

19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 588 052**

51 Int. Cl.:

C09K 5/04 (2006.01)

F25B 17/08 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **17.03.2010** E 10156703 (0)

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **25.05.2016** EP 2230288

54 Título: **Materiales estructurales organometálicos en máquinas de enfriamiento/calentamiento**

30 Prioridad:

20.03.2009 EP 09155677

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

28.10.2016

73 Titular/es:

**BASF SE (100.0%)
Carl-Bosch-Strasse 38
67056 Ludwigshafen am Rhein, DE**

72 Inventor/es:

**KIENER, CHRISTOPH;
MÜLLER, ULRICH;
SCHUBERT, MARKUS;
TEICH, FRIEDHELM;
HERR HENNINGER, STEFAN, DR. y
HERR HENNING, HANS-MARTIN, PROF. DR.**

74 Agente/Representante:

CARPINTERO LÓPEZ, Mario

ES 2 588 052 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

Materiales estructurales organometálicos en máquinas de enfriamiento/calentamiento

5 La presente invención se refiere a módulos de enfriamiento/calentamiento por adsorción, así como a su uso en máquinas de enfriamiento y/o de calentamiento, recipientes para líquidos o sistemas de climatización de una habitación así como a su uso.

Los módulos de enfriamiento/calentamiento por adsorción pueden ser parte de una máquina de enfriamiento/calentamiento o representar ya uno de este tipo. Estos se basan en el principio de que, debido a procesos de adsorción y desorción, se libera o se absorbe energía térmica, de modo que estos pueden emplearse para el enfriamiento y/o calentamiento.

10 En función del fin de uso, el enfriamiento o el calentamiento puede representar el foco. Por consiguiente, los módulos de enfriamiento/calentamiento por adsorción se denominan también máquinas de enfriamiento (por adsorción), bombas de calor (de adsorción), sistemas de intercambio de calor, sistemas de acumulador de calor y de acumulador de frío o como parte de recipientes de auto-refrigeración en el estado de la técnica.

15 Un módulo de intercambio de calor de adsorción se describe por ejemplo en el documento EP-A 1 840 486, que presenta una capa de absorción de humedad de un polímero orgánico.

20 El uso de zeolitas en un sistema de acumulador de calor y de frío se describe en el documento EP-A 1 652 817. El documento DE-A 10 2006 059 504 describe una bomba de calor con elementos dispuestos de forma apilable. El documento EP-A 0 412 161 describe una máquina de frío por adsorción criogénica así como procedimientos para el enfriamiento de un objeto con ayuda de esta máquina de enfriamiento. Así mismo, en el documento EP-A 0 840 077 se describe una máquina de enfriamiento por adsorción.

Una bomba de calor por adsorción se describe en el documento EP-B 1 279 908. Recipiente en forma de una botella o embalaje con un módulo de auto-enfriamiento se describen en el documento EP-A 1 647 786 y el documento US-B 7.213.401.

25 Las zeolitas especiales en un dispositivo de sorción para calentar y enfriar corrientes de gas se describen en el documento DE-A 100 28 030. Como máquina de adsorción se describe un módulo de enfriamiento/calentamiento por adsorción de este tipo en el documento DE-A 10 2006 011 410.

A pesar de los numerosos módulos de enfriamiento/calentamiento por adsorción conocidos en el estado de la técnica existe una necesidad de módulos alternativos o agentes de adsorción alternativos.

Un objetivo de la presente invención se basa por lo tanto en la provisión de módulos de este tipo.

30 El objetivo se consigue mediante un módulo de enfriamiento/calentamiento por adsorción que contiene un sorbente sólido así como un agente de trabajo, en el que el sorbente contiene al menos un material estructural organometálico poroso que contiene al menos un compuesto orgánico al menos bidentado, unido por coordinación al al menos un ión metálico, caracterizado por que el agente de trabajo contiene agua.

35 Se ha mostrado que debido al uso de material estructural organometálico en módulos de enfriamiento/calentamiento por adsorción de este tipo, pueden conseguirse propiedades ventajosas para el calentamiento o el enfriamiento. En este sentido pueden mencionarse a modo de ejemplo el comportamiento de adsorción y/o desorción, en particular en el caso del uso de agua.

40 Los módulos de enfriamiento/calentamiento por adsorción de acuerdo con la presente invención puede realizarse de muchas formas diferentes, dependiendo la configuración concreta de la aplicación. En cualquier caso se provoca sin embargo el calentamiento o el enfriamiento mediante el proceso de adsorción o desorción de un agente de trabajo en el o del sorbente.

Según el campo de aplicación puede seleccionarse el agente de trabajo adecuado. De acuerdo con la invención, el agente de trabajo contiene agua o el agua representa el agente de trabajo.

45 Los materiales estructurales organometálicos (MOF) son conocidos en el estado de la técnica y 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), página 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, documentos DE-A-101 11 230, DE-A 10 2005 053430, WO-A 2007/054581, WO-A 2005/049892 y WO-A 2007/023134.

50 En el documento DE 10 2006 061 587 A1 se describe el uso de materiales estructurales organometálicos como sorbente así como para la caracterización por colores de un filtro.

El documento US 2003/0222023 A1 se refiere a cuerpos moldeados que contienen materiales estructurales organometálicos porosos así como opcionalmente sustancias adicionales, en particular materiales de soporte.

Los materiales estructurales organometálicos a base de aluminio, hierro y cromo, que contienen un compuesto orgánico derivado de un ácido dicarboxílico, se describen en el documento WO 2008/129051 A2.

5 Como grupo especial de estos materiales estructurales organometálicos se describen en la bibliografía más reciente los denominados materiales estructurales "limitados", en los que la estructura mediante la elección especial del compuesto orgánico no se abarca infinitamente sino con la formación de poliedros. A.C. Sudik, et al., J. Am. Chem. Soc. 127 (2005), 7110-7118, describen materiales estructurales especiales de este tipo. En este sentido estos se denominan para la delimitación, poliedros organometálicos (MOP = Metal-Organic Polyhedra).

10 Un grupo especial adicional de materiales estructurales organometálicos porosos son aquellos en los que el compuesto orgánico como ligando, representa un sistema de anillo mono-, bi- 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 presenta al menos dos átomos de anillo de nitrógeno. La producción electroquímica de los materiales estructurales de este tipo se describe en el documento WO-A 2007/131955.

La aptitud general de materiales estructurales organometálicos para la recepción de gases y líquidos se describe por ejemplo en el documento WO-A 2005/003622 y el documento EP-A 1 702 925.

15 En particular estos grupos especiales son adecuados en el contexto de la presente invención.

20 Los materiales estructurales organometálicos de acuerdo con la presente invención contienen poros, en particular micro- y/o mesoporos. Los microporos se definen como aquellos con un diámetro de 2 nm o inferior y los mesoporos se definen por un diámetro en el intervalo de 2 a 50 nm, en cada caso de manera correspondiente de acuerdo con la definición, tal como está indicado en Pure & Applied Chem. 57 (1983), 603 - 619, en particular en la página 606. La presencia de micro- y/o mesoporos puede someterse a ensayo con ayuda de mediciones de sorción, determinando estas mediciones la capacidad de absorción de los MOF para nitrógeno a 77 Kelvin según DIN 66131 y/o DIN 66134.

25 Preferentemente, la superficie específica, calculada según el modelo de Langmuir (DIN 66131, 66134) para un MOF en forma de polvo asciende a más de 100 m²/g, más preferentemente por encima de 300 m²/g, más preferentemente más de 700 m²/g, adicionalmente más preferentemente más de 800 m²/g, adicionalmente más preferentemente más de 1000 m²/g y de manera especialmente preferente más de 1200 m²/g.

Los cuerpos moldeados que contienen materiales estructurales organometálicos pueden tener una superficie específica menor; preferentemente sin embargo más de 150 m²/g, más preferentemente más de 300 m²/g, adicionalmente más preferentemente más de 700 m²/g.

30 El componente de metal en el material estructural de acuerdo con la presente invención se selecciona preferentemente de los grupos Ia, IIa, IIIa, IVa a VIIIa y Ib a VIb. Se prefieren especialmente 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, representando Ln los lantánidos.

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

35 En referencia a los iones de estos elementos pueden mencionarse especialmente Mg²⁺, Ca²⁺, Sr²⁺, Ba²⁺, Sc³⁺, Y³⁺, Ln³⁺, Ti⁴⁺, Zr⁴⁺, Hf⁴⁺, V⁴⁺, V³⁺, V²⁺, Nb³⁺, Ta³⁺, Cr³⁺, Mo³⁺, W³⁺, Mn³⁺, Mn²⁺, Re³⁺, Re²⁺, Fe³⁺, Fe²⁺, Ru³⁺, Ru²⁺, Os³⁺, Os²⁺, Co³⁺, Co²⁺, Rh²⁺, Rh⁺, Ir²⁺, Ir⁺, Ni²⁺, Ni⁺, Pd²⁺, Pd⁺, Pt²⁺, Pt⁺, Cu²⁺, Cu⁺, Ag⁺, Au⁺, Zn²⁺, Cd²⁺, Hg²⁺, Al³⁺, Ga³⁺, In³⁺, Tl³⁺, Si⁴⁺, Si²⁺, Ge⁴⁺, Ge²⁺, Sn⁴⁺, Sn²⁺, Pb⁴⁺, Pb²⁺, As⁵⁺, As³⁺, As⁺, Sb⁵⁺, Sb³⁺, Sb⁺, Bi⁵⁺, Bi³⁺ y Bi⁺.

40 Además se prefieren especialmente Mg, Al, Y, Sc, Zr, Ti, V, Cr, Mo, Mn, Fe, Co, Cu, Ni, Zn, Ln. Se prefieren adicionalmente Al, Mo, Mn, Y, Sc, Mg, Fe, Cu y Zn. En particular se prefieren Y, Sc, Al, Mn, Cu y Zn.

