde una fase líquida componentes de esta
 20 fase, mediante la conducción de gases sobre la fase líquida y se convierten a una fase gaseosa.

Esto es ventajoso, entre otras cosas, cuando la reacción puede tener lugar bajo agitación, lo cual también es ventajoso en una escalamiento. Mediante ello pueden obtenerse por reacción mayores cantidades de un material estructural orgánico poroso deseado.

Se prefiere que la reacción ocurra a una presión de máximo 2 bar (absoluto). Además, sin embargo de modo preferible la presión alcanza como máximo 1200 mbar (absoluto). En particular la reacción
 25 tiene lugar preferiblemente a presión atmosférica.

La reacción puede ser llevada a cabo a temperatura ambiente o temperatura elevada. Preferiblemente, la reacción ocurre sin embargo a una temperatura en el rango de 80°C a 180°C. Además se prefiere la temperatura de reacción de 100°C a 150°C.

30 Como se explicó arriba, el compuesto metálico puede ser una sal metálica. Son ejemplos de tales sales nitratos, sulfatos, cloruros, fluoruros, cloruros, yoduros, hidróxidos, óxidos o alcoxilatos. Dependiendo del metal empleado están presentes tales compuestos como hidratos. Como ejemplo se mencionan el nitrato de zinc, el cual es obtenible comercialmente tanto en tetra como también como hexahidrato.

35 Los materiales estructurales organometálicos según la presente invención contiene poros, en particular micro- y/o mesoporos. Se definen como microporos aquellos con un diámetro de 2 nm o menos y mesoporos se definen por un diámetro en el rango de 2 a 50 nm, correspondientes en cada caso según la definición, como se indica en Pure & Applied Chem. 57 (1985), 603 - 619, en particular en la página 606 (1976). La presencia de micro- y/o mesoporos puede ser examinada con ayuda de medidas
 40 de sorción, donde estas medidas determinan la capacidad de absorción del MOF por nitrógeno a 77 kelvin según DIN 66131 y/o DIN 66134.

Preferiblemente la superficie específica calculada según el modelo de Langmuir según DIN 66135 (DIN 66131, 66134) para un MOF en forma de polvo es mayor de 5 m²/g, mas preferiblemente sobre 10 m²/g, mas preferiblemente más de 50 m²/g, aún más preferiblemente más de 500 m²/g, todavía aún
 45 más preferiblemente mayor que 1000 m²/g y en particular más de 1500 m²/g.

Los cuerpos moldeados de MOF pueden poseer una superficie específica menor; sin embargo preferiblemente mayor de 10 m²/g, mas preferiblemente mayor de 50 m²/g, aún más preferiblemente mayor de 500 m²/g.

El componente metálico en el material estructural es elegido preferiblemente de entre los grupos Ia, 5
IIa, IIIa, IVa a VIIIa y Ib a VIb. Se prefieren particularmente Mg, Ca, Sr, Ba, Sc, Y, Ti, Zr, Hf, V, Nb, Ta, Cr, Mo, W, Mn, Re, Fe, Ru, Os, Co, Rh, Ir, Ni, Pd, Pt, Cu, Ag, Au, Zn, Cd, Hg, B, Al, Ga, In, Tl, Si, Ge, Sn, Pb, As, Sb y Bi. Son más preferidos Zn, Al, Mg, Ca, Cu, Ni, Fe, Pd, Pt, Ru, Rh, Co, Zr y Ti. En particular se prefieren Zn, Al, Ni, Cu, Mg, Ca, Fe. Respecto a estos iones de estos elementos son de mencionar Mg²⁺, Ca²⁺, Sr²⁺, Ba²⁺, Sc³⁺, Y³⁺, Ti⁴⁺, Zr⁴⁺, Hf⁴⁺, V⁴⁺, V³⁺, V²⁺, Nb³⁺, Ta³⁺, Cr³⁺, 10
Mo³⁺, W³⁺, Mn³⁺, Mn²⁺, Re³⁺, Re²⁺, Fe³⁺, Fe²⁺, Ru³⁺, Ru²⁺, Os³⁺, Os²⁺, Co³⁺, Co²⁺, Rh²⁺, Rh⁺, Ir²⁺, Ir⁺, Ni²⁺, Ni⁺, Pd²⁺, Pd⁺, Pt²⁺, Pt⁺, Cu²⁺, Cu⁺, Ag⁺, Au⁺, Zn²⁺, Cd²⁺, Hg²⁺, Al³⁺, Ga³⁺, In³⁺, Tl³⁺, Si⁴⁺, Si²⁺, Ge⁴⁺, Ge²⁺, Sn⁴⁺, Sn²⁺, Pb⁴⁺, Pb²⁺, As⁵⁺, As³⁺, As⁺, Sb⁵⁺, Sb³⁺, Sb⁺, Bi⁵⁺, Bi³⁺ y Bi⁺.

Al menos un compuesto orgánico por lo menos bidentado exhibe por lo menos dos átomos, que son elegidos en cada caso independientemente uno de otro del grupo compuesto por oxígeno, azufre y 15
nitrógeno, sobre los cuales el compuesto orgánico puede enlazarse al metal de manera coordinada. Estos átomos pueden ser parte de la estructura del compuesto orgánico o ser grupos funcionales.

Como grupos funcionales sobre los cuales pueden formarse los mencionados enlaces coordinados, son de mencionar en particular por ejemplo los siguientes grupos funcionales: OH, SH, NH₂, NH(-R-H), N(R-H)₂, CH₂OH, CH₂SH, CH₂NH₂, CH₂NH(-R-H), CH₂N(-R-H)₂, -CO₂H, COSH, -CS₂H, -NO₂, - 20
B(OH)₂, -SO₃H, -Si(OH)₃, -Ge(OH)₃, -Sn(OH)₃, -Si(SH)₄, -Ge(SH)₄, -Sn(SH)₃, -PO₃H₂, -AsO₃H, -AsO₄H, -P(SH)₃, -As(SH)₃, -CH(RSH)₂, -C(RSH)₃, -CH(RNH₂)₂, -C(RNH₂)₃, -CH(ROH)₂, -C(ROH)₃, -CH(RCN)₂, -C(RCN)₃, donde R preferiblemente puede contener un grupo alquileo con 1, 2, 3, 4 o 5 átomos de carbono como por ejemplo un grupo metileno, etileno, n-propileno, i-propileno, n-butileno, i-butileno, tert-butileno o n-pentileno, o un grupo arilo que contiene 1 o 2 25
núcleos aromáticos como por ejemplo 2 anillos C₆, los cuales dado el caso pueden ser condensados e independientemente uno de otro pueden estar sustituidos de modo adecuado con por lo menos en cada caso un sustituyente, y/o los cuales pueden contener independientemente uno de otro en cada caso por lo menos un heteroátomo como por ejemplo N, O y/o S. Según formas así mismo preferidas de operar son de mencionar grupos funcionales en los cuales el radical R arriba mencionado no está presente. 30
De modo correspondiente son de mencionar entre otros -CH(SH)₂, -C(SH)₃, -CH(NH₂)₂, CH(NH(R-H))₂, CH(N(R-H))₂, C(NH(R-H))₃, C(N(R-H))₂, -C(NH₂)₃, -CH(OH)₂, -C(OH)₃, -CH(CN)₂, -C(CN)₃.

Los al menos dos grupos funcionales pueden por principio estar enlazados en cada compuesto orgánico adecuado en tanto se garantice que los compuestos orgánicos que exhiben estos grupos 35
funcionales son capaces de formar enlaces de manera coordinada y de producir el material estructural. Preferiblemente los compuestos orgánicos, que contienen por lo menos los por lo menos dos grupos funcionales, se derivan de un compuesto alifático saturado o insaturado o un compuesto aromático o compuesto tanto alifático como también aromático.

El compuesto alifático o la parte alifática del compuesto tanto alifático como también aromático puede 40
ser lineal y/o ramificada y/o cíclica, donde también son posibles varios ciclos por compuesto. De modo más preferido el compuesto alifático o la parte alifática del compuesto tanto alifático como también aromático contiene 1 a 18, más preferiblemente 1 a 14, más preferiblemente 1 a 13, más preferiblemente 1 a 12, más preferiblemente 1 a 11 y en particular preferiblemente 1 a 10 átomos de carbono como por ejemplo 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 o 10 átomos de carbono. Aquí se prefieren en 45
particular entre otros metano, adamantano, acetileno, etileno o butadieno.

El compuesto aromático o la parte aromática del compuesto tanto aromático como también alifático puede exhibir uno o también varios núcleos como por ejemplo 2, 3, 4 o cinco núcleos, donde los núcleos pueden estar presentes de modo separado uno de otro y/o por lo menos dos núcleos estar presentes en forma condensada. De modo particularmente preferido el compuesto aromático o la parte aromática del compuesto tanto alifático como aromático exhibe uno, dos o tres núcleos, donde se prefieren de modo particular uno o dos núcleos. Independientemente uno de otro, además cada núcleo de los compuestos mencionados puede contener por lo menos un heteroátomo como por ejemplo N, O, S, B, P, Si, preferiblemente N, O y/o S. Además, el compuesto aromático o la parte aromática del compuesto tanto aromático como alifático contiene preferiblemente uno o dos núcleos C₆, donde los dos pueden estar presentes separados uno de otro o en forma condensada. En particular son de mencionar como compuestos aromáticos benceno, naftaleno y/o bifenilo y/o biperidilo y/o piridilo. De modo particularmente preferido el compuesto orgánico por lo menos bidentado se deriva de un ácido di-, tri-, o tetracarboxílico o sus análogos de azufre. Análogos de azufre son los grupos funcionales -C(=O)SH así como sus tautómeros y C(=S)SH, los cuales pueden ser empleados en lugar de uno o varios grupos carboxílicos.

