

19



OFICINA ESPAÑOLA DE  
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 823 823**

51 Int. Cl.:

**B01J 20/26** (2006.01)  
**B01J 31/16** (2006.01)  
**C08F 14/18** (2006.01)  
**C08J 5/18** (2006.01)  
**C08J 9/00** (2006.01)  
**C08K 5/56** (2006.01)  
**C08K 7/02** (2006.01)

12

## TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **24.03.2015** **E 17202126 (3)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **06.05.2020** **EP 3311913**

54 Título: **Películas porosas que comprenden materiales de estructura organometálica**

30 Prioridad:

**27.03.2014 EP 14162018**

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:  
**10.05.2021**

73 Titular/es:

**BASF SE (100.0%)**  
**67056 Ludwigshafen, DE**

72 Inventor/es:

**SCHWAB, MATTHIAS GEORG;**  
**MAURER, STEFAN;**  
**BARTULI, WALDEMAR y**  
**MÜLLER, ULRICH**

74 Agente/Representante:

**GONZÁLEZ PECES, Gustavo Adolfo**

ES 2 823 823 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).

## DESCRIPCIÓN

Películas porosas que comprenden materiales de estructura organometálica

La presente invención se refiere a una composición para preparar una película porosa que comprende al menos un material de estructura organometálica (MOF) porosa.

5 Los materiales de estructura organometálica porosa son bien conocidos por ser adecuados para muchas aplicaciones que incluyen el almacenamiento de gas. Dependiendo de la aplicación, los materiales de estructura organometálica se pueden usar como polvo y, por lo tanto, se pueden usar directamente después de la preparación. Otra forma adecuada incluye cuerpos moldeados (véanse, por ejemplo, las publicaciones WO 03/102000 A1, WO 2006/050898 A1).

10 En particular, las películas de materiales de estructura organometálica son muy adecuadas cuando se usan, por ejemplo, en tecnologías de sensores.

Aquí dos grupos de películas deben considerarse de forma independiente. Un primer grupo se refiere a películas, donde el material de estructura organometálica es un componente secundario de una película de polímero. Se describe un ejemplo en el documento WO 2010/106105 A2, donde se divulga un material biodegradable. Un segundo grupo se refiere a películas de material de estructura organometálica pura o al menos con MOF como componente principal.

15 También para el segundo grupo, la preparación de tales películas se describe en la literatura. O. Shekhah et al., Chem. Soc. Rev., 2011, 40, 1081 -1106 proporcionan un análisis de los procedimientos para la fabricación de películas delgadas de MOF y la aplicación de tales películas.

20 Por consiguiente, los ejemplos de procedimientos de preparación son la deposición capa por capa (D.Y. Lee et al., RSC Advances (2014), 4 (23), 12037-12042), la deposición de capas atómicas (L.D. Salmi et al., Microporous and Mesoporous Materials). (2013), 182, 147-154), deposición epitaxial en fase líquida (LPE) (S. Wannapaiboon et al., Advanced Functional Materials, publicado por primera vez en línea el 20 de diciembre de 2013), deposición por láser pulsado (A.M. Marti et al., Langmuir (2013), 29 (19), 5927-5936), revestimiento por inmersión, H. Guo et al., Inorganic Chemistry Communications (2014), 41, 29-32), preparación solvotérmica (S.R. Ahrenholtz et al., Journal of the American Chemical Society (2014), 136 (6), 2464-2472), deposición térmica inducida por microondas (Y. Yeonahick et al. Chemical communications (Cambridge, Inglaterra) (2008), (21), 2441 -3) y electrodeposición (Y.-Min Zhu et al., Journal of Materials Chemistry A: Materials for Energy and Sustainability (2013), 1 (37), 11312-11319).

25 En el documento WO 2010/077030 A1 se divulga un procedimiento para revestir una superficie de soporte con materiales de estructura organometálica porosa utilizando tecnología de pulverización y disolventes como auxiliares de tratamiento.

30 El documento US 2011/0260100 A1 describe una película soportada de una estructura organometálica como material de electrodo con fluoruro de polivinilideno no fibrilado y negro de humo como componentes adicionales de la película. Sin embargo, el uso de un disolvente para la preparación de dicha película es limitante, ya que no todos los materiales de estructura organometálica son lo suficientemente estables para dicho procedimiento. Otro inconveniente de usar un aglutinante a base de disolvente se relaciona con la porosidad del material MOF cuyos poros pueden estar cerrados o bloqueados por el aglutinante disuelto.

35 Todos estos procedimientos tienen desventajas tales como la complejidad de la técnica y el equipo del procedimiento, limitaciones con respecto al aumento de escala (solo a escala de laboratorio), requerimiento de un sustrato y/o solvente, limitación a parámetros de reacción muy específicos como, por ejemplo, temperatura o limitaciones debido a la viscosidad.

40 Por lo tanto, existe la necesidad de películas MOF nuevas que pueden prepararse mediante procedimientos que eviten al menos en parte las desventajas anteriores y de composiciones que puedan usarse como material inicial para la preparación de la película.

Por consiguiente, un objeto de la presente invención es proporcionar tales composiciones.

45 El objetivo se logra mediante en forma seca que comprende

- (A) de 51 % en peso a 99,9 % en peso basado en el peso total de la composición de al menos un material de estructura organometálica porosa; el material comprende al menos un compuesto orgánico al menos bidentado, coordinado con al menos un ion de metal;
- (B) de 0,1 % en peso a 49 % en peso basado en el peso total de la composición de al menos un fluoropolímero seleccionado del grupo de polímeros y copolímeros que consisten en trifluoroetileno, hexafluoropropileno, monoclorotrifluoroetileno, diclorodifluoroetileno, tetrafluoroetileno, perfluorobutil-etileno, perfluoro (éter de alquilvinilo), fluoruro de vinilideno y fluoruro de vinilo y sus mezclas, que son capaces de tratar la fibrilación inducida; y
- (C) 0 % en peso a 48,9 % en peso basado en el peso total de la composición de un componente aditivo.

Se divulga una película porosa que comprende (A), (B) en forma fibrilada y (C).

Sorprendentemente, se ha encontrado que un material de estructura organometálica porosa en tales películas puede retener su porosidad al menos en cierto grado en comparación con el material en polvo, lo que da como resultado la capacidad de preparar películas porosas de alta densidad. Esto es particularmente sorprendente ya que las estructuras organometálicas están formadas parcialmente por enlaces químicos no covalentes débiles. Además, la preparación de películas independientes es posible y el procedimiento de fabricación de la película de la presente invención solo requiere un número limitado de pasos simples. El procedimiento de fabricación también es fácilmente escalable. El procedimiento de fabricación puede ser completamente seco.

Para proporcionar un MOF se requiere un componente de película (B) como agente "inductor" de película. Los fluoropolímeros fibrilados son conocidos en la técnica. A partir de un fluoropolímero capaz de fibrilación inducida por tratamiento, el polímero, opcionalmente como parte de una mezcla, se somete a una fuerza de cizalla suficiente para inducir la fibrilación.

Está claro para el profesional en la materia que la película puede comprender uno, dos diferentes o más fluoropolímeros diferentes. Por consiguiente, el término "al menos un fluoropolímero" se refiere a uno o más; por ejemplo, dos, tres o cuatro, fluoropolímeros. Los porcentajes en peso dados para el componente (B) se refieren a todos los fluoropolímeros en la película y, por lo tanto, pueden calcularse a partir de la suma de fluoropolímeros. Sin embargo, se prefiere que en la película esté presente solo un fluoropolímero.

El al menos un fluoropolímero que es capaz de tratar la fibrilación inducida se selecciona del grupo de polímeros y copolímeros que consisten en trifluoroetileno, hexafluoropropileno, monoclorotrifluoroetileno, diclorodifluoroetileno, tetrafluoroetileno, perfluorobutil etileno, perfluoro (éter de alquil-vinilo), fluoruro de vinilideno y fluoruro de vinilo y mezclas de los mismos. Por consiguiente, pueden usarse homopolímeros de uno de los monómeros o copolímeros anteriores de dos o más de estos monómeros. Preferiblemente, el al menos un fluoropolímero es politetrafluoroetileno (PTFE).

Tal PTFE fibrilado es conocido en la técnica, por ejemplo, por las publicaciones US 2003/0219587 A1, US 4,379,772 A, US 2006/0185336 A1 y US 4,153,661 A. Por consiguiente, se ha reconocido que, cuando se somete a fuerzas de cizalla, pequeñas partículas de ciertos materiales poliméricos, por ejemplo, los polímeros perfluorados como el PTFE, formarán fibrillas de tamaño microscópico. Usando este conocimiento, Ree et al. describieron a fines de la década de 1970 en el documento US 4,153, 661 A una lámina composite de PTFE para usar como un aislante electrónico, un separador de batería y/o una membrana semipermeable para usar en la ciencia de la separación. La formación de la película resistente, atractiva y extremadamente flexible implicaba un mezclado intensivo de la mezcla de PTFE y lubricante que fuera suficiente para hacer que las fibrillas de PTFE se fibrilaran y formaran una lámina. Por lo tanto, las fibrillas de la resina de politetrafluoroetileno se pueden obtener aplicando un esfuerzo de cizalla a las partículas de resina de politetrafluoroetileno (publicación US 2006/0185336 A1).

La resina de PTFE puede tener un peso molecular promedio en número de 3.000.000 a 50.000.000 g/mol, preferiblemente de 5.000.000 a 15.000.000 g/mol, como se describe en el documento US 2006/0185336 A1. En el documento US 2006/0185336, la resina se mezcló con un agente funcional tal como una resina de intercambio iónico, carbón activado, zeolita, gel de sílice, catalizador de óxido metálico y similares, para convertirse adicionalmente en una lámina de filtro de aire.

Los grados de PTFE adecuados están disponibles comercialmente, tales como Teflon fabricado por E. I. du Pont de Nemours & Company; Fluon fabricado por ASAHI GLASS CO., LTD. de Japón y Dyneon fabricado por 3M Company, St. Paul, Minnesota.

La película puede ser autónoma o soportada. En caso de que la película esté soportada, se puede utilizar cualquier soporte adecuado. Tal soporte puede ser poroso, parcialmente poroso o no poroso. El soporte puede ser mono- o multicapa. El soporte puede ser conductor semiconductor o aislante térmico y/o eléctrico. Es posible un soporte rígido o flexible. Los ejemplos de soportes adecuados incluyen metales, como titanio, circonio, hafnio, vanadio, niobio, tantalio, cromo, molibdeno, tungsteno, manganeso, renio, hierro, rutenio, osmio, cobalto, rodio, iridio, níquel, platino, paladio, cobre, plata, oro, zinc, aluminio, estaño, plomo, metales de la serie lantánida; aleaciones de metales como el acero; sustratos de carbono; mallas; telas; materiales de celulosa, como papel y madera; cerámica; semiconductores, como silicio, germanio, arseniuro de galio, fósforo de indio, vidrio; cuarzo; óxidos metálicos, como óxido de aluminio, óxido de silicio, óxido de circonio y óxido de indio y estaño; carburo de silicio; polímeros y similares.

La película se puede suministrar al soporte después de su preparación mediante procedimientos de deposición adecuados. Ejemplos de tales procedimientos de revestimiento por adhesión usando un adhesivo, que también puede ser parte de la película como un componente aditivo (C) o solo usando fuerzas de adhesión de la película al estampar, prensar, moldear o grabar la película sobre el soporte.

Preferiblemente, la película tiene un grosor de al menos 0,5  $\mu\text{m}$  (más preferiblemente 1  $\mu\text{m}$  a 2  $\mu\text{m}$ , incluso más preferiblemente 1  $\mu\text{m}$  a 1  $\text{cm}$ , incluso más preferiblemente 5  $\mu\text{m}$  a 500  $\mu\text{m}$ , aún más preferiblemente 10  $\mu\text{m}$  a 100  $\mu\text{m}$ ) cuando la película es autónoma y al menos 0,1  $\mu\text{m}$  (más preferiblemente 1  $\mu\text{m}$  a 2  $\mu\text{m}$ , aún más preferiblemente 1  $\mu\text{m}$

a 1 cm, aún más preferiblemente 5  $\mu\text{m}$  a 500  $\mu\text{m}$ , incluso más preferiblemente 10  $\mu\text{m}$  a 100 $\mu\text{m}$ ) cuando la película está soportada.

En caso de que la película tenga espesores diferentes, el valor inferior de un intervalo representa el valor mínimo de todos los valores de espesor y el valor superior de un intervalo representa el valor máximo de todos los espesores.

- 5 Preferiblemente, la película tiene una superficie bidimensional con al menos una dimensión que excede 1 cm. La longitud de la película se puede ajustar según sea necesario para una aplicación específica. En principio, la longitud no está limitada. Así también son posibles bobinas de películas. En este caso, es ventajoso separar cada capa de película entre sí por medios de separación, como un agente de liberación o una lámina de separación.

- 10 La estructura organometálica utilizada como componente (A) de la composición según la presente invención, así como la película de la presente invención, comprende poros, en particular microporos y/o mesoporos. Los microporos se definen como poros que tienen un diámetro de 2 nm o menos y los mesoporos se definen por un diámetro en el intervalo de 2 a 50 nm (Pure & Appl. Chem 57 (1985) 603- 619). La presencia de microporos y/o mesoporos puede verificarse por medio de mediciones de sorción y estas mediciones determinan la capacidad de absorción de las estructuras metálicas orgánicas para nitrógeno a 77 Kelvin de acuerdo con DIN 66134:1998-02.

- 15 Preferiblemente, el área de superficie específica de la película medida de acuerdo con BET (DIN ISO 9277:2003 -05) es de al menos 50  $\text{m}^2/\text{g}$ , más preferiblemente de al menos 100  $\text{m}^2/\text{g}$ , más preferiblemente de al menos 250  $\text{m}^2/\text{g}$ , más preferiblemente de al menos 500  $\text{m}^2/\text{g}$ , más preferiblemente de al menos 500  $\text{m}^2/\text{g}$ , más preferiblemente de al menos 600  $\text{m}^2/\text{g}$ , incluso más preferiblemente de al menos 700  $\text{m}^2/\text{g}$ , en particular de al menos 800  $\text{m}^2/\text{g}$ .

- 20 Preferiblemente, el área superficial específica volumétrica de la película es de al menos 15  $\text{m}^2/\text{cm}^3$ . El área de superficie específica volumétrica se puede calcular determinando el producto del área de superficie específica [ $\text{m}^2/\text{g}$ ] de la película y la densidad [ $\text{g}/\text{cm}^3$ ] de la película.

Preferiblemente, la película es preferiblemente flexible. En consecuencia, la película se puede doblar, retorcer, enrollar, plegar o presentar como película plana.

- 25 Preferiblemente, las cantidades basadas en el peso total de la película son 51 por ciento en peso ( % en peso) a 99,9 % en peso de (A), 0,1 % en peso a 49 % en peso de (B) y 0 % en peso de (C). Más preferiblemente, las cantidades basadas en el peso total de la película son 75 % en peso a 99 % en peso de (A), 1 % en peso a 25 % en peso de (B) y 0 % en peso de (C). Incluso más preferiblemente, las cantidades basadas en el peso total de la película son 80 % en peso a 98 % en peso de (A), 2 % en peso a 20 % en peso de (B) y 0 % en peso de (C). Incluso más preferiblemente, las cantidades basadas en el peso total de la película son 85 % en peso a 98 % en peso de (A), 2 % en peso a 15 % en peso de (B) y 0 % en peso de (C).

- 30 Preferiblemente, las cantidades basadas en el peso total de la composición son 51 % en peso a 99,8 % en peso de (A), 0,1 % en peso a 48,9 % en peso de (B) y 0,1 a 48,9 % en peso de (C). Más preferiblemente, las cantidades basadas en el peso total de la película son 51 % en peso a 98 % en peso de (A), 1 % en peso a 15 % en peso de (B) y 1 % en peso a 34 % en peso de (C). Más preferiblemente, las cantidades basadas en el peso total de la película son 55 % en peso a 95 % en peso de (A), 2 % en peso a 15 % en peso de (B) y 3 % en peso a 30 % en peso de (C). Más preferiblemente, las cantidades basadas en el peso total de la película son del 61 % en peso al 95 % en peso de (A), 2 % en peso a 12 % en peso de (B) y 3 % en peso a 27 % en peso de (C).