La expresión "compuesto al menos bidentado" designa un compuesto orgánico, que contiene al menos un grupo funcional, que puede formar, con respecto a un ión metálico dado, al menos dos enlaces coordinados, y/o con respecto a dos o más, preferentemente dos átomos de metal, en cada caso un enlace coordinado.

45 Como grupos funcionales, a través de los que pueden formarse los enlaces coordinados mencionados, pueden mencionarse en particular por ejemplo los siguientes grupos funcionales: -CO₂H, -CS₂H, -NO₂, -B(OH)₂, -SO₃H, -Si(OH)₃, -Ge(OH)₃, -Sn(OH)₃, -Si(SH)₄, -Ge(SH)₄, -Sn(SH)₃, -PO₃H, -AsO₃H, -AsO₄H, -P(SH)₃, -As(SH)₃, -CH(RSH)₂, -C(RSH)₃, -CH(RNH₂)₂, -C(RNH₂)₃, -CH(ROH)₂, -C(ROH)₃, -CH(RCN)₂, -C(RCN)₃ pudiendo contener R por ejemplo preferentemente un grupo alquileo con 1, 2, 3, 4 o 5 átomos de carbono tal como por ejemplo un grupo metileno, etileno, n-propileno, i-propileno, n-butileno, i-butileno, terc-butileno o n-pentileno, o un grupo arilo, que contiene 1 o 2 núcleos aromáticos tal como por ejemplo 2 anillos C₆, que pueden estar opcionalmente condensados y pueden estar sustituidos de manera adecuada independientemente entre sí con al menos en cada caso un sustituyente, y/o que pueden contener independientemente entre sí en cada caso al menos un heteroátomo tal como por ejemplo N, O y/o S. De acuerdo con formas de realización así mismo preferidas pueden mencionarse grupos funcionales en los que el resto R mencionado anteriormente no está presente. A este respecto, pueden mencionarse, entre otros, -CH(SH)₂, -C(SH)₃, -CH(NH₂)₂, -C(NH₂)₃, -CH(OH)₂, -C(OH)₃, -CH(CN)₂ o -C(CN)₃.

Los grupos funcionales pueden ser sin embargo también heteroátomos de un heterociclo. En particular pueden mencionarse en este sentido átomos de nitrógeno.

Los al menos dos grupos funcionales pueden estar unidos en principio en cualquier compuesto orgánico adecuado, siempre que esté garantizado que el compuesto orgánico que presenta estos grupos funcionales esté capacitado para la formación del enlace coordinado y para la producción del material estructural.

Preferentemente, los compuestos orgánicos, que contienen los al menos dos grupos funcionales, se derivan de un compuesto alifático saturado o insaturado o de un compuesto aromático o de un compuesto tanto alifático como aromático.

El compuesto alifático o la parte alifática del compuesto tanto alifático como aromático puede ser lineal y/o ramificado y/o cíclico, siendo posibles también varios ciclos por compuesto. Más preferentemente, el compuesto alifático o la parte alifática del compuesto tanto alifático como aromático contiene de 1 a 15, más preferentemente de 1 a 14, más preferentemente de 1 a 13, más preferentemente de 1 a 12, más preferentemente de 1 a 11 y en particular preferentemente de 1 a 10 átomos de C tal como por ejemplo 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 o 10 átomos de C. En particular se prefieren en este sentido, entre otro, metano, adamantano, acetileno, etileno o butadieno.

El compuesto aromático o la parte aromática del compuesto tanto aromático como alifático puede presentar uno o también varios núcleos, tal como por ejemplo dos, tres, cuatro o cinco núcleos, pudiendo encontrarse los núcleos separados entre sí y/o encontrándose al menos dos núcleos en forma condensada. De manera especialmente preferente, el compuesto aromático o la parte aromática del compuesto tanto alifático como aromático presenta uno, dos o tres núcleos, prefiriéndose especialmente uno o dos núcleos. Independientemente entre sí, además cada núcleo del compuesto mencionado puede contener al menos un heteroátomo tal como por ejemplo N, O, S, B, P, Si, Al, preferentemente N, O y/o S. Más preferentemente, el compuesto aromático o la parte aromática del compuesto tanto aromático como alifático contiene uno o dos núcleos C₆, encontrándose los dos o bien separados entre sí, o bien en forma condensada. En particular pueden mencionarse como compuestos aromáticos benceno, naftaleno y/o bifenilo y/o biperidilo y/o piridilo.

Más preferentemente, el compuesto orgánico al menos bidentado, es un hidrocarburo alifático o aromático, acíclico o cíclico, con 1 a 18, preferentemente 1 a 10 y en particular 6 átomos de carbono, que presenta además exclusivamente 2, 3 o 4 grupos carboxilo como grupos funcionales.

Por ejemplo, el compuesto orgánico al menos bidentado se deriva de un ácido dicarboxílico, tal como por ejemplo ácido oxálico, ácido succínico, ácido tartárico, ácido 1,4-butanodicarboxílico, ácido 1,4-butenodicarboxílico, ácido 4-óxo-pirano-2,6-dicarboxílico, ácido 1,6-hexanodicarboxílico, ácido decanodicarboxílico, ácido 1,8-heptadecanodicarboxílico, ácido 1,9-heptadecanodicarboxílico, ácido heptadecanodicarboxílico, ácido acetilendicarboxílico, ácido 1,2-benzenodicarboxílico, ácido 1,3-benzenodicarboxílico, ácido 2,3-piridindicarboxílico, ácido piridin-2,3-dicarboxílico, ácido 1,3-butadieno-1,4-dicarboxílico, ácido 1,4-benzenodicarboxílico, ácido p-benzenodicarboxílico, ácido imidazol-2,4-dicarboxílico, ácido 2-metilquinolin-3,4-dicarboxílico, ácido quinolin-2,4-dicarboxílico, ácido quinoxalin-2,3-dicarboxílico, ácido 6-cloroquinoxalin-2,3-dicarboxílico, ácido 4,4'-diaminifenilmetan-3,3'-dicarboxílico, ácido quinolin-3,4-dicarboxílico, ácido 7-cloro-4-hidroxiquinolin-2,8-dicarboxílico, ácido diimidodicarboxílico, ácido piridin-2,6-dicarboxílico, ácido 2-metilimidazol-4,5-dicarboxílico, ácido tiofen-3,4-dicarboxílico, ácido 2-isopropilimidazol-4,5-dicarboxílico, ácido tetrahidropiran-4,4-dicarboxílico, ácido perilen-3,9-dicarboxílico, ácido perilendicarboxílico, Pluriol E 200-ácido dicarboxílico, ácido 3,6-dioxaoctanodicarboxílico, ácido 3,5-ciclohexadieno-1,2-dicarboxílico, ácido octadicarboxílico, ácido pentano-3,3-carboxílico, ácido 4,4'-diamino-1,1'-difetil-3,3'-dicarboxílico, ácido 4,4'-diaminodifenil-3,3'-dicarboxílico, ácido benzidina-3,3'-dicarboxílico, ácido 1,4-bis-(fenilamino)-benceno-2,5-dicarboxílico, ácido 1,1'-dinaftildicarboxílico, ácido 7-cloro-8-metilquinolin-2,3-dicarboxílico, ácido 1-anilinoantraquinona-2,4'-dicarboxílico, ácido politetrahidrofurano-250-dicarboxílico, ácido 1,4-bis-(carboximetil)-piperazin-2,3-dicarboxílico, ácido 7-cloroquinolin-3,8-dicarboxílico, ácido 1-(4-carboxi)-fenil-3-(4-cloro)-fenilpirazolin-4,5-dicarboxílico, ácido 1,4,5,6,7,7,-hexafluoro-5-norborneno-2,3-dicarboxílico, ácido fenilindanodicarboxílico, ácido 1,3-dibencil-2-oxoimidazolidin-4,5-dicarboxílico, ácido 1,4-ciclohexanodicarboxílico, naftaleno-1,8-dicarboxílico, ácido 2-benzoilbenceno-1,3-dicarboxílico, ácido 1,3-dibencil-2-oxoimidazolidin-4,5-cisdicarboxílico, ácido 2,2'-biquinolin-4,4'-dicarboxílico, ácido piridin-3,4-dicarboxílico, ácido 3,6,9-trioxaundecanodicarboxílico, ácido hidroxibenzofenonadicarboxílico, ácido Pluriol E 300-ácido dicarboxílico, Pluriol E 400-ácido dicarboxílico, Pluriol E 600-ácido dicarboxílico, ácido pirazol-3,4-dicarboxílico, ácido 2,3-pirazindicarboxílico, ácido 5,6-dimetil-2,3-pirazindicarboxílico, ácido 4,4'-diaminodifenileterdiimidodicarboxílico, ácido 4,4'-diaminodifenilmetanodiimidodicarboxílico, ácido 4,4'-diaminodifenilsulfondiimidodicarboxílico, 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'-difetil-p-terfenil-4,4"-dicarboxílico, ácido difenileter-4,4'-dicarboxílico, ácido imidazol-4,5-dicarboxílico, ácido 4(1H)-oxotiocromeno-2,8-dicarboxílico, ácido 5-terc-butil-1,3-benzenodicarboxílico, ácido 7,8-quinolindicarboxílico, ácido 4,5-imidazolidicarboxílico, ácido 4-ciclohexeno-1,2-dicarboxílico, ácido hexatriacontanodicarboxílico, ácido tetradecanodicarboxílico, ácido 1,7-heptadicarboxílico, ácido 5-hidroxi-1,3-benzenodicarboxílico, ácido 2,5-dihidroxi-1,4-dicarboxílico, ácido pirazin-2,3-dicarboxílico, ácido furano-2,5-dicarboxílico, ácido 1-noneno-6,9-dicarboxílico, ácido eicosenodicarboxílico, 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-piridindicarboxílico, ácido ciclohexeno-2,3-dicarboxílico, ácido 2,9-diclorofluorourbin-4,11-dicarboxílico, ácido 7-cloro-3-metilquinolin-6,8-dicarboxílico, ácido 2,4-diclorobenzofenona-2',5'-dicarboxílico, ácido 1,3-benzenodicarboxílico, ácido 2,6-piridindicarboxílico, ácido 1-metilpirrol-3,4-dicarboxílico, ácido 1-bencil-1H-pirrol-3,4-dicarboxílico, ácido antraquinona-1,5-dicarboxílico, ácido 3,5-pirazoldicarboxílico, ácido 2-nitrobenzeno-1,4-dicarboxílico, ácido heptano-1,7-dicarboxílico, ácido ciclobutano-1,1-dicarboxílico, ácido 1,14-tetradecanodicarboxílico, ácido 5,6-dehidronorbornano-2,3-dicarboxílico, ácido 5-etil-2,3-piridindicarboxílico o ácido alcanfordicarboxílico.

