

La estructura del fullereno C_{60} y sus aplicaciones

Oxana Vasilievna Kharissova*, Ubaldo Ortiz Méndez**

El carbono es un elemento peculiar. Se presenta en formas y colores diversos. Quizá lo más común es encontrarlo en la forma de sólido negro (coque, grafito), pero también se puede presentar como el cristalino y duro diamante. En los diamantes los átomos de carbono están en un arreglo muy especial, que sólo se consigue bajo presiones muy altas. En el grafito los átomos de carbono forman capas en las que cada átomo está rodeado por otros tres átomos idénticos, formando una estructura hexagonal. En el diamante cada átomo de carbono está enlazado a cuatro vecinos iguales dispuestos en forma de tetraedro. La estructura de cada uno de estos materiales, es decir, el orden interno de sus átomos, es lo que determina sus propiedades. Los enlaces en tres dimensiones de los átomos de carbono en el diamante dan lugar a una estructura más robusta y por tanto a cristales más duros que en el caso del grafito. En este último, el enlace está limitado a las dos dimensiones de las paredes, las cuales pueden deslizarse fácilmente entre sí, lo cual da lugar a un material blando que se usa como lubricante sólido (figura 1).

Estas estructuras son formas alotrópicas construidas a partir de los mismos bloques (átomos de carbono).

Recientemente, el carbono irrumpió nuevamente en el mundo de los materiales. Se encontró una tercera forma del carbono (C_{60}), la cual se conoce como fullereno.^{1,2} Los fullerenos se han encontrado en el espacio interestelar y en formaciones geológicas en la Tierra.³⁻⁵ Los investigadores estadounidenses (Luann Becker y otros) descubrieron que el meteorito que cayó alrededor de la localidad de Allende, en México, el 8 de febrero de 1969, contiene moléculas sencillas (formadas por sesenta átomos) abundantes en fullerenos y que tienen desde cien hasta cuatrocientos átomos de carbono. Los fullerenos presentes en los meteoritos fueron formados a partir de estrellas, que los expulsaron al espacio al extinguir-



Fig.1. La estructura del grafito.

se. Los fullerenos son moléculas grandes esféricas. La más común es la molécula C_{60} (figura 2) las demás son C_{70} , C_{76} , C_{84} y otras.⁶⁻⁸

La estructura de fullereno C_{60}

El fullereno C_{60} es una molécula que consta de 60 átomos de carbono los cuales forman 12 pentágonos y 20 hexágonos.⁹ La forma es la misma que la de una pelota de fútbol. La propiedad más importante de la molécula C_{60} es su alta simetría. En ésta hay 120 operaciones de simetría, tales como rotaciones de eje o reflexiones en el plano. Ello hace que la molécula C_{60} sea la molécula más simétrica, pues tiene el número más grande de operaciones de simetría. Para la molécula C_{60} hay tres tipos de ejes de rotación C_2 , C_3 y C_5 . El eje C_5 se considera como el que pasa a través de los centros de dos pentágonos como se muestra en la figura 3.

Como hay 12 pentágonos, se tienen seis diferentes ejes 5 (cada eje pasa a través de dos pentágonos). Además, hay 20 hexágonos con 10 diferentes ejes 3, así como 30 bordes entre los hexágonos con 15 diferentes ejes 2, pues los planos espejo tienen dos bordes.

Finalmente, la molécula C_{60} tiene un centro de inversión. Al combinar todas estas transformaciones,

* Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, UANL.

** Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica, UANL.

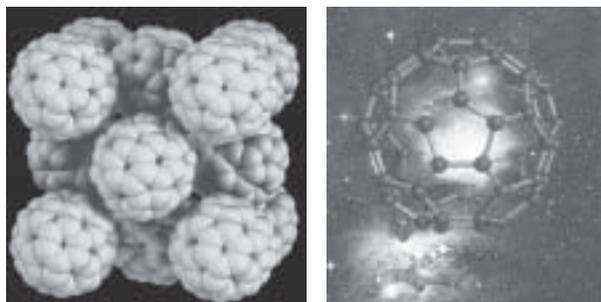
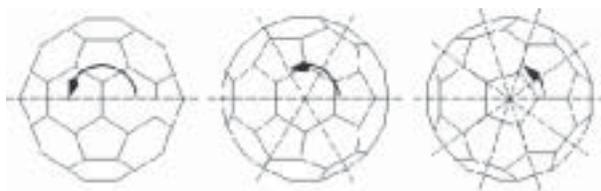
Fig. 2. La estructura del fullereno C₆₀

Fig. 3. Tres tipos de ejes de rotación.

se pueden encontrar las 120 diferentes operaciones de simetría. Éstas forman el grupo icosaedral, que es el grupo puntual con el mayor número de elementos.