- 40 El componente (A) se refiere al menos a un material de estructura organometálica. Por consiguiente, la composición de la presente invención puede comprender un material de estructura organometálica. También es posible que se utilicen mezclas de diferentes materiales de estructura organometálica. En este caso, las cantidades indicadas anteriormente representan la cantidad total de todos los materiales de estructura organometálica en la mezcla. Dicha mezcla puede consistir en dos materiales de estructura organometálica diferentes. También es posible que más de dos, como tres, cuatro o más materiales de estructura organometálica diferentes representen la mezcla.

- 45 Tales materiales de estructura organometálica (MOF) se describen, por ejemplo, en los documentos US 5,648,508, EP-A-0 790 253, M. O'Keeffe et al., J. Sol. State Chem., 152 (2000), páginas 3 a 20, H. Li et al., Nature 402, (1999), página 276, M. Eddaoudi et al., Topics in Catalysis 9, (1999), páginas 105 a 111, B. Chen et al., Science 291, (2001), páginas 1021 a 1023, DE-A-10111230, DE- A 10 2005 053430, WO-A 2007/054581, WO-A 2005/049892 y WO-A 2007/023134.

- 50 Como un grupo específico de estas estructuras organometálicas, estructuras "limitadas" en las que, como resultado de la selección específica del compuesto orgánico, la estructura no se extiende infinitamente, sino que se describen formas de poliedros en la literatura. A.C. Sudik, y col., J. Am. Chem Soc. 127 (2005), 7110-7118, describen dichas estructuras específicas. Aquí se describirán como poliedros organometálicos (MOP) para distinguirlas.

- 55 Un grupo específico adicional de estructuras organometálicas porosas comprende aquellas en las que el compuesto orgánico como ligando es un sistema de anillo monocíclico, bicíclico o policíclico que se deriva al menos de uno de los heterociclos seleccionados del grupo que consiste en pirrol, alfa- piridona y gamma-piridona y tiene al menos dos

nitrógenos de anillo. La preparación electroquímica de tales estructuras se describe en el documento WO-A 2007/131955.

Como ya se indicó anteriormente, las estructuras organometálicas según la presente invención comprenden poros, en particular microporos y/o mesoporos. Los microporos se definen como poros que tienen un diámetro de 2 nm o menos y los mesoporos se definen por un diámetro en el intervalo de 2 a 50 nm, en cada caso correspondiente a la definición dada en Pure & Applied Chem. 57 (1983), 603 - 619, en particular en la página 606. La presencia de microporos y/o mesoporos puede verificarse mediante mediciones de sorción que determinan la capacidad de absorción del MOF para nitrógeno a 77 Kelvin de acuerdo con DIN 66134:1998-02.

El área superficial específica, calculada según el modelo BET (DIN ISO 9277: 2003-05), de un polvo MOF es preferiblemente mayor que 100 m<sup>2</sup>/g, más preferiblemente mayor que 200 m<sup>2</sup>/g, más preferiblemente mayor que 500 m<sup>2</sup>/g. Dependiendo del MOF, también es posible alcanzar más de 1000 m<sup>2</sup>/g, más preferiblemente más de 1500 m<sup>2</sup>/g y de modo particularmente preferible más de 2000 m<sup>2</sup>/g. Típicamente, el área de superficie específica es inferior a 5000 m<sup>2</sup>/g.

El componente metálico en la estructura según la presente invención se selecciona preferiblemente de los grupos Ia, IIa, IIIa, IVa a VIIa y Ib a VIb de la tabla periódica. Se da preferencia particular a Mg, Ca, Sr, Ba, Sc, Y, Ln, 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, Al, Ga, In, Tl, Si, Ge, Sn, Pb, As, Sb y Bi, donde Ln representa los lantánidos.

Los lantánidos son La, Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb.

Con respecto a los iones de estos elementos, se puede hacer mención particular de Mg<sup>2+</sup>, Ca<sup>2+</sup>, Sr<sup>2+</sup>, Ba<sup>2+</sup>, Sc<sup>3+</sup>, Y<sup>3+</sup>, Ln<sup>3+</sup>, Ti<sup>4+</sup>, Zr<sup>4+</sup>, Hf<sup>4+</sup>, V<sup>4+</sup>, V<sup>3+</sup>, V<sup>2+</sup>, Nb<sup>3+</sup>, Ta<sup>3+</sup>, Cr<sup>3+</sup>, Mo<sup>3+</sup>, W<sup>3+</sup>, Mn<sup>3+</sup>, Mn<sup>2+</sup>, Re<sup>3+</sup>, Re<sup>2+</sup>, Fe<sup>3+</sup>, Fe<sup>2+</sup>, Ru<sup>3+</sup>, Ru<sup>2+</sup>, Os<sup>3+</sup>, Os<sup>2+</sup>, Co<sup>3+</sup>, Co<sup>2+</sup>, Rh<sup>2+</sup>, Rh<sup>3+</sup>, Ir<sup>2+</sup>, Ir<sup>3+</sup>, Ni<sup>2+</sup>, Ni<sup>3+</sup>, Pd<sup>2+</sup>, Pd<sup>4+</sup>, Pt<sup>2+</sup>, Pt<sup>4+</sup>, Cu<sup>2+</sup>, Cu<sup>+</sup>, Ag<sup>+</sup>, Au<sup>+</sup>, Zn<sup>2+</sup>, Cd<sup>2+</sup>, Hg<sup>2+</sup>, Al<sup>3+</sup>, Ga<sup>3+</sup>, In<sup>3+</sup>, Tl<sup>3+</sup>, Si<sup>4+</sup>, Si<sup>2+</sup>, Ge<sup>4+</sup>, Ge<sup>2+</sup>, Sn<sup>4+</sup>, Sn<sup>2+</sup>, Pb<sup>4+</sup>, Pb<sup>2+</sup>, As<sup>5+</sup>, As<sup>3+</sup>, As<sup>+</sup>, Sb<sup>5+</sup>, Sb<sup>3+</sup>, Sb<sup>+</sup>, Bi<sup>5+</sup>, Bi<sup>3+</sup> y Bi<sup>+</sup>.

Se da preferencia muy particular a Mg, Ca, Al, Y, Sc, Zr, Ti, V, Cr, Mo, Fe, Co, Cu, Ni, Zn, Ln. Se da mayor preferencia a Mg, Zr, Ni, Al, Mo, Y, Sc, Mg, Fe, Cu y Zn. En particular, se prefieren Mg, Fe, Zr, Sc, Al, Cu y Zn. Aquí puede hacerse una mención muy particular de Mg, Zr, Al, Cu y Zn, en particular Al, Zn y Cu.

El término "compuesto orgánico al menos bidentado" se refiere a un compuesto orgánico que comprende al menos un grupo funcional que puede formar al menos dos enlaces coordinados con un ion metálico dado y/o formar un enlace coordinado con cada uno de dos o más, preferiblemente dos, átomos de metal.

Como grupos funcionales a través de los cuales se forman los enlaces coordinados mencionados anteriormente, se puede hacer mención particular a modo de ejemplo de los siguientes grupos funcionales: -CO<sub>2</sub>H, -CS<sub>2</sub>H, -NO<sub>2</sub>, -B(OH)<sub>2</sub>, -SO<sub>3</sub>H, -Si(OH)<sub>3</sub>, -Ge(OH)<sub>3</sub>, -Sn(OH)<sub>3</sub>, -Si(SH)<sub>4</sub>, -Ge(SH)<sub>4</sub>, -Sn(SH)<sub>3</sub>, -PO<sub>3</sub>H, -AsO<sub>3</sub>H, -AsO<sub>4</sub>H, -P(SH)<sub>3</sub>, -As(SH)<sub>3</sub>, -CH(RSH)<sub>2</sub>, -C(RSH)<sub>3</sub>, -CH(RNH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>, -C(RNH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>, -CH(ROH)<sub>2</sub>, -C(ROH)<sub>3</sub>, -CH(RCN)<sub>2</sub>, -C(RCN)<sub>3</sub>, donde R es, por ejemplo, preferiblemente un grupo alquileo que tiene 1, 2, 3, 4 o 5 átomos de carbono, por ejemplo un grupo metileno, etileno, n-propileno, i-propileno, n-butileno, i-butileno, terc-butileno o n-pentileno, o un grupo arilo que comprende 1 o 2 anillos aromáticos, por ejemplo 2 anillos de C<sub>6</sub>, que pueden fusionarse opcionalmente y pueden, independientemente uno de otro, estar apropiadamente sustituidos por al menos un sustituyente en cada caso y/o independientemente uno del otro, pueden comprender en cada caso al menos un heteroátomo tal como N, O y/o S. En las formas de realización similarmente preferidas, se puede hacer mención de grupos funcionales en los que no está presente el radical R mencionado anteriormente. A este respecto, se pueden mencionar, entre otros, -CH(SH)<sub>2</sub>, -C(SH)<sub>3</sub>, -CH(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>, -C(NH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>, -CH(OH)<sub>2</sub>, -C(OH)<sub>3</sub>, -CH(CN)<sub>2</sub> o -C(CN)<sub>3</sub>.

Sin embargo, los grupos funcionales también pueden ser heteroátomos de un heterociclo. Aquí puede hacerse una mención particular de los átomos de nitrógeno.

En principio, los al menos dos grupos funcionales pueden unirse a cualquier compuesto orgánico adecuado siempre que se garantice que el compuesto orgánico que lleva estos grupos funcionales sea capaz de formar el enlace coordinado y producir la estructura.

Los compuestos orgánicos que comprenden los al menos dos grupos funcionales se derivan preferiblemente de un compuesto alifático saturado o insaturado o un compuesto aromático o tanto de un compuesto alifático como de un compuesto aromático.

El compuesto alifático o la parte alifática tanto del compuesto alifático como del compuesto aromático puede ser lineal y/o ramificado y/o cíclico, y también es posible una pluralidad de anillos por compuesto. El compuesto alifático o la parte alifática tanto del compuesto alifático como del compuesto aromático comprende más preferiblemente de 1 a 15, más preferiblemente de 1 a 14, más preferiblemente de 1 a 13, más preferiblemente de 1 a 12, más preferiblemente de 1 a 11 y de modo particularmente preferible de 1 a 10 átomos de carbono, por ejemplo 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 o 10 átomos de carbono. Aquí se da preferencia particular a, entre otros, metano, adamantano, acetileno, etileno o butadieno.

El compuesto aromático o la parte aromática tanto del compuesto aromático como del compuesto alifático puede tener uno o más anillos, por ejemplo, dos, tres, cuatro o cinco anillos, y los anillos pueden estar presentes por separado unos de otros y/o al menos dos los anillos pueden estar presentes en forma fusionada. El compuesto aromático o la parte aromática tanto del compuesto alifático como del compuesto aromático tiene de modo particularmente preferible uno, dos o tres anillos, y particularmente se prefieren uno o dos anillos. Además, cada anillo de dicho compuesto puede comprender independientemente al menos un heteroátomo; por ejemplo, N, O, S, B, P, Si, Al; preferiblemente N, O y/o S. El compuesto aromático o la parte aromática tanto del compuesto aromático como del compuesto alifático comprende más preferiblemente uno o dos anillos de C<sub>6</sub>, y los dos están presentes por separado uno del otro o en forma fusionada. En particular, se pueden mencionar benceno, naftaleno y/o bifenilo y/o bipyridilo y/o piridilo como compuestos aromáticos.

El compuesto orgánico al menos bidentado es más preferiblemente un hidrocarburo alifático o aromático, acíclico o cíclico que tiene de 1 a 18, preferiblemente de 1 a 10 y en particular 6, átomos de carbono y adicionalmente tiene exclusivamente 2, 3 o 4 grupos carboxilo como grupos funcionales.

El al menos un compuesto orgánico al menos bidentado se deriva preferiblemente de un ácido dicarboxílico, tricarboxílico o tetracarboxílico.

Por ejemplo, el compuesto orgánico al menos bidentado se deriva de un ácido dicarboxílico tal como ácido oxálico, ácido succínico, ácido tartárico, ácido 1,4-butanodicarboxílico, ácido 1,4-butenodicarboxílico, ácido 4-oxopiran-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-piridinadicarboxílico, ácido piridina-2,3-dicarboxílico, ácido 1,3-butadieno-1,4-dicarboxílico, ácido 1,4-bencenodicarboxílico, ácido p-bencenodicarboxílico, ácido imidazol-2,4-dicarboxílico, ácido 2-metilquinolina-3,4-dicarboxílico, ácido quinolin-2,4-dicarboxílico, ácido quinoxalino-2,3-dicarboxílico, ácido 6-cloroquinoxalino-2,3-dicarboxílico, ácido 4,4'-diaminofenilmetano-3,3'-dicarboxílico, ácido quinolin-3,4-dicarboxílico, ácido 7-cloro-4-hidroxiquinolina-2,8-dicarboxílico, ácido diimidadicarboxílico, ácido piridina-2,6-dicarboxílico, ácido 2-metilimidazol-4,5-dicarboxílico, ácido tiofeno-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 octanodicarboxílico, ácido pentano-3,3-dicarboxílico, ácido 4,4'-diamino-1,1'-bifenil-3,3'-dicarboxílico, ácido 4,4'-diaminobifenil-3,3'-dicarboxílico, ácido bencidina-3,3'-dicarboxílico, ácido 1,4-bis(fenilamino)benceno-2,5-dicarboxílico, ácido 1,1'-binaftildicarboxílico, ácido 7-cloro-8-metilquinolina-2,3-dicarboxílico, ácido 1-anilinoantraquinona-2,4'-dicarboxílico, ácido politetrahidrofurano 250-dicarboxílico, ácido 1,4-bis(carboximetil)piperazina-2,3-dicarboxílico, ácido 7-cloroquinolina-3,8-dicarboxílico, ácido 1-(4-carboxi)fenil-3-(4-cloro)fenilpirazolina-4,5-dicarboxílico, ácido 1,4,5,6,7,7-hexacloro-5-norborneno-2,3-dicarboxílico, ácido fenilindanodicarboxílico, ácido 1,3-dibencil-2-oxoimidazolidina-4,5-dicarboxílico, ácido 1,4-ciclohexanodicarboxílico, ácido naftaleno-1,8-dicarboxílico, ácido 2-benzoilbenceno-1,3-dicarboxílico, ácido 1,3-dibencil-2-oxoimidazolideno-4,5-cis-dicarboxílico, ácido 2,2'-biquinolina-4,4'-dicarboxílico, ácido piridina-3,4-dicarboxílico, ácido 3,6,9-trioxaundecanodicarboxílico, ácido hidroxibenzofenonadicarboxílico, ácido Pluriol E 300-dicarboxílico, ácido Pluriol E 400-dicarboxílico, ácido Pluriol E 600-dicarboxílico, ácido pirazol-3,4-dicarboxílico, ácido 2,3-pirazinadicarboxílico, ácido 5,6-dimetil-2,3-pirazinadicarboxílico, ácido 4,4'-diamino(difeniléter)diimidadicarboxílico, ácido 4,4'-diaminodifenilmetanodiimidadicarboxílico, ácido 4,4'-diamino(difenil sulfona)diimidadicarboxílico, ácido 1,4-naftalenodicarboxílico, ácido 2,6-naftalenodicarboxílico, ácido 1,3-adamantanodicarboxílico, ácido 1,8-naftalenodicarboxílico, ácido 2,3-naftalenodicarboxílico, ácido 8-metoxi-2,3-naftalenodicarboxílico, ácido 8-nitro-2,3-naftalenodicarboxílico, ácido 8-sulfo-2,3-naftalenodicarboxílico, ácido antraceno-2,3-dicarboxílico, ácido 2',3'-difenil-p-terfenil-4,4"-dicarboxílico, ácido (difenil éter)-4,4'-dicarboxílico, ácido imidazol-4,5-dicarboxílico, ácido 4(1H)-oxotiocromo-2,8-dicarboxílico, ácido 5-terc-butil-1,3-bencenodicarboxílico, ácido 7,8-quinolinadicarboxílico, ácido 4,5-imidazoldicarboxílico, ácido 4-ciclohexeno-1,2-dicarboxílico, ácido hexatriacontanodicarboxílico, ácido tetradecanodicarboxílico, ácido 1,7-heptanodicarboxílico, ácido 5-hidroxi-1,3-bencenodicarboxílico, ácido 2,5-dihidroxi-1,4-dicarboxílico, ácido pirazina-2,3-dicarboxílico, ácido furano-2,5-dicarboxílico, ácido 1-noneno-6,9-dicarboxílico, ácido eicosendicarboxílico, ácido 4,4'-dihidroxi-difenilmetano-3,3'-dicarboxílico, ácido 1-amino-4-metil-9,10-dioxo-9,10-dihidroantraceno-2,3-dicarboxílico, ácido 2,5-piridinadicarboxílico, ácido ciclohexeno-2,3-dicarboxílico, ácido 2,9-diclorofluorrubina-4,11-dicarboxílico, ácido 7-cloro-3-metilquinolina-6,8-dicarboxílico, ácido 2,4-diclorobenzofenona-2',5'-dicarboxílico, ácido 1,3-bencenodicarboxílico, ácido 2,6-piridinadicarboxílico, ácido 1-metilpirrol-3,4-dicarboxílico, ácido 1-bencil-1H-pirrol-3,4-dicarboxílico, ácido antraquinona-1,5-dicarboxílico, ácido 3,5-pirazoledicarboxílico, ácido 2-nitrobenceno-1,4-dicarboxílico, ácido heptano-1,7-dicarboxílico, ácido ciclobutano-1,1,1-dicarboxílico, ácido 1,14-tetradecanodicarboxílico, ácido 5,6-deshidronorbornano-2,3-dicarboxílico, ácido 5-etil-2,3-piridinadicarboxílico o ácido canfordicarboxílico,

Además, el compuesto orgánico al menos bidentado es más preferiblemente uno de los ácidos dicarboxílicos mencionados como ejemplo anteriormente como tal.

