



## Modos vibracionales de $C_{60}$ obtenidos mediante el método DFT

ALFREDO TLAHUICE FLORES\*, EDUARDO PÉREZ TIJERINA\*, SERGIO MEJÍA ROSALES\*

El estudio de una nueva y fascinante forma alotrópica del carbono inició hace poco más de dos décadas.<sup>1</sup> El descubrimiento de una molécula de simetría icosaedral marcó el inicio del incesante trabajo en una nueva química del carbono. Los *fullerenos*, desde entonces, tuvieron en el  $C_{60}$  a su principal representante.

El término *fullereno* describe una molécula cerrada, constituida enteramente por átomos de carbono, enlazados de manera que forman anillos pentagonales y hexagonales, aunque la definición puede ser ampliada de manera que se consideren también anillos heptagonales o con un número mayor o menor a seis átomos.

Si bien la alta simetría encontrada en la molécula de  $C_{60}$  podría ser una de las principales causas de su estudio, se deben añadir a ésta sus potenciales usos como portadores de medicamentos, como dispositivos de encapsulamiento de materiales peligrosos, como materiales electro-ópticos cuando se adicionan grupos a la estructura fullerénica, o como precursores poliméricos; además, las moléculas de  $C_{60}$  representan sistemas viables para la conversión de luz en electricidad.<sup>2</sup>

La reactividad de la molécula de  $C_{60}$  es atribuible a la diferencia existente entre la energía de su orbital molecular más altamente ocupado (HOMO) y a su orbital molecular más bajo desocupado

(LUMO). Dicha diferencia en energía (o *gap*) es de aproximadamente 2.32 eV, valor obtenido mediante mediciones electroquímicas<sup>3</sup> así como mediante el uso de otras técnicas.<sup>4</sup> Sin embargo, cálculos teóricos por medio de la teoría del funcional de la densidad (DFT), usando la aproximación de LDA dan valores del *gap* tan pequeños como 1.5 eV.<sup>5</sup>

Por otra parte, los elementos de simetría, presentes en general en cualquier molécula, tienen consecuencias en su espectroscopía debido a que ésta es gobernada por reglas basadas en simetría.<sup>6</sup> Así, dado el grupo puntual de una molécula, la teoría de grupos predice si la molécula es quiral y, por lo tanto, ópticamente activa; si la molécula puede tener un momento dipolar permanente y como consecuencia un espectro rotacional puro, o si su espectro Raman o infrarrojo tendrá picos en común. La simetría molecular también determinará el número de señales esperadas en el espectro de RMN. De todo lo anterior se desprende la importancia que tiene el que, al realizar el cálculo del  $C_{60}$ , se defina correctamente su simetría, lo cual, por otro lado, puede ahorrar tiempo de cálculo y proporcionar mayor seguridad en la asignación de la simetría tanto a los orbitales moleculares como a los modos vibracionales.

La asignación de los modos vibracionales es im-

\*Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, UANL.  
Contacto: atlahuice@cfm.uanl.mx

portante, porque a través de ellos y del conocimiento de sus modificaciones es posible inferir el tipo de interacciones intermoleculares e intramoleculares presentes, de acuerdo al estado de agregación del  $C_{60}$ . Así, se ha encontrado que en el caso del  $C_{60}$  sólido, algunos de los modos vibracionales se debilitan debido, principalmente, a que la simetría disminuye en relación a una molécula de  $C_{60}$  aislada.

Desde su descubrimiento, se han empleado diversas técnicas para la caracterización del  $C_{60}$ , tanto para la obtención del espectro vibracional (infrarrojo, y Raman) como del espectro electrónico (ultravioleta).<sup>7</sup> En el caso de la región del espectro infrarrojo se ha reportado que el  $C_{60}$  absorbe básicamente en cuatro bandas:  $527\text{ cm}^{-1}$ ,  $576.5\text{ cm}^{-1}$ ,  $1182.5\text{ cm}^{-1}$  y  $1429\text{ cm}^{-1}$ .

La aparición de sólo cuatro bandas en IR se debe a la alta simetría que posee el  $C_{60}$ .

El espectro RAMAN del  $C_{60}$  posee diez picos:  $272\text{ cm}^{-1}$ ,  $429\text{ cm}^{-1}$ ,  $495\text{ cm}^{-1}$ ,  $570\text{ cm}^{-1}$ ,  $772\text{ cm}^{-1}$ ,  $1099\text{ cm}^{-1}$ ,  $1250\text{ cm}^{-1}$ ,  $1422\text{ cm}^{-1}$ ,  $1467\text{ cm}^{-1}$  y  $1573.5\text{ cm}^{-1}$ .

El espectro UV presenta bandas en  $213\text{ nm}$ ,  $257\text{ nm}$  y  $329\text{ nm}$ .

En este trabajo se presenta una serie de cálculos de longitudes de enlace, modos de vibración y orbitales moleculares para el  $C_{60}$ . Los cálculos se realizaron mediante el DFT, uno de los métodos de mecánica cuántica más exitoso y versátil para el estudio de la estructura electrónica de sistemas de muchos átomos. En los siguientes apartados se describen: el método utilizado para la construcción de la estructura inicial, el modelo utilizado para los cálculos de DFT, y se discuten los resultados obtenidos y su comparación con resultados experimentales y cálculos de otros autores.