Sobre la base del teorema de Euler se puede mostrar que una superficie esférica, construida de pentágonos y hexágonos, debe tener exactamente 12 pentágonos. Las moléculas de tamaño diferente se han obtenido dependiendo del número de hexágonos y se conocen como fullerenos, en honor al arquitecto americano Richard Buckminster Fuller, quien construía casas geodésicas basadas en hexágonos y pentágonos.

Sin embargo, Buckminster Fuller no fue el primero en combinar hexágonos y pentágonos para formar una esfera. Esta forma simétrica ya era conocida en la antigüedad, incluso por Arquímedes, que la llamaba icosaedro truncado. El dibujo más antiguo de esta "pelota de fútbol" ha sido encontrado en la biblioteca del Vaticano. Es una imagen pintada en el libro del pintor matemático Piero della Francesca (1420-1492), con fecha de 1480. Asimismo, la concepción del corte del poliedro fue introducida por Johannes Kepler (figura 4).

La molécula C₆₀ fue descubierta por Harold Kroto, James Heath, Sean O'Brien, Robert Curl y Richard Smalley en 1985. Esta molécula se encontró a partir de un espectro de absorción de polvo interestelar, que se supone está relacionada con algunos

tipos de moléculas de carbono con cadenas largas.

Las esferas de fullereno tienen diámetro de 7-15Å, el cual es 6-10 veces mayor que el diámetro de un átomo típico. A nivel atómico son enormes, pero en realidad son pequeños en comparación con muchas moléculas orgánicas. Los fullerenos son bastante estables: para destruirlos, se necesitan temperaturas mayores de 1000°C (el número exacto depende del tipo de fullereno particular). A temperaturas más bajas, los fullerenos se subliman sin destrucción de las esferas. Esta propiedad se usa en el crecimiento de cristales y películas finas de fullerenos.¹⁰

Se ha observado que las moléculas C₆₀ se combinan formando un sólido cristalino con propiedades interesantes. Este sólido tiene una estructura cúbica, y es aislante eléctrico (con un diferencial de energía de alrededor de 2.3eV). Arriba de -13°C las moléculas rotan libremente en sus posiciones cristalinas, por eso parecen esferas lisas. A temperaturas más bajas, éstas comienzan a fijarse en orientaciones definidas. Abajo de -183°C, las esferas se tornan completamente inmóviles. Algunos aspectos de este proceso de enfriamiento todavía no están muy claros.

Químicamente la molécula C₆₀ es muy electro-negativa y forma fácilmente compuestos con átomos donadores de electrones. Una combinación obvia es la molécula C₆₀ y un metal alcalino, ya que los metales alcalinos son muy electropositivos.

La molécula C₆₀ pura es interesante y visualmente bastante diferente del grafito y del diamante. Es un polvo amarillo que se torna de color rosa cuando se disuelve en solventes definidos como el tolueno. Al exponer la moléculas C₆₀ a la luz ultravioleta intensa como la del láser, se polimerizan formando enlaces entre las esferas cercanas. En el estado de polímero, la molécula C₆₀ ya no se disuelve en tolueno. El hecho de que la molécula C₆₀ cambie sus propiedades al ser expuesta a la luz la hace fotosensible. Por lo anterior la molécula C₆₀ se utiliza como fotoresistor en algunos procesos fotográficos.

Aplicaciones de los Fullerenos

Los fullerenos pueden tener las siguientes aplicaciones:

- Como lubricantes (las esferas hacen más fácil el deslizamiento entre superficies). Para ello los fullerenos deben ser modificados químicamente para que contengan otros átomos fuera de la esfera.



Fig. 4. Imagen de la construcción de un icosaedro truncado.

- Los fullerenos pueden tener aplicaciones ópticas. Generalmente cambian sus propiedades bajo la acción de la luz ultravioleta. Esta propiedad puede ser utilizada en fotolitografía.
- Los fullerenos tienen propiedades de superconducción eléctrica a temperaturas desde 10 a 40K.

El descubrimiento de los fullerenos C_{32} , C_{44} , C_{50} , C_{58} , C_{60} , C_{70} , C_{240} , C_{540} , C_{960} ha estimulado una gran actividad en la química. Al inicio, el C_{60} se producía solamente en cantidades pequeñas. Las cosas cambiaron en 1990, cuando Wolfgang Krätschmer, Lowell Lamb, Konstantinos Fostiropoulos y Donald Huffman descubrieron cómo producir el fullereno C_{60} puro en cantidades mucho más grandes. Este hecho abrió completamente nuevas posibilidades para investigaciones experimentales e inició un periodo de investigación tecnológica muy intensa. Ahora el fullereno C_{60} puede ser producido comercialmente.¹¹ El método actual para obtenerlo es haciendo un arco eléctrico entre dos electrodos de grafito o sublimando grafito usando un láser. En realidad son moléculas muy abundantes, quizás más que las del grafito y del diamante: se encuentran en el humo del fuego y en las estrellas gigantes rojas (con baja temperatura superficial y gran diámetro).