El compuesto orgánico al menos bidentado puede derivarse, por ejemplo, de un ácido tricarboxílico tal como

Ácido 2-hidroxi-1,2,3-propanotricarboxílico, ácido 7-cloro-2,3,8-quinolinatricarboxílico, ácido 1,2,3-, 1,2,4-bencenotricarboxílico, ácido 1,2,4-butanotricarboxílico, ácido 2-fosfono-1,2,4-butanotricarboxílico, ácido 1,3,5-

bencenotricarboxílico, ácido 1-hidroxi-1,2,3-propanotricarboxílico, ácido 4,5-dihidro-4,5-dioxo-1H-pirrol[2,3-F]quinolina-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.

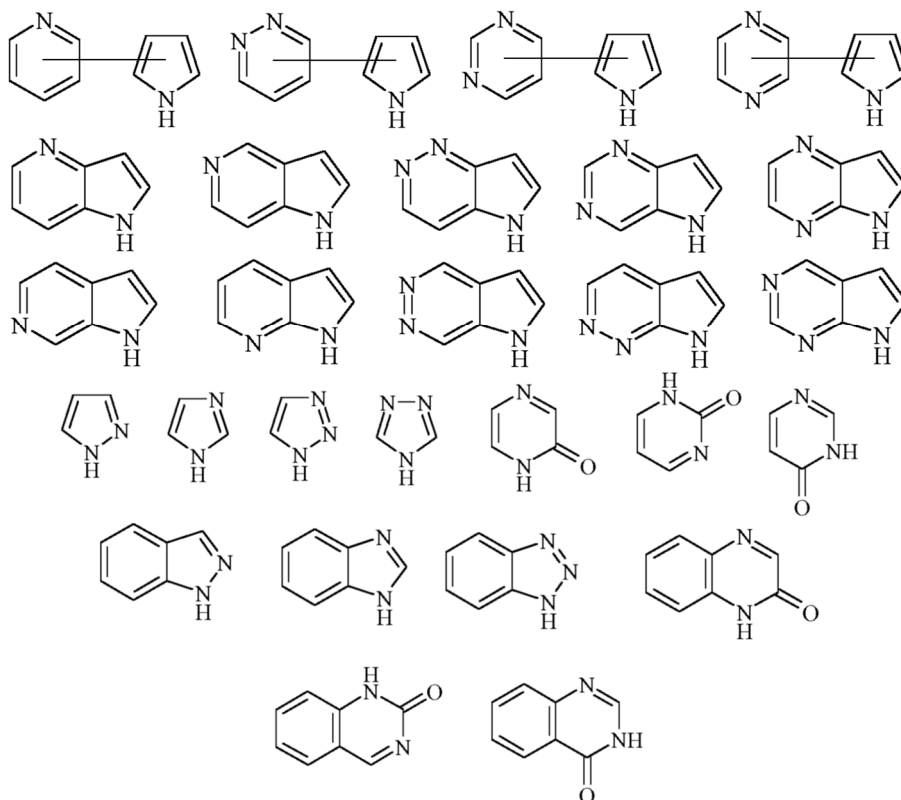
Además, el compuesto orgánico al menos bidentado es más preferiblemente uno de los ácidos tricarboxílicos mencionados como ejemplo anteriormente como tal.

Ejemplos de un compuesto orgánico al menos bidentado derivado de un ácido tetracarboxílico son

Ácido 1,1-dioxidoperilo[1, 12-BCD] tiofeno-3,4,9,10-tetracarboxílico, ácidos perilenotetracarboxílicos tales como ácido perileno-3,4,9,10-tetracarboxílico o ácido (perileno-1,12-sulfona)-3,4,9,10-tetracarboxílico, ácidos butanotetracarboxílicos tales 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-hexaoxaciclooctadecano-2,3,11,12-tetracarboxílico, ácido 1,2,4,5-bencenotetracarboxílico, ácido 1,2,11,12-dodecanotetracarboxílico, ácido 1,2,5,6-hexanotetracarboxílico, ácido 1,2,7,8-octanotetracarboxílico, ácido 1,4,5,8-naftalenotetracarboxílico, ácido 1,2,9,10-decanotetracarboxílico, ácido benzofenonatetracarboxílico, ácido 3,3',4,4'-benzofenonatetracarboxílico, ácido tetrahidrofuranotetracarboxílico o ácidos ciclopentanotetracarboxílicos tales como ácido ciclopentano-1,2,3,4-tetracarboxílico.

Además, el compuesto orgánico al menos bidentado es más preferiblemente uno de los ácidos tetracarboxílicos mencionados como ejemplo anteriormente como tal.

Los heterociclos preferidos como compuesto orgánico al menos bidentado en el que se forma un enlace coordinado a través de los heteroátomos del anillo son los siguientes sistemas de anillo sustituidos o no sustituidos:



Se da preferencia muy particular al uso opcional de ácidos dicarboxílicos, tricarboxílicos o tetracarboxílicos aromáticos al menos mono-sustituídos que pueden tener uno, dos, tres, cuatro o más anillos, y cada uno de los anillos puede comprender al menos un heteroátomo y dos o más anillos pueden comprender heteroátomos idénticos o diferentes. Por ejemplo, se da preferencia a ácidos dicarboxílicos de un anillo, ácidos tricarboxílicos de un anillo, ácidos tetracarboxílicos de un anillo, ácidos dicarboxílicos de dos anillos, ácidos tricarboxílicos de dos anillos, ácidos tetracarboxílicos de dos anillos, ácidos dicarboxílicos de tres anillos, ácidos tricarboxílicos de tres anillos, ácidos tetracarboxílicos de tres anillos, ácidos dicarboxílicos de cuatro anillos, ácidos tricarboxílicos de cuatro anillos y/o ácidos tetracarboxílicos de cuatro anillos. Los heteroátomos adecuados son, por ejemplo, N, O, S, B, P, y los heteroátomos preferidos son N, S y/u O. Los sustituyentes adecuados aquí son, entre otros, -OH, un grupo nitro, un grupo amino o un grupo alquilo o alcoxi.

Los compuestos orgánicos al menos bidentados particularmente preferidos son imidazolatos tales como 2-metilimidazolato, ácido acetilendicarboxílico (ADC), ácido canfordicarboxílico, ácido fumárico, ácido succínico, ácidos

- bencenodicarboxílicos como el ácido ftálico, ácido isoftálico, ácido tereftálico (BDC), ácido aminotereftálico, trietilendiamina (TEDA), ácido metilglicinadiacético (MGDA), ácidos naftalenodicarboxílicos (NDC), ácidos bifenildicarboxílicos como el ácido 4,4'-bifenildicarboxílico (BPDC), ácidos pirazinadicarboxílicos como el ácido 2,5-pirazinadicarboxílico, ácidos bipyridinadicarboxílicos como los ácidos 2,2'-bipyridinadicarboxílicos como el ácido 2,2'-bipyridina-5,5'-dicarboxílico, ácidos bencenotricarboxílicos tales como ácido 1,2,3-, 1, 2,4-bencenotricarboxílico o ácido 1,3,5-bencenotricarboxílico (BTC), ácido bencenotetracarboxílico, ácido adamantanotetracarboxílico (ATC), adamantanodibenzoato (ADB), bencenotribenzoato (BTB), metanotetrabenzoato (MTB), adamantanotetrabenzoato o ácidos dihidroxitereftálicos como el ácido 2,5-dihidroxitereftálico (DHBDC), ácido tetrahidropireno-2,7-dicarboxílico (HPDC), ácido bifeniltetracarboxílico (BPTC), 1,3-bis (4-piridil) propano (BPP).
- 5 Se da preferencia muy particular al uso, entre otros, de 2-metilimidazol, 2-etilimidazol, ácido ftálico, ácido isoftálico, ácido tereftálico, ácido 2,6-naftalenodicarboxílico, ácido 1,4-naftalenodicarboxílico, ácido 1,5-naftalenodicarboxílico, ácido 1,2,3-bencenotricarboxílico, ácido 1,2,4-bencenotricarboxílico, ácido 1,3,5-bencenotricarboxílico, ácido 1,2,4,5-bencenotetracarboxílico, amino BDC, TEDA, ácido fumárico, bifenildicarboxilato, ácido 1,5- y 2,6-naftalenodicarboxílico, ácido terc-butilisoftálico, ácido dihidroxibenzoico, BTB, HPDC, BPTC, BPP, ácido fumárico.
- 10 Particularmente preferidos son 1,3,5-BTC, ácido fumárico, 2-metilimidazol.
- Además de estos compuestos orgánicos al menos bidentados, la estructura organometálica también puede comprender uno o más ligandos monodentados y/o uno o más ligandos al menos bidentados que no se derivan de un ácido dicarboxílico, tricarboxílico o tetracarboxílico.
- Además de estos compuestos orgánicos al menos bidentados, la estructura organometálica también puede comprender uno o más ligandos monodentados.
- 20 Los compuestos orgánicos al menos bidentados preferidos son ácido fórmico, ácido acético o un ácido dicarboxílico o policarboxílico alifático; por ejemplo, ácido malónico, ácido fumárico o similares; en particular, ácido fumárico, o se derivan de estos.
- Para los fines de la presente invención, el término "derivado" significa que el al menos un compuesto orgánico al menos bidentado está presente en forma parcial o totalmente desprotonada. Además, el término "derivado" significa que el al menos un compuesto orgánico al menos bidentado puede tener sustituyentes adicionales. Por lo tanto, un ácido dicarboxílico o policarboxílico puede tener no solo la función de ácido carboxílico sino también uno o más sustituyentes independientes tales como grupos amino, hidroxilo, metoxi, halógeno o metilo. Se da preferencia a que no esté presente ningún sustituyente adicional. Para los fines de la presente invención, el término "derivado" también significa que la función del ácido carboxílico puede estar presente como un análogo de azufre. Los análogos de azufre son -C(=O)SH y su tautómero y -C(S)SH.
- 25 Los disolventes adecuados para preparar la estructura organometálica son, entre otros, etanol, dimetilformamida, tolueno, metanol, clorobenceno, dietilformamida, sulfóxido de dimetilo, agua, peróxido de hidrógeno, metilamina, solución de hidróxido de sodio, éter de N-metilpirrolidona, acetonitrilo, cloruro de bencilo, trietilamina, etilenglicol y sus mezclas. Otros iones metálicos, compuestos orgánicos al menos bidentados y disolventes para la preparación de MOF se describen, entre otros, en los documentos US-A 5,648,508 o DE-A 101 11 230.
- 35 El tamaño de poro de la estructura organometálica puede controlarse mediante la selección del ligando apropiado y/o el compuesto orgánico al menos bidentado. En general, cuanto mayor es el compuesto orgánico, mayor es el tamaño de poro. El tamaño de poro es preferiblemente de 0,2 nm a 30 nm; de modo particularmente preferible se encuentra en el intervalo de 0,3 nm a 3 nm, basado en el material cristalino.
- 40 A continuación, se dan ejemplos de estructuras organometálicas. Además de la designación de la estructura, también se indican el metal y el ligando al menos bidentado, el disolvente y los parámetros celulares (ángulos  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\gamma$  y las dimensiones A, B y C en Å). Estos últimos fueron determinados por difracción de rayos X.



MOF-n	Proporción molar de componentes M+L	Disolventes	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	a	b	c	Grupo de espacio
MOF-0	$Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ $H_3(BTC)$	etanol	90	90	120	16,711	16,711	14,189	$P6(3)Mcm$
MOF-2	$Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ (0,246 mmol) $H_2(BDC)$ 0,241 mmol)	DMF tolueno	90	102,8	90	6,718	15,49	12,43	$P2(1)h$
MOF-3	$Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ (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	$Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ (1,00 mmol) $H_3(BTC)$ (0,5 mmol)	etanol	90	90	90	14,728	14,728	14,728	$P2(1)3$
MOF-5	$Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ (2,22 mmol) $H_2(BDC)$ (2,17 mmol)	DMF clorobenceno	90	90	90	25,669	25,669	25,669	Fm-3m
MOF-38	$Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ (0,27 mmol) $H_3(BTC)$ (0,15 mmol)	DMF clorobenceno	90	90	90	20,657	20,657	17,84	l4cm
MOF-31 $Zn(ADC)_2$	$Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ 0,4 mmol $H_2(ADC)$ 0,8 mmol	etanol	90	90	90	10,821	10,821	10,821	$Pn(-3)m$
MOF-12 $Zn_2(ATC)$	$Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ 0,3 mmol $H_4(ATC)$ 0,15 mmol	etanol	90	90	90	15,745	16,907	18,167	Pbca

(continuación)

MOF-n	Proporción molar de componentes M+L	Disolventes	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	a	b	c	Grupo de espacio
MOF-20 ZnNDC	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •6H <sub>2</sub> O 0,37 mmol H <sub>2</sub> NDC 0,36 mmol	DMF clorobenceno	90	92,13	90	8,13	16,444	12,807	P2(1)c
MOF-37	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •6H <sub>2</sub> O 0,2 mmol H <sub>2</sub> NDC 0,2 mmol	DEF clorobenceno	72,38	83,16	84,33	9,952	11,576	15,556	P-1
MOF-8 Tb2 (ADC)	Tb(NO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> •5H <sub>2</sub> O 0,10 mmol H <sub>2</sub> ADC 0,20 mmol	DMSO MeOH	90	115,7	90	19,83	9,822	19,183	C2/c
MOF-9 Tb2 (ADC)	Tb(NO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> •5H <sub>2</sub> O 0,08 mmol H <sub>2</sub> ADB 0,12 mmol	DMSO	90	102,0 9	90	27,056	16,795	28,139	C2/c
MOF-6	Tb(NO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> •H <sub>2</sub> O 0,30 mmol H <sub>2</sub> (BDC) 0,30 mmol	DMF MeOH	90	91,28	90	17,599	19,996	10,545	P21/c
MOF-7	Tb(NO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> •H <sub>2</sub> O 0,15 mmol H <sub>2</sub> (BDC) 0,15 mmol	H <sub>2</sub> O	102,3	91,12	101,5	6,142	10,069	10,096	P-1
MOF-69A	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •6H <sub>2</sub> O 0,083 mmol 4,4'-BPDC 0,041 mmol	DEF H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> MeNH <sub>2</sub>	90	111,6	90	23,12	20,92	12	C2/c