En el marco de la presente invención, el concepto "derivar" significa que el compuesto orgánico por lo menos bidentado puede estar presente en el material estructural en forma parcialmente desprotonada o totalmente desprotonada. Además el compuesto orgánico por lo menos bidentado puede contener otros sustituyentes como por ejemplo -OH, -NH₂, -OCH₃, -CH₃, -NH(CH₃), -N(CH₃)₂, -CN así como halogenuros.

Más preferido es el compuesto orgánico por lo menos bidentado de un hidrocarburo alifático o aromático cíclico o acíclico con 1 a 18 átomos de carbono el cual además exhibe como grupos funcionales exclusivamente por lo menos dos grupos carboxi.

Por ejemplo, en el marco de la presente invención se mencionan ácidos dicarboxílicos como ácido oxálico, ácido succínico, ácido tartárico, ácido 1,4-butanodicarboxílico, ácido 1,4-butenodicarboxílico, ácido 4-oxo-pirano-2,6-dicarboxílico, ácido 1,6-hexanodicarboxílico, ácido decanodicarboxílico, ácido 1,8-heptadecanodicarboxílico, ácido 1,9-heptadecanodicarboxílico, ácido heptadecanodicarboxílico, ácido acetilendicarboxílico, ácido 1,2-bencenodicarboxílico, ácido 1,3-bencenodicarboxílico, ácido 2,3-piridindicarboxílico, ácido piridin-2,3-dicarboxílico, ácido 1,3-butadieno-1,4-dicarboxílico, ácido 1,4-bencenodicarboxílico, ácido p-bencenodicarboxílico, ácido imidazol-2,4-dicarboxílico, ácido 2-metilquinolin-3,4-dicarboxílico, ácido quinolin-2,4-dicarboxílico, ácido quinoxalin-2,3-dicarboxílico, ácido 6-cloroquinoxalin-2,3-dicarboxílico, ácido 4,4'-diaminifenilmetan-3,3'-dicarboxílico, ácido quinolin-3,4-dicarboxílico, ácido 7-cloro-4-hidroxiquinolin-2,8-dicarboxílico, ácido diimidodicarboxílico, ácido piridin-2,6-dicarboxílico, ácido 2-metilimidazol-4,5-dicarboxílico, ácido tiofen-3,4-dicarboxílico, ácido 2-Isopropilimidazol-4,5-dicarboxílico, ácido tetrahidropiran-4,4-dicarboxílico, ácido perilen-3,9-dicarboxílico, ácido perilendicarboxílico, ácido pluriol E 200-dicarboxílico, ácido 3,6-dioxaoctanodicarboxílico, ácido 3,5-ciclohexadieno-1,2-dicarboxílico, ácido octadicarboxílico, ácido pentano-3,3-carbonico, ácido 4,4'-diamino-1,1'-difenil-3,3'-dicarboxílico, ácido 4,4'-diaminodifenil-3,3'-dicarboxílico, ácido benzidin-3,3'-dicarboxílico, ácido 1,4-bis-(fenilamino)-benceno-2,5-dicarboxílico, ácido 1,1'-dinaftildicarboxílico, ácido 7-cloro-8-metilquinolin-2,3-dicarboxílico, ácido 1-anilinoantraquinon-2,4'-dicarboxílico, ácido politetrahidrofurano-250-dicarboxílico, ácido 1,4-bis-(carboximetil)-piperazin-2,3-dicarboxílico, ácido 7-cloroquinolin-3,8-dicarboxílico, ácido 1-(4-carboxi)-fenil-3-(4-cloro)-fenilpirazolin-4,5-dicarboxílico, ácido 1,4,5,6,7,7,7-hexacloro-5-norbornen-2,3-dicarboxílico, ácido fenilindandicarboxílico, ácido 1,3-dibenzil-2-oxo-imidazolidin-4,5-dicarboxílico, ácido 1,4-

- ciclohexandicarboxílico, ácido naftalin-1,8-dicarboxílico, ácido 2-benzoil-benceno-1,3-dicarbon-ico, ácido 1,3-dibenzil-2-oxoimidazolidin-4,5-cis-dicarboxílico, ácido 2,2'-biquinolin-4,4'-dicarboxílico, ácido piridin-3,4-dicarboxílico, ácido 3,6,9-trioxaundecanodicarboxílico, ácido hidroxibenzofenondicarboxílico, ácido pluriol E 300-dicarboxílico, ácido pluriol E 400-dicarboxílico, ácido pluriol E 600-dicarboxílico, ácido pirazol-3,4-dicarboxílico, ácido 2,3-pirazindicarboxílico, ácido 5,6-dimetil-2,3-pirazindicarboxílico, ácido 4,4'-diaminodifenileterdiimidodicarboxílico, ácido 4,4'-diaminodifenilmetandiimidodicarboxílico, ácido 4,4'-diaminodifenilsulfondiimidodicarboxílico, ácido 1,4-naftalindicarboxílico, ácido 2,6-naftalindicarboxílico, ácido 1,3-adamantandicarboxílico, ácido 1,8-naftalindicarboxílico, ácido 2,3-naftalindicarboxílico, ácido 8-metoxi-2,3-naftalindicarboxílico, ácido 8-nitro-2,3-naftalin-carbonico, ácido 8-sulfo-2,3-naftalindicarboxílico, ácido antracen-2,3-dicarboxílico, ácido 2',3'-difenil-p-terfenil-4,4"-dicarboxílico, ácido difenileter-4,4'-dicarboxílico, ácido imidazol-4,5-dicarboxílico, ácido 4(1H)-oxotiochromen-2,8-dicarboxílico, ácido 5-tert-butil-1,3-benzenodicarboxílico, ácido 7,8-quinolindicarboxílico, ácido 4,5-imidazoldicarboxílico, ácido 4-ciclohexen-1,2-dicarboxílico, ácido hexatriacontanodicarboxílico, ácido tetradecanodicarboxílico, ácido 1,7-heptadicarboxílico, ácido 5-hidroxi-1,3-benzenodicarboxílico, ácido 2,5-dihidroxi-1,4-dicarboxílico, ácido pirazin-2,3-dicarboxílico, ácido furan-2,5-dicarboxílico, ácido 1-nonen-6,9-dicarboxílico, ácido eicosendicarboxílico, ácido 4,4'-dihidroxidifenilmetan-3,3'-dicarboxílico, ácido 1-amino-4-metil-9,10-dioxo-9,10-dihidroantracen-2,3-dicarboxílico, ácido 2,5-piridindicarboxílico, ácido ciclohexen-2,3-dicarboxílico, 2,9-diclorofluorubin-4,11-dicarboxílico, ácido 7-cloro-3-metilquinolin-6,8-dicarboxílico, ácido 2,4-diclorobenzofenon-2',5'-dicarboxílico, ácido 1,3-benzenodicarboxílico, ácido 2,6-piridindicarboxílico, ácido 1-metilpirrol-3,4-dicarboxílico, ácido 1-benzil-1H-pirrol-3,4-dicarboxílico, ácido antraquinon-1,5-dicarboxílico, ácido 3,5-pirazoldicarboxílico, ácido 2-nitrobenceno-1,4-dicarboxílico, ácido heptan-1,7-dicarboxílico, ácido ciclobutano-1,1-dicarboxílico 1,14-tetradecanodicarboxílico, ácido 5,6-dehidronorboman-2,3-dicarboxílico, ácido 5-etil-2,3-piridindicarboxílico o ácido camferdicarboxílico,
- ácidos tricarboxílicos como
- ácido 2-hidroxi-1,2,3-propanotricarboxílico, ácido 7-cloro-2,3,8-quinolintricarboxílico, ácido 1,2,3-, ácido 1,2,4-benzenotricarboxílico, ácido 1,2,4-butanotricarboxílico, ácido 2-fosfono-1,2,4-butanotricarboxílico, ácido 1,3,5-benzenotricarboxílico, ácido 1-hidroxi-1,2,3-propanotricarboxílico, ácido 4,5-dihidro-4,5-dioxo-1H-pirrol[2,3-F]quinolin-2,7,9-tricarboxílico, ácido 5-acetil-3-amino-6-metilbenceno-1,2,4-tricarboxílico, ácido 3-amino-5-benzoil-6-metilbenceno-1,2,4-tricarboxílico, ácido 1,2,3-propanotricarboxílico o ácido aurintricarboxílico,
- o ácidos tetracarboxílicos como
- 1,1-dioxidperilo[1,12-BCD]tiofen-3,4,9,10-tetracarboxílico, ácidos perilentetracarboxílicos como ácido perilen-3,4,9,10-tetracarboxílico o ácido perilen-1,12-sulfon-3,4,9,10-tetracarboxílico, ácidos butanotetracarboxílicos como ácido 1,2,3,4-butanotetracarboxílico o ácido meso-1,2,3,4-butanotetracarboxílico, ácido decano-2,4,6,8-tetracarboxílico, ácido 1,4,7,10,13,16-hexaoxiclooctadecano-2,3,11,12-tetracarboxílico, ácido 1,2,4,5-benzenotetracarboxílico, ácido 1,2,11,12-dodecanotetracarboxílico, ácido 1,2,5,6-hexano-tetracarboxílico, ácido 1,2,7,8-octanotetracarboxílico, ácido 1,4,5,8-naftalintetracarboxílico, ácido 1,2,9,10-decanotetracarboxílico, ácido benzofenontetracarboxílico, ácido 3,3',4,4'-benzo-fenontetracarboxílico, ácido tetrahidrofuranotetracarboxílico o ácidos ciclopentanotetracarboxílicos como ciclopentano-1,2,3,4-tetracarboxílico.
- De modo muy particularmente preferido se emplean, dado el caso, ácidos di-, tri- o tetracarboxílicos aromáticos mono-, di-, tri-, tetra- o polinucleares con al menos un sustituyente, donde cada uno de los