Compuestos alcalinos- C_{60} y nanotubos

Se ha abierto una nueva ruta de la química de los fullerenos que estudia las nuevas familias de moléculas basadas en fullerenos. Las moléculas C_{60} se condensan formando un sólido con uniones débiles. Esta forma se llama fullerita. Muchos trabajos se han dedicado a las

fases sólidas de la molécula C_{60} . Si los átomos alcalinos (A:K,Rb,Cs,Na) se añaden a la molécula C_{60} sólida, nuevos compuestos tales como el A_3C_{60} , pueden ser formados y se llaman fulleridos alcalinos.¹² Si el potasio (K) o el rubidio (Rb) (figura 5) son los elementos que se agregan, entonces se forman compuestos superconductores. Para los fulleridos alcalinos la temperatura crítica es bastante alta (20-40K) comparada con los superconductores convencionales. Los A_3C_{60} tienen propiedades de superconducción sólo superados por los cupratos cerámicos.

Estos compuestos tienden a formar cristales con una cantidad importante de imperfecciones. Como se sabe, siempre hay desorden: átomos en lugares incorrectos, planos de átomos desalineados, impurezas incluso en cristales sencillos muy puros. Los fulleridos alcalinos no son la excepción. En éstos hay regiones pequeñas que se llaman granos o cristalitas, donde el cristal es relativamente perfecto. Un grano puede tener un tamaño de 25Å (los muy pequeños tienen alrededor de 10 átomos en cada dirección) hasta unos micrómetros (alrededor de 10000 áto-

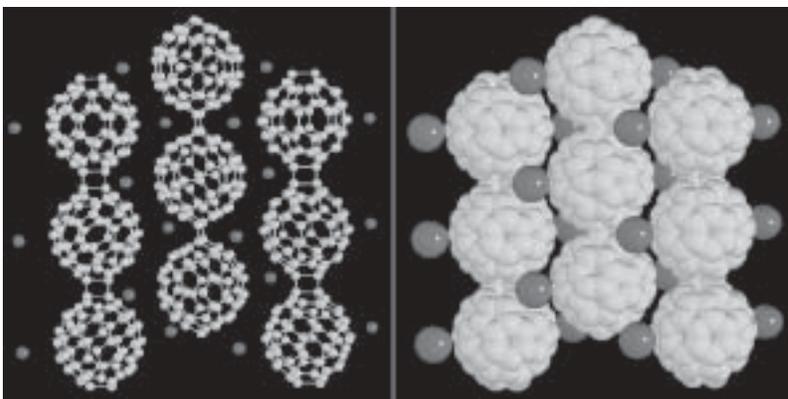


Fig. 5. La estructura de la Rb_3C_{60}

mos). El cristal macroscópico está formado de muchos de estos granos que pueden no tener una orientación especial en relación con los granos a su alrededor. Cada impureza tiende a acumularse en las fronteras de los granos. Estos compuestos con mucha dificultad tienen una estructura regular. Eso se relaciona con las energías y orientaciones de los enlaces interatómicos, así como por otras interacciones, como las magnéticas.

En muchos compuestos los electrones se comportan como si ellos no interactuaran entre ellos (en realidad, si hay tal interacción, pero los electrones se comportan como si no la hubiera). Sus propiedades pueden ser predecidas. Sin embargo, en el caso de los compuestos de C₆₀, sus propiedades son "anómalas", pues las interacciones entre los electrones son importantes. Las moléculas C₆₀ son parte de los sistemas fuertemente correlacionados, para los cuales no hay todavía una teoría completa.

Todavía no está claro el comportamiento electrónico de los compuestos de metales alcalinos - C₆₀.

Los fullerenos tienden a formar nanotubos que tal parece serán muy útiles en la industria.^{13,14} De hecho es un buen ejemplo de cómo se pueden combinar la investigación y las aplicaciones prácticas que dependen directamente de las propiedades de estos nanotubos.