(continuación)

MOF-n	Proporción molar de componentes M+L	Disolventes	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	a	b	c	Grupo de espacio
MOF-69B	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •6H <sub>2</sub> O 0,083 mmol 2,6-NCD 0,041 mmol	DEF H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> MeNH <sub>2</sub>	90	95,3	90	20,17	18,55	12,16	C2/c
MOF-11 Cu <sub>2</sub> (AT C)	Cu(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •2,5H <sub>2</sub> O 0,47 mmol H <sub>2</sub> ATC 0,22 mmol	H <sub>2</sub> O	90	93,86	90	12,987	11,22	11,336	C2/c
MOF-11 Cu <sub>2</sub> (AT C) dehidr.			90	90	90	8,4671	8,4671	14,44	P42/ mmc
MOF-14 Cu <sub>3</sub> (BTB)	Cu(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •2,5H <sub>2</sub> O 0,28 mmol H <sub>3</sub> BTB 0,052 mmol	H <sub>2</sub> O DMF EtOH	90	90	90	26,946	26,946	26,946	Im-3
MOF-32 Cd(ATC )	Cd(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •4H <sub>2</sub> O 0,24 mmol H <sub>4</sub> ATC 0,10 mmol	H <sub>2</sub> O NaOH	90	90	90	13,468	13,468	13,468	P(-4)3m
MOF-33 Zr <sub>2</sub> (ATB)	ZnCl <sub>2</sub> 0,15 mmol H <sub>4</sub> ATB 0,02 mmol	H <sub>2</sub> O DMF EtOH	90	90	90	19,561	15,255	23,404	Imma
MOF-34 Ni(ATC)	Ni(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •6H <sub>2</sub> O 0,24 mmol H <sub>4</sub> ATC 0,10 mmol	H <sub>2</sub> O NaOH	90	90	90	10,066	11,163	19,201	P212121
MOF-36 Zr <sub>2</sub> (MTB)	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •4H <sub>2</sub> O 0,20 mmol H <sub>4</sub> MTB 0,04 mmol	H <sub>2</sub> O DMF	90	90	90	15,745	16,907	18,167	Pbca

(continuación)

MOF-n	Proporción molar de componentes M+L	Disolventes	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	a	b	c	Grupo de espacio
MOF-39 Zn <sub>3</sub> O(H BTB)	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·4H <sub>2</sub> O 0,27 mmol H <sub>3</sub> BTB 0,07 mmol	H <sub>2</sub> O DMF EtOH	90	90	90	17,158	21,591	25,308	Pnma
NO305	FeCl <sub>2</sub> ·4H <sub>2</sub> O 5,03 mmol ácido fórmico 86,90 mmol	DMF	90	90	120	8,2692	8,2692	63,566	R-3c
NO306 A	FeCl <sub>2</sub> ·4H <sub>2</sub> O 5,03 mmol ácido fórmico 86,90 mmol	DEF	90	90	90	9,9364	18,374	18,374	Pbcn
NO29 MOF-0 similar	Mn(Ac) <sub>2</sub> ·4H <sub>2</sub> O 0,46 mmol H <sub>3</sub> BTC 0,69 mmol	DMF	120	90	90	14,16	33,521	33,521	P-1
BPR48 A2	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·6H <sub>2</sub> O 0,012 mmol H <sub>2</sub> BDC 0,012 mmol	DMSO tolueno	90	90	90	14,5	17,04	18,02	Pbca
BPR69 B1	Cd(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> 4H <sub>2</sub> O 0,0212 mmol H <sub>2</sub> BDC 0,0428 mmol	DMSO	90	98,76	90	14,16	15,72	17,66	Cc
BPR92 A2	Co(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·6H <sub>2</sub> O 0,018 mmol H <sub>2</sub> BDC 0,018 mmol	NMP	106,3	107,63	107,2	7,5308	10,942	11,025	P1

(continuación)

MOF-n	Proporción molar de componentes M+L	Disolventes	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	a	b	c	Grupo de espacio
BPR95 C5	Cd(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·4H <sub>2</sub> O 0,012 mmol H <sub>2</sub> BDC 0,36 mmol	NMP	90	112,8	90	14,460	11,085	15,829	P2(1)/n
Cu C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> O <sub>6</sub>	Cu(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·2,5H <sub>2</sub> O 0,370 mmol H <sub>2</sub> BDC(OH) <sub>2</sub> 0,37 mmol	DMF clorobenceno	90	105,2 9	90	15,259	14,816	14,13	P2(1)/c
M(BTC) similar a MOF-0	Cd(SO <sub>4</sub> ) H <sub>2</sub> O 0,055 mmol H <sub>3</sub> BTC 0,037 mmol	DMF	como MOF-0						
Tb(C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> O <sub>6</sub> )	Tb(NO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> ·5H <sub>2</sub> O 0,370 mmol H <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> O <sub>6</sub> ) 0,56 mmol	DMF clorobenceno	104,6	107,9	97,14 7	10,491	10,981	12,541	P-1
Zn (C <sub>2</sub> O <sub>4</sub> )	ZnCl <sub>2</sub> 0,370 mmol oxalic acid 0,37 mmol	DMF clorobenceno	90	120	90	9,4168	9,4168	8,464	P(-3)1 m
Co(CHO)	Co(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·5H <sub>2</sub> 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 <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·4H <sub>2</sub> O 0,185 mmol ácido fórmico 0,185 mmol	DMF	90	120	90	8,5168	8,5168	22,674	R-3c

(continuación)

MOF-n	Proporción molar de componentes M+L	Disolventes	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	a	b	c	Grupo de espacio
Cu(C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> O <sub>4</sub> )	Cu(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •2,5H <sub>2</sub> O 0,043 mmol ácido malónico 0,192 mmol	DMF	90	90	90	8,366	8,366	11,919	P43
Zn <sub>6</sub> (NDC) <sub>4</sub> MOF-48	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •6H <sub>2</sub> O 0,097 mmol 14 NDC 0,069 mmol	DMF clorobenceno H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	90	95,90 2	90	19,504	16,482	14,64	C2/m
MOF-47	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> 6H <sub>2</sub> O 0,185 mmol H <sub>2</sub> (BDC)(CH <sub>3</sub> ) <sub>4</sub> 0,185 mmol	DMF clorobenceno H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	90	92,55	90	11,303	16,029	17,535	P2(1)yc
MO25	Cu(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •2,5H <sub>2</sub> O 0,084 mmol BPhDC 0,085 mmol	DMF	90	112,0	90	23,880	16,834	18,389	P2(1)yc
Cu-Thio	Cu(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •2,5H <sub>2</sub> O 0,084 mmol ácido tiofenodicarboxílico 0,085 mmol	DEF	90	113,6	90	15,4747	14,514	14,032	P2(1)yc
CIBDC1	Cu(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •2,5H <sub>2</sub> O 0,084 mmol H <sub>2</sub> (BDC)(Cl <sub>2</sub> ) 0,085 mmol	DMF	90	105,6	90	14,911	15,622	18,413	C2/c
MOF-101	Cu(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •2,5H <sub>2</sub> O 0,084 mmol BrBDC 0,085 mmol	DMF	90	90	90	21,607	20,607	20,073	Fm3m

(continuación)

MOF-n	Proporción molar de componentes M+L	Disolventes	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	a	b	c	Grupo de espacio
Zn <sub>3</sub> (BT C) <sub>2</sub>	ZnCl <sub>2</sub> 0,033 mmol H <sub>3</sub> BTC 0,033 mmol	DMF EtOH base agregada	90	90	90	26,572	26,572	26,572	Fm-3m
MOF-j	Co(CH <sub>3</sub> CO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> •4H <sub>2</sub> O (1,65 mmol) H <sub>3</sub> (BZC) (0,95 mmol)	H <sub>2</sub> O	90	112,0	90	17,482	12,963	6,559	C2
MOF-n	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •6H <sub>2</sub> O H <sub>3</sub> (BTC)	etanol	90	90	120	16,711	16,711	14,189	P6(3)ymcm
PbBDC	Pb(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> (0,181 mmol) H <sub>2</sub> (BDC) (0,181 mmol)	DMF etanol	90	102,7	90	8,3639	17,991	9,9617	P2(1)yn
Znhex	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •6H <sub>2</sub> O (0,171 mmol) H <sub>3</sub> BTB (0,114 mmol)	DMF p-xileno etanol	90	90	120	37,116 5	37,117	30,019	P3(1)c
AS16	FeBr <sub>2</sub> 0,927 mmol H <sub>2</sub> (BDC) 0,927 mmol	DMF anhidra	90	90,13	90	7,2595	8,7894	19,484	P2(1)c
AS27-2	FeBr <sub>2</sub> 0,927 mmol H <sub>3</sub> (BDC) 0,464 mmol	DMF anhidra	90	90	90	26,735	26,735	26,735	Fm3m
AS32	FeCl <sub>3</sub> 1,23 mmol H <sub>2</sub> (BDC) 1,23 mmol	DMF anhidra etanol	90	90	120	12,535	12,535	18,479	P6(2)c

(continuación)

MOF-n	Proporción molar de componentes M+L	Disolventes	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	a	b	c	Grupo de espacio
MOF-47	$Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ 0,185 mmol $H_2(BDC)(CH_3)_4$ 0,185 mmol	DMF clorobenceno $H_2O_2$	90	92,55	90	11,303	16,029	17,535	P2(1)yc
MO25	$Cu(NO_3)_2 \cdot 2,5H_2O$ 0,084 mmol BPhDC 0,085 mmol	DMF	90	112,0	90	23,880	16,834	18,389	P2(1)yc
Cu-Thio	$Cu(NO_3)_2 \cdot 2,5H_2O$ 0,084 mmol ácido tifenodicarboxílico 0,085 mmol	DEF	90	113,6	90	15,474 7	14,514	14,032	P2(1)yc
CIBDC1	$Cu(NO_3)_2 \cdot 2,5H_2O$ 0,084 mmol $H_2(BDCCl_2)$ 0,085 mmol	DMF	90	105,6	90	14,911	15,622	18,413	C2c
MOF-101	$Cu(NO_3)_2 \cdot 2,5H_2O$ 0,084 mmol BrBDC 0,085 mmol	DMF	90	90	90	21,607	20,607	20,073	Fm3m
Zns(BT C) $\beta$	$ZnCl_2$ 0,033 mmol $H_3BTC$ 0,033 mmol	DMF EtOH base agregada	90	90	90	26,572	26,572	26,572	Fm-3m
MOF-j	$Co(CH_3CO_2)_2 \cdot 4H_2O$ (1,65 mmol) $H_3(BZC)$ (0,95 mmol)	$H_2O$	90	112,0	90	17,482	12,963	6,559	C2
MOF-n	$Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ $H_3(BTC)$	etanol	90	90	120	16,711	16,711	14,189	P6(3)mc m



(continuación)

MOF-n	Proporción molar de componentes M+L	Disolventes	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	a	b	c	Grupo de espacio
PbBDC	Pb(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> (0,181 mmol) H <sub>2</sub> (BDC) (0,181 mmol)	DMF etanol	90	102,7	90	8,3639	17,991	9,9617	P2(1)n
Znhex	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·6H <sub>2</sub> O (0,171 mmol) H <sub>3</sub> BTB (0,114 mmol)	DMF p-xileno etanol	90	90	120	37,116 5	37,117	30,019	P3(1)c
AS16	FeBr <sub>2</sub> 0,927 mmol H <sub>2</sub> (BDC) 0,927 mmol	DMF anhidra	90	90,13	90	7,2595	8,7894	19,484	P2(1)c
AS27-2	FeBr <sub>2</sub> 0,927 mmol H <sub>3</sub> (BDC) 0,464 mmol	DMF anhidra	90	90	90	26,735	26,735	26,735	Fm3m
AS32	FeCl <sub>3</sub> 1,23 mmol H <sub>2</sub> (BDC) 1,23 mmol	DMF anhidra etanol	90	90	120	12,535	12,535	18,479	P6(2)c
AS54-3	FeBr <sub>2</sub> 0,927 BPDC 0,927 mmol	DMF anhidra n-propanol	90	109,9 8	90	12,019	15,286	14,399	C2
AS61-4	FeBr <sub>2</sub> 0,927 mmol m-BDC 0,927 mmol	piridina anhidra	90	90	120	13,017	13,017	14,896	P6(2)c

(continuación)

MOF-n	Proporción molar de componentes M+L	Disolventes	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	a	b	c	Grupo de espacio
AS68-7	FeBr <sub>2</sub> 0,927 mmol m-BDC 1,204 mmol	DMF anhídrido pindina	90	90	90	18,340 7	10,036	18,039	Pca21
Zn(ADC)	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •6H <sub>2</sub> O 0,37 mmol H <sub>2</sub> (ADC) 0,36 mmol	DMF clorobenceno	90	99,85	90	16,764	9,349	9,635	C2/c
MOF-12 Zn <sub>2</sub> (ATC)	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •6H <sub>2</sub> O 0,30 mmol H <sub>4</sub> (ATC) 0,15 mmol	etanol	90	90	90	15,745	16,907	18,167	Pbca
MOF-20 ZnNDC	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •6H <sub>2</sub> O 0,37 mmol H <sub>2</sub> NDC 0,36 mmol	DMF clorobenceno	90	92,13	90	8,13	16,444	12,807	P2(1)yc
MOF-37	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •6H <sub>2</sub> O 0,20 mmol H <sub>2</sub> 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 <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •6H <sub>2</sub> O H <sub>2</sub> NDC	DMSO	68,08	75,33	88,31	8,631	10,207	13,114	P-1
Zn(NDC)	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •6H <sub>2</sub> O H <sub>2</sub> NDC		90	99,2	90	19,289	17,628	15,052	C2/c
Zn(HPDC)	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •4H <sub>2</sub> O 0,23 mmol H <sub>2</sub> (HPDC) 0,05 mmol	DMF H <sub>2</sub> O	107,9	105,0 6	94,4	8,326	12,085	13,767	P-1
Co(HPDC)	Co(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •6H <sub>2</sub> O 0,21 mmol H <sub>2</sub> (HPDC) 0,06 mmol	DMF H <sub>2</sub> O/etanol	90	97,69	90	29,677	9,63	7,981	C2/c

(continuación)

MOF-n	Proporción molar de componentes M+L	Disolventes	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	a	b	c	Grupo de espacio
Zn <sub>3</sub> (PDC)2,5	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •4H <sub>2</sub> O 0,17 mmol H <sub>2</sub> (HPDC) 0,05 mmol	DMF/ ClBz H <sub>2</sub> O/ TEA	79,34	80,8	85,83	8,564	14,046	26,428	P-1
Cd <sub>2</sub> (TPDC)2	Cd(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •4H <sub>2</sub> O 0,06 mmol H <sub>2</sub> (HPDC) 0,06 mmol	metanol/ CHP H <sub>2</sub> O	70,59	72,75	87,14	10,102	14,412	14,964	P-1
Tb(PDC)1,5	Tb(NO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> •5H <sub>2</sub> O 0,21 mmol H <sub>2</sub> (PDC) 0,034 mmol	DMF H <sub>2</sub> O/ etanol	109,8	103,6	100,1	9,829	12,11	14,628	P-1
ZnDBP	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •6H <sub>2</sub> O 0,05 mmol fosfato de dibencilo 0,10 mmol	MeOH	90	93,67	90	9,254	10,762	27,93	P2/h
Zn3(BP DC)	ZnBr <sub>2</sub> 0,021 mmol 4,4'-BPDC 0,005 mmol	DMF	90	102,7	90	11,49	14,79	19,18	P21/h
CdBDC	Cd(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •4H <sub>2</sub> O 0,100 mmol H <sub>2</sub> (BDC) 0,401 mmol	DMF Na <sub>2</sub> SiO <sub>3</sub> (aq)	90	95,85	90	11,2	11,11	16,71	P21/h
Cd-mBDC	Cd(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •4H <sub>2</sub> O 0,009 mmol H <sub>2</sub> (mBDC) 0,018 mmol	DMF MeNH <sub>2</sub>	90	101,1	90	13,69	18,25	14,91	C2/c

(continuación)

