

Estudio de un sistema complejo de boratos de cinc mediante múltiples técnicas

Marcos Imer¹, Nicolás Veiga¹, Carlos Kremer¹, Leopoldo Suescun² y Livia Arizaga¹

1-Química Inorgánica, Departamento Estrella Campos; 2-Cryssmat-Lab/Cátedra de Física/DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay
mimer@fq.edu.uy

Los boratos de cinc son materiales de uso industrial muy importante, con aplicaciones que incluyen retardantes de llama y preservantes de maderas. Este trabajo reporta la síntesis de tres nuevos boratos de cinc $[\text{Zn}(\text{NH}_3)_3\text{B}_4\text{O}_5(\text{OH})_4]\cdot\text{H}_2\text{O}$ (ZB1), $\text{Zn}_3(\text{H}_2\text{B}_3\text{O}_7)_2\cdot 2\text{NH}_3\cdot 4\text{H}_2\text{O}$ (ZB2) y $[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4][\text{B}_4\text{O}_5(\text{OH})_4]\cdot 4\text{H}_2\text{O}$ (ZB3). Las fases sólidas se caracterizaron mediante análisis elemental de elementos livianos y Zn, espectroscopia FTIR y Raman, difracción de rayos X, microscopía SEM y análisis térmico.

Se determinaron las estructuras cristalinas de ZB1 (monoclinica, Cc, $a = 12,1972(8)$, $b = 7,8314(5)$, $c = 12,1441(8)$ Å, $\beta = 107,404(5)^\circ$) y ZB3 (ortorrómbica, Pbcn, $a = 15,0796(9)$, $b = 11,8853(5)$, $c = 16,7606(8)$ Å). Se logró realizar una asignación completa para los espectros FTIR y Raman, utilizando cálculos DFT. Para ZB2, obtenido como un sólido policristalino, se realizaron estudios de difracción de rayos X de polvo, los que confirmaron que se está en presencia de una fase única y permitieron determinar los parámetros de la celda unidad (romboédrica, $a = 36,79601$, $c = 12,20072$ Å) con una fórmula esperada de $\text{Zn}_3(\text{H}_2\text{B}_3\text{O}_7)_2\cdot 2\text{NH}_3\cdot 4\text{H}_2\text{O}$, lo que sugiere que este compuesto es un triborato complejo.

ZB1 según nuestros conocimientos, resulta ser el primer anión tetraborato actuando como ligando en este modo de coordinación. Adicionalmente, ZB3 muestra un ensamblaje supramolecular complejo de tetraboratos y agua vía enlaces de hidrógeno, formando un arreglo de tipo pared de ladrillos, conteniendo un raro motivo β -R22(8).

