



Estudio Estructural de Imidazolatos Porosos a partir de Datos de Difracción de Rayos – X en Polvos y Datos Espectroscópicos

O. Hernández Silva¹ y E. Reguera¹

¹ Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada del Instituto Politécnico Nacional, Legaria 694. Colonia Irrigación, 11500 México D. F.

Introducción

Los imidazolatos porosos y sus derivados (benzoimidazolatos, 2-ethyl-imidazolatos...) consisten de una unidad tetraédrica de MN_4 ($M = Co, Cu, Zn$, etc.) unidos por una molécula heterocíclica (N-piridínico and N-pirrólico) que actúa como un ligando angular rígido exobidentado para formar estructuras tipo zeolitas. El fuerte enlace ente metal y anillo imidazol, mejora la rigidez de los enlaces del ligando que puede resultar en un robusto y estable sólido poroso con un elevado contacto superficial. Debido a lo anteriormente mencionado y a la diversidad estructural es que los imidazolatos han sido extensivamente estudiados como materiales nanoporosos con aplicaciones para el almacenamiento de Hidrógeno y captura de dióxido de carbono. Por otra parte, dichos compuestos son usualmente obtenidos como polvos por lo que la determinación estructural se obtiene resolviendo y refinando a partir de datos de difracción de Rayos – X en polvos. Debido a la naturaleza d dicho estudio utilizando únicamente datos de difracción podría ser una tarea insoluble, por lo que el uso de datos complementarios de técnicas espectroscópicas aparece como una opción a introducir “*a priori*” información en la determinación estructural. En esta contribución tal estrategia es discutida con el el 2-etilimidazolato de zinc.

Análisis y Resultados

•Caracterización espectroscopía por Infrarrojo

El Imidazol presenta un espectro IR peculiar en el estado sólido. Presenta una amplia banda de absorción muy intensa de 3000 a 2500cm^{-1} , debida a las vibraciones de los fuertes puentes de hidrogeno con el Nitrógeno pirrólico y piridinico.

Cuando los imidazoles reaccionan con los nitratos del metal de transición la amplia absorción de 3000 a 2500cm^{-1} desaparece y la banda de vibración C-H localizada aproximadamente a los 1050cm^{-1} se recorre a los 1058cm^{-1} en el 2-etilimidazolato de zinc,

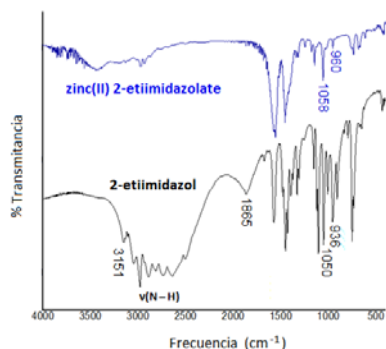
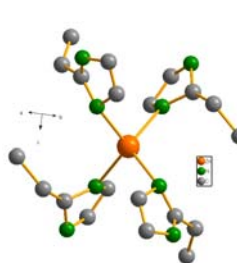


FIG. 1 Espectro de Infrarrojo del 2-etilimidazol y el Zn(etlm)2

esto debido a la transferencia del protón presente en la molécula del imidazol

• Difracción de Rayos – X



Grupo espacial $P3_221$

Parámetros de celda

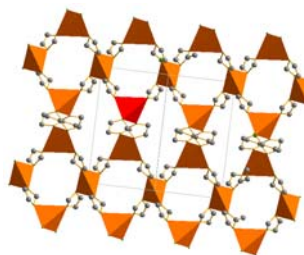
$a = b = 8.4745(1)$

$c = 12.866(1)$

$\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ$

Volumen 800.2042 Å^3 ; $Z = 3$

FIG2. Coordinación tetraédrica del átomo de zinc



El análisis estructural indica que el átomo de zinc está coordinado tetraédricamente con cuatro nitrógenos provenientes del anillo etilimidazol, formando una estructura porosa tridimensional como se observa en la FIG. 3.

FIG 3. Enrejado poros tridimensional

Conclusiones

Se pudo dar seguimiento de la reacción entre el óxido de zinc y los correspondientes imidazoles identificando las bandas características de los imidazolatos en general. A través del análisis estructural de Rayos – X se puede observar que los imidazolatos presentan una coordinación tetraédrica $M - N$. Así mismo debido a los grupos funcionales, estos materiales presentan una topología característica de la red cristalina.

Referencias

- [1] Jin Chong Tan, Thomas D. Bennet and Anthony K. Cheetham. Chemica Reviews, 2010, Vol. 107, No 22.
- [2] Xiao-Chun Huang, Yan-Yong Lin, Jie-Peng Zhang, and Xiao-Ming Chen. Chem. Int. Ed. 2006, 45, 1557 –1559.
- [3] Yun-Qi Tian, Yu-Ming Zhao, Zhen-Xia Chen, Guang-Ning Zhang, Lin-Hong Weng, and Dong-Yuan Zhao; Eur. J. Chem. 13, 4146,-4154 (2007).
- [4] José Fernández-Bertrán, Lila Castellanos-Serra, Yee-Madeira and Edilso Reguera; Journal of Solid State Chemistry 147, 561-564 (1999).