MOF-n	Proporción molar de componentes M+L	Disolventes	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	a	b	c	Grupo de espacio
Zn <sub>4</sub> OB NDC	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •6H <sub>2</sub> O 0,041 mmol BNDc	DEF MeNH <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	90	90	90	22,35	26,05	59,56	Fm $\bar{3}$ mm
Eu(TCA)	Eu(NO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> •6H <sub>2</sub> O 0,14 mmol TCA	DMF clorobenceno	90	90	90	23,325	23,325	23,325	Pm-3n
Tb(TCA)	Tb(NO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> •6H <sub>2</sub> O 0,069 mmol TCA	DMF clorobenceno	90	90	90	23,272	23,272	23,372	Pm-3n
Formiato	Ce(NO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> •6H <sub>2</sub> O 0,138 mmol ácido fórmico 0,43 mmol	H <sub>2</sub> O etanol	90	90	120	10,668	10,667	4,107	R-3m
	FeCl <sub>2</sub> •4H <sub>2</sub> O 5,03 mmol ácido fórmico 86,90 mmol	DMF	90	90	120	8,2692	8,2692	63,566	R-3c
	FeCl <sub>2</sub> •4H <sub>2</sub> O 5,03 mmol ácido fórmico 86,90 mmol	DEF	90	90	90	9,9364	18,374	18,374	Pbcn
	FeCl <sub>2</sub> •4H <sub>2</sub> O 5,03 mmol ácido fórmico 86,90 mmol	DEF	90	90	90	8,335	8,335	13,34	P-31 c

(continuación)

MOF-n	Proporción molar de componentes M+L	Disolventes	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	a	b	c	Grupo de espacio
NO330	$\text{FeCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 0,50 mmol ácido fórmico 8,69 mmol	formamida	90	90	90	8,7749	11,655	8,3297	Pnma
NO332	$\text{FeCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 0,50 mmol ácido fórmico 8,69 mmol	DIP	90	90	90	10,0313	18,808	18,355	Pbcn
NO333	$\text{FeCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 0,50 mmol ácido fórmico 8,69 mmol	DBF	90	90	90	45,2754	23,861	12,441	Cmcm
NO335	$\text{FeCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 0,50 mmol ácido fórmico 8,69 mmol	CHF	90	91,37 2	90	11,5964	10,187	14,945	P21/n
NO336	$\text{FeCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 0,50 mmol ácido fórmico 8,69 mmol	MFA	90	90	90	11,7945	48,843	8,4136	Pbcm
NO13	$\text{Mn}(\text{Ac})_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 0,46 mmol ácido benzoico 0,92 mmol bipiridina 0,46 mmol	etanol	90	90	90	18,66	11,762	9,418	Pbcn
NO29 similar a MOF-0	$\text{Mn}(\text{Ac})_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 0,46 mmol $\text{H}_3\text{BTC}$ 0,69 mmol	DMF	120	90	90	14,16	33,521	33,521	P-1

(continuación)

MOF-n	Proporción molar de componentes M+L	Disolventes	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	a	b	c	Grupo de espacio
Mn(hfac) <sub>2</sub> (O <sub>2</sub> CC <sub>6</sub> H <sub>5</sub> )	Mn(Ac) <sub>2</sub> •4H <sub>2</sub> O 0,46 mmol Hfac 0,92 mmol bipiridina 0,46 mmol	ether	90	95,32	90	9,572	17,162	14,041	C2/c
BPR43G2	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •6H <sub>2</sub> O 0,0288 mmol H <sub>2</sub> BDC 0,0072 mmol	DMF CH <sub>3</sub> CN	90	91,37	90	17,96	6,38	7,19	C2/c
BPR48A2	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •6H <sub>2</sub> O 0,012 mmol H <sub>2</sub> BDC 0,012 mmol	DMSO tolueno	90	90	90	14,5	17,04	18,02	Pbca
BPR49B1	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •6H <sub>2</sub> O 0,024 mmol H <sub>2</sub> BDC 0,048 mmol	DMSO metanol	90	91,17 2	90	33,181	9,824	17,884	C2/c
BPR56E1	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •6H <sub>2</sub> O 0,012 mmol H <sub>2</sub> BDC 0,024 mmol	DMSO n-propanol	90	90,09 6	90	14,5873	14,153	17,183	P2(1)yn
BPR68D10	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> 6H <sub>2</sub> O 0,0016 mmol H <sub>3</sub> BTC 0,0064 mmol	DMSO benceno	90	95,31 6	90	10,0627	10,17	16,413	P2(1)yc
BPR69B1	Cd(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •4H <sub>2</sub> O 0,0212 mmol H <sub>2</sub> BDC 0,0428 mmol	DMSO	90	98,76	90	14,16	15,72	17,66	Cc

(continuación)

MOF-n	Proporción molar de componentes M+L	Disolventes	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	a	b	c	Grupo de espacio
BPR73E4	$\text{Cd}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 0,006 mmol $\text{H}_2\text{BDC}$ 0,003 mmol	DMSO tolueno	90	92,324	90	8,7231	7,0568	18,438	P2(1)h
BPR76D5	$\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ 0,0009 mmol $\text{H}_2\text{BzPDC}$ 0,0036 mmol	DMSO	90	104,17	90	14,4191	6,2599	7,0611	Pc
BPR80B5	$\text{Cd}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 0,018 mmol $\text{H}_2\text{BDC}$ 0,036 mmol	DMF	90	115,11	90	28,049	9,184	17,837	C2/c
BPR80H5	$\text{Cd}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 0,027 mmol $\text{H}_2\text{BDC}$ 0,027 mmol	DMF	90	119,06	90	11,474 6	6,2151	17,268	P2/c
BPR82C6	$\text{Cd}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 0,0068 mmol $\text{H}_2\text{BDC}$ 0,202 mmol	DMF	90	90	90	9,7721	21,142	27,77	Fdd2
BPR86C3	$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ 0,0025 mmol $\text{H}_2\text{BDC}$ 0,075 mmol	DMF	90	90	90	18,3449	10,031	17,983	Pca2(1)
BPR86H6	$\text{Cd}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ 0,010 mmol $\text{H}_2\text{BDC}$ 0,010 mmol	DMF	80,98	89,69	83,412	9,8752	10,263	15,362	P-1
	$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	NMP	106,3	107,63	107,2	7,5308	10,942	11,025	P1

(continuación)

MOF-n	Proporción molar de componentes M+L	Disolventes	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	a	b	c	Grupo de espacio
BPR95A2	$Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ 0,012 mmol $H_2BDC$ 0,012 mmol	NMP	90	102,9	90	7,4502	13,767	12,713	P2(1)yc
$Cu_6F_4O_4$	$Cu(NO_3)_2 \cdot 2,5H_2O$ 0,370 mmol $H_2BDC(OH)_2$ 0,37 mmol	DMF clorobenceno	90	98,834	90	10,9675	24,43	22,553	P2(1)h
Fe Formic	$FeCl_2 \cdot 4H_2O$ 0,370 mmol ácido fórmico 0,37 mmol	DMF	90	91,543	90	11,495	9,963	14,48	P2(1)h
Mg Formic	$Mg(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ 0,370 mmol ácido fórmico 0,37 mmol	DMF	90	91,359	90	11,383	9,932	14,656	P2(1)h
$MgC_8H_4O_6$	$Mg(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ 0,370 mmol $H_2BDC(OH)_2$ 0,37 mmol	DMF	90	96,624	90	17,245	9,943	9,273	C2/c
$Zn C_2H_4BD C MOF-38$	$ZnCl_2$ 0,44 mmol CBBDC 0,261 mmol	DMF	90	94,714	90	7,3386	16,834	12,52	P2(1)h
MOF-49	$ZnCl_2$ 0,44 mmol m-BDC 0,261 mmol	DMF $CH_3CN$	90	93,459	90	13,509	11,984	27,099	P2/c



(continuación)

MOF-n	Proporción molar de componentes M+L	Disolventes	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	a	b	c	Grupo de espacio
MOF-26	Cu(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •5H <sub>2</sub> O 0,084 mmol DCPE 0,085 mmol	DMF	90	95,607	90	20,8797	16,017	26,176	P2(1)yn
MOF-112	Cu(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •2,5H <sub>2</sub> 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 <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •2,5H <sub>2</sub> O 0,084 mmol KDB 0,085 mmol	DMF	90	111,98	90	23,8801	16,834	18,389	P2(1)yc
MOF-111	Cu(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •2,5H <sub>2</sub> 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 <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •2,5H <sub>2</sub> O 0,084 mmol ácido tiofenodicarboxílico 0,085 mmol	DMF	90	90	120	20,0652	20,065	20,747	R-3/m
MOF-107	Cu(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •2,5H <sub>2</sub> O 0,084 mmol ácido tiofenodicarboxílico. 0,085 mmol	DEF	104,8	97,075	95,206	11,032	18,067	18,452	P-1
MOF-108	Cu(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> •2,5H <sub>2</sub> O 0,084 mmol ácido tiofenodicarboxílico 0,085 mmol	DBF/metanol	90	113,63	90	15,4747	14,514	14,032	C2/c

(continuación)

MOF-n	Proporción molar de componentes M+L	Disolventes	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	a	b	c	Grupo de espacio
MOF-102	$\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$ 0,084 mmol $\text{H}_2(\text{BDCCl}_2)$ 0,085 mmol	DMF	91,63	106,24	112,01	9,3845	10,794	10,831	P-1
Clbdc1	$\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$ 0,084 mmol $\text{H}_2(\text{BDCCl}_2)$ 0,085 mmol	DEF	90	105,56	90	14,911	15,622	18,413	P-1
$\text{Cu}(\text{NMOP})$	$\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$ 0,084 mmol NBDC 0,085 mmol	DMF	90	102,37	90	14,9238	18,727	15,529	P2(1)ym
Tb(BTC)	$\text{Tb}(\text{NO}_3)_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ 0,033 mmol $\text{H}_3\text{BTC}$ 0,033 mmol	DMF	90	106,02	90	18,6986	11,368	19,721	
$\text{Zn}_3(\text{BTC})_2$ Hork	$\text{ZnCl}_2$ 0,033 mmol $\text{H}_3\text{BTC}$ 0,033 mmol	DMF etanol	90	90	90	26,572	26,572	26,572	Fm-3m
$\text{Zn}_4\text{O}(\text{NDC})$	$\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 0,066 mmol 14NDC 0,066 mmol	DMF etanol	90	90	90	41,5594	18,818	17,574	aba2
CdTDC	$\text{Cd}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 0,014 mmol tiofeno 0,040 mmol DABCO 0,020 mmol	DMF H <sub>2</sub> O	90	90	90	12,173	10,485	7,33	Pmma

(continuación)

MOF-n	Proporción molar de componentes M+L	Disolventes	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	a	b	c	Grupo de espacio
IRMOF-2	$\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 0,160 mmol o-Br-BDC 0,60 mmol	DEF	90	90	90	25,772	25,772	25,772	Fm-3m
IRMOF-3	$\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 0,20 mmol $\text{H}_2\text{N-BDC}$ 0,60 mmol	DEF etanol	90	90	90	25,747	25,747	25,747	Fm-3m
IRMOF-4	$\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 0,11 mmol $[\text{C}_3\text{H}_7\text{O}]_2\text{-BDC}$ 0,48 mmol	DEF	90	90	90	25,849	25,849	25,849	Fm-3m
IRMOF-5	$\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 0,13 mmol $[\text{C}_5\text{H}_{11}\text{O}]_2\text{-BDC}$ 0,50 mmol	DEF	90	90	90	12,882	12,882	12,882	Pm-3m
IRMOF-6	$\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 0,20 mmol $[\text{C}_2\text{H}_4\text{-BDC}]$ 0,60 mmol	DEF	90	90	90	25,842	25,842	25,842	Fm-3m
IRMOF-7	$\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 0,07 mmol 1,4NDC 0,20 mmol	DEF	90	90	90	12,914	12,914	12,914	Pm-3m
IRMOF-8	$\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 0,55 mmol 2,6NDC 0,42 mmol	DEF	90	90	90	30,092	30,092	30,092	Fm-3m

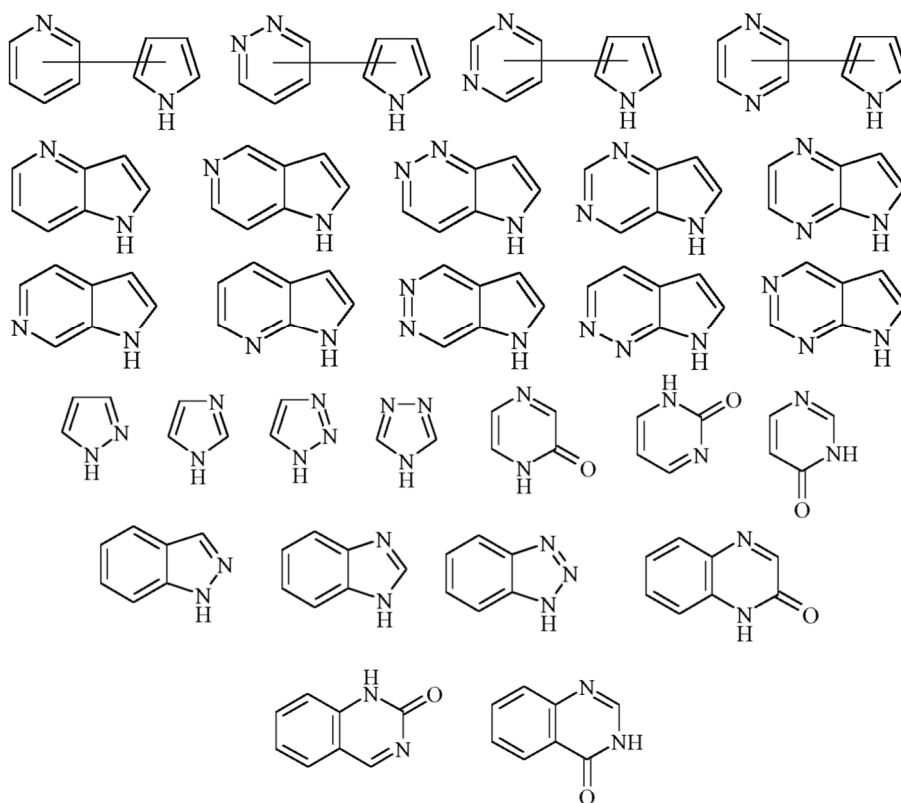
(continuación)

MOF-n	Proporción molar de componentes M+L	Disolventes	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	a	b	c	Grupo de espacio
IRMOF-9	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·4H <sub>2</sub> O 0,05 mmol BPDC 0,42 mmol	DEF	90	90	90	17,147	23,322	25,255	Pnnm
IRMOF-10	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·4H <sub>2</sub> O 0,02 mmol BPDC 0,012 mmol	DEF	90	90	90	34,281	34,281	34,281	Fm-3m
IRMOF-11	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·4H <sub>2</sub> O 0,05 mmol HPDC 0,20 mmol	DEF	90	90	90	24,822	24,822	56,734	R-3m
IRMOF-12	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·4H <sub>2</sub> O 0,017 mmol HPDC 0,12 mmol	DEF	90	90	90	34,281	34,281	34,281	Fm-3m
IRMOF-13	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·4H <sub>2</sub> O 0,048 mmol PDC 0,31 mmol	DEF	90	90	90	24,822	24,822	56,734	R-3m
IRMOF-14	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·4H <sub>2</sub> O 0,17 mmol PDC 0,12 mmol	DEF	90	90	90	34,381	34,381	34,381	Fm-3m
IRMOF-15	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·4H <sub>2</sub> O 0,063 mmol TPDC 0,025 mmol	DEF	90	90	90	21,459	21,459	21,459	Im-3m

(continuación)

MOF-n	Proporción molar de componentes M+L	Disolventes	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	a	b	c	Grupo de espacio
IRMOF-16	Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ·4H <sub>2</sub> 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 naftalenodicarboxílico
- BDC ácido bencenodicarboxílico
- ATC ácido adamantanotetracarboxílico
- 5 BTC ácido bencenotricarboxílico
- BTB ácido bencenotribenzoico
- MTB ácido metanotetrabenzoico
- ATB ácido adamantanotetrabenzoico
- ADB ácido adamantanodibenzoico
- 10 Otros estructuras organometálicas son MOF-2 a 4, MOF-9, MOF-31 a 36, MOF-39, MOF-69 a 80, MOF103 a 106, MOF-122, MOF-125, MOF-150, MOF-177, MOF-178, MOF-235, MOF-236, MOF-500, MOF-501, MOF-502, MOF-505, IRMOF-1, IRMOF-61, IRMOF-13, IRMOF-51, MIL-17, MIL-45, MIL-47, MIL-53, MIL-59, MIL-60, MIL-61, MIL-63, MIL-68, MIL-79, MIL-80, MIL-83, MIL-85, CPL-1 a 2, SZL-1, que se describen en la literatura.
- 15 Las estructuras organometálicas particularmente preferidas son MIL-53, ácido Zn-tBu-isoftálico, Al-BDC, MOF-5, MOF-177, MOF-505, IRMOF-8, IRMOF-11, Cu-BTC, Al-NDC, Al-aminoBDC, Cu-BDC-TEDA, Zn-BDC-TEDA, Al-BTC, Cu-BTC, Al-NDC, Mg-NDC, fumarato de Al, 2-metilimidazolato de Zn, 2-aminoimidazolato de Zn, Cu-bifenildicarboxilato-TEDA, MOF-74, Cu-BPP, Sc-tereftalato. En particular, sin embargo, se da preferencia al formiato de Mg, acetato de Mg y sus mezclas debido a su respeto por el medio ambiente. Se prefieren particularmente el Cu-BTC, el fumarato de aluminio y el 2-metilimidazolato de zinc.
- 20 Como una forma preferida de realización particular, el al menos un compuesto orgánico al menos bidentado es un derivado de un ácido di, tri- o tetracarboxílico o sistemas de anillo sustituidos o no sustituidos:



y/o el al menos un ion metálico es un ion seleccionado del grupo de metales que consiste en Mg, Ca, Al, Y, Sc, Zr, Ti, V, Cr, Mo, Fe, Co, Cu, Ni, Zn y un lantánido.