- núcleos puede contener por lo menos un heteroátomo, donde dos o más núcleos pueden contener heteroátomo iguales o diferentes. Por ejemplo se prefieren ácidos dicarboxílicos mononucleares, ácidos tricarboxílicos mononucleares, ácidos tetracarboxílicos mononucleares, ácidos dicarboxílicos dinucleares, ácidos tricarboxílicos dinucleares, ácidos tetracarboxílicos dinucleares, ácidos dicarboxílicos trinucleares, ácidos tricarboxílicos trinucleares, ácidos tetracarboxílicos trinucleares, ácidos dicarboxílicos tetranucleares, ácidos tricarboxílicos tetranucleares y/o ácidos tetracarboxílicos tetranucleares. Son por ejemplo heteroátomos adecuados N, O, S, B, P, los heteroátomos preferidos son aquí N, S y/o O. De modo correspondiente, como sustituyentes adecuados son de mencionar entre otros -OH, un grupo nitro, un grupo amino, un grupo alquilo o alcoxi.
- 5 En particular se prefiere emplear como compuestos orgánicos por lo menos bidentados ácido acetilendicarboxílico (ADC), ácido camferdicarboxílico, ácido fumárico, ácido succínico, ácidos benzenodicarboxílicos, ácidos naftalindicarboxílicos, ácidos bifenildicarboxílicos como por ejemplo, ácido 4,4'-bifenildicarboxílico (BPDC), ácidos pirazindicarboxílicos como ácido 2,5-pirazindicarboxílico, ácidos bipyridindicarboxílicos como por ejemplo ácido 2, 2'-bipyridin dicarboxílico, como por ejemplo ácido 2,2'-bipyridin-5,5'-dicarboxílico, ácidos benzenotricarboxílicos como por ejemplo ácido 1, 2, 3-, ácido 1, 2, 4-benzenotricarboxílico o ácido 1, 3, 5-benzenotricarboxílico (BTC), ácido benzenotetracarboxílico, ácido adamantantetracarboxílico (ATC), adamantandibenzoato (ADB) benzenotribenzoato (BTB), metanotetrabenzoato (MTB), adamantantetrabenzoato o ácidos dihidroxitereftálicos como por ejemplo ácido 2,5-dihidroxitereftálico (DHBDC).
- 10 De modo muy particularmente preferido se emplean entre otros ácido isoftálico, ácido tereftálico, ácido 2,5-dihidroxitereftálico, ácido 1, 2, 3-benzenotricarboxílico, ácido 1, 3, 5-benzenotricarboxílico, ácido 2, 6-naftalindicarboxílico, ácido 1, 4-naftalindicarboxílico, ácido 1, 2, 3, 4- y 1, 2, 4, 5-benzenotetracarboxílico, ácido camferdicarboxílico o ácido 2,2'-bipyridin-5, 5'-dicarboxílico.
- 15 Aparte de estos compuestos orgánicos por lo menos bidentados, el material estructural organometálico puede abarcar también uno o varios ligandos monodentados.
- A continuación se indican ejemplos materiales estructurales organometálicos conocidos en el estado de la técnica. Aparte de la caracterización del MOF, el metal así como el ligando por lo menos bidentado se indica además el solvente así como los parámetros de las celdas (ángulo α , β y γ así como las distancias A, B y C en Å). Estas últimas fueron determinadas mediante difracción Röntgen.
- 20
- 25
- 30

| MOF-n | Relación molar de componentes M+L | Solvente | α | β | γ | a | b | c | Grupo espacial |
|---------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------|----------|---------|----------|--------|--------|--------|----------------|
| MOF-0 | Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O H ₃ (BTC) | Etanol | 90 | 90 | 120 | 16.711 | 16.711 | 14.189 | P6(3)/Mcm |
| MOF-2 | Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O (0.246 mmol) H ₂ (BDC) 0.241 mmol) | DMF Tolueno | 90 | 102.8 | 90 | 6.718 | 15.49 | 12.43 | P2(1)/n |
| MOF-3 | Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O (1.89 mmol) H ₂ (BDC) (1.93 mmol) | DMF MeOH | 99.72 | 111.11 | 108.4 | 9.726 | 9.911 | 10.45 | P-1 |
| MOF-4 | Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O (1.00 mmol) H ₃ (BTC) (0.5 mmol) | Etanol | 90 | 90 | 90 | 14.728 | 14.728 | 14.728 | P2(1)3 |
| MOF-5 | Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O (2.22 mmol) H ₂ (BDC) (2.17 mmol) | DMF Clorobenceno | 90 | 90 | 90 | 25.669 | 25.669 | 25.669 | Fm-3m |
| MOF-38 | Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O (0.27 mmol) H ₃ (BTC) (0.15 mmol) | DMF Clorobenceno | 90 | 90 | 90 | 20.657 | 20.657 | 17.84 | I4cm |
| MOF-31 Zn(ADC) ₂ | Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0.4 mmol H ₂ (ADC) 0.8 mmol | Etanol | 90 | 90 | 90 | 10.821 | 10.821 | 10.821 | Pn(-3)m |
| MOF-12 Zn ₂ (ATC) | Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0.3 mmol Ha(ATC) 0.15 mmol | Etanol | 90 | 90 | 90 | 15.745 | 16.907 | 18.167 | Pbca |
| MOF-20 ZnNDC | Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0.37 mmol H ₂ NDC | DMF | 90 | 92.13 | 90 | 8.13 | 16.444 | 12.807 | P2(1)/c |

| | | | | | | | | | | |
|--------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------|-------|--------|-------|--------|--------|---------|----------------|--|
| | 0.36 mmol | Clorobenceno | | | | | | | | |
| MOF-37 | Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0.2 mmol H ₂ NDC 0.2 mmol | DEF Clorobenceno | 72.38 | 83.16 | 84.33 | 9.952 | 11.576 | 15.556 | P-1 | |
| MOF-8 Tb ₂ (ADC) | Tb(NO ₃) ₃ ·5H ₂ O 0.10 mmol H ₂ ADC 0.20 mmol | DMSO MeOH | 90 | 115.7 | 90 | 19.83 | 9.822 | 19.183 | C2/c | |
| MOF-9 Tb ₂ (ADC) | Tb(NO ₃) ₃ ·5H ₂ O 0.08 mmol H ₂ ADB 0.12 mmol | DMSO | 90 | 102.09 | 90 | 27.056 | 16.795 | 28.139 | C2/c | |
| MOF-6 | Tb(NO ₃) ₃ ·5H ₂ O 0.30 mmol H ₂ (BDC) 0.30 mmol | DMF MeOH | 90 | 91.28 | 90 | 17.599 | 19.996 | 10.545 | P21/c | |
| MOF-7 | Tb(NO ₃) ₃ ·5H ₂ O 0.15 mmol H ₂ (BDC) 0.15 mmol | H ₂ O | 102.3 | 91.12 | 101.5 | 6.142 | 10.069 | 10.096 | P-1 | |
| MOF-69A | Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0.083 mmol 4,4'-BPDC 0.041 mmol | DEF H ₂ O ₂ MeNH ₂ | 90 | 111.6 | 90 | 23.12 | 20.92 | 12 | C2/c | |
| MOF-69B | Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0.083 mmol 2,6-NCD 0.041 mmol | DEF H ₂ O ₂ MeNH ₂ | 90 | 95.3 | 90 | 20.17 | 18.55 | 12.16 | C2/c | |
| MOF-11 Cu ₂ (ATC) | Cu(NO ₃) ₂ ·2.5H ₂ O 0.47 mmol H ₂ ATC 0.22 mmol | H ₂ O | 90 | 93.86 | 90 | 12.987 | 11.22 | 1.1.336 | C2/c | |
| MOF-11 Cu ₂ (ATC) dehidr. | | | 90 | 90 | 90 | 8.4671 | 8.4671 | 14.44 | P42/ mmc | |
| MOF-14 Cu ₃ (BTB) | Cu(NO ₃) ₂ ·2.5H ₂ O 0.28 mmol H ₃ BTB 0.052 mmol | H ₂ O DMF EtOH | 90 | 90 | 90 | 26.946 | 26.946 | 26.946 | Im-3 | |
| MOF-32 Cd(ATC) | Cd(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0.24 mmol H ₄ ATC 0.10 mmol | H ₂ O NaOH | 90 | 90 | 90 | 13.468 | 13.468 | 13.468 | P(-4)3m | |
| MOF-n | Relación molar de componentes M+L | Solvente | α | β | γ | a | b | c | Grupo espacial | |
| MOF-33 (ATB) Zn ₂ | ZnCl ₂ 0.15 mmol H ₄ ATB 0.02 mmol | H ₂ O DMF EtOH | 90 | 90 | 90 | 19.561 | 15.255 | 23.404 | Imma | |
| MOF-34 Ni(ATC) | Ni(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0.24 mmol H ₄ ATC 0.10 mmol | H ₂ O NaOH | 90 | 90 | 90 | 10.066 | 11.163 | 19.201 | P212121 | |
| MOF-36 (MTB) Zn ₂ | Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0.20 mmol H ₄ MTB 0.04 mmol | H ₂ O DMF | 90 | 90 | 90 | 15.745 | 16.907 | 18.167 | Pbca | |
| MOF-39 Zn ₃ O(HBTB) | Zn(NO ₃) ₂ 4H ₂ O 0.27 mmol H ₃ BTB 0.07 mmol | H ₂ O DMF EtOH | 90 | 90 | 90 | 17.158 | 21.591 | 25.308 | Pnma | |
| NO305 | FeCl ₂ ·4H ₂ O 5.03 mmol ácido fórmico 86.90 mmol | DMF | 90 | 90 | 120 | 8.2692 | 8.2692 | 63.566 | R-3c | |
| NO306A | FeCl ₂ ·4H ₂ O 5.03 mmol ácido fórmico 86.90 mmol | DEF | 90 | 90 | 90 | 9.9364 | 18.374 | 18.374 | Pbcn | |
| NO29 similar a MOF-0 | Mn(Ac) ₂ ·4H ₂ O 0.46 mmol H ₃ BTC 0.69 mmol | DMF | 120 | 90 | 90 | 14.16 | 33.521 | 33.521 | P-1 | |
| BPR48 A2 | Zn(NO ₃) ₂ 6H ₂ O 0.012 mmol H ₂ BDC 0.012 mmol | DMSO Tolueno | 90 | 90 | 90 | 14.5 | 17.04 | 18.02 | Pbca | |
| BPR69 B1 | Cd(NO ₃) ₂ 4H ₂ O 0.0212 mmol H ₂ BDC 0.0428 mmol | DMSO | 90 | 98.76 | 90 | 14.16 | 15.72 | 17.66 | Cc | |
| BPR92 A2 | Co(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0.018 mmol H ₂ BDC 0.018 mmol | NMP | 106.3 | 107.63 | 107.2 | 7.5308 | 10.942 | 11.025 | P1 | |
| BPR95 C5 | Cd(NO ₃) ₂ 4H ₂ O 0.012 mmol H ₂ BDC 0.36 mmol | NMP | 90 | 112.8 | 90 | 14.460 | 11.085 | 15.829 | P2(1)/n | |