Estas propiedades son:

- La conductividad eléctrica. Probablemente los nanotubos son los mejores conductores de electricidad a nivel de nanoescala.
- La conductividad térmica es comparable con la del diamante a lo largo del eje del tubo.
- Mecánicas. Probablemente es la fibra más fuerte que puede existir.
- Perfección molecular, esencialmente libre de defectos.
- Fuerzas fuertes de Van der Waals que llevan al reforzamiento espontáneo de muchos nanotubos, lo cual es importante en algunas aplicaciones.

Conclusiones

Los fullerenos, como nuevos materiales de sistemas altamente correlacionados, causan un gran interés entre la comunidad científica en particular desde el punto de vista de la superconductividad. El continuar las investigaciones básicas sobre materiales

como el fullereno C₆₀, puede mejorar las teorías y tecnologías de producción de materiales útiles para el futuro.

Resumen

Se revisan los datos reportados de una nueva clase de materiales basados en los fullerenos. Se explica la estructura del fullereno C₆₀ y sus compuestos con metales alcalinos, sus propiedades y aplicaciones. Se señala que estos compuestos tienen propiedades de superconducción comparable con la de los tradicionales cupratos. Se indica que esta modificación del carbono puede formar nanotubos que tienen varias aplicaciones prácticas debido a sus propiedades.

Palabras clave: Fullerenos, Nanotubos, Superconductores, Estructura.

Abstract

Data from literature on a new class of materials on based on fullerenes are reviewed. The structure, properties, and applications of C₆₀ and its compounds with alkali metals are explained. It is shown that these compounds have properties of superconductors, comparable with those of traditional cuprates. It is indicated that this carbon modification can form the nanotubes which have wide application.

Keywords: Fullerenes, Nanotubes, Superconductor, Structure.

Referencias

1. Curl, Robert F., Smalley, Richard E., Fullerenes, *Scientific american*, 1991, Vol. 265, No.4, pp. 54.
2. Fowler, P.W.; Manolopoulos, D.E., Magic Numbers and Stable Structures for Fullerenes Fullerides and Fullerenium Ions, *Nature*, 1992, Vol. 355, No.6359, pp. 428
3. Webster, Adrian; Fullerenes, fulleranes and the Diffuse Interstellar Band, *Monthly notices of the Royal Astronomical Society*, 1992, Vol. 255, No. 3, pp. 41P.
4. Webster, A.S. Fulleranes Fullerenes and the Interstellar Extinction, *Astronomy and astrophysics*, 1992, Vol. 257, No. 2, pp. 750.
5. Buseck, P.R.; Tsipursky, S.J.; Hettich, R., Fullerenes

- from the Geological Environment, *Science*, 1992, Vol. 257, No. 5067, pp. 215
6. Diederich, F.; Ettl, R.; Rubin, Y, The Higher Fullerenes: Isolation and Characterization of C_{76} , C_{84} , C_{90} , C_{94} , and C_{700} , an Oxide of D5h- C_{70} , *Science*, 1991, Vol. 252, No. 5005, pp. 548
 7. Kurita, N.; Kobayashi, K; Kumahora, H., Non-local density functional calculations of binding energies of carbon fullerenes C_n , with $n=10,12,20,24,28,32,36,50,60,70,80,90,100,110$ and 120, *Chemical physics letters*, 1992, Vol. 188, No. 3/4, pp. 181.
 8. Fowler, P.W.; Heine, T.; Zerbetto, F., Competition between Even and Odd Fullerenes: C_{118} , C_{119} , and C_{120} , *Journal of Physical Chemistry A*, 2000, Vol. 104, No. 42, pp.9625-9629.
 9. Von Helden, Gert; Hsu, Ming-Teh; Kemper, Paul R., Structures of carbon clusters ions from 2 to 60 atoms: Linears to rings to fullerenes, *The journal of chemical physics*, 1991, Vol. 95, No. 5, pp. 3835.
 10. Zheng, L.A.; Lairson, B.M.; Barrera, E.V.; Shull, R.D., Formation of nonmagnetic thin films by dispersed fullerenes, *Applied Physics Letters*, 2000, Vol. 77, No. 20, pp. 3242-3244
 11. Mittelbach, A.; Honle, W.; von Schnering, H.G., Optimization of the Production and Separation of Fullerenes, *Angewandte chemie*, 1992, Vol. 31, No. 12, pp. 1640
 12. Gunnarsson, O., Superconductivity in fullerenes, *Reviews of modern physics*, 1997, Vol. 69, No. 2, pp. 575
 13. Byszewski, P.; Klusek, Z, Some properties of fullerenes and carbon nanotubes, *Optoelectronics Review*, 2001, No. year 9, pp. 203-210
 14. Iijima, S., Hybrid structures of fullerenes and single-wall carbon nanotubes, *Springer Proceedings in Physics*, 2001, Vol. 87, No. 1, pp. 24.