Incluso más preferiblemente, el al menos un compuesto orgánico al menos bidentado se deriva de un ácido di-, tri- o tetracarboxílico o un imidazol y/o el al menos un ion metálico es un ion seleccionado del grupo de metales que consiste en Mg, Zr, Zn, Cu y Al (más preferiblemente Zn, Cu y Al).

5 El término "y/o" que combina dos opciones significa la primera opción o la segunda opción o ambas, la primera y la segunda opción.

Ejemplos de materiales de estructura organometálica adecuados son cobre-1,3,5-BTC, fumarato de aluminio y 2-metilimidazolato de zinc.

El componente aditivo (C) puede variar en función de la aplicación de la composición según la presente invención.

10 Los aditivos adecuados son conocidos por el profesional en la técnica. Preferiblemente, el componente aditivo comprende al menos un aditivo seleccionado del grupo que consiste en partículas conductoras eléctricas o térmicas, polímeros termoplásticos, líquidos, tensioactivos, dispersantes, antioxidantes, absorbentes UV/estabilizadores de luz, desactivadores de metales, agentes antiestáticos, agentes de refuerzo, materiales de relleno, agentes de nucleación, agentes antiempañantes, biocidas, plastificantes, lubricantes, emulsionantes, colorantes, pigmentos, aditivos reológicos, agentes desmoldantes, adherentes, catalizadores, agentes de control de flujo, abrillantadores ópticos, 15 agentes ignífugos, agentes antigoteo y agentes espumantes.

Los aditivos preferidos son partículas conductoras de electricidad.

20 Las partículas conductoras de electricidad adecuadas son metales, como titanio, circonio, hafnio, vanadio, niobio, tantalio, cromo, molibdeno, tungsteno, manganeso, renio, hierro, rutenio, osmio, cobalto, rodio, iridio, níquel, platino, paladio, cobre, plata, oro, zinc, aluminio, estaño, plomo, metales de la serie de los lantánidos; aleaciones de metales como el acero; materiales de carbono, como negro de humo, carbón activado, grafito, grafito expandido, grafito expansible, fibras de carbono, nanotubos de carbono, fullerenos, grafeno, carbón y coque.

Aditivos también preferidos son partículas térmicamente conductoras.

25 Las partículas conductoras térmicas adecuadas se seleccionan, por ejemplo, del grupo que consiste en metales, como los metales mencionados como partículas conductoras de electricidad, especialmente plata, cobre y hierro, nitruro de boro, nitruro de aluminio, óxido de aluminio y carburo de silicio.

Para un profesional en la materia está claro que una partícula eléctricamente conductora también puede usarse como partícula conductora térmica y viceversa, en función de sus propiedades materiales. Por lo tanto, una partícula conductora eléctrica o térmica, como un metal, puede usarse como partícula conductora eléctrica, como partícula conductora térmica o ambas, partícula conductora eléctrica y térmica.

30 También los aditivos preferidos son los termoplásticos.

35 Los termoplásticos (polímeros termoplásticos) son plásticos que producen materiales sólidos al enfriar una masa fundida de polímero y se ablandan al calentar, por lo que la conformación de un termoplástico es un procedimiento reversible. Normalmente están compuestos de moléculas de masa molar relativamente alta y forman la mayor parte de los plásticos. Ejemplos son los polímeros vinilaromáticos, como el poliestireno (incluido el poliestireno de alto impacto), polímeros de acrilonitrilo/butadieno/estireno (ABS) y de estireno/acrilonitrilo (SAN); poli(óxido de fenileno) (PPO), aleaciones de PPO-poliamida, polietersulfonas (PESU), polisulfonas (PSU), polifenilsulfonas (PPSU; PPSF), polietercetonas (PEK), polieteréter-cetonas (PEEK), poliolefinas, copolímeros de etileno/alcohol vinílico (EVOH), poliimidas, poliacetales, como polioximetilenos (POM); polieterimidaz, fluoropolímeros, polímeros de etileno y propileno fluorados (FEP), poli(fluoruro de vinilo), poli (fluoruro de vinilideno), poli (cloruro de vinilideno), poli(cloruro de vinilo), poli(acrilonitrilo), policarbonatos (PC), poliamidas, poliuretanos termoplásticos (TPU), poliésteres, tales como poli(tereftalato de butileno) (PBT), poli (tereftalato de etileno) (PET), poli(tereftalato de 1,3-propileno) (PPT), poli (naftalato de etileno) (PEN), y poli(tereftalato de ciclohexanodimetanol) (PCT); y polímeros cristalinos líquidos (LCP).

45 Los aditivos convencionales adecuados comprenden, por ejemplo, tensioactivos, dispersantes, antioxidantes, absorbentes de UV/estabilizadores de la luz, desactivadores de metales, agentes antiestáticos, agentes de refuerzo, materiales de relleno, agentes de nucleación, agentes antiempañantes, biocidas, plastificantes, lubricantes, emulsionantes, colorantes, pigmentos, aditivos reológicos, agentes desmoldantes, adherentes, catalizadores, agentes de control de flujo, abrillantadores ópticos, agentes ignífugos, agentes antigoteo y agentes espumantes y similares.

La elección de los aditivos adecuados depende en cada caso de la naturaleza específica de la película, así como del uso final de la película que se va a producir y puede ser establecida por un experto en la materia.

50 Más detalles sobre los aditivos mencionados anteriormente están disponibles en la literatura técnica, por ejemplo, *Plastics Additive Handbook*, 5a edición, H. Zweifel (Ed.), Hanser Publishers, Múnich, 2001.

Los materiales de relleno o agentes de refuerzo adecuados comprenden, por ejemplo, pigmentos, carbonato de calcio, silicatos, talco, mica, caolín, bentonita, sulfato de bario, óxidos metálicos e hidróxidos metálicos, harina de madera y

polvos finos o fibras de otros productos naturales y fibras sintéticas. Los ejemplos de materiales de relleno fibrosos o pulverulentos adecuados incluyen además fibras de carbono o fibras de vidrio en forma de telas de vidrio, esteras de vidrio o mechas de vidrio de filamento, vidrio picado, perlas de vidrio y wollastonita y similares.

- 5 Ejemplos de lubricantes son los jabones de metal, como el estearato de calcio, el estearato de magnesio o el estearato de zinc, el estearato de butilo, el estearato de palmitilo, el monoestearato de glicerol, la amida de etilen-bi-estearilo, la amida de metilen-bi-estearilo, la amida palmítica, el ácido esteárico, el ácido behénico, la cera de polietileno y similares.

Preferiblemente, el componente aditivo comprende negro de humo.

- 10 Los aspectos preferidos de la composición de la presente invención son los descritos para la película descrita anteriormente, en lo que respecta a los componentes (A), (B) y (C).

Un fluoropolímero capaz de fibrilación inducida por tratamiento se refiere a un fluoropolímero que ya está al menos parcial o totalmente fibrilado o puede fibrilarse en una etapa de tratamiento posterior.

Se describe un procedimiento para preparar una película, que comprende los pasos de

- (a) preparar una composición como se describe anteriormente;  
15 (b) convertir la composición en la película.

Preferiblemente, el paso (a) incluye un paso de fibrilación. Además, se prefiere que los componentes (A) y opcionalmente (C) se puedan mezclar con el componente (B) en forma no fibrilada y la mezcla resultante se somete a fibrilación del componente (B). Alternativamente, el componente fibrilado (B) se mezcla con los componentes (A) y opcionalmente (B). La conversión en el paso (b) puede comprender un paso de calandrado.

- 20 En general, es posible preparar la composición en la etapa (a) añadiendo el componente (B) en forma al menos parcialmente fibrilada. Además, es posible llevar a cabo el paso de fibrilación al menos parcialmente en el paso (a) y/o en el paso (b). Por lo tanto, es posible que la fibrilación ocurra antes del paso (a), durante el paso (a) y/o durante el paso (b).

- 25 Típicamente, la preparación de la composición en la etapa (a) incluye una etapa de mezcla. Un mezclador adecuado es cualquier mezclador o amasador que pueda someter la mezcla a fuerzas de cizallamiento suficientes para fibrilar el fluoropolímero a la temperatura de tratamiento deseada. Los mezcladores por lotes que están disponibles comercialmente a modo de ejemplo incluyen el mezclador de Banbury, el mezclador de Mogul, el mezclador de C. W. Brabender Prep y el mezclador de cuchilla sigma de C. W. Brabender. Los tipos de mezcladores conocidos son Ribbon Blender Mezclador en V, Procesador continuo, Mezclador de tornillo cónico, Mezclador de tornillo, Mezclador de doble cono, Mezclador planetario doble, mezclador de alta viscosidad, de contrarrotación, eje doble y triple, mezclador al vacío, estator de rotor de alto cizallamiento, mezcladores de dispersión, paleta, mezclador de chorro, mezcladores móviles, mezcladores de tambor, mezclador de banbury, mezclador de entremezclado, mezclador planetario.

- 35 El paso (b) se refiere a la conversión de la composición a la película. Los procedimientos adecuados para producir la película son, por ejemplo, extrusión de cilindro, extrusión de pistón, extrusión de película mediante extrusoras de tornillo simple o doble, extrusión seguida de un procedimiento de conformado (termoformado, conformado al vacío), calandrado, prensado, prensado en caliente, laminación, moldeo por inyección, moldeo por compresión, moldeo por soplado, rotomoldeo y similares. Opcionalmente, el paso de producción de película puede ser seguido por un paso de estiramiento para orientar el fluoropolímero fibrilado para una mayor resistencia.

- 40 Se describe el uso de una película de acuerdo con la presente invención como un sensor, especialmente un sensor de humedad, una película conductora, un dispositivo de almacenamiento o separación.

En principio, la película puede usarse como cualquier otra película adecuada.

- 45 En consecuencia, la película se puede usar como un sensor selectivo para vapores y gases químicos, como sensor óptico o como sensor de resonancia plasmónica de superficie como se describe por O. Shekhah et al., Chem. Soc. Rev., 2011, 40, 1081-1106. L.E. Keno y col., Chem. Rev. 2012, 112, 1105-1125 hacen un análisis detallado de los sensores químicos.

Por consiguiente, se describe un sensor que comprende dicha película.

Como película conductora, es posible usar la película de la presente invención como conductor eléctrico o térmico. Dichas aplicaciones incluyen el uso como electrodos o conductores de doble capa como se describe en los documentos US 6,631,074 B2, US 6,359,769 B1, US 7,175,783 B2 o US 2010/0014215 A1.

- 50 Por consiguiente, se describe un electrodo o conductor que comprende dicha película.



La película de la presente invención también se puede usar como dispositivo de almacenamiento y separación. Por consiguiente, cualquier aplicación de almacenamiento o separación para materiales de estructura organometálica conocidos en la técnica también se puede usar con una película.

5 Especialmente, el uso como dispositivo de almacenamiento y separación incluye el uso de una estructura organometálica porosa en la película para la absorción de al menos una sustancia para propósitos de su almacenamiento, separación y liberación controlada. Aquí la película puede ser parte de un filtro o membrana o similar. Se describe un ejemplo para un filtro de limpieza en la publicación JP-H105545 A. Las membranas se describen en US 2003/219587.

10 En consecuencia, se describe un dispositivo de almacenamiento o separación, como una membrana o filtro, que comprende dicha película.

Otro uso es en una reacción química. Por consiguiente, se describe un reactor químico que comprende dicha película.

La al menos una sustancia es preferiblemente un gas o una mezcla de gases. También son posibles líquidos.

15 Los procedimientos de almacenamiento por medio de estructuras organometálicas en general se describen en los documentos WO-A 2005/003622, WO-A 2003/064030, WO-A 2005/049484, WO-A 2006/089908 y DE-A 10 2005 012 087. Los procedimientos descritos allí también se pueden usar para la estructura organometálica de la invención. Los gases preferidos para el almacenamiento son metano o hidrógeno.

Los procedimientos de separación o purificación por medio de estructuras organometálicas en general se describen en las publicaciones EP-A 1 674 555, DE-A 10 2005 000938 y la solicitud de patente alemana número DE 10 2005 022 844. Los procedimientos descritos allí también pueden usarse para la película.

20 Si la película se usa para almacenamiento, esto tiene lugar preferiblemente en un intervalo de temperatura de -200°C a +80°C. Se da mayor preferencia a un intervalo de temperatura de -40°C a +80°C. Un intervalo de presión preferido es de 20 bares a 1000 bares (absolutos), en particular de 100 bares a 400 bares.

25 Para los fines de la presente invención, los términos "gas" y "líquido" se usan en aras de la simplicidad, pero las mezclas de gases y las mezclas líquidas o soluciones líquidas también están abarcadas por el término "gas" o "líquido", respectivamente.

Los gases preferidos son hidrógeno, gas natural, gas de ciudad, hidrocarburos, en particular metano, etano, eteno, acetileno, propano, n-butano e i-butano, monóxido de carbono, dióxido de carbono, óxidos de nitrógeno, oxígeno, óxidos de azufre, halógenos, hidrocarburos halogenados, NF<sub>3</sub>, SF<sub>6</sub>, amoníaco, boranos, fosfanos, sulfuro de hidrógeno, aminas, formaldehído, gases nobles, en particular helio, neón, argón, criptón y xenón.

30 El gas es particularmente preferible dióxido de carbono que se separa de una mezcla de gases que comprende dióxido de carbono. La mezcla de gases comprende preferiblemente dióxido de carbono junto con al menos H<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> o monóxido de carbono. En particular, la mezcla de gases comprende dióxido de carbono junto con monóxido de carbono.

35 También se da preferencia al uso de la película para el almacenamiento de metano a una presión en el intervalo de 1 bar (absolutos) a 17 bares (absolutos), más preferiblemente de 3 bares (absolutos) a 100 bares (absolutos), más preferiblemente de 3 bares (absolutos) a 200 bares (absolutos), más preferiblemente de 3 bares (absolutos) a 250 bares (absolutos). También se da preferencia al uso de la película de la invención para el almacenamiento de hidrógeno a una presión en el intervalo de 3 bares (absolutos) a 100 bares (absolutos), más preferiblemente de 3 bares (absolutos) a 350 bares (absolutos), más preferiblemente de 3 bares (absolutos) a 700 bares (absolutos).