| | | | | | | | | | |
|---------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------|------------|--------|--------|-------------|--------|--------|----------------|
| Cu C ₆ H ₄ O ₆ | Cu(NO ₃) ₂ ·2.5H ₂ O 0.370 mmol H ₂ BDC(OH) ₂ 0.37 mmol | DMF Clorobenceno | 90 | 105.29 | 90 | 15.259 | 14.816 | 14.13 | P2(1)/c |
| M(BTC) similar a MOF-0 | Co(SO ₄) H ₂ O 0.055 mmol H ₃ BTC 0.037 mmol | DMF | como MOF-0 | | | | | | |
| Tb(C ₆ H ₄ O ₆) | Tb(NO ₃) ₃ ·5H ₂ O 0.370 mmol H ₂ (C ₆ H ₄ O ₆) 0.56 mmol | DMF Clorobenceno | 104.6 | 107.9 | 97.147 | 10.491 | 10.981 | 12.541 | P-1 |
| Zn (C ₂ O ₄) | ZnCl ₂ 0.370 mmol Acido oxálico 0.37 mmol | DMF Clorobenceno | 90 | 120 | 90 | 9.4168 | 9.4168 | 8.464 | P(-3)1m |
| Co(CHO) | Co(NO ₃) ₂ ·5H ₂ O 0.043 mmol ácido fórmico 1.60 mmol | DMF | 90 | 91.32 | 90 | 11.328 | 10.049 | 14.854 | P2(1)/n |
| Cd(CHO) | Cd(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0.185 mmol ácido fórmico 0.185 mmol | DMF | 90 | 120 | 90 | 8.5168 | 8.5168 | 22.674 | R-3c |
| Cu(C ₃ H ₂ O ₄) | Cu(NO ₃) ₂ ·2.5H ₂ O 0.043 mmol ácido malónico 0.192 mmol | DMF | 90 | 90 | 90 | 8.366 | 8.366 | 11.919 | P43 |
| Zn ₆ (NDC) ₅ MOF-48 | Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0.097 mmol 14 NDC 0.069 mmol | DMF Clorobenceno H ₂ O ₂ | 90 | 95.902 | 90 | 19.504 | 16.482 | 14.64 | C2/m |
| MOF-47 | Zn(NO ₃) ₂ 6H ₂ O 0.185 mmol H ₂ (BDC[CH ₃] ₄) 0.185 mmol | DMF Clorobenceno H ₂ O ₂ | 90 | 92.55 | 90 | 11.303 | 16.029 | 17.535 | P2(1)/c |
| MO25 | Cu(NO ₃) ₂ ·2.5H ₂ O 0.084 mmol BPhDC 0.085 mmol | DMF | 90 | 112.0 | 90 | 23.880 | 16.834 | 18.389 | P2(1)/c |
| MOF-n | Relación molar de componentes M+L | Solvente | α | β | γ | a | b | c | Grupo espacial |
| Cu-Tio | Cu(NO ₃) ₂ ·2.5H ₂ O 0.084 mmol ácido tiofendicarboxílico 0.085 mmol | DEF | 90 | 113.6 | 90 | 15.474 7 | 14.514 | 14.032 | P2(1)/c |
| CIBDC1 | Cu(NO ₃) ₂ ·2.5H ₂ O 0.084 mmol H ₂ (BDCCl ₂) 0.085 mmol | DMF | 90 | 105.6 | 90 | 14.911 | 15.622 | 18.413 | C2/c |
| MOF-101 | Cu(NO ₃) ₂ ·2.5H ₂ O 0.084 mmol BrBDC 0.085 mmol | DMF | 90 | 90 | 90 | 21.607 | 20.607 | 20.073 | Fm3m |
| Zn ₃ (BTC) ₂ | ZnCl ₂ 0.033 mmol H ₃ BTC 0.033 mmol | DMF EtOH Base añadida | 90 | 90 | 90 | 26.572 | 26.572 | 26.572 | Fm-3m |
| MOF-j | Co(CH ₃ CO ₂) ₂ ·4H ₂ O (1.65 mmol) H ₃ (BZC) (0.95 mmol) | H ₂ O | 90 | 112.0 | 90 | 17.482 | 12.963 | 6.559 | C2 |
| MOF-n | Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O H ₃ (BTC) | Etanol | 90 | 90 | 120 | 16.711 | 16.711 | 14.189 | P6(3)/mcm |
| PbBDC | Pb(NO ₃) ₂ (0.181 mmol) H ₂ (BDC) (0.181 mmol) | DMF Etanol | 90 | 102.7 | 90 | 8.3639 | 17.991 | 9.9617 | P2(1)/n |
| Znhex | Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O (0.171 mmol) H ₃ BTB (0.114 mmol) | DMF p-xileno Etanol | 90 | 90 | 120 | 37.116 5 | 37.117 | 30.019 | P3(1)c |
| AS16 | FeBr ₂ 0.927 mmol H ₂ (BDC) 0.927 mmol | DMF anhidro | 90 | 90.13 | 90 | 7.2595 | 8.7894 | 19.484 | P2(1)c |
| AS27-2 | FeBr ₂ 0.927 mmol H ₃ (BDC) 0.464 mmol | DMF anhidro | 90 | 90 | 90 | 26.735 | 26.735 | 26.735 | Fm3m |
| AS32 | FeCl ₃ | DMF | 90 | 90 | 120 | 12.535 | 12.535 | 18.479 | P6(2)c |
| | 1.23 mmol H ₂ (BDC) 1.23 mmol | etanol anhidro | | | | | | | |
| AS54-3 | FeBr ₂ 0.927 BPDC 0.927 mmol | DMF, n-Propanol anhidro | 90 | 109.98 | 90 | 12.019 | 15.286 | 14.399 | C2 |
| AS61-4 | FeBr ₂ 0.927 mmol m-BDC 0.927 mmol | Piridina anhidra | 90 | 90 | 120 | 13.017 | 13.017 | 14.896 | P6(2)c |
| AS68-7 | FeBr ₂ 0.927 mmol 7 m-BDC 1.204 | DMF Piridina | 90 | 90 | 90 | 18.340 | 10.036 | 18.039 | Pca21 |