Además más preferentemente, en el caso del compuesto orgánico al menos bidentado se trata de uno de los ácidos dicarboxílicos mencionados a modo de ejemplo anteriormente como tal.

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

15 ácido 2-hidroxi-1,2,3-propanotricarboxílico, ácido 7-cloro-2,3,8-quinolintricarboxílico, ácido 1,2,3-, 1,2,4-benzenotricarboxílico, ácido 1,2,4-butanotricarboxílico, ácido 2-fosfona-1,2,4-butanotricarboxílico, ácido 1,3,5-benzenotricarboxílico, ácido 1-hidroxi-1,2,3-propanotricarboxílico, ácido 4,5-dihidro-4,5-dioxo-1H-pirrol[2,3-F]quinolin-2,7,9-tricarboxílico, ácido 5-acetil-3-amino-6-metilbenceno-1,2,4-tricarboxílico, ácido 3-amino-5-benzoil-6-metilbenceno-1,2,4-tricarboxílico, ácido 1,2,3-propanotricarboxílico o ácido aurintricarboxílico.

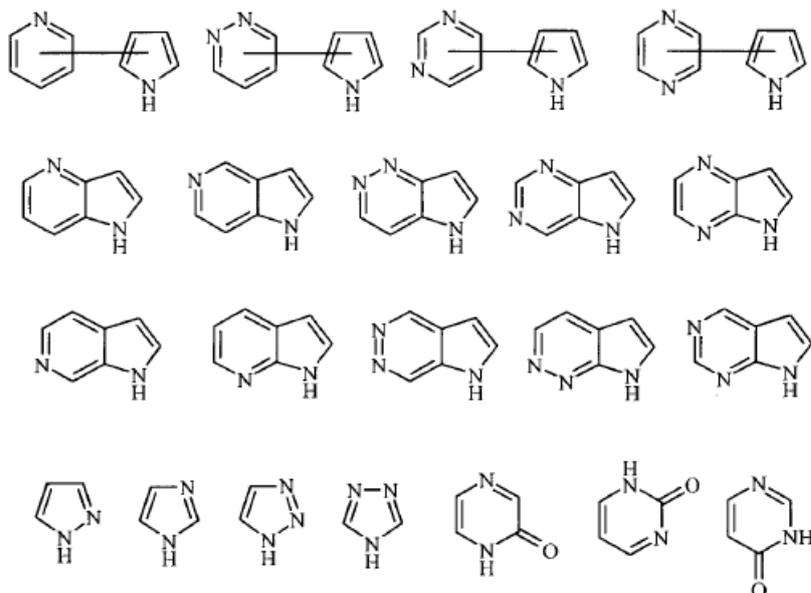
Además más preferentemente, el compuesto orgánico al menos bidentado es uno de los ácidos tricarboxílicos mencionados a modo de ejemplo anteriormente como tal.

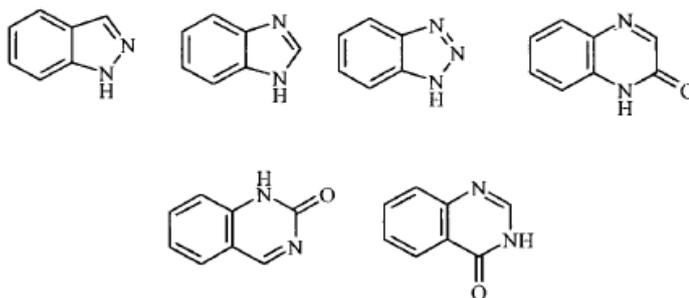
Ejemplos de un compuesto orgánico al menos bidentado, que se derivan de un ácido tetracarboxílico, son

20 Ácido 1,1-dioxido-perilo[1,12-BCD]tiofen-3,4,9,10-tetracarboxílico, ácidos perilenotetracarboxílicos tales como ácido perilen-3,4,9,10-tetracarboxílico o ácido perilen-1,12-sulfon-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-benzenotetracarboxílico, ácido 1,2,11,12-dodecanotetracarboxílico, ácido 1,2,5,6-hexano-tetracarboxílico, ácido 1,2,7,8-octanotetracarboxílico, ácido 1,4,5,8-naftalenotetracarboxílico, ácido 1,2,9,10-decanotetracarboxílico, ácido benzofenonatetracarboxílico, ácido 3,3',4,4'-benzo-fenonatetracarboxílico, ácido tetrahidrofuranotetracarboxílico o ácidos ciclopentanotetracarboxílicos tales como ácido ciclopentano-1,2,3,4-tetracarboxílico.

Además más preferentemente en el caso del compuesto orgánico al menos bidentado se trata de uno de los ácidos tetracarboxílicos mencionados anteriormente a modo de ejemplo como tal.

30 Heterociclos preferidos como compuestos orgánicos al menos bidentados, en los que tiene lugar un enlace coordinativo a través de los heteroátomos de anillo, son los siguientes sistemas de anillo sustituidos o no sustituidos:





De manera muy especialmente preferente se emplean opcionalmente ácidos di-, tri- o tetracarboxílicos aromáticos mono-, di-, tri-, tetra- o más núcleos al menos mono sustituidos, pudiendo contener cada uno de los núcleos al menos un heteroátomo, pudiendo contener dos o más núcleos heteroátomos iguales o diferentes. Por ejemplo se prefieren ácidos dicarboxílicos de un solo núcleo, ácidos tricarboxílicos de un solo núcleo, ácidos tetracarboxílicos de un solo núcleo, ácidos dicarboxílicos de dos núcleos, ácidos tricarboxílicos de dos núcleos, ácidos tetracarboxílicos de dos núcleos, ácidos dicarboxílicos de tres núcleos, ácidos tricarboxílicos de tres núcleos, ácidos tetracarboxílicos de tres núcleos, ácidos dicarboxílicos de cuatro núcleos, ácidos tricarboxílicos de cuatro núcleos y/o ácidos tetracarboxílicos de cuatro núcleos. Heteroátomos adecuados son por ejemplo N, O, S, B, P heteroátomos preferidos son, en este sentido N, S y/u O. Como sustituyente adecuado puede mencionarse a este respecto, entre otros, -OH, un grupo nitro, un grupo amino o un grupo alquilo o alcoxi.

En particular preferentemente se emplean como compuestos orgánicos al menos bidentados imidazolatos, tales como imidazolato de 2-metilo, ácido acetilendicarboxílico (ADC), ácido alcanfordicarboxílico, ácido fumárico, ácido succínico, ácidos benzenodicarboxílicos tales como ácido ftálico, ácido isoftálico, ácido tereftálico (BDC), ácido aminotereftálico, trietilendiamina (TE-DA), ácidos naftalenodicarboxílicos (NDC), ácidos bifenildicarboxílicos tales como por ejemplo ácido 4,4'-bifenildicarboxílico (BPDC), ácidos pirazindicarboxílicos, tales como ácido 2,5-pirazindicarboxílico, ácidos bipyridindicarboxílicos tales como por ejemplo ácidos 2,2'-bipyridindicarboxílicos tales como por ejemplo ácido 2,2'-bipyridin-5,5'-dicarboxílico, ácidos benzenotricarboxílicos tales como por ejemplo ácido 1,2,3-, 1,2,4-benzenotricarboxílico o ácido 1,3,5-benzenotricarboxílico (BTC), ácido benzenotetracarboxílico, ácido adamantantetracarboxílico (ATC), adamantandibenzoato (ADB) benzenotribenzoato (BTB), metantetrabenzoato (MTB), adamantantetrabenzoato o ácidos dihidroxitereftálicos tales como por ejemplo ácido 2,5-dihidroxitereftálico (DHBDC), ácido tetrahidropiren-2,7-dicarboxílico (HPDC), ácido bifeniltetracarboxílico (BPTC), 1,3-bis(4-piridil)propano (BPP), ácido piridindicarboxílico, ácido imidazoldicarboxílico.

Se prefieren muy especialmente, entre otros, 2-metilimidazol, 2-etilimidazol, ácido ftálico, ácido isoftálico, ácido tereftálico, 2,6-naftalenodicarboxílico, ácido 1,4-naftalenodicarboxílico, ácido 1,5-naftalenodicarboxílico, ácido 1,2,3-benzenotricarboxílico, ácido 1,2,4-benzenotricarboxílico, ácido 1,3,5-benzenotricarboxílico, ácido 1,2,4,5-benzenotetracarboxílico, aminoBDC, TEDA, ácido fumárico, dicarboxilato de bifenilo, ácido 1,5- y 2,6-naftalenodicarboxílico, ácido terc-butilisoftálico, ácido dihidroxibenzoico, BTB, HPDC, BPTC, BPP, ácido piridindicarboxílico, ácido imidazoldicarboxílico.

