

Aluminofosfato microporoso
 $(\text{NH}_3\text{CH}_3)_{1+x}[(\text{Al}_{3-x}\text{Cu}_x)(\text{PO}_4)_3(\text{H}_2\text{O})(\text{OH})]$.
Síntesis y estudio estructural

Microporous aluminum phosphate
 $(\text{NH}_3\text{CH}_3)_{1+x}[(\text{Al}_{3-x}\text{Cu}_x)(\text{PO}_4)_3(\text{H}_2\text{O})(\text{OH})]$.
Synthesis and structural study

J. ESCOBAL(2), J.L. PIZARRO(1), J.L. MESA(2), M.I. ARRIORTUA(1), T. ROJO(2).

(1) Dpto. de Mineralogía y Petrología

(2) Dpto. de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias, Universidad del País Vasco/EHU, Apdo. 644,
48080-Bilbao, España.

La creciente importancia industrial de las zeolitas -aluminosilicatos con poros o canales formados por aluminio y silicio tetraédricamente coordinados y unidos por átomos de oxígeno

(Hartmann y Kevan, 1999)- ha impulsado su síntesis y la de otros materiales microporosos (Goodgame y col., 1999) con estructura similar, zeotipos. Los aluminofosfatos y silicoaluminofosfatos constituyen una nueva clase de sustancias microporosas comparables a las zeolitas. Desde el año 1982, se han sintetizado mediante, métodos hidrotermales, varios aluminofosfatos porosos en presencia de diferentes moléculas orgánicas (Zhou y col., 1999). Muchos de estos compuestos presentan estructuras laminares (Kimura y col., 1999) o tridimensionales, con túneles formados por anillos de hasta doce miembros (Yu y col. 1998).

En este trabajo se presenta la estructura cristalina del aluminofosfato de fórmula $(\text{NH}_3\text{CH}_3)_{1+x}[(\text{Al}_{3-x}\text{Cu}_x)(\text{PO}_4)_5(\text{H}_2\text{O})(\text{OH})]$ perteneciente a la familia de materiales microporosos conteniendo moléculas orgánicas como estabilizadores de la estructura. La preparación del compuesto se realizó bajo condiciones hidrotermales suaves, utilizando un recinto de reacción formado por un recipiente de politetrafluoroetileno (*teflón*) contenido en una carcasa de acero para impedir su deformación. La síntesis se realizó a 170°C y bajo presión autógena (aproximadamente 7.8 bar) durante un tiempo de reacción de siete días. El resultado de la síntesis fue una mezcla formada por mono y policristales de la fase estudiada. La caracterización del compuesto se llevó a cabo mediante análisis elemental,

espectroscopía infrarroja, análisis termogravimétrico y difracción de rayos X en muestra policristalina.

La obtención de monocristales de buena calidad permitió determinar la estructura cristalina de esta nueva fase. El compuesto cristaliza en el sistema monoclinico, con parámetros de celda $a=8.543(1)\text{Å}$, $b=17.641(2)\text{Å}$, $c=9.057(2)\text{Å}$, $\beta = 107.10(1)^\circ$, grupo espacial $P2_1/n$, $Z=4$. La estructura cristalina consiste en un entramado tridimensional de diferentes tipos de poliedros compartiendo vértices (Fig.1). Los átomos de aluminio se colocan en tres posiciones cristalográficas diferentes, con números de coordinación 4, 5 y 6, respectivamente. Los átomos de fósforo ocupan tres posiciones tetraédricas. El edificio cristalino inorgánico presenta dos tipos de canales, delimitado cada uno de ellos por ocho poliedros de coordinación de átomos de aluminio y/o de fósforo. Estos canales se encuentran alineados a lo largo de las direcciones cristalográficas $[100]$ y $[001]$.

Los cationes metilamonio $(\text{NH}_3\text{CH}_3)^+$ se disponen en estos canales en dos posiciones diferentes, ocupadas al 50% por cada una de ellas. Estos cationes orgánicos compensan las cargas negativas que presenta el entramado tridimensional inorgánico. El número de cationes orgánicos que se incorpora a la estructura cristalina está también controlado por la descompensación de carga ocasionada por la sustitución de iones Al^{3+} por Cu^{2+} .

Las moléculas orgánicas desempeñan un papel de plantilla (*template*) en este tipo de compuestos híbridos orgánico-inorgánicos, posibilitando la formación de estructuras abiertas. La importancia del com-

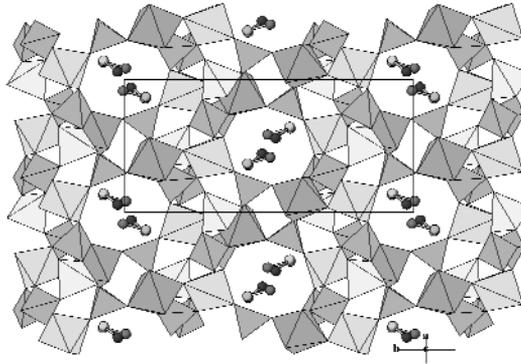


Fig.1.- Estructura cristalina del compuesto $(\text{NH}_4\text{CH}_3)_{1-x}[(\text{Al}_{1-x}\text{Cu}_x)(\text{PO}_4)_3(\text{H}_2\text{O})(\text{OH})]$ a lo largo de la dirección

puesto estudiado se relaciona con la posibilidad de formar edificios cristalinos inorgánicos semejantes cambiando la molécula orgánica. En este sentido, Cheetham y Harding publicaron en el año 1991 la estructura cristalina de un aluminofosfato dopado con cobalto que presenta el mismo entramado inorgánico, conteniendo etilendiamina ($\text{C}_2\text{H}_{10}\text{N}_2$) como agente director estructural. El compuesto que presentamos está estabilizado por una especie orgánica distinta a la reportada por Cheetham, habiéndose realizado la sustitución catiónica por un ión diferente (Cu^{2+} en lugar de Co^{2+}).

YU, J., SUGIYAMA, K., ZHENG, S., QIU, S., CHEN, J., XU, R., SAKAMOTO, Y., TERASAKI, O., HIRAGA, K., HURSTHOUSE, M.B., THOMAS, J.M. (1998). *Chem. Mater.*, 10, 1208.
CHEETHAM, G.M.T., HARDING, M.M. (1991). *Acta. Cryst. C*47, 1361.

BIBLIOGRAFÍA

- HARTMANN, M., KEVAN, L. (1999). *Chemical Reviews*, 99, 635.
GOODGAME, D.M.L., GRACHVOGEL, D.A., WILLIAMS, D.J. (1999). *Angew. Chem. Int. Ed.*, 38, 153.
ZHOU, B., YU, J., LI, J., XU, Y., QIU, S., XU, R. (1999). *Chem. Mater.*, 11, 1094.
KIMURA, T., SUGAHARA, Y., KURODA, K. (1999). *Chem. Mater.*, 11, 508.