40 Sin embargo, la al menos una sustancia también puede ser un líquido. Ejemplos de dicho líquido son desinfectantes, disolventes inorgánicos u orgánicos, combustibles, en particular gasolina o diésel, fluidos hidráulicos, fluidos de radiadores, líquidos de frenos o un aceite, en particular aceite de máquina. Además, el líquido puede ser un hidrocarburo alifático o aromático, cíclico o acíclico halogenado o una mezcla de los mismos. En particular, el líquido puede ser acetona, acetonitrilo, anilina, anisol, benceno, benzonitrilo, bromobenceno, butanol, terc-butanol, quinolina, clorobenceno, cloroformo, ciclohexano, dietilenglicol, éter dietílico, dimetilacetamida, dimetilformamida, sulfóxido de dimetilo, dioxano, ácido acético glacial, anhídrido acético, acetato de etilo, etanol, carbonato de etileno, dicloruro de etileno, etilenglicol, éter dimetílico de etilenglicol, formamida, hexano, isopropanol, metanol, metoxipropanol, 3-metil-1-butanol, cloruro de metileno, metiletil cetona, N-metilformamida, N-metilpirrolidona, nitrobenceno, nitrometano, piperidina, propanol, carbonato de propileno, piridina, disulfuro de carbono, sulfolano, tetracloroeteno, tetracloruro de carbono, tetrahidrofurano, tolueno, 1,1,1-tricloroetano, tricloroetileno, trietilamina, trietilenglicol, triglima, agua o una  
50 mezcla de los mismos.

La al menos una sustancia también puede ser una sustancia olorosa.

La sustancia olorosa es preferiblemente un compuesto orgánico o inorgánico volátil que comprende al menos uno de los elementos nitrógeno, fósforo, oxígeno, azufre, flúor, cloro, bromo o yodo o un hidrocarburo insaturado o aromático

o un aldehído saturado o insaturado o una cetona. Elementos más preferidos son nitrógeno, oxígeno, fósforo, azufre, cloro, bromo; y se da preferencia particular a nitrógeno, oxígeno, fósforo y azufre.

En particular, la sustancia olorosa es amoníaco, sulfuro de hidrógeno, óxidos de azufre, óxidos de nitrógeno, ozono, aminas cíclicas o acíclicas, tioles, tioéteres y también aldehídos, cetonas, ésteres, éteres, ácidos o alcoholes. Se da preferencia particular a amoníaco, sulfuro de hidrógeno, ácidos orgánicos (preferiblemente ácido acético, ácido propiónico, ácido butírico, ácido isobutírico, ácido valérico, ácido isovalérico, ácido caproico, ácido heptanoico, ácido láurico, ácido pelargónico) e hidrocarburos cíclicos o acíclicos que comprenden nitrógeno o azufre y también aldehídos saturados o insaturados tales como hexanal, heptanal, octanal, nonanal, decanal, octenal o nonenal y en particular aldehídos volátiles como butiraldehído, propionaldehído, acetaldehído y formaldehído y también combustibles como gasolina, diésel (constituyentes).

Las sustancias olorosas también pueden ser fragancias que se usan, por ejemplo, para producir perfumes. Ejemplos de fragancias o aceites que liberan tales fragancias son: aceites esenciales, aceite de albahaca, aceite de geranio, aceite de menta, aceite de cananga, aceite de cardamomo, aceite de lavanda, aceite de menta, aceite de nuez moscada, aceite de manzanilla, aceite de eucalipto, aceite de romero, aceite de limón, aceite de lima, aceite de naranja, aceite de bergamota, aceite de salvia moscatel, aceite de cilantro, aceite de ciprés, 1,1-dimetoxi-2-feniletano, 2,4-dimetil-4-fenil-tetrahidrofurano, dimetiltetrahidrobenzaldehído, 2,6-dimetil-7-octen-2-ol, 1,2-dietoxi-3,7-dimetil-2,6-octadieno, fenilacetaldéhído, óxido de rosa, pentanoato de etil-2-metilo, 1-(2,6,6-trimetil-1,3-ciclohexadien-1-il)-2-buten-1-ona, etil-vanilina, 2,6-dimetil-2-octenol, 3,7-dimetil-2-octenol, acetato de terc-butilciclohexilo, acetato de anisilo, oxiacetato de alil-ciclohexilo, etil-linalool, eugenol, cumarina, acetoacetato de etilo, 4-fenil-2,4,6-trimetil-1,3-dioxano, 4-metileno-3,5,6,6-tetrametil-2-heptanona, tetrahidroafranato de etilo, geranil nitrilo, cis-3-hexen-1-ol, acetato de cis-3-hexenilo, carbonato de cis-3-hexenil metilo, 2,6-dimetil-5-hepten-1-ol, 4-(triciclo [5.2.1.0] decilideno) -8-butanal, 5-(2,2,3-trimetil-3-ciclopentenil)-3-metilpentan-2-ol, p-terc.-butil-alfa-metilhidrocinamaldehído, etil[5.2.1.0]triciclododecanocarboxilato, geraniol, citronelol, citral, linalool, acetato de linalilo, ionona, feniletanol y mezclas de los mismos.

Para los fines de la presente invención, una sustancia olorosa volátil tiene preferiblemente un punto de ebullición o un intervalo de ebullición por debajo de 300°C. La sustancia olorosa es más preferiblemente un compuesto o mezcla fácilmente volátil. La sustancia olorosa tiene particularmente un punto de ebullición o intervalo de ebullición por debajo de 250°C, más preferiblemente por debajo de 230°C, de modo particularmente preferible por debajo de 200°C.

También se da preferencia a las sustancias olorosas que tienen una alta volatilidad. La presión de vapor puede emplearse como una medida de la volatilidad. Para los propósitos de la presente invención, una sustancia olorosa volátil tiene preferiblemente una presión de vapor de más de 0,001 kPa (20°C). La sustancia olorosa es más preferiblemente un compuesto o mezcla fácilmente volátil. La sustancia olorosa tiene particularmente una presión de vapor de más de 0,01 kPa (20°C), más preferiblemente una presión de vapor de más de 0,05 kPa (20°C). Se da preferencia particular a las sustancias olorosas que tienen una presión de vapor de más de 0,1 kPa (20°C).

La al menos una sustancia es preferiblemente agua, independientemente de si está en forma gaseosa o líquida.

Un ejemplo en el que puede tener lugar una reacción química en presencia de la película es la alcoxilación de monooles o polioles. El procedimiento para llevar a cabo tales alcoxilaciones se describe en los documentos WO-A 03/035717 y WO-A 2005/03069. La estructura organometálica porosa de la invención también se puede usar para epoxidación y para preparar carbonatos de polialquileño y peróxido de hidrógeno. Dichas reacciones se describen en los documentos WO-A 03/101975, WO-A 2004/037895 y US-A 2004/081611.

Se da preferencia particular a las reacciones catalíticas.

Breve descripción de las figuras.

La figura 1 muestra el aumento del peso de una película en función de la exposición a la atmósfera ambiental.

La figura 2 muestra un ciclo de calentamiento y enfriamiento de una película en función del tiempo cuando se somete a energía eléctrica (ciclo de calentamiento) y después de la terminación del flujo de corriente (ciclo de enfriamiento).

La figura 3 muestra la adsorción de agua de una película en función de la humedad relativa.

## Ejemplos

### Ejemplo 1: Fabricación de una película de material de estructura organometálica (MOF) (benceno-tricarboxilato de cobre MOF, C300)

900 mg de polvo de estructura organometálica disponible comercialmente (Basolite C300, BASF SE) y 100 mg de polvo de poli (tetrafluoroetileno) (DuPont, Teflon 6CN X-EF) se colocaron en un mortero y se mezclaron. Con esto, se ajustaron los porcentajes en peso basados en el peso total de la película del 90 % (A) y del 10 % (B).

Después de obtener una mezcla de polvo íntima, se aplicó presión al mortero para inducir la fibrilación del componente de poli (tetrafluoroetileno).

Después de obtener una masa homogénea similar a una masilla de color azul claro, el material obtenido se transfirió a una calandria y se conformó en una película flexible independiente. El espacio de la calandria se usó para disminuir progresivamente el espesor de la película hasta un nivel final de 300  $\mu\text{m}$  según lo determinado por un medidor de espesor (Indicador Digimatic TYPE ID-1 10M, Mitutoyo). La película azul claro obtenida se recortó a una geometría rectangular (2,6 cm x 2,4 cm) con una cuchilla y se determinó que su peso era de 213,6 mg usando una balanza de laboratorio. Por lo tanto, se puede calcular la densidad de la película y se encontró que era 1,14  $\text{g}/\text{cm}^3$

El área de superficie específica de la película fue de 361  $\text{m}^2/\text{g}$  medida por fisisorción de nitrógeno a  $-196,15^\circ\text{C}$  (Gemini V 2365, Micromeritics) y calculada utilizando el procedimiento de Brunauer-Emmett-Teller (según DIN ISO 9277:2003-05). Usando la densidad de la película, se calculó que el área de superficie específica volumétrica de la película era 412  $\text{m}^2/\text{cm}^3$ .

#### **Ejemplo 2a: Fabricación de una película delgada de MOF (fumarato de aluminio MOF, A520)**

Se usó el mismo procedimiento y el mismo equipo que en el Ejemplo 1.

276 mg de polvo de estructura organometálica disponible comercialmente (Basolite A520, BASF SE) y 31,2 mg de polvo de poli(tetrafluoroetileno) (DuPont, Teflon 6CN X-EF) se utilizaron dando como resultado porcentajes en peso basados en el peso total de la película de 90 % (A) y 10 % (B).

Se obtuvo una película blanca flexible autónoma con un grosor de 52  $\mu\text{m}$  y una densidad de película de 1,20  $\text{g}/\text{cm}^3$ . El área superficial específica de la película fue de 422  $\text{m}^2/\text{g}$  y el área superficial específica volumétrica de la película se calculó en 506  $\text{m}^2/\text{cm}^3$ .

#### **Ejemplo 2 b Fabricación de una película MOF gruesa (fumarato de aluminio MOF, A520)**

Se utilizó el mismo procedimiento y el mismo equipo que en el Ejemplo 1.

950 mg de polvo de estructura organometálica disponible comercialmente (Basolite A520, BASF SE) y 50 mg de polvo de poli(tetrafluoroetileno) (DuPont, Teflon 6CN X-EF) se utilizaron dando como resultado porcentajes en peso basados en el peso total de la película de 95 % (A) y 5 % (B).

Se obtuvo una película blanca flexible autónoma con un espesor de 345  $\mu\text{m}$  y una densidad de película de 0,78  $\text{g}/\text{cm}^3$ . El área superficial específica de la película fue de 738  $\text{m}^2/\text{g}$  y el área superficial específica volumétrica de la película se calculó en 576  $\text{m}^2/\text{cm}^3$ .

#### **Ejemplo 3: Fabricación de una película MOF mixta (C300/A520)**

Se utilizó el mismo procedimiento y el mismo equipo que en el Ejemplo 1.

254,0 mg de polvo de estructura organometálica 1 (Basolite C300, BASF SE), 254,4 mg de polvo de estructura organometálica 2 (Basolite A520, BASF SE) y 27,1 mg de 1166 el polvo de poli(tetrafluoroetileno) (DuPont, Teflon 6CN X-EF) dieron como resultado porcentajes en peso basados en el peso total de la película de 47,4 % (A1), 47,5 % (A2) y 5,1 % (B). Por lo tanto, el porcentaje en peso del componente (A) es del 94,9 %.

Se obtuvo una película azul claro flexible autónoma con un espesor de 95  $\mu\text{m}$  y una densidad de película de 1,05  $\text{g}/\text{cm}^3$ . El área de superficie específica de la película fue de 180  $\text{m}^2/\text{g}$  y el área de superficie específica volumétrica de la película se calculó en 189  $\text{m}^2/\text{cm}^3$ .

#### **Ejemplo 4: Fabricación de una película ZIF 8 (2-metilimidazolato de zinc MOF, Z1200)**

Se utilizó el mismo procedimiento y el mismo equipo que en el Ejemplo 1.

478,2 mg de polvo de estructura organometálica disponible en el mercado (Basolite Z1200, BASF SE) y 25,1 mg de polvo de poli(tetrafluoroetileno) (DuPont, Teflon 6CN X-EF) se utilizaron dando como resultado porcentajes en peso basados en el peso total de la película de 95 % (A) y 5 % (B).

Se obtuvo una película blanca flexible autónoma con un espesor de 51  $\mu\text{m}$  y una densidad de película de 0,72  $\text{g}/\text{cm}^3$ . El área superficial específica de la película fue 1068  $\text{m}^2/\text{g}$  y el área superficial volumétrica específica de la película se calculó en 769  $\text{m}^2/\text{cm}^3$ .

#### **Ejemplo 5: Fabricación de una película compuesta MOF/negro de humo**

Se utilizó el mismo procedimiento y el mismo equipo que en el Ejemplo 1.

453,0 mg de polvo de estructura organometálica (Basolite C300, BASF SE), 61,2 mg de poli(tetrafluoroetileno) y 90,8 mg de polvo de negro de humo (Printex XPB 538, Orion Engineered Carbons) (DuPont, Teflon 6CN X-EF) se utilizaron dando como resultado porcentajes en peso basados en el peso total de la película del 75 % (A) y 10 % (B) y 15 % (C).

Se obtuvo una película negra flexible autónoma con un espesor de 115  $\mu\text{m}$  y una densidad de película de 1,4 g/cm<sup>3</sup>.

#### 5 **Ejemplo 6: Fabricación de un sensor de humedad MOF**

La película azul claro obtenida en el Ejemplo 1 se colocó en una cámara de secado al vacío durante 15 minutos a 80°C. Se descubrió que la desorción de la humedad adsorbida dio como resultado la activación del componente de estructura organometálica de la película. Durante este procedimiento, la película cambió su color de azul claro a azul oscuro. La película fue transferida rápidamente a una balanza de laboratorio y la balanza fue tarada. Al cabo de unos pocos minutos se observó un aumento continuo de peso debido a la re-adsorción de humedad de la atmósfera ambiente mientras la película volvió a cambiar su color a azul claro. La figura 1 muestra el aumento de peso de la película en el transcurso de aproximadamente 1 a 1,5 horas. Se encontró que el efecto era completamente reversible durante un número repetido de ciclos de adsorción/desorción.

#### **Ejemplo 7: Fabricación de una película MOF/Negro de humo calentable (sensor combinado eléctrico/térmico)**

15 La película obtenida en el Ejemplo 5 se recortó a una geometría rectangular (2,1 cm x 1,0 cm). Una pintura plateada eléctricamente conductora ("Dosilac", Amidoduco) se aplicó como revestimiento alrededor de dos bordes opuestos de la película y sobre la película se pegaron contactos metálicos delgados (lámina de níquel, Alfa Aesar, 30  $\mu\text{m}$ ).

Los contactos metálicos de la película se conectaron con dos pinzas de contacto en serie a un multímetro (Metrakit, GMCI Gossen-Metrawatt GmbH, Nuremberg/Alemania) y una fuente de voltaje de laboratorio (EA-PS 3016-40 B, Elektro-Automatik GmbH, cccc/Alemania). Se ajustó un voltaje de 16 V y se permitió que la corriente eléctrica fluyera a través de la película.

Mediante el multímetro se determinó la potencia eléctrica promedio resultante en 41 mA. Mediante esta, la resistencia eléctrica se calculó en 387 Ohm.

25 La temperatura de la película se midió con una cámara infrarroja sin contacto (FLIR i60, Orlmeister Infrarot-Systeme, Walluf/Alemania) que también se utilizó para visualizar el calentamiento de la película.

Se alcanzó un nivel de temperatura promedio de 85,7°C después de 97 s. Una vez que se cortó el voltaje, la temperatura disminuyó nuevamente a 26,5°C después de 136 s. La figura 2 muestra las curvas respectivas de aumento de temperatura (ciclo de calentamiento) y disminución (ciclo de enfriamiento).

30 Se encontró que el efecto era completamente reversible durante un número repetido de ciclos de calentamiento/enfriamiento.