| | | | | | | | | | | |
|------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------|-------|--------|--------|--------|--------|--------|----------------|--|
| | mmol | anhidra | | | | | | | | |
| Zn(ADC) | Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0.37 mmol H ₂ (ADC) 0.36 mmol | DMF Clorobenceno | 90 | 99.85 | 90 | 16.764 | 9.349 | 9.635 | C2/c | |
| MOF-12 Zn2 (ATC) | Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0.30 mmol Ha(ATC) 0.15 mmol | Etanol | 90 | 90 | 90 | 15.745 | 16.907 | 18.167 | Pbca | |
| MOF-20 ZnNDC | Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0.37 mmol H ₂ NDC 0.36 mmol | DMF Clorobenceno | 90 | 92.13 | 90 | 8.13 | 16.444 | 12.807 | P2(1)/c | |
| MOF-37 | Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0.20 mmol H ₂ NDC 0.20 mmol | DEF Clorobenceno | 72.38 | 83.16 | 84.33 | 9.952 | 11.576 | 15.556 | P-1 | |
| Zn(NDC) (DMSO) | Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O H ₂ NDC | DMSO | 68.08 | 75.33 | 88.31 | 8.631 | 10.207 | 13.114 | P-1 | |
| Zn(NDC) | Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O H ₂ NDC | | 90 | 99.2 | 90 | 19.289 | 17.628 | 15.052 | C2/c | |
| Zn(HPDC) | Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0.23 mmol H ₂ (HPDC) 0.05 mmol | DMF H ₂ O | 107.9 | 105.06 | 94.4 | 8.326 | 12.085 | 13.767 | P-1 | |
| Co(HPDC) | Co(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0.21 mmol H ₂ (HPDC) 0.06 mmol | DMF H ₂ O/ Etanol | 90 | 97.69 | 90 | 29.677 | 9.63 | 7.981 | C2/c | |
| Zn3(PDC) 2.5 | Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0.17 mmol H ₂ (HPDC) 0.05 mmol | DMF/ CIBz. H ₂ O/ TEA | 79.34 | 80.8 | 85.83 | 8.564 | 14.046 | 26.428 | P-1 | |
| Cd ₂ | Cd(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O | Meta- | 70.59 | 72.75 | 87.14 | 10.102 | 14.412 | 14.964 | P-1 | |
| MOF-n | Relación molar de componentes M+L | Solvente | α | β | γ | a | b | c | Grupo espacial | |
| (TPDC)2 | 0.06 mmol H ₂ (HPDC) 0.06 mmol | no/ CHP H ₂ O | | | | | | | | |
| Tb(PDC) 1.5 | Tb(NO ₃) ₃ ·5H ₂ O 0.21 mmol H ₂ (PDC) 0.034 mmol | DMF H ₂ O/ Etanol | 109.8 | 103.61 | 100.14 | 9.829 | 12.11 | 14.628 | P-1 | |
| ZnDBP | Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0.05 mmol dibencilfosfato 0.10 mmol | MeOH | 90 | 93.67 | 90 | 9.254 | 10.762 | 27.93 | P2/n | |
| Zn ₃ (BPDC) | ZnBr ₂ 0.021 mmol 4,4'BPDC 0.005 mmol | DMF | 90 | 102.76 | 90 | 11.49 | 14.79 | 19.18 | P21/n | |
| CdBDC | Cd(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0.100 mmol H ₂ (BDC)0.401 mmol | DMF Na ₂ SiO ₃ (ac.) | 90 | 95.85 | 90 | 11.2 | 11.11 | 16.71 | P21/n | |
| Cd-mBDC | Cd(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0.009 mmol H ₂ (mBDC) 0.018 mmol | DMF MeNH ₂ | 90 | 101.1 | 90 | 13.69 | 18.25 | 14.91 | C2/c | |
| Zn ₄ OBND C | Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0.041mmol BNDC | DEF MeNH ₂ H ₂ O ₂ | 90 | 90 | 90 | 22.35 | 26.05 | 59.56 | Fmmm | |
| Eu(TCA) | Eu(NO ₃) ₃ ·6H ₂ O 0.14 mmol TCA 0.026 mmol | DMF Clorobenceno | 90 | 90 | 90 | 23.325 | 23.325 | 23.325 | Pm-3n | |
| Tb(TCA) | Tb(NO ₃) ₃ ·6H ₂ O 0.069 mmol TCA 0.026 mmol | DMF Clorobenceno | 90 | 90 | 90 | 23.272 | 23.272 | 23.272 | Pm-3n | |
| Formiato | Ce(NO ₃) ₃ ·6H ₂ O 0.138 mmol Ácido fórmico 0.43 mmol | H ₂ O Etanol | 90 | 90 | 120 | 10.668 | 10.667 | 4.107 | R-3m | |
| | FeCl ₂ ·4H ₂ O 5.03 mmol Ácido fórmico 86.90 mmol | DMF | 90 | 90 | 120 | 8.2692 | 8.2692 | 63.566 | R-3c | |
| | FeCl ₂ ·4H ₂ O 5.03 mmol Ácido fórmico 86.90 mmol | DEF | 90 | 90 | 90 | 9.9364 | 18.374 | 18.374 | Pbcn | |
| | FeCl ₂ ·4H ₂ O 5.03 mmol Ácido fórmico 86.90 mmol | DEF | 90 | 90 | 90 | 8.335 | 8.335 | 13.34 | P-31c | |
| NO330 | FeCl ₂ ·4H ₂ O 0.50 mmol Ácido fórmico. 8.69 mmol | Formamida | 90 | 90 | 90 | 8.7749 | 11.655 | 8.3297 | Pnna | |

| | | | | | | | | | |
|------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------|-------|--------|--------|-------------|--------|--------|----------------|
| NO332 | FeCl ₂ ·4H ₂ O 0.50 mmol Ácido fórmico 8.69 mmol | DIP | 90 | 90 | 90 | 10.031 3 | 18.808 | 18.355 | Pbcn |
| NO333 | FeCl ₂ ·4H ₂ O 0.50 mmol Ácido fórmico 8.69 mmol | DBF | 90 | 90 | 90 | 45.275 4 | 23.861 | 12.441 | Cmcm |
| NO335 | FeCl ₂ ·4H ₂ O 0.50 mmol Ácido fórmico 8.69 mmol | CHF | 90 | 91.372 | 90 | 11.596 4 | 10.187 | 14.945 | P21/n |
| NO336 | FeCl ₂ ·4H ₂ O 0.50 mmol Ácido fórmico 8.69 mmol | MFA | 90 | 90 | 90 | 11.794 5 | 48.843 | 8.4136 | Pbcm |
| NO13 | Mn(Ac) ₂ ·4H ₂ O 0.46 mmol ácido benzoico 0.92 mmol biperidina 0.46 mmol | Etanol | 90 | 90 | 90 | 18.66 | 11.762 | 9.418 | Pbcn |
| NO29 similar a MOF-0 | Mn(Ac) ₂ ·4H ₂ O 0.46 mmol H ₃ BTC 0.69 mmol | DMF | 120 | 90 | 90 | 14.16 | 33.521 | 33.521 | P-1 |
| Mn(hfac) ₂ (O ₂ CC ₆ H ₅) | Mn(Ac) ₂ ·4H ₂ O 0.46 mmol Hfac 0.92 mmol biperidina 0.46 mmol | Eter | 90 | 95.32 | 90 | 9.572 | 17.162 | 14.041 | C2/c |
| BPR43G2 | Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0.0288 mmol H ₂ BDC 0.0072 mmol | DMF CH ₃ CN | 90 | 91.37 | 90 | 17.96 | 6.38 | 7.19 | C2/c |
| BPR48A2 | Zn(NO ₃) ₂ 6H ₂ O 0.012 mmol H ₂ BDC 0.012 mmol | DMSO Tolueno | 90 | 90 | 90 | 14.5 | 17.04 | 18.02 | Pbca |
| MOF-n | Relación molar de componentes M+L | Solvente | α | β | γ | a | b | c | Grupo espacial |
| BPR49B1 | Zn(NO ₃) ₂ 6H ₂ O 0.024 mmol H ₂ BDC 0.048 mmol | DMSO Metanol | 90 | 91.172 | 90 | 33.181 | 9.824 | 17.884 | C2/c |
| BPR56E1 | Zn(NO ₃) ₂ 6H ₂ O 0.012 mmol H ₂ BDC 0.024 mmol | DMSO n-Propanol | 90 | 90.096 | 90 | 14.587 3 | 14.153 | 17.183 | P2(1)/n |
| BPR68D10 | Zn(NO ₃) ₂ 6H ₂ O 0.0016 mmol H ₃ BTC 0.0064 mmol | DMSO Benceno | 90 | 95.316 | 90 | 10.062 7 | 10.17 | 16.413 | P2(1)/c |
| BPR69B1 | Cd(NO ₃) ₂ 4H ₂ O 0.0212 mmol H ₂ BDC 0.0428 mmol | DMSO | 90 | 98.76 | 90 | 14.16 | 15.72 | 17.66 | Cc |
| BPR73E4 | Cd(NO ₃) ₂ 4H ₂ O 0.006 mmol H ₂ BDC 0.003 mmol | DMSO Tolueno | 90 | 92.324 | 90 | 8.7231 | 7.0568 | 18.438 | P2(1)/n |
| BPR76D5 | Zn(NO ₃) ₂ 6H ₂ O 0.0009 mmol H ₂ BzPDC 0.0036 mmol | DMSO | 90 | 104.17 | 90 | 14.419 1 | 6.2599 | 7.0611 | Pc |
| BPR80B5 | Cd(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0.018 mmol H ₂ BDC 0.036 mmol | DMF | 90 | 115.11 | 90 | 28.049 | 9.184 | 17.837 | C2/c |
| BPR80H5 | Cd(NO ₃) ₂ 4H ₂ O 0.027 mmol H ₂ BDC 0.027 mmol | DMF | 90 | 119.06 | 90 | 11.474 6 | 6.2151 | 17.268 | P2/c |
| BPR82C6 | Cd(NO ₃) ₂ 4H ₂ O 0.0068 mmol H ₂ BDC 0.202 mmol | DMF | 90 | 90 | 90 | 9.7721 | 21.142 | 27.77 | Fdd2 |
| BPR86C3 | Co(NO ₃) ₂ 6H ₂ O 0.0025 mmol H ₂ BDC 0.075 mmol | DMF | 90 | 90 | 90 | 18.344 9 | 10.031 | 17.983 | Pca2(1) |
| BPR86H6 | Cd(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0.010 mmol H ₂ BDC 0.010 mmol | DMF | 80.98 | 89.69 | 83.412 | 9.8752 | 10.263 | 15.362 | P-1 |
| BPR95A2 | Zn(NO ₃) ₂ 6H ₂ O 0.012 mmol H ₂ BDC 0.012 mmol | NMP | 106.3 | 107.63 | 107.2 | 7.5308 | 10.942 | 11.025 | P1 |
| Cu ₆ F ₄ O ₄ | Cu(NO ₃) ₂ ·2.5H ₂ O 0.370 mmol H ₂ BDC(OH) ₂ 0.37 mmol | DMF Clorobenceno | 90 | 98.834 | 90 | 10.967 5 | 24.43 | 22.553 | P2(1)/n |
| Fe Fórmico | FeCl ₂ ·4H ₂ O 0.370 mmol Ácido fórmico 0.37 mmol | DMF | 90 | 91.543 | 90 | 11.495 | 9.963 | 14.48 | P2(1)/n |
| Mg Fórmico | Mg(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0.370 mmol Ácido fórmico 0.37 mmol | DMF | 90 | 91.359 | 90 | 11.383 | 9.932 | 14.656 | P2(1)/n |
| MgC ₆ H ₄ O ₆ | Mg(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O | DMF | 90 | 96.624 | 90 | 17.245 | 9.943 | 9.273 | C2/c |