Además de estos compuestos orgánicos al menos bidentados, el material estructural organometálico puede comprender también uno o varios ligandos monodentados y/o uno o varios ligandos al menos bidentados, que no se derivan de un ácido di-, tri- o tetracarboxílico. Como ligandos bidentados sirven también ácido fórmico y ácido acético.

En una forma de realización preferida, por lo tanto, el al menos un compuesto orgánico al menos bidentado se deriva de ácido fórmico, ácido acético o de un ácido di-, tri- o tetracarboxílico.

El término "derivar" significa en el contexto de la presente invención, que el al menos un compuesto orgánico al menos bidentado se encuentra en forma parcial o completamente desprotonada. Además el término significa "derivar", significa que el al menos un compuesto orgánico al menos bidentado puede presentar sustituyentes adicionales. De este modo, un ácido di-, tri- o tetracarboxílico puede presentar además de la funcionalidad ácido carboxílico también uno o varios sustituyentes independientemente entre sí, tales como grupos amino, hidroxilo, metoxilo, halógeno o metilo. Preferentemente no está presente ningún sustituyente adicional. En el contexto de la presente invención el término "derivar" significa también que la funcionalidad ácido carboxílico puede encontrarse como análogo de azufre. Análogos de azufre son -C(=O)SH así como sus tautómeros y -C(S)SH.

Además de estos compuestos orgánicos al menos bidentados, el material estructural organometálico puede comprender también uno o varios ligandos monodentados.

Disolventes adecuados para la producción del material estructural organometálico son, entre otros, etanol, dimetilformamida, tolueno, metanol, clorobenceno, dietilformamida, dimetilsulfóxido, agua, peróxido de hidrógeno, metilamina, hidróxido de sodio, N-metilpolidonéter, acetonitrilo, cloruro de bencilo, trietilamina, etilenglicol y mezclas de los mismos. Otros iones metálicos, compuestos orgánicos al menos bidentados y disolventes para la producción

de MOF se describen, entre otros, en el documento US-A 5.648.508 o el documento DE-A 101 11 230.

5 El tamaño de poro del material estructural organometálico puede controlarse mediante la elección del ligando adecuado y/o del compuesto orgánico al menos bidentado. En general, es válido que cuanto mayor es el compuesto orgánico mayor es el tamaño de poro. Preferentemente, el tamaño de poro asciende de 0,2 nm a 30 nm, de manera especialmente preferente el tamaño de poro se encuentra en el intervalo de 0,3 nm a 3 nm con respecto al material cristalino.

10 En un cuerpo moldeado que contiene un material estructural organometálico aparecen sin embargo también poros más grandes, cuya distribución de tamaño puede variar. Preferentemente sin embargo más del 50 % del volumen de poro total, en particular más del 75 %, se forma por poros con un diámetro de poro de hasta 1000 nm. Preferentemente, sin embargo una gran parte del volumen de poro se forma por poros de dos intervalos de diámetro. Se prefiere además por lo tanto cuando más del 25 % del volumen de poro total, en particular más del 50 % del volumen de poro total se forma por poros que se encuentran en un intervalo de diámetro de 100 nm a 800 nm y cuando más del 15 % del volumen de poro total, en particular más del 25 % del volumen de poro total se forma por
15 poros que se encuentran en un intervalo de diámetro o hasta 10 nm. La distribución de poros puede determinarse por medio de porosimetría de mercurio.

A continuación se indican ejemplos de materiales estructurales organometálicos. Además de la designación del material estructural, del metal así como del ligando al menos bidentado se indica además el disolvente así como los parámetros de celda (ángulo α , β y γ así como las distancias A, B y C en Å). Estos últimos se determinaron mediante difracción de rayos X.

MOF-n	Sustancias contenidas relación molar M+L	Disolvente(s)	α	β	γ	a	b	c	Grupo espacial
MOF-0	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O H ₃ (BTC)	etanol	90	90	120	16,711	16,711	14,189	P6(3)/Mcm
MOF-2	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O (0,246 mmol) H ₂ (BDC) 0,241 mmol	DMF tolueno	90	102,8	90	6,718	15,49	12,43	P2(1)/n
MOF-3	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O (1,89 mmol) H ₂ (BDC) (1,93mmol)	DMF MeOH	99,72	111,11	108,4	9,726	9,911	10,45	P-1
MOF-4	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O (1,00 mmol) H ₃ (BTC) (0,5 mmol)	etanol	90	90	90	14,728	14,728	14,728	P2(1)3
MOF-5	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O (2,22 mmol) H ₂ (BDC) (2,17 mmol)	DMF clorobenceno	90	90	90	25,669	25,669	25,669	Fm-3m
MOF-38	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O (0,27 mmol) H ₃ (BTC) (0,15 mmol)	DMF clorobenceno	90	90	90	20,657	20,657	17,84	14cm
MOF-31 Zn(ADC) ₂	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0,4 mmol H ₂ (ADC) 0,8 mmol	etanol	90	90	90	10,821	10,821	10,821	Pn(-3)m
MOF-12 Zn ₂ (ATC)	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0,3 mmol H ₄ (ATC) 0,15 mmol	etanol	90	90	90	15,745	16,907	18,167	Pbca
MOF-20 ZnNDC	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0,37 mmol H ₂ NDC 0,36 mmol	DMF clorobenceno	90	92,13	90	8,13	16,444	12,807	P2(1)/c
MOF-37	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0,2 mmol H ₂ NDC 0,2 mmol	DEF clorobenceno	72,38	83,16	84,33	9,952	11,576	15,556	P-1
MOF-8 Tb ₂ (ADC)	Tb(NO ₃) ₃ ·5H ₂ O 0,10 mmol H ₂ ADC 0,20 mmol	DMSO MeOH	90	115,7	90	19,83	9,822	19,183	C2/c
MOF-9 Tb ₂ (ADC)	Tb(NO ₃) ₃ ·5H ₂ O 0,08 mmol H ₂ AADB 0,12 mmol	DMSO	90	102,09	90	27,056	16,795	28,139	C2/c
MOF-6	Tb(NO ₃) ₃ ·5H ₂ O 0,30 mmol H ₂ (BDC) 0,30 mmol	DMF MeOH	90	91,28	90	17,599	19,996	10,545	P21/c
MOF-7	Tb(NO ₃) ₃ ·5H ₂ O 0,15 mmol H ₂ (BDC) 0,15 mmol	H ₂ O	102,3	91,12	101,5	6,142	10,069	10,096	P-1
MOF-69A	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0,083 mmol 4,4'BPDC 0,041 mmol	DEF H ₂ O ₂ MeNH ₂	90	111,6	90	23,12	20,92	12	C2/c
MOF-69B	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0,083 mmol 2,6-NCD 0,041 mmol	DEF H ₂ O ₂ MeNH ₂	90	95,3	90	20,17	18,55	12,16	C2/c

(continuación)

MOF-n	Sustancias contenidas relación molar M+L	Disolvente(s)	α	β	γ	a	b	c	Grupo espacial
MOF-11 Cu ₂ (ATC)	Cu(NO ₃) ₂ ·2,5H ₂ O 0,47 mmol H ₂ ATC 0,22 mmol	H ₂ O	90	93,86	90	12,987	11,22	11,336	C2/c
MOF-11 Cu ₂ (ATC) deshidr.			90	90	90	8,4671	8,4671	14,44	P42/ mnc
MOF-14 Cu ₃ (BTB)	Cu(NO ₃) ₂ ·2,5H ₂ O 0,28 mmol H ₃ BTB 0,052 mmol	H ₂ O DMF EtOH	90	90	90	26,946	26,946	26,946	Im-3
MOF-32 Cd (ATC)	Cd(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,24 mmol H ₄ ATC 0,10 mmol	H ₂ O NaOH	90	90	90	13,468	13,468	13,468	P(-4)3m
MOF-33 Zn ₂ (ATB)	ZnCl ₂ 0,15 mmol H ₄ ATB 0,02 mmol	H ₂ O DMF EtOH	90	90	90	19,561	15,255	23,404	Imma
MOF-34 Ni(ATC)	Ni(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0,24 mmol H ₄ ATC 0,10 mmol	H ₂ O NaOH	90	90	90	10,066	11,163	19,201	P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁
MOF-36 Zn ₂ (MTB)	Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,20 mmol H ₄ MTB 0,04 mmol	H ₂ O DMF	90	90	90	15,745	16,907	18,167	Pbca
MOF-39 Zn ₃ O(HBTB)	Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,27 mmol H ₃ BTB 0,07 mmol	H ₂ O DMF EtOH	90	90	90	17,158	21,591	25,308	Pnma
NO305	FeCl ₂ ·4H ₂ O 5,03 mmol ácido fórmico 86,90 mmol	DMF	90	90	120	8,2692	8,2692	63,566	R-3c
NO306A	FeCl ₂ ·4H ₂ O 5,03 mmol ácido fórmico 86,90 mmol	DEF	90	90	90	9,9364	18,374	18,374	Pbcn
N029 MOF-0 similar	Mn(Ac) ₂ ·4H ₂ O 0,46 mmol H ₃ BTC 0,69 mmol	DMF	120	90	90	14,16	33,521	33,521	P-1
BPR48 A2	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0,012 mmol H ₂ BDC 0,012 mmol	DMSO tolueno	90	90	90	14,5	17,04	18,02	Pbca
BPR69 B1	Cd(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,0212 mmol H ₂ BDC 0,0428 mmol	DMSO	90	98,76	90	14,16	15,72	17,66	Cc
BPR92 A2	Co(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0,018 mmol H ₂ BDC 0,018 mmol	NMP	106,3	107,63	107,2	7,5308	10,942	11,025	P1
BPR95 C5	Cd(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,012 mmol H ₂ BDC 0,36 mmol	NMP	90	112,8	90	14,460	11,085	15,829	P2(1)/n