#### **Ejemplo 8: Aplicación de una película de MOF como agente de secado reciclable**

La absorción de agua de la película obtenida del ejemplo 2a se midió como el aumento de peso sobre el de la película seca. La isoterma de adsorción/desorción de agua se realizó en un instrumento VTI SA de TA Instruments siguiendo un programa de isoterma por pasos. El experimento consistió en una ejecución realizada en un material de muestra que se había colocado en la bandeja de una microbalanza dentro del instrumento. Antes de comenzar la medición, la humedad residual de la muestra se eliminó calentando la muestra a 100 °C (rampa de calentamiento de 5 °C/min) y manteniéndola durante 6 h bajo un flujo de nitrógeno. Después del programa de secado, la temperatura en la celda se redujo a 25°C y se mantuvo isotérmica durante la medición. Se calibró la microbalanza y se equilibró el peso de la muestra seca (desviación de masa máxima 0,01 % en peso). La absorción de agua por la muestra se midió como el aumento de peso sobre el de la muestra seca. Primero, como la curva de adsorción se midió aumentando la humedad relativa (HR) (expresada como % en peso de agua en la atmósfera dentro de la celda) a la que se expuso la muestra y midiendo la absorción de agua por la muestra como equilibrio. La HR se incrementó con un paso de 10 % en peso del 5 % al 85 % y en cada paso el sistema controló la HR y monitoreó el peso de la muestra hasta alcanzar las condiciones de equilibrio después de que la muestra se expuso del 85 % en peso a 5 % en peso con un paso del 10 % y el cambio en el peso de la muestra (absorción de agua) fue monitoreado y registrado. La absorción de agua total en peso a HR de 85 % fue del 30 %. La isoterma del agua se muestra en la figura 3. La forma de la isoterma demuestra un comportamiento reversible de absorción y liberación de agua de la película de MOF, un requisito previo para el uso como agente de secado reciclable.

#### **Ejemplo 9: Fabricación de una película de MOF grande y un rollo de MOF para almacenamiento de gas.**

50 232,6 g de polvo de estructura organometálica (Basolite C300, BASF SE), 5,96 g de polvo de poli(tetrafluoroetileno) (DuPont, Teflon 6CN X-EF) y 20 bolas de molienda de ágata (diámetro 2,0 cm, igual a 208,0 g) se colocaron en un recipiente de plástico de 1000 ml. Mediante esto, se ajustó una relación en peso de 97,5/2,5 de estructura organometálica a poli(tetrafluoroetileno). El recipiente de plástico sellado se trató durante 12 h en un par de rodillos cilíndricos. De este modo se obtuvo una mezcla íntima en polvo. La mezcla se transfirió en porciones a un mortero

- donde siguió mezclándose. La fibrilación completa del componente de poli(tetrafluoroetileno) se logró mediante la aplicación de presión al mortero. La masa similar a masilla azul claro homogénea resultante se transfirió a una calandria y se conformó en una película flexible autónoma (espesor de 0,75 mm) que se recortó a una geometría en forma de tira con una cuchilla (14,5 cm de ancho x 160 cm de longitud, peso total de la película antes del secado 145,1 g, peso total de la película después del secado 110,8 g). Se cortaron dos tiras de tela plástica (4,5 g) en la misma dimensión y se colocaron encima y debajo de la película de MOF. Después de esto, las tres capas se envolvieron firmemente en una geometría en forma de rollo que se fijó con cinta adhesiva (0,3 g) de tal manera que la tela plástica separó las capas de MOF entre sí. El diámetro del rollo era de 4,5 cm. La densidad de la película se calculó en 0,64 g/cm<sup>3</sup>. Al secar al vacío a 80°C, se descubrió que el color del rollo cambiaba de azul claro a azul oscuro.
- 10 El área superficial específica gravimétrica de la película fue de 924 m<sup>2</sup>/g y el área superficial específica volumétrica de la película fue de 588 m<sup>2</sup>/cm<sup>3</sup>.

#### Captación de metano

La captación de metano se midió de la siguiente manera:

- 15 El rollo obtenido se colocó en un recipiente de acero que se selló herméticamente, seguido de la evacuación al vacío con bomba de aceite. El contenedor se colocó luego en un contenedor superior y se conectó a un depósito a presión con metano. Se aplicó una cierta presión de metano abriendo una válvula conectada al recipiente de acero. La válvula se cerró y se midió el peso del recipiente completo tan pronto como ya no se observó ningún cambio en la temperatura (~ 21°C, isoterma). Los datos se muestran en la siguiente tabla:

Presión absoluta en contenedor [bar]	Absorción de CH <sub>4</sub> [g CH <sub>4</sub> / L de tanque]
0	0
5,2	22,47
11,60	37,81
15,40	43,81
20,00	50,25
24,00	55,99
51,30	77,56
101,50	112,71
152,20	143,24
200,40	169,24

#### 20 **Ejemplo 10: Cuantificación de la adsorción y desorción de agua reversible con película de MOF/negro de humo calentable**

- De acuerdo con el procedimiento dado en el Ejemplo 5, se preparó una película de MOF/negro de humo de composición idéntica con un espesor final de 63 µm y un peso de 24 mg. Se recortó a una geometría rectangular (2,1 cm x 1,4 cm). Una pintura plateada eléctricamente conductora ("Dosilac", Amidoduco) se aplicó como revestimiento alrededor de dos bordes opuestos de la película y sobre la película se pegaron contactos metálicos delgados (lámina de níquel, Alfa Aesar, 30 µm). Los contactos metálicos de la película se conectaron con dos alambres de cobre delgados en serie a un multímetro (Metrahit, GMC-I Gossen-Metrawatt GmbH, Nuremberg/Alemania) y una fuente de voltaje de laboratorio (EA-PS 3016-40 B, Elektro-Automatik GmbH, Viersen/Alemania). La película se colocó en un soporte de muestra que se colocó en una balanza de laboratorio.
- 25
- 30 Mediante esta configuración experimental, se controló el cambio de peso de la película en función del voltaje aplicado y, por lo tanto, el aumento o disminución en temperatura. Como resultado, la humedad adsorbida dentro de la película se desorbió en poco tiempo (< 2 min) cuando se encendió el voltaje (16 V) (temperatura promedio de la película 74°C). Después de la desorción de la humedad total contenida en la película, su peso permaneció constante. Después de que se desconectó el voltaje, el peso de la película se recuperó al nivel original debido a la reabsorción de humedad del aire ambiente. Se descubrió que el procedimiento era completamente reversible y reveló una buena reproducibilidad. La cantidad de humedad que podría adsorberse y desorberse corresponde a aproximadamente 10 % en peso con respecto al peso total de la película.
- 35

• (A) de 51 % en peso a 99,9 % en peso basado en el peso total de la composición de al menos un material de estructura organometálica porosa, y el material comprende al menos un compuesto orgánico al menos bidentado coordinado con al menos un ion de metal;

- (C) 0 % en peso a 48.9 % en peso basado en el peso total de la composición de un componente aditivo.

3. La composición de la reivindicación 1 o 2, en la que las cantidades basadas en el peso total de la composición son 51 % en peso a 99.9 % en peso de (A), 0.1 % en peso a 49 % en peso de (B) y 0 % en peso de (C).

5. La composición de la reivindicación 1 o 2, en donde las cantidades basadas en el peso total de la composición son 51 % en peso a 99,8 % en peso de (A), 0,1 % en peso a 48,9 % en peso de (B) y 0,1 a 48,9 % en peso de (C).

7. La composición de cualquiera de las reivindicaciones 1 a 6, en la que el al menos un compuesto orgánico al menos bidentado se deriva de un ácido di-, tri- o tetracarboxílico o sistemas de anillo sustituidos o no sustituidos;



y/o el al menos un ion metálico es un ion seleccionado del grupo de metales que consiste en Mg, Ca, Al, Y, Sc, Zr, Ti, V, Cr, Mo, Fe, Co, Cu, Ni, Zn y un lantánido

5 8. La composición de cualquiera de las reivindicaciones 1 a 7, en la que el al menos un compuesto orgánico al menos bidentado se deriva de un ácido di, tri- o tetracarboxílico o un imidazol y/o el al menos un ion metálico es un ion seleccionado del grupo de metales que consiste en Mg, Zr, Zn, Cu y Al.

9. La composición de cualquiera de las reivindicaciones 1 a 8, en la que el al menos un material de estructura organometálica porosa es cobre-1,3,5-BTC, fumarato de aluminio o 2-metilimidazolato de zinc.

10 10. La composición de cualquiera de las reivindicaciones 1 a 9, en la que el componente aditivo comprende al menos un aditivo seleccionado del grupo que consiste en partículas conductoras eléctricas o térmicas, polímeros termoplásticos, líquidos, tensioactivos, dispersantes, antioxidantes, absorbentes de UV/estabilizadores de luz, desactivadores de metales, agentes antiestáticos, agentes de refuerzo, materiales de relleno, agentes de nucleación, agentes antiempañantes, biocidas, plastificantes, lubricantes, emulsionantes, colorantes, pigmentos, aditivos reológicos, agentes desmoldantes, adherentes, catalizadores, agentes de control de flujo, abrillantadores ópticos, agentes ignífugos, agentes antigoteo y agentes espumantes.

15 11. La composición de la reivindicación 10, en la que el aditivo es una partícula conductora eléctrica o térmica o un termoplástico.

12. La composición de la reivindicación 10 u 11, en la que el componente aditivo comprende negro de humo.

FIG.1

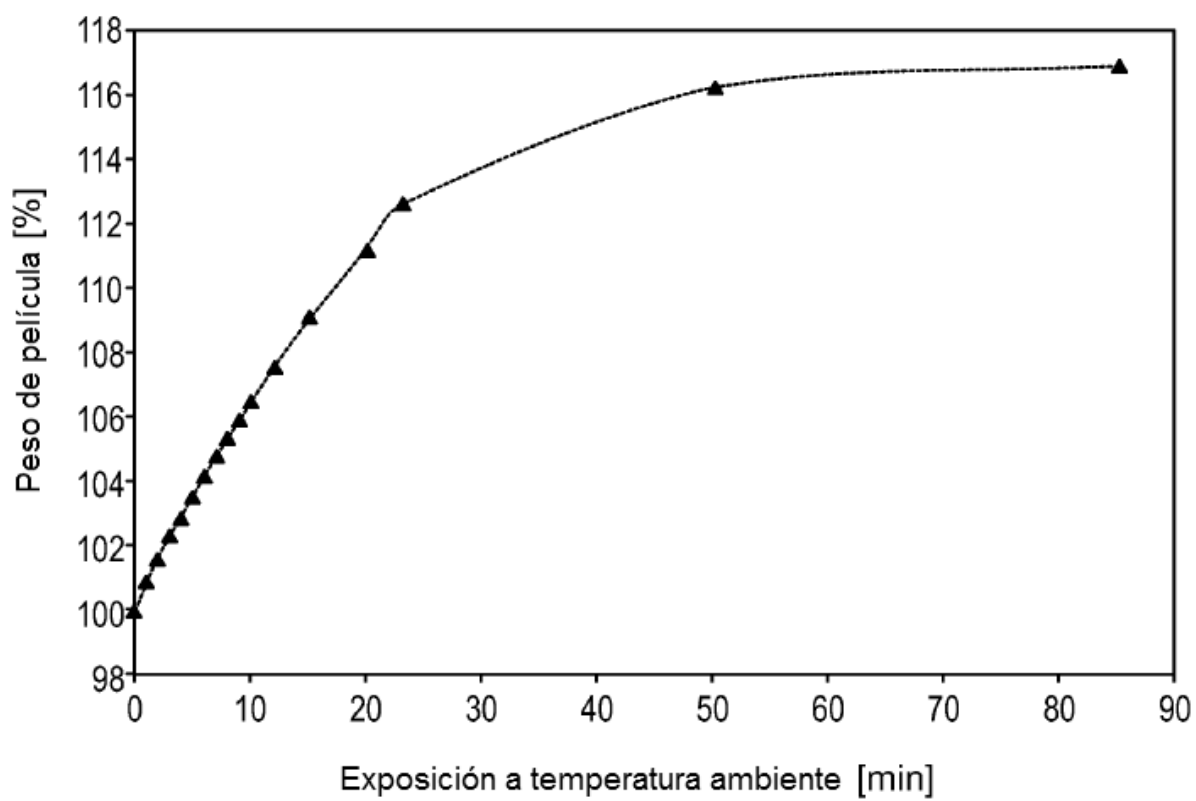




FIG.2

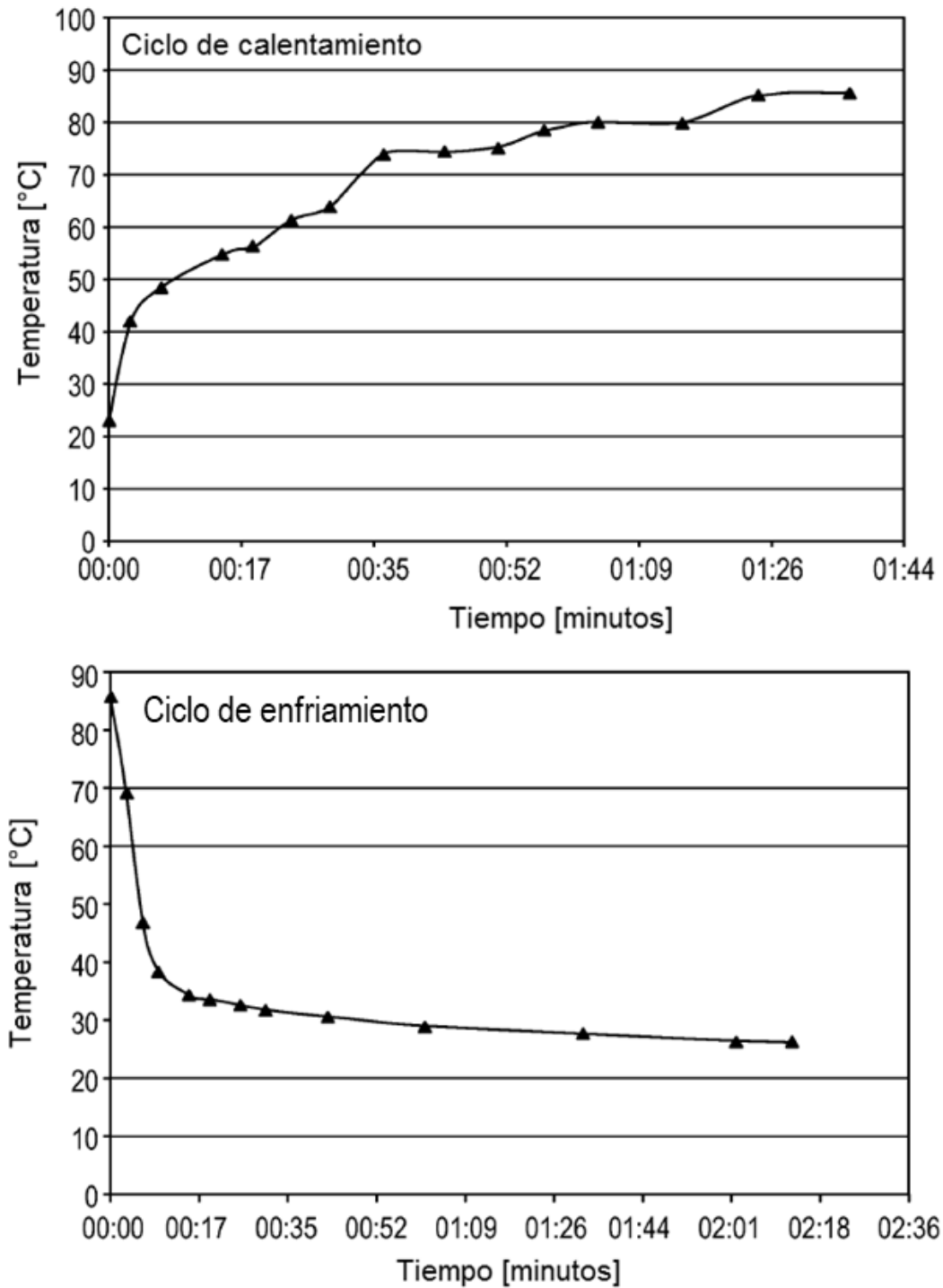


FIG.3