| | | | | | | | | | | |
|---------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------|----------|---------|----------|---------|--------|--------|----------------|--|
| | 0.370 mmol H ₂ BDC (OH) ₂ 0.37 mmol | | | | | | | | | |
| Zn C ₂ H ₄ BDC MOF-38 | ZnCl ₂ 0.44 mmol CBBDC 0.261 mmol | DMF | 90 | 94.714 | 90 | 7.3386 | 16.834 | 12.52 | P2(1)/n | |
| MOF-49 | ZnCl ₂ 0.44 mmol m-BDC 0.261 mmol | DMF CH ₃ CN | 90 | 93.459 | 90 | 13.509 | 11.984 | 27.039 | P2/c | |
| MOF-26 | Cu(NO ₃) ₂ ·5H ₂ O 0.084 mmol DCPE 0.085 mmol | DMF | 90 | 95.607 | 90 | 20.8797 | 16.017 | 26.176 | P2(1)/n | |
| MOF-112 | Cu(NO ₃) ₂ ·2.5H ₂ O 0.084 mmol o-Br-m-BDC 0.085 mmol | DMF Etanol | 90 | 107.49 | 90 | 29.3241 | 21.297 | 18.069 | C2/c | |
| MOF-109 | Cu(NO ₃) ₂ ·2.5H ₂ O 0.084 mmol KDB 0.085 mmol | DMF | 90 | 111.98 | 90 | 23.8801 | 16.834 | 18.389 | P2(1)/c | |
| MOF-111 | Cu(NO ₃) ₂ ·2.5H ₂ O 0.084 mmol o-BrBDC 0.085 mmol | DMF Etanol | 90 | 102.16 | 90 | 10.6767 | 18.781 | 21.052 | C2/c | |
| MOF-110 | Cu(NO ₃) ₂ ·2.5H ₂ O 0.084 mmol Acido tiofendicarboxílico 0.085 mmol | DMF | 90 | 90 | 120 | 20.0652 | 20.065 | 20.747 | R-3/m | |
| MOF-n | Relación molar de componentes M+L | Solvente | α | β | γ | a | b | c | Grupo espacial | |
| MOF-107 | Cu(NO ₃) ₂ ·2.5H ₂ O 0.084 mmol Acido tiofendicarboxílico 0.085 mmol | DEF | 104.8 | 97.075 | 95.206 | 11.032 | 18.067 | 18.452 | P-1 | |
| MOF-108 | Cu(NO ₃) ₂ ·2.5H ₂ O 0.084 mmol Acido tiofendicarboxílico 0.085 mmol | DBF/ Metanol | 90 | 113.63 | 90 | 15.4747 | 14.514 | 14.032 | C2/c | |
| MOF-102 | Cu(NO ₃) ₂ ·2.5H ₂ O 0.084 mmol H ₂ (BDCCl ₂) 0.085 mmol | DMF | 91.63 | 106.24 | 112.01 | 9.3845 | 10.794 | 10.831 | P-1 | |
| C1bdc1 | Cu(NO ₃) ₂ ·2.5H ₂ O 0.084 mmol H ₂ (BDCCl ₂) 0.085 mmol | DEF | 90 | 105.56 | 90 | 14.911 | 15.622 | 18.413 | P-1 | |
| Cu(NMOP) | Cu(NO ₃) ₂ ·2.5H ₂ O 0.084 mmol NBDC 0.085 mmol | DMF | 90 | 102.37 | 90 | 14.923 | 18.727 | 15.529 | P2(1)/m | |
| Tb(BTC) | Tb(NO ₃) ₃ ·5H ₂ O 0.033 mmol H ₃ BTC 0.033 mmol | DMF | 90 | 106.02 | 90 | 18.6986 | 11.368 | 19.721 | | |
| Zn ₃ (BTC) ₂ Honk | ZnCl ₂ 0.033 mmol H ₃ BTC 0.033 mmol | DMF Etanol | 90 | 90 | 90 | 26.572 | 26.572 | 26.572 | Fm-3m | |
| Zn ₄ O(NDC) | Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0.066 mmol 14NDC 0.066 mmol | DMF Etanol | 90 | 90 | 90 | 41.5594 | 18.818 | 17.574 | aba2 | |
| CdTDC | Cd(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0.014 mmol Tiofeno 0.040 mmol DABCO 0.020 mmol | DMF H ₂ O | 90 | 90 | 90 | 12.173 | 10.485 | 7.33 | Pmma | |
| IRMOF-2 | Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0.160 mmol o-Br-BDC 0.60 mmol | DEF | 90 | 90 | 90 | 25.772 | 25.772 | 25.772 | Fm-3m | |
| IRMOF-3 | Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0.20 mmol H ₂ N-BDC 0.60 mmol | DEF Etanol | 90 | 90 | 90 | 25.747 | 25.747 | 25.747 | Fm-3m | |
| IRMOF-4 | Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0.11 mmol [C ₃ H ₇ O] ₂ -BDC 0.48 mmol | DEF | 90 | 90 | 90 | 25.849 | 25.849 | 25.849 | Fm-3m | |
| IRMOF-5 | Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0.13 mmol [C ₅ H ₁₁ O] ₂ -BDC 0.50 mmol | DEF | 90 | 90 | 90 | 12.882 | 12.882 | 12.882 | Pm-3m | |
| IRMOF-6 | Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0.20 mmol [C ₂ H ₄]-BDC 0.60 mmol | DEF | 90 | 90 | 90 | 25.842 | 25.842 | 25.842 | Fm-3m | |
| IRMOF-7 | Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0.07 mmol 1,4NDC 0.20 mmol | DEF | 90 | 90 | 90 | 12.914 | 12.914 | 12.914 | Pm-3m | |
| IRMOF-8 | Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0.55 mmol | DEF | 90 | 90 | 90 | 30.092 | 30.092 | 30.092 | Fm-3m | |

| | | | | | | | | | |
|----------|------------------------------------------------------------------------------------|----------|----------|---------|----------|--------|--------|--------|-------------------|
| | 2,6NDC 0.42 mmol | | | | | | | | |
| IRMOF-9 | Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0.05 mmol BPDC 0.42 mmol | DEF | 90 | 90 | 90 | 17.147 | 23.322 | 25.255 | Pnnm |
| IRMOF-10 | Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0.02 mmol BPDC 0.012 mmol | DEF | 90 | 90 | 90 | 34.281 | 34.281 | 34.281 | Fm-3m |
| IRMOF-11 | Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0.05 mmol HPDC 0.20 mmol | DEF | 90 | 90 | 90 | 24.822 | 24.822 | 24.822 | R-3m |
| IRMOF-12 | Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0.017 mmol HPDC 0.12 mmol | DEF | 90 | 90 | 90 | 34.281 | 34.281 | 34.281 | Fm-3m |
| IRMOF-13 | Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0.048 mmol PDC 0.31 mmol | DEF | 90 | 90 | 90 | 24.822 | 24.822 | 56.734 | R-3m |
| IRMOF-14 | Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0.17 mmol PDC 0.12 mmol | DEF | 90 | 90 | 90 | 34.381 | 34.381 | 34.381 | Fm-3m |
| IRMOF-15 | Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0.063 mmol TPDC 0.025 mmol | DEF | 90 | 90 | 90 | 21.459 | 21.459 | 21.459 | Im-3m |
| MOF-n | Relación molar de componentes M+L | Solvente | α | β | γ | a | b | c | Grupo espacial |
| IRMOF-16 | Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0.0126 mmol TPDC 0.05 mmol | DEF NMP | 90 | 90 | 90 | 21.49 | 21.49 | 21.49 | Pm-3m |

ADC Ácido acetilendicarboxílico

NDC Ácido naftalindicarboxílico

BDC Ácido bencenodicarboxílico

5 ATC Ácido adamantotetracarboxílico

BTC Ácido bencenotricarboxílico

BTB Ácido bencenotribenzoico

MTB Ácido metanotetrabenzoico

ATB Ácido adamantotetrabenzoico

10 ADB Ácido adamantandibenzoico

Otros MOF son MOF-177, MOF-178, MOF-74, MOF-235, MOF-236, MOF-69 a 80, MOF-501, MOF-502, los cuales están descritos en la literatura.

En el marco de la presente invención son muy particularmente preferidos los así denominados materiales IRMOF, en particular IRMOF-1 (= MOF-5).

15 En el caso de materiales estructurales orgánicos de boro, en lugar del ion metálico aparece un compuesto orgánico que exhibe por lo menos dos grupos boro. Así mismo, aquí puede emplearse la estructura del compuesto, como se explicó arriba para el material estructural organometálico, compuesto orgánico por lo menos bidentado. Además, sin embargo éstos tienen que exhibir por lo menos dos grupos (-B(OH)₂). Como ejemplos se mencionan aquí ácidos bencenodibóricos, en particular ácido benceno-1,2-dibórico. Cada uno de los grupos boro reacciona con por lo menos un compuesto orgánico por lo menos bifuncional, el cual en principio puede ser empleado como el compuesto orgánico por lo menos bidentado para el material estructural organometálico. Aquí pueden emplearse las mismas estructuras así como los grupos funcionales arriba mencionados. Sin embargo, adicionalmente pueden ser también compuestos orgánicos que contienen boro, que pueden ser iguales

20 o diferentes al primer compuesto que exhibe por lo menos dos grupos boro. Preferiblemente el compuesto orgánico por lo menos bifuncional son di o polioles aromáticos o ácidos di- o bien polibóricos. Con ello los materiales COF son compuestos partir de un primer compuesto orgánico que exhibe por lo menos dos grupos boro así como un segundo compuesto orgánico con por lo menos dos

grupos funcionales. Además pueden emplearse otros compuestos que no son necesariamente bi- o multifuncionales.