(continuación)

MOF-n	Sustancias contenidas relación molar M+L	Disolvente(s)	α	β	γ	a	b	c	Grupo espacial
Cu C ₆ H ₄ O ₆	Cu(NO ₃) ₂ ·5H ₂ O 0,370 mmol H ₂ BDC(OH) ₂ 0,37 mmol	DMF clorobenceno	90	105,29	90	15,259	14,816	14,13	P2(1)/c
M(BTC) MOF-0 similar	Co(SO ₄) H ₂ O 0,055 mmol H ₃ BTC 0,037 mmol	DMF	como MOF-0						
Tb(C ₆ H ₄ O ₆)	Tb(NO ₃) ₃ ·5H ₂ O 0,370 mmol H ₂ (C ₆ H ₄ O ₆) 0,56 mmol	DMF clorobenceno	104,6	107,9	97,147	10,491	10,981	12,541	P-1
Zn (C ₂ O ₄)	ZnCl ₂ 0,370 mmol ácido oxálico 0,37 mmol	DMF clorobenceno	90	120	90	9,4168	9,4168	8,464	P(-3)1m
Co(CHO)	Co(NO ₃) ₂ ·5H ₂ O 0,043 mmol ácido fórmico 1,60 mmol	DMF	90	91,32	90	11,328	10,049	14,854	P2(1)/n
Cd(CHO)	Cd(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,185 mmol ácido fórmico 0,185 mmol	DMF	90	120	90	8,5168	8,5168	22,674	R-3c
CU(C ₃ H ₂ O ₄)	Cu(NO ₃) ₂ ·2,5H ₂ O 0,043 mmol ácido malónico 0,192 mmol	DMF	90	90	90	8,366	8,366	11,919	P43
Zn ₆ (NDC) ₆ MOF-48	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0,097 mmol 14 NDC 0,069 mmol	DMF clorobenceno H ₂ O ₂	90	95,902	90	19,504	16,482	14,64	C2/m
MOF-47	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0,185 mmol H ₂ (BDC[CH ₃] ₄) 0,185 mmol	DMF clorobenceno H ₂ O ₂	90	92,55	90	11,303	16,029	17,535	P2(1)/c
MO25	Cu(NO ₃) ₂ ·2,5H ₂ O 0,084 mmol BPhDC 0,085 mmol	DMF	90	112,0	90	23,880	16,834	18,389	P2(1)/c
Cu-Tio	Cu(NO ₃) ₂ ·2,5H ₂ O 0,084 mmol ácido tiofendicarboxílico 0,085 mmol	DEF	90	113,6	90	15,474 7	14,514	14,032	P2(1)/c
CIBDC1	Cu(NO ₃) ₂ ·2,5H ₂ O 0,084 mmol H ₂ (BDCCl ₂) 0,085 mmol	DMF	90	105,6	90	14,911	15,622	18,413	C2/c
MOF-101	Cu(NO ₃) ₂ ·2,5H ₂ O 0,084 mmol BrBDC 0,085 mmol	DMF	90	90	90	21,607	20,607	20,073	Fm3m
Zn ₃ (BTC) ₂	ZnCl ₂ 0,033 mmol H ₃ BTC 0,033 mmol	DMF EtOH añadir base	90	90	90	26,572	26,572	26,572	Fm-3m

(continuación)

MOF-n	Sustancias contenidas relación molar M+L	Disolvente(s)	α	β	γ	a	b	c	Grupo espacial
MOF-j	$\text{Co}(\text{CH}_3\text{CO}_2)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ (1,65 mmol) $\text{H}_3(\text{BZC})$ (0,95 mmol)	H_2O	90	112,0	90	17,482	12,963	6,559	C2
MOF-n	$\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O} \cdot \text{H}_3(\text{BTC})$	etanol	90	90	120	16,711	16,711	14,189	$\text{P6}(3)/\text{mcm}$
PbBDC	$\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ (0,181 mmol) $\text{H}_2(\text{BDC})$ (0,181 mmol)	DMF etanol	90	102,7	90	8,3639	17,991	9,9617	$\text{P2}(1)/\text{n}$
Znhex	$\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (0,171 mmol) $\text{H}_3(\text{BTB})$ (0,114 mmol)	DMF p-xileno etanol	90	90	120	37,116 5	37,117	30,019	$\text{P3}(1)/\text{c}$
AS16	FeBr_2 0,927 mmol $\text{H}_2(\text{BDC})$ 0,927 mmol	DMF anhidra	90	90,13	90	7,2595	8,7894	19,484	$\text{P2}(1)/\text{c}$
AS27-2	FeBr_2 0,927 mmol $\text{H}_3(\text{BDC})$ 0,464 mmol	DMF anhidra	90	90	90	26,735	26,735	26,735	Fm3m
AS32	FeCl_3 1,23 mmol $\text{H}_2(\text{BDC})$ 1,23 mmol	DMF anhidra etanol	90	90	120	12,535	12,535	18,479	$\text{P6}(2)/\text{c}$
AS54-3	FeBr_2 0,927 BPDC 0,927 mmol	DMF anhidra n-Propanol	90	109,98	90	12,019	15,286	14,399	C2
AS61-4	FeBr_2 0,927 mmol m-BDC 0,927 mmol	piridina anhidra	90	90	120	13,017	13,017	14,896	$\text{P6}(2)/\text{c}$
AS68-7	FeBr_2 0,927 mmol m-BDC 1,204 mmol	DMF anhidra piridina	90	90	90	18,340 7	10,036	18,039	$\text{Pca}2_1$
Zn(ADC)	$\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ 0,37 mmol $\text{H}_2(\text{ADC})$ 0,36 mmol	DMF clorobenceno	90	99,85	90	16,764	9,349	9,635	C2/c
MOF-12 Zn ₂ (ATC)	$\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ 0,30 mmol $\text{H}_4(\text{ATC})$ 0,15 mmol	etanol	90	90	90	15,745	16,907	18,167	Pbca
MOF-20 ZnNDC	$\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ 0,37 mmol H_2NDC 0,36 mmol	DMF clorobenceno	90	92,13	90	8,13	16,444	12,807	$\text{P2}(1)/\text{c}$
MOF-37	$\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ 0,20 mmol H_2NDC 0,20 mmol	DEF clorobenceno	72,38	83,16	84,33	9,952	11,576	15,556	P-1
Zn(NDC)(DMSO)	$\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ H_2NDC	DMSO	68,08	75,33	88,31	8,631	10,207	13,114	P-1
Zn(NDC)	$\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ H_2NDC		90	99,2	90	19,289	17,628	15,052	C2/c
Zn(HPDC)	$\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 0,23 mmol $\text{H}_2(\text{HPDC})$ 0,05 mmol	DMF H_2O	107,9	105,06	94,4	8,326	12,085	13,767	P-1

(continuación)

MOF-n	Sustancias contenidas relación molar M+L	Disolvente(s)	α	β	γ	a	b	c	Grupo espacial
Co(HPDC)	Co(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0,21 mmol H ₂ (HPDC) 0,06 mmol	DMF H ₂ O/ etanol	90	97,69	90	29,677	9,63	7,981	C2/c
Zn ₃ (PDC)2,5	Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,17 mmol H ₂ (HPDC) 0,05 mmol	DMF/CIBZ H ₂ O/ TEA	79,34	80,8	85,83	8,564	14,046	26,428	P-1
Cd ₂ (TPDC)2	Cd(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,06 mmol H ₂ (HPDC) 0,06 mmol	metanol/ CHP H ₂ O	70,59	72,75	87,14	10,102	14,412	14,964	P-1
Tb(PDC)1,5	Tb(NO ₃) ₃ ·5H ₂ O 0,21 mmol H ₂ (PDC) 0,034 mmol	DMF H ₂ O/ etanol	109,8	103,61	100,14	9,829	12,11	14,628	P-1
ZnDBP	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0,05 mmol Dibencilfosfato 0,10 mmol	MeOH	90	93,67	90	9,254	10,762	27,93	P2/n
Zn ₃ (BPDC)	ZnBr ₂ 0,021 mmol 4,4'BPDC 0,005 mmol	DMF	90	102,76	90	11,49	14,79	19,18	P21/n
CdBDC	Cd(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,100 mmol H ₂ (BDC) 0,401 mmol	DMF Na ₂ SiO ₃ (ac.)	90	95,85	90	11,2	11,11	16,71	P21/n
Cd-mBDC	Cd(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,009 mmol H ₂ (mBDC) 0,018 mmol	DMF MeNH ₂	90	101,1	90	13,69	18,25	14,91	C2/c
Zn ₄ OBND C	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0,041 mmol BND C	DEF MeNH ₂ H ₂ O ₂	90	90	90	22,35	26,05	59,56	Fmmm
Eu(TCA)	Eu(NO ₃) ₃ ·6H ₂ O 0,14 mmol TCA 0,026 mmol	DMF clorobenceno	90	90	90	23,325	23,325	23,325	Pm-3n
Tb(TCA)	Tb(NO ₃) ₃ ·6H ₂ O 0,069 mmol TCA 0,026 mmol	DMF clorobenceno	90	90	90	23,272	23,272	23,372	Pm-3n
Formiato	Ce(NO ₃) ₃ ·6H ₂ O 0,138 mmol ácido fórmico 0,43 mmol	H ₂ O etanol	90	90	120	10,668	10,667	4,107	R-3m
	FeCl ₂ ·4H ₂ O 5,03 mmol ácido fórmico 86,90 mmol	DMF	90	90	120	8,2692	8,2692	63,566	R-3c
	FeCl ₂ ·4H ₂ O 5,03 mmol ácido fórmico 86,90 mmol	DEF	90	90	90	9,9364	18,374	18,374	Pbcn
	FeCl ₂ ·4H ₂ O 5,03 mmol ácido fórmico 86,90 mmol	ácido fórmico DEF	90	90	90	8,335	8,335	13,34	P-31c
NO330	FeCl ₂ ·4H ₂ O 0,50 mmol ácido fórmico 8,69 mmol	formamida	90	90	90	8,7749	11,655	8,3297	Pnna