5 El solvente orgánico no acuoso es preferiblemente un alcohol C_{1-6} , dimetilsulfóxido (DMSO), N,N-dimetilformamida (DMF), N,N-diethylformamida (DEF), N,N-dimetilacetamida (DMAc), acetonitrilo, tolueno, dioxano, benceno, clorobenceno, metiletilcetona (MEK), piridina, tetrahidrofurano (THF), acetato de etilo, así mismo alcano C_{1-200} halogenado, sulfolano, glicol, N-metilpirrolidona (NMP), gamma-butirolactona, alcoholes alicíclicos así como ciclohexanol, cetonas, como acetona o acetilacetona, ciclocetonas, como ciclohexanona, sulfoleno o mezclas de ellos.

10 Un alcohol C_{1-6} describe un alcohol con 1 a 6 átomos de carbono. Aquí son ejemplos de ello metanol, etanol, n-propanol, i-propanol, n-butanol, i-butanol, t-butanol, pentanol, hexanol así como mezclas de ellos.

15 Un alcano C_{1-200} así mismo halogenado exhibe un alcano con 1 a 200 átomos de carbono, donde uno o varios o incluso todos los átomos de hidrógeno puede o pueden ser reemplazados por halógeno, preferiblemente cloro o flúor, en particular cloro. Son ejemplos aquí cloroformo, diclorometano, tetraclorometano, dicloroetano, hexano, heptano, octano así como mezclas de ellos.

Son solventes preferidos DMF, DEF, DMAc y NMP. Se prefiere particularmente DMF.

El concepto "no acuoso" se relaciona preferiblemente con un solvente que no supera un contenido máximo de agua de 10 % en peso, mas preferido 5 % en peso, aún más preferido 1 % en peso, aún preferido 0,1 % en peso, particularmente preferido 0,01 % en peso basado en peso total del solvente.

20 Preferiblemente el contenido total máximo de agua de la fase líquida de la mezcla de reacción antes de la transformación asciende a 10 % en peso, mas preferiblemente 5 % en peso y aún más preferiblemente 1 % en peso. Además al final de la transformación el contenido máximo total de agua es a lo sumo de 3 % en peso, más preferiblemente a lo sumo 1 % en peso y por lo común preferiblemente a lo sumo 0,5 % en peso.

25 La determinación del contenido de agua puede ser realizada mediante los métodos corrientes para los expertos. Preferiblemente se determina el contenido de agua según el método Karl Fischer (por ejemplo Römpp Chemie Lexikon vol. 3 (1995), p. 2161, editorial Georg Thieme).

El concepto "solvente" se refiere a solventes puros así como mezclas de diferentes solventes.

30 Después de la reacción pueden ocurrir varios pasos de acabado, los cuales son ejecutados preferiblemente bajo exclusión de humedad. Pueden ser pasos de filtrado, secado, lavado, secado, extracción, calcinación o conformado.

Se prefiere en particular un paso de calcinación. Típicamente, la temperatura aquí ajustada es mayor a 250°C, preferiblemente 300°C a 400°C.

35 A causa del paso de calcinación pueden liberarse los compuestos de partida que eventualmente permanecen en los poros.

40 De modo complementario o alternativo para ello puede ocurrir la eliminación de los materiales de partida de los poros del material estructural orgánico poroso, mediante el tratamiento del material estructural formado, con un solvente no acuoso. Aquí en un tipo de "método de extracción" se lixivia el material de partida que se va a eliminar y, dado el caso, se reemplaza en el material estructural por una molécula de solvente. Este delicado método es adecuado en particular cuando los materiales de partida son compuestos de alto punto de ebullición. El tratamiento ocurre por lo menos por 30 minutos y puede ser ejecutado típicamente por hasta dos días. Esto puede tener lugar a temperatura ambiente o temperatura elevada. Preferiblemente esto ocurre a temperatura elevada, preferiblemente a por lo menos 40°C, preferiblemente 60°C. Además se prefiere la extracción a temperatura de ebullición del solvente empleado (bajo reflujo).

El tratamiento puede ocurrir en un recipiente sencillo mediante suspensión y agitación del material estructural. También pueden emplearse equipos de extracción como equipos Soxhlet, en particular equipos técnicos de extracción.

5 Como solventes adecuados pueden emplearse los arriba mencionados, como por ejemplo alcohol C₁₋₆, dimetilsulfóxido (DMSO), N,N-dimetilformamida (DMF), N,N-dietilformamida (DEF), acetonitrilo, tolueno, dioxano, benceno, clorobenceno, metiletilcetona (MEK), piridina, tetrahidrofurano (THF), acetato de etilo, dado el caso alcano C₁₋₂₀₀ halogenado, sulfolano, glicol, N-metilpirrolidona (NMP), gamma-butirolactona, alcoholes alicíclicos como ciclohexanol, cetonas, como acetona o acetilacetona, cicloacetonas, como ciclohexanona o mezclas de ellos.

10 Se prefieren metanol, etanol, propanol, acetona, MEK y mezclas de ellos.

Un agente de extracción muy particularmente preferido es metanol.

El solvente empleado para la extracción pueden ser igual o diferente al de la reacción del por lo menos un compuesto metálico con el por lo menos un compuesto orgánico por lo menos bidentado. En particular, en la "extracción" no es absolutamente necesario aunque preferido que el solvente sea anhidro.

15 El material orgánico estructural puede estar presente en forma de polvo o bien como aglomerado. El material estructural puede ser empleado como tal o puede ser transformado en un cuerpo moldeado.

Aquí son métodos preferidos para la producción de cuerpos moldeados la granulación o tableteado. En la producción de cuerpos moldeados el material estructural puede exhibir otros materiales, como por ejemplo aglutinantes, desmoldantes y otros aditivos, los cuales pueden ser añadidos durante la producción. Asimismo es imaginable que el material estructural exhiba otros componentes, como por ejemplo absorbentes como carbón activado o similares.

20 Respecto a las posibles geometrías de los cuerpos moldeados, esencialmente no existe ninguna limitación. Por ejemplo son de mencionar entre otros pellas como por ejemplo pellas en forma de disco, motas, esferas, granulados, extruidos como por ejemplo cuerdas, panales, rejillas o cuerpos huecos.

25 Para la producción de estos cuerpos huecos son posibles fundamentalmente todos los métodos adecuados. Se prefieren en particular las siguientes variantes del método:

30 - amasado/molienda del material estructural sólo o junto con por lo menos un aglutinante y/o por lo menos un material de empastado y/o por lo menos un compuesto guía para obtener una mezcla; conformado de la mezcla obtenida por medio de por lo menos un método adecuado como por ejemplo extrusión; de modo opcional lavado y/o secado y/o calcinación del extruido; de modo opcional terminado.

- Tableteado junto con por lo menos un aglutinante y/u otras sustancias auxiliares.

35 - Aplicación del material estructural sobre por lo menos un material de soporte dado el caso poroso. El material obtenido puede ser entonces reacondicionado hasta un cuerpo moldeado según el método antes descrito.

- aplicación del material estructural sobre por lo menos un sustrato dado el caso poroso.

40 El amasado/molienda y conformado pueden ocurrir según cualquier método adecuado, como se describe por ejemplo en Ullmanns Enzyklopädie der Technischen Chemie, 4ª. edición, volumen 2, pp. 313 y siguientes (1972).

Por ejemplo el amasado/molienda y conformado pueden ocurrir por medio de una prensa de pistón, prensa de rodillos en presencia o ausencia de por lo menos un material ligante, composición, peletizado, tableteado, extrusión, co-extrusión, espumado, hilado, revestido, granulado,

preferiblemente granulado por atomización, atomizado, secado por atomización o una combinación de dos o más de estos métodos.

De modo muy particularmente preferido se producen pellas y/o tabletas.

5 El amasado y/o conformado puede ocurrir a temperaturas elevadas como por ejemplo en el rango de temperatura ambiente a 300 °C y/o presión elevada como por ejemplo en el rango de presión normal hasta algunos cientos de bar y/o en una atmósfera de gas protector como por ejemplo en presencia de un gas noble, nitrógeno o una mezcla de dos o más de ellos.

10 Según otra forma de ejecución, el amasado y/o conformado son ejecutados por adición de por lo menos un aglutinante, donde como aglutinante se emplea fundamentalmente cualquier compuesto químico que en el amasado y/o conformado garantice la viscosidad deseada de la masa que va a ser amasado y/o conformada. Además, en el sentido de la presente invención los aglutinantes pueden ser tanto compuestos que aumentan la viscosidad como que reducen la viscosidad.