(continuación)

MOF-n	Sustancias contenidas relación molar M+L	Disolvente(s)	α	β	γ	a	b	c	Grupo espacial
NO332	FeCl ₂ ·4H ₂ O 0,50 mmol ácido fórmico 8,69 mmol	DIP	90	90	90	10,031 3	18,808	18,355	Pbcn
NO333	FeCl ₂ ·4H ₂ O 0,50 mmol ácido fórmico 8,69 mmol	DBF	90	90	90	45,275 4	23,861	12,441	Cmcm
NO335	FeCl ₂ ·4H ₂ O 0,50 mmol ácido fórmico 8,69 mmol	CHF	90	91,372	90	11,596 4	10,187	14,945	P2(1)/n
NO336	FeCl ₂ ·4H ₂ O 0,50 mmol ácido fórmico 8,69 mmol	MFA	90	90	90	11,794 5	48,843	8,4136	Pbcn
NO13	Mn(Ac) ₂ ·4H ₂ O 0,46 mmol ácido benzoico 0,92 mmol biperidina 0,46 mmol	etanol	90	90	90	18,66	11,762	9,418	Pbcn
NO29 MOF-0 similar	Mn(Ac) ₂ ·4H ₂ O 0,46 mmol H ₃ BTC 0,69 mmol	DMF	120	90	90	14,16	33,521	33,521	P-1
Mn(hfac) ₂ (O ₂ CC ₆ H ₅)	Mn(Ac) ₂ ·4H ₂ O 0,46 mmol Hfac 0,92 mmol biperidina 0,46 mmol	éter	90	95,32	90	9,572	17,162	14,041	C2/c
BPR43G2	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0,0288 mmol H ₂ BDC 0,0072 mmol	DMF CH ₃ CN	90	91,37	90	17,96	6,38	7,19	C2/c
BPR48A2	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0,012 mmol H ₂ BDC 0,012 mmol	DMSO tolueno	90	90	90	14,5	17,04	18,02	Pbca
BPR49B1	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0,024 mmol H ₂ BDC 0,048 mmol	DMSO metanol	90	91,172	90	33,181	9,824	17,884	C2/c
BPR56E1	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0,012 mmol H ₂ BDC 0,024 mmol	DMSO n-Propanol	90	90,096	90	14,587 3	14,153	17,183	P2(1)/n
BPR68D10	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0,0016 mmol H ₃ BTC 0,0064 mmol	DMSO benceno	90	95,316	90	10,062 7	10,17	16,413	P2(1)/c
BPR69B1	Cd(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,0212 mmol H ₂ BDC 0,0428 mmol	DMSO	90	98,76	90	14,16	15,72	17,66	Cc
BPR73E4	Cd(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,006 mmol H ₂ BDC 0,003 mmol	DMSO tolueno	90	92,324	90	8,7231	7,0568	18,438	P2(1)/n
BPR76D5	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O 0,0009 mmol H ₂ BzPDC 0,0036 mmol	DMSO	90	104,17	90	14,419 1	6,2599	7,0611	Pc
BPR80B5	Cd(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,018 mmol H ₂ BDC 0,036 mmol	DMF	90	115,11	90	28,049	9,184	17,837	C2/c
BPR80H5	Cd(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,027 mmol H ₂ BDC 0,027 mmol	DMF	90	119,06	90	11,474 6	6,2151	17,268	P2/c
BPR82C6	Cd(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,0068 mmol H ₂ BDC 0,202 mmol	DMF	90	90	90	9,7721	21,142	27,77	Fdd2

(continuación)

MOF-n	Sustancias contenidas relación molar M+L	Disolvente(s)	α	β	γ	a	b	c	Grupo espacial
BPR86C3	$\text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ 0,0025 mmol H_2BDC 0,075 mmol	DMF	90	90	90	18,344 9	10,031	17,983	Pca2(1)
BPR86H6	$\text{Cd}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ 0,010 mmol H_2BDC 0,010 mmol	DMF	80,98	89,69	83,41 2	9,8752	10,263	15,362	P-1
	$\text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	NMP	106,3	107,63	107,2	7,5308	10,942	11,025	P1
BPR95A2	$\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ 0,012 mmol H_2BDC 0,012 mmol	NMP	90	102,9	90	7,4502	13,767	12,713	P2(1)/c
CUC ₆ F ₄ O ₄	$\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$ 0,370 mmol $\text{H}_2\text{BDC}(\text{OH})_2$ 0,37 mmol	DMF clorobenceno	90	98,834	90	10,967 5	24,43	22,553	P2(1)/h
Fe fórmico	$\text{FeCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 0,370 mmol ácido fórmico 0,37 mmol	DMF	90	91,543	90	11,495	9,963	14,48	P2(1)/h
Mg fórmico	$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ 0,370 mmol ácido fórmico 0,37 mmol	DMF	90	91,359	90	11,383	9,932	14,656	P2(1)/h
MgC ₆ H ₄ O ₆	$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ 0,370 mmol $\text{H}_2\text{BDC}(\text{OH})_2$ 0,37 mmol	DMF	90	96,624	90	17,245	9,943	9,273	C2/c
Zn C ₂ H ₄ BDC MOF-38	ZnCl_2 0,44 mmol CBBDC 0,261 mmol	DMF	90	94,714	90	7,3386	16,834	12,52	P2(1)/h
MOF-49	ZnCl_2 0,44 mmol m-BDC 0,261 mmol	DMF CH ₃ CN	90	93,459	90	13,509	11,984	27,039	P2/c
MOF-26	$\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ 0,084 mmol DCPE 0,085 mmol	DMF	90	95,607	90	20,879 7	16,017	26,176	P2(1)/h
MOF-112	$\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$ 0,084 mmol o-Br-m-BDC 0,085 mmol	DMF etanol	90	107,49	90	29,324 1	21,297	18,069	C2/c
MOF-109	$\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$ 0,084 mmol KDB 0,085 mmol	DMF	90	111,98	90	23,880 1	16,834	18,389	P2(1)/c
MOF-111	$\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$ 0,084 mmol o-BrBDC 0,085 mmol	DMF etanol	90	102,16	90	10,676 7	18,781	21,052	C2/c
MOF-110	$\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$ 0,084 mmol ácido tiotendicarboxílico 0,085 mmol	DMF	90	90	120	20,065 2	20,065	20,747	R-3/m
MOF-107	$\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$ 0,084 mmol ácido tiotendicarboxílico 0,085 mmol	DEF	104,8	97,075	95,20 6	11,032	18,067	18,452	P-1
MOF-108	$\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$ 0,084 mmol ácido tiotendicarboxílico 0,085 mmol	DBF/ metanol	90	113,63	90	15,474 7	14,514	14,032	C2/c

(continuación)

MOF-n	Sustancias contenidas relación molar M+L	Disolvente(s)	α	β	γ	a	b	c	Grupo espacial
MOF-102	Cu(NO ₃) ₂ ·2,5H ₂ O 0,084 mmol H ₂ (BDCC12) 0,085 mmol	DMF	91,63	106,24	112,0 1	9,3845	10,794	10,831	P-1
CiIbdc1	Cu(NO ₃) ₂ ·2,5H ₂ O 0,084 mmol H ₂ (BDCC12) 0,085 mmol	DEF	90	105,56	90	14,911	15,622	18,413	P-1
Cu(NMOP)	Cu(NO ₃) ₂ ·2,5H ₂ O 0,084 mmol NBDC 0,085 mmol	DMF	90	102,37	90	14,923 8	18,727	15,529	P2(1)/m
Tb(BTC)	Tb(NO ₃) ₃ ·5H ₂ O 0,033 mmol H ₃ BTC 0,033 mmol	DMF	90	106,02	90	18,698 6	11,368	19,721	
Zn ₃ (BTC) ₂ conc.	ZnCl ₂ 0,033 mmol H ₃ BTC 0,033 mmol	DMF etanol	90	90	90	26,572	26,572	26,572	Fm-3m
Zn ₄ O(NDC)	Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,066 mmol 14NDC 0,066 mmol	DMF etanol	90	90	90	41,559 4	18,818	17,574	aba2
CdTDC	Cd(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,014 mmol tiofeno 0,040 mmol DABCO 0,020 mmol	DMF H ₂ O	90	90	90	12,173	10,485	7,33	Pmma
IRMOF-2	Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,160 mmol o-Br-BDC 0,60 mmol	DEF	90	90	90	25,772	25,772	25,772	Fm-3m
IRMOF-3	Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,20 mmol H ₂ N-BDC 0,60 mmol	DEF etanol	90	90	90	25,747	25,747	25,747	Fm-3m
IRMOF-4	Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,11 mmol [C ₃ H ₇ O] ₂ -BDC 0,48 mmol	DEF	90	90	90	25,849	25,849	25,849	Fm-3m
IRMOF-5	Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,13 mmol [C ₅ H ₁₁ O] ₂ -BDC 0,50 mmol	DEF	90	90	90	12,882	12,882	12,882	Pm-3m
IRMOF-6	Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,20 mmol [C ₂ H ₄]-BDC 0,60 mmol	DEF	90	90	90	25,842	25,842	25,842	Fm-3m
IRMOF-7	Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,07 mmol 1,4NDC 0,20 mmol	DEF	90	90	90	12,914	12,914	12,914	Pm-3m
IRMOF-8	Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,55 mmol 2,6NDC 0,42 mmol	DEF	90	90	90	30,092	30,092	30,092	Fm-3m
IRMOF-9	Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,05 mmol BPDC 0,42 mmol	DEF	90	90	90	17,147	23,322	25,255	Pnmm
IRMOF-10	Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,02 mmol BPDC 0,012 mmol	DEF	90	90	90	34,281	34,281	34,281	Fm-3m
IRMOF-11	Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,05 mmol HPDC 0,20 mmol	DEF	90	90	90	24,822	24,822	56,734	R-3m
IRMOF-12	Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,017 mmol HPDC 0,12 mmol	DEF	90	90	90	34,281	34,281	34,281	Fm-3m

(continuación)

MOF-n	Sustancias contenidas relación molar M+L	Disolvente(s)	α	β	γ	a	b	c	Grupo espacial
IRMOF-13	Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,048 mmol PDC 0,31 mmol	DEF	90	90	90	24,822	24,822	56,734	R-3m
IRMOF-14	Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,17 mmol PDC 0,12 mmol	DEF	90	90	90	34,381	34,381	34,381	Fm-3m
IRMOF-15	Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,063 mmol TPDC 0,025 mmol	DEF	90	90	90	21,459	21,459	21,459	Im-3m
IRMOF-16	Zn(NO ₃) ₂ ·4H ₂ O 0,0126 mmol TPDC 0,05 mmol	DEF NMP	90	90	90	21,49	21,49	21,49	Pm-3m

ADC	ácido acetilenodicarboxílico
NDC	ácido naftalenodicarboxílico
BDC	ácido bencenodicarboxílico
ATC	ácido adamantantetracarboxílico
BTC	ácido bencenotricarboxílico
BTB	ácido bencenotribenzoico
MTB	ácido metanotetrabenzoico
ATB	ácido adamanotantetrabenzoico
ADB	ácido adamantanodibenzoico

5 Otros materiales estructurales organometálicos 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 bibliografía.

10 Materiales estructurales organometálicos especialmente preferidos son MIL-53, Zn-ácido t-buisoftálico, 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, Zn-2-metilimidazolato, Zn-2-aminoimidazolato, Cu-bifenildicarboxilato-TEDA, MOF-74, Cu-BPP, Sc-tereftalato. Aún son más preferidos Sc-tereftalato, Al-BDC y Al-BTC.

Además se prefieren Mn-BDC, Mn-NDC, Mn-formiato, Al-BDC, Al-imidazoldicarboxilato, Y-piridindicarboxilato, Cu-BTC, Mg-NDC.

15 Además del método convencional para la producción de los MOF, tal como se describe por ejemplo en el documento US 5.648.508, estos pueden producirse también de manera electroquímica. A este respecto, se remite al documento DE-A 103 55 087 así como al documento WO-A 2005/049892. Los materiales estructurales organometálicos producidos de esta manera presentan propiedades especialmente adecuadas en relación con la adsorción y desorción de sustancias químicas, en particular de gases.

20 Independientemente de su producción, el material estructural organometálico se produce en forma pulverulenta o cristalina. Este puede emplearse como tal como sorbente solos o junto con otros sorbentes u otros materiales. Preferentemente esto se produce como producto a granel. Además, el material estructural organometálico puede convertirse en un cuerpo moldeado. En una forma de realización preferida el material estructural organometálico se encuentra como cuerpo moldeado.

25 Procedimientos preferidos son, en este sentido, la formación de hebras o la formación de comprimidos. En la producción de cuerpos moldeados, pueden colocarse para el material estructural organometálico, materiales adicionales, tales como por ejemplo aglutinantes, lubricantes u otros aditivos. Así mismo es concebible que se produzcan mezclas de material estructural y otros adsorbentes por ejemplo carbón activo como cuerpo moldeado o que resulten cuerpos moldeados por separado, que se emplean entonces como mezclas de cuerpo moldeado.

30 En cuanto a las posibles geometrías de estos cuerpos moldeados no existe esencialmente ninguna limitación. Por ejemplo pueden mencionarse, entre otros, gránulos, tales como por ejemplo gránulos en forma de disco, píldoras, esferas, granulados, extruidos tales como por ejemplo filamentos, panales, rejillas o cuerpos huecos.

Preferentemente, el material estructural organometálico se encuentra como cuerpo moldeado. Configuraciones preferidas son comprimidos así como extruidos en forma de filamento. Los cuerpos moldeados se extienden preferentemente en al menos una dimensión del espacio en el intervalo de 0,2 mm a 30 mm, más preferentemente de 0,5 mm a 5 mm, en particular de 1 mm a 3 mm.

35 Para la producción de estos cuerpos moldeados son posibles en principio todos los procedimientos adecuados. Se prefieren en particular las siguientes realizaciones de procedimiento:

- 40 - Amasar el material estructural solo o junto con al menos un aglutinante y/o al menos un agente de masa pastosa y/o al menos un compuesto de templado con la obtención de una mezcla; conformar la mezcla obtenida por medio de al menos un método adecuado tal como por ejemplo extrusión; opcionalmente lavar y/o secar y/o calcinar el extruido; opcionalmente confección.
- Aplicar el material estructural sobre al menos un material de soporte opcionalmente poroso. El material obtenido puede reprocesarse entonces de acuerdo con el método descrito anteriormente para dar un cuerpo moldeado.
- Aplicar el material estructural sobre al menos un sustrato opcionalmente poroso.

45 Amasar y conformar puede tener lugar de acuerdo con cualquier procedimiento adecuado, tal como se describe por ejemplo en Ullmanns Enzyklopädie der Technischen Chemie, 4ª edición, volumen 2, página 313 y siguientes (1972),

a cuyo contenido a este respecto se incluye en su totalidad por referencia en el contexto de la presente solicitud.

Por ejemplo preferentemente, el amasado y/o la conformación puede tener lugar por medio de una prensa de pistón, prensa de cilindro en presencia o ausencia de al menos un material aglutinante, combinación, peletización, formación de comprimidos, extrusión, co-extrusión, espumación, hilatura, recubrimiento, granulación, preferentemente granulación por pulverización, rociado, secado por pulverización o una combinación de dos o más de estos métodos.

Muy especialmente se producen gránulos y/o comprimidos.

El amasado y/o la conformación puede tener lugar a temperaturas elevadas, tal como, por ejemplo en el intervalo de temperatura ambiente a 300 °C y/o a presión elevada tal como por ejemplo en el intervalo de presión normal hasta algunos cientos de bares y/o en una atmósfera de gas protector tal como por ejemplo en presencia de al menos un gas noble, nitrógeno o una mezcla de dos o más de los mismos.

El amasado y/o la conformación se lleva a cabo de acuerdo con una forma de realización adicional con la adición de al menos un aglutinante, pudiendo emplearse como aglutinante en principio cualquier compuesto químico que garantice la viscosidad deseada para el amasado y/o la conformación de la masa que va a amasarse y/o conformarse. Por consiguiente, aglutinantes en el sentido de la presente invención pueden ser tanto compuestos que aumentan la viscosidad como compuestos que reducen la viscosidad.

Como aglutinantes preferidos entre otros son por ejemplo óxido de aluminio o aglutinantes que contienen óxido de aluminio, tal como se describen por ejemplo en el documento WO 94/29408, dióxido de silicio, tal como por ejemplo en el documento EP 0 592 050 A1, mezclas de dióxido de silicio y óxido de aluminio, tal como se describen por ejemplo en el documento WO 94/13584, minerales de arcilla, tal como se describen por ejemplo en el documento JP 03-037156 A, por ejemplo montmorillonita, caolín, bentonita, hallosita, dickita, nacrita y anauxita, alcoxisilanos, tal como se describen por ejemplo en el documento EP 0 102 544 B1, por ejemplo tetraalcoxisilanos tales como por ejemplo tetrametoxisilano, tetraetoxisilano, tetrapropoxisilano, tetrabutoxisilano, o por ejemplo trialcoxisilanos tales como por ejemplo trimetoxisilano, trietoxisilano, tripropoxisilano, tributoxisilano, alcoxititanatos, por ejemplo tetraalcoxititanatos tales como por ejemplo tetrametoxititanato, tetraetoxititanato, tetrapropoxititanato, tetrabutoxititanato, o por ejemplo trialcoxititanatos tales como por ejemplo trimetoxititanato, trietoxititanato, tripropoxititanato, tributoxititanato, alcoxizirconatos, por ejemplo tetraalcoxizirconatos tales como por ejemplo tetrametoxizirconato, tetraetoxizirconato, tetrapropoxizirconato, tetrabutoxizirconato, o por ejemplo trialcoxizirconatos tales como por ejemplo trimetoxizirconato, trietoxizirconato, tripropoxizirconato, tributoxizirconato, sales de sílice, sustancias anfífilas y/o grafitos. En particular se prefiere grafito.

Como compuesto que aumenta la viscosidad puede emplearse por ejemplo también, opcionalmente además de los compuestos mencionados anteriormente, un compuesto orgánico y/o un polímero hidrófilo tal como por ejemplo celulosa o un derivado de celulosa tal como por ejemplo metilcelulosa y/o un poliacrilato y/o un polimetacrilato y/o un poli(alcohol vinílico) y/o una polivinilpirrolidona y/o un poliisobuteno y/o un politetrahidrofurano.