15 Como otros aglutinantes preferidos son de mencionar por ejemplo óxido de aluminio o ligantes que contienen óxido de aluminio, como se describen por ejemplo en la WO 94/29408, dióxido de silicio como se describe por ejemplo en la EP 0 592 050 A1, mezclas de dióxido de silicio y óxido de aluminio como se describen por ejemplo en la WO 94/13584, minerales de la arcilla como se describen por ejemplo en la JP 03-037156 A, por ejemplo montmorillonita, caolin, bentonita, halloisita, dickita, nacrita y anauxita, alcoxisilanos como se describen por ejemplo en la EP 0 102 544 B1, por ejemplo tetraalcoxisilanos como por ejemplo tetrametoxisilano, tetraetoxisilano, 20 tetrapropoxisilano, tetrabutoxisilano, o por ejemplo trialcoxisilanos como por ejemplo trimetoxisilano, trietoxisilano, tripropoxisilano, tributoxisilano, alcoxititanatos, por ejemplo tetraalcoxititanatos como por ejemplo tetrametoxititanato, tetraetoxititanato, tetrapropoxititanato, tetrabutoxititanato, o por ejemplo trialcoxititanatos como por ejemplo trimetoxititanato, trietoxititanato, tripropoxititanato, tributoxititanato, alcoxircirconatos, por ejemplo tetraalcoxircirconatos como por ejemplo 25 tetrametoxircirconato, tetraetoxircirconato, tetrapropoxircirconato, tetrabutoxircirconato, o por ejemplo trialcoxircirconatos como por ejemplo trimetoxircirconato, trietoxircirconato, tripropoxircirconato, tributoxircirconato, silicasoles, sustancias anfífilas y/o grafito.

30 Como compuestos que aumentan la viscosidad pueden emplearse por ejemplo también, dado el caso adicionalmente a los compuestos mencionados arriba, un compuesto orgánico y/o un polímero hidrofílico como por ejemplo celulosa o un derivado de celulosa como por ejemplo metilcelulosa y/o un poliacrilato y/o un polimetacrilato y/o un polivinilalcohol y/o una polivinilpirrolidona y/o un poliisobuteno y/o un politetrahidrofurano y/o un óxido de polietileno.

35 Como agente de empastado pueden emplearse entre otros preferiblemente agua o por lo menos un alcohol como por ejemplo un monoalcohol con 1 a 4 átomos de carbono como por ejemplo metanol, etanol, n-propanol, iso-propanol, 1-butanol, 2-butanol, 2-metil-1-propanol o 2-metil-2-propanol o una mezcla de agua y por lo menos uno de los alcoholes mencionados o un alcohol polivalente como por ejemplo un glicol, preferiblemente un alcohol polivalente miscible en agua, sólo o como mezcla con agua y/o por lo menos uno de los mencionados alcoholes monovalentes.

40 Otros aditivos que pueden ser empleados para el amasado y/o conformado son entre otros aminas o derivados de aminas como por ejemplo compuestos de tetraalquilamonio o aminoalcoholes y compuestos que contienen carbonatos como por ejemplo carbonato de calcio. Esos otros aditivos son descritos en la EP 0 389 041 A1, la EP 0 200 260 A1 o la WO 95/19222.

Básicamente, el orden de los aditivos como compuesto guía, ligante, agente de empastado, sustancia que aumenta la viscosidad en el conformado y amasado, no es crítico.

Según otra forma preferida de operar, el cuerpo moldeado obtenido según amasado y/o conformado es sometido por lo menos a un secado, el cual es llevado a cabo en general a una temperatura en el rango de 25 a 500 °C, preferiblemente en el rango de 50 a 500 °C y particularmente preferido en el rango de 100 a 350 °C. Así mismo es posible secar al vacío o bajo atmósfera de gas protector o mediante secado por atomización.

5

Según una forma particularmente preferida de operar en el marco de este procedimiento de secado, se elimina del cuerpo moldeado por lo menos parcialmente por lo menos uno de los compuestos adicionados como aditivos.

Ejemplos

10 Ejemplo de comparación 1: síntesis convencional de MOF-5

Se suspenden 96,7 g de $Zn(NO_3)_2 \cdot 4H_2O$ y 20,8 g de ácido tereftálico en 2825 g de DEF (contenido de agua de 0,02% según K. Fischer). Se mantiene la mezcla de reacción (contenido total de agua de 1 % según K. Fischer) por 3,5 h a 130°C. Al final del tiempo de reacción el contenido de agua de la solución de reacción es de 1,1%. Después del enfriamiento se separa por filtración la materia seca y se

15

lava 4 x 500 ml con acetona anhidra. Primero que todo se preseca la sustancia sólida a temperatura ambiente en corriente de nitrógeno 2 a 4 días y a continuación se hace vacío en armario de secado al vacío por 16 h (≤ 1 mbar).

Antes de la determinación de la superficie con N_2 se hace vacío en las muestras en cada caso por más horas a 200°C.

20

Se determinaron los siguientes valores de superficie (según Langmuir):

| Muestra | Superficie [m^2/g] |
|-------------------------|------------------------|
| A (MH 148) | 2674 |
| B (MH 150) | 3016 |
| C (MH 155) | 2904 |
| D (MH 158) | 3530 |
| E (MH 159) | 2279 |
| F (MH 160) | 3684 |
| G (MH 161) | 2038 |
| H (MH 164) | 2811 |
| Promedio 2867 ± 561 | |

Ejemplo 2: Síntesis de MOF-5 con eliminación de agua

Se repite la síntesis del ejemplo 1. Sin embargo esta vez se separan los vapores formados durante la reacción con una suave corriente de nitrógeno sobre un puente de destilación. Después de la filtración, la solución madre contiene sólo aproximadamente 0,5% de H_2O . El tratamiento posterior de las muestras ocurre nuevamente de forma análoga al ejemplo 1.

25

Se determinan los siguientes valores de superficie (según Langmuir):

| Muestra | Superficie [m^2/g] |
|-------------------------|------------------------|
| I (MH 166) | 3372 |
| J (MH 167) | 3545 |
| K (MH 170) | 2940 |
| L (MH 183) | 3511 |
| M (MH 184) | 3628 |
| Promedio 3399 ± 273 | |

Los resultados muestran que debido a la eliminación del agua de la mezcla de reacción se puede obtener un material estructural con mayor superficie específica y que en la repetición de las pruebas resulta una menor desviación estándar, lo cual indica una mayor reproducibilidad.

Ejemplo 3: Síntesis de MOF-5 con eliminación del agua

- 5 Se repite la síntesis del ejemplo 1, sin embargo esta vez en presencia de 200 g de un tamiz molecular de 3 Å recientemente activado. Después de la filtración la solución madre contiene sólo aproximadamente 0,34 % de H₂O. El tratamiento posterior de las muestras ocurre nuevamente de forma análoga al ejemplo 1. Las muestras exhibieron una superficie N₂ (según Langmuir) de 3182 m²/g.

Reivindicaciones

1. Método para la producción de un material estructural organometálico poroso, dado el caso limitado, donde incluye el paso
 - 5 -reacción de una mezcla de reacción en una fase líquida de por lo menos un compuesto metálico con por lo menos un compuesto orgánico por lo menos bidentado, el cual puede estar enlazado al metal de manera coordinada, en presencia de un solvente orgánico no acuoso en presencia de y/o bajo liberación de agua, donde el compuesto orgánico exhibe por lo menos dos átomos elegidos en cada caso independientemente uno de otro de entre el grupo compuesto por oxígeno, azufre y nitrógeno, sobre el cual el compuesto orgánico puede estar
 - 10 ligado sobre el metal de modo coordinado, **caracterizado porque** durante la reacción se elimina agua de la fase líquida de la mezcla de reacción.
2. Método según la reivindicación 1, **caracterizado porque** el agua es por lo menos agua de cristalización del compuesto metálico o es componente del solvente o se forma por escisión durante la reacción del por lo menos un compuesto metálico con el por lo menos un compuesto por lo menos
- 15 bidentado.
3. Método según las reivindicaciones 1 o 2, **caracterizado porque** el por lo menos un compuesto orgánico por lo menos bidentado se deriva de un ácido di-, tri- o tetracarboxílico o un análogo de azufre de los mismos.
4. Método para la producción de un material estructural boro-orgánico poroso dado el caso limitado,
- 20 donde contiene el paso
 - 25 - reacción de una mezcla de reacción en una fase líquida de por lo menos un compuesto que exhibe por lo menos dos grupos boro con por lo menos un compuesto orgánico que es por lo menos bifuncional, el cual puede estar enlazado de modo covalente a un grupo boro, en presencia de un solvente orgánico no acuoso, donde el compuesto orgánico por lo menos bifuncional exhibe por lo menos dos átomos elegidos en cada caso independientemente uno de otro del grupo compuesto por oxígeno, azufre y nitrógeno, sobre el cual el compuesto orgánico bifuncional puede enlazarse de modo covalente con un grupo boro, **caracterizado porque** durante la transformación de la fase líquida de la mezcla de reacción se elimina agua.
5. Método según una de las reivindicaciones 1 a 4, **caracterizado porque** el agua se elimina de la
- 30 mezcla de reacción mediante destilación, arrastre de vapor o con agentes de adsorción.
6. Método según una de las reivindicaciones 1 a 5, **caracterizado porque** la reacción ocurre bajo agitación.
7. Método según una de las reivindicaciones 1 a 6, **caracterizado porque** la reacción ocurre a una presión de 2 bar como máximo.
- 35 8. Método según una de las reivindicaciones 1 a 7, **caracterizado porque** la reacción ocurre a una temperatura en el rango de 80°C a 180°C.
9. Método según una de las reivindicaciones 1 a 8, **caracterizado porque** el solvente orgánico no acuoso es un alcohol C₁₋₆, DMSO, DMF, DEF, DMAc, acetonitrilo, tolueno, dioxano, benceno, clorobenceno, MEK, piridina, THF, acetato de etilo, alcano C₁₋₂₀₀ dado el caso halogenado, sulfolano,
- 40 glicol, NMP, γ -butirolactona, alcoholes alicíclicos, cetonas, ciclocetonas, sulfoleno una mezcla de ellos.
10. Método según una de las reivindicaciones 1 a 9, **caracterizado porque** sigue una o varias etapas de acondicionamiento, las cuales son realizadas bajo exclusión de humedad.