Como agente de masa pastosa puede emplearse, entre otros, preferentemente agua o al menos un alcohol, tal como por ejemplo un monoalcohol con 1 a 4 átomos de C tal como por ejemplo metanol, etanol, n-propanol, iso-propanol, 1-butanol, 2-butanol, 2-metil-1-propanol o 2-metil-2-propanol o una mezcla de agua y al menos uno de los alcoholes mencionados o un alcohol polihidroxilado tal como por ejemplo un glicol, preferentemente un alcohol polihidroxilado miscible con agua, solo o como mezcla con agua y/o al menos uno de los alcoholes monohidroxilados mencionados.

Otros aditivos, que pueden emplearse para el amasado y/o la conformación, son entre otros aminas o derivados de amina tales como por ejemplo compuestos de tetraalquilamonio o aminoalcoholes y compuestos que contienen carbonato tales como, por ejemplo, carbonato de calcio. Aditivos adicionales de este tipo se describen por ejemplo en el documento EP 0 389 041 A1, el documento EP 0 200 260 A1 o el documento WO 95/19222.

En principio, no es crítico el orden de los aditivos tal como compuesto de templado, aglutinantes, agentes de masa pastosa, sustancia que aumenta la viscosidad en la conformación y el amasado.

De acuerdo con una forma de realización preferida adicional, el cuerpo moldeado obtenido de acuerdo con el amasado y/o la conformación se somete al menos a un secado, que se lleva a cabo en general a una temperatura en el intervalo de 25 a 300 °C, preferentemente en el intervalo de 50 a 300 °C y de manera especialmente preferente en el intervalo de 100 a 300 °C. Así mismo, es posible secar a vacío o bajo atmósfera de gas protector o mediante secado por pulverización.

De acuerdo con una forma de realización especialmente preferida se retira en el marco de ese proceso de secado al menos uno de los compuestos añadidos como aditivos al menos en parte del cuerpo moldeado.

Además del material estructural organometálico poroso o una mezcla de materiales estructurales organometálicos porosos, el sorbente puede presentar también otros sorbentes, que son materiales estructurales organometálicos porosos.

Existe por lo tanto la posibilidad de que el sorbente se forme exclusivamente de materiales estructurales organometálicos porosos, es decir, al menos un material estructural organometálico poroso.

Además, la unidad de aislamiento de vacío de acuerdo con la invención puede presentar un sorbente, que contiene al menos un sorbente adicional, que no es ningún material estructural organometálico poroso.

- 5 Por consiguiente, el sorbente puede presentar un sorbente adicional o una mezcla de distintos sorbentes adicionales, es decir, al menos 2, 3, 4, 5, 6, 7 o 8 sorbentes de este tipo, que no representan ningún material estructural organometálico poroso.

10 Ejemplos de al menos un sorbente adicional es carbón activo o grafito, un tamiz molecular, una zeolita, un óxido alcalino, un óxido alcalinotérreo, un hidróxido alcalino, un hidróxido alcalinotérreo, un carbonato alcalino, un carbonato alcalinotérreo, un sulfato alcalino, un sulfato alcalinotérreo o un material capaz de formación de hidruro de metal a temperatura ambiente.

15 El módulo de enfriamiento/calentamiento por adsorción de acuerdo con la invención puede ser parte de una máquina de enfriamiento y/o de calentamiento. Tal como ya se expuso anteriormente, mediante el campo de aplicación se determina si el enfriamiento, el calentamiento o tanto el enfriamiento como el calentamiento tienen prioridad. En el contexto de la presente invención pueden tener prioridad tanto el enfriamiento como el calentamiento así como una combinación de ambos. En particular pueden ser ventajosos procesos de enfriamiento.

20 El módulo de enfriamiento/calentamiento por adsorción de acuerdo con la invención puede ser sin embargo también parte de un recipiente para líquidos. En este sentido, en el caso del recipiente para líquidos puede tratarse de un embalaje, un envoltorio, una botella, una lata, un barril o similar. En el caso del líquido puede tratarse de una bebida u otros líquidos. El módulo de enfriamiento/calentamiento por adsorción de acuerdo con la invención puede ser así mismo parte de un sistema de climatización de una habitación. Un sistema de climatización de una habitación de este tipo puede emplearse en forma de un aparato individual, en forma de varios aparatos, que funcionan de manera aislada o como instalación de climatización.

25 Un objeto adicional de la presente invención es el uso de un módulo de enfriamiento/calentamiento por adsorción de acuerdo con la invención para el enfriamiento y/o calentamiento.

El módulo de enfriamiento/calentamiento por adsorción de acuerdo con la invención se caracteriza en particular por el uso de un material estructural organometálico poroso como parte de un sorbente.

30 Por consiguiente, un objeto adicional de la presente invención es el uso de un sorbente sólido en un módulo de enfriamiento/calentamiento por adsorción de acuerdo con la invención, conteniendo el sorbente al menos un material estructural organometálico y poroso que contiene al menos un compuesto orgánico al menos bidentado y unido por coordinación al menos a ión metálico.

Ejemplos

Ejemplo 1: Producción de un material estructural organometálico a base de fumarato de aluminio

35 Se suspenden 17,91 g de $\text{AlCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ y 9,04 g de ácido fumárico en un matraz de vidrio en 550 ml de DMF y se separa por filtración durante 17 h bajo reflujo (130 °C). El sólido generado se separa por filtración y se lava con 3 x 100 ml de acetona y 2 x 100 ml de metanol.

A continuación se seca la sustancia en la estufa de secado de vacío a 100 °C durante 16 h. Se obtienen 11,4 g de un producto incoloro. La superficie de N_2 se determina con 1155 m^2/g (Langmuir).

Ejemplo 2 Producción de un material estructural organometálico a base de formiato de magnesio

1)	nitrato de magnesio*6 agua	38,5 mmol	9,90 g
2)	ácido fórmico	106,5 mmol	4,8 g
3)	DMF	2,19 mol	160,0 g

40

Se disuelve nitrato de magnesio en DMF en un recipiente de autoclave. A esto se le añade ácido fórmico y se agita la disolución durante 10 min. (pH = 3,49)

cristalización: 125 °C/78 h

estructura: disolución transparente con cristales blancos

45 procesamiento: los cristales se separan por filtración, se lavan 2 veces con 50 ml de DMF.

pesada: 5,162 g

contenido en sólido: pesada: 2,9 % de sólido

Ejemplo 3: Calorimetría diferencial dinámica según las normas DIN 51007 y DIN 51006

Las muestras se secan durante 24 h a 120 °C a alto vacío (hasta 0,0050 mbar). Entonces se distribuyen los polvos

sobre placas Petri y se colocan en un desecador. En este reina una humedad del aire de aproximadamente el 70 %. Las muestras se dejan durante 120 h en esta atmósfera. A continuación tiene lugar la medición de DDK.

5 La medición de la cantidad de calor cedida/absorbida tiene lugar en cada caso con una muestra de los materiales estructurales organometálicos de acuerdo con el Ejemplo 1 (MOF-1) y 2 (MOF-2). Para ello se mantienen 26,480 mg de MOF-1 y 30,490 mg de MOF-2 bajo atmósfera de aire. En intervalo de temperatura asciende a de 20 °C a 200 °C. La tasa de aumento asciende a 1 K/min.

Se determina una pérdida de masa del 20,9 % para MOF-1 y 23,3 % para MOF-2 de agua. Resulta una entalpía de 385 J/g para MOF-1 y 560 J/g para MOF-2. Se muestra un máximo a una temperatura de aproximadamente 55 °C para MOF-1 y 139 °C para MOF-2.

10

REIVINDICACIONES

- 5 1. Módulo de enfriamiento/calentamiento por adsorción que contiene un sorbente sólido así como un agente de trabajo, en el que el sorbente contiene al menos un material estructural organometálico poroso que contiene al menos un compuesto orgánico al menos bidentado, unido por coordinación al al menos un ión metálico, **caracterizado porque** el agente de trabajo contiene agua.
2. Módulo de enfriamiento/calentamiento por adsorción de acuerdo con la reivindicación 1, **caracterizado porque** el al menos un material estructural organometálico poroso se encuentra como cuerpo moldeado.
- 10 3. Módulo de enfriamiento/calentamiento por adsorción de acuerdo con las reivindicaciones 1 o 2, **caracterizado porque** el al menos un ión metálico es un ión seleccionado del grupo de los metales que consiste en Mg, Al, Y, Sc, Zr, Ti, V, Cr, Mo, Fe, Co, Cu, Ni, Mn, Zn y lantánidos.
4. Módulo de enfriamiento/calentamiento por adsorción de acuerdo con una de las reivindicaciones 1 a 3, **caracterizado porque** el al menos un compuesto orgánico al menos bidentado se deriva de ácido fórmico, ácido acético o un ácido di-, tri- o tetracarboxílico.
- 15 5. Máquina de enfriamiento y/o de calentamiento que contiene un módulo de enfriamiento/calentamiento por adsorción de acuerdo con una de las reivindicaciones 1 a 4.
6. Recipiente para líquidos que contiene un módulo de enfriamiento/calentamiento por adsorción de acuerdo con una de las reivindicaciones 1 a 4.
7. Sistema de climatización de una habitación que contiene un módulo de enfriamiento/calentamiento por adsorción de acuerdo con una de las reivindicaciones 1 a 4.
- 20 8. Uso de un módulo de enfriamiento/calentamiento por adsorción de acuerdo con una de las reivindicaciones 1 a 4 para el enfriamiento y/o el calentamiento.
9. Uso de un sorbente sólido en un módulo de enfriamiento/calentamiento por adsorción de acuerdo con una de las reivindicaciones 1 a 4, en donde el sorbente contiene al menos un material estructural organometálico poroso que contiene al menos un compuesto orgánico al menos bidentado, unido por coordinación al al menos un ión metálico.