## Construcción de la estructura inicial de $C_{60}$

La molécula de  $C_{60}$  puede ser inscrita dentro de un icosaedro, como se muestra en la figura 1. En consistencia con este hecho, al  $C_{60}$  también se le ha denominado icosaedro truncado. Partiendo de la idea anterior, para construir una molécula de  $C_{60}$  es posible iniciar de un icosaedro ideal y dividir cada

arista entre tres, de manera que se obtiene un hexágono inscrito sobre cada cara triangular, y un pentágono sobre cada vértice del icosaedro. Como en el icosaedro original se tenían 20 caras triangulares y doce vértices, al dividir las aristas se obtienen los 20 hexágonos y los doce pentágonos que constituyen al  $C_{60}$ . Mediante el procedimiento anterior se genera una estructura inicial, en la que todos los enlaces tienen una longitud igual a la encontrada entre los átomos de carbono en el grafito ( $1.42\text{ \AA}$ ).

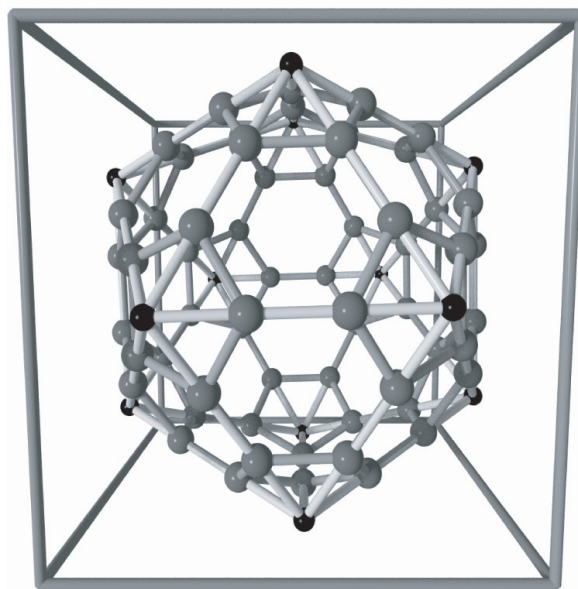


Fig. 1. Estructura inicial de  $C_{60}$  donde se muestra la división de las caras triangulares del icosaedro, obteniéndose las correspondientes caras hexagonales y pentagonales del  $C_{60}$ . Los vértices del icosaedro se muestran en negro.

Considerando que en el icosaedro ideal todas las distancias entre vecinos inmediatos son iguales a la distancia presente en el grafito, el diámetro resultante de esta molécula es de  $7.24\text{ \AA}$ .

## El modelo

El cálculo de los modos vibracionales, longitudes y orbitales fue realizado empleando un algoritmo que implementa los principios de DFT.<sup>8,9</sup> En este método se describe un sistema de  $n$  electrones interactuantes mediante la densidad electrónica y no mediante una función de onda de muchos cuerpos, de manera que se asume que la energía total del sistema en el estado base está dado por la siguiente expresión:

$$E[\rho] = T_s[\rho] + V_{ne}[\rho] + J[\rho] + E_{xc}[\rho]; \quad (1.1)$$

donde  $T_s[\rho]$  es la energía cinética de los electrones,  $V_{ne}[\rho]$  representa la energía potencial de interacción núcleo-electrón,  $J[\rho]$  es la interacción coulombica entre pares de electrones, y  $E_{xc}[\rho]$  incluye todas las interacciones a muchos cuerpos, en particular las de intercambio y correlación. Desde su postulado original, Kohn propuso que de conocer con certeza el término de correlación-intercambio  $E_{xc}[\rho]$ , podríamos conocer con exactitud las propiedades, del sistema en estudio, en su estado base.<sup>8,9</sup> Este término requiere de una aproximación adecuada que haga los cálculos computacionalmente factibles. Se han desarrollado muchas formas funcionales del término de correlación-intercambio, basados en distintas suposiciones y simplificaciones, con diferentes grados de éxito dependiendo del sistema que se estudie. Algunas aproximaciones para describir el término de correlación-intercambio son:

- I. Métodos basados en la densidad electrónica:
  - a. Aproximación de la densidad local (LDA).
  - b. Aproximación de la densidad del spin local (LSDA).
- II. Métodos basados en la densidad electrónica y en su gradiente (GGA):
  - a. PBE.
  - b. PW91.
- III. Métodos basados en la densidad, su gradiente y su laplaciano.
- IV. Funcionales híbridos. Incluyen intercambio Hartree-Fock exacto en la expresión del funcional de intercambio
  - a. B3LYP, que es la aproximación que mejores resultados da para compuestos orgánicos y para metales de transición

Los métodos de DFT han probado ser adecuados, en general, en la predicción de las frecuencias vibracionales y sus desviaciones de los resultados experimentales son sistemáticas, de manera que se han propuesto factores de escalamiento para ajustar las frecuencias calculadas a las experimentales. Para

el  $C_{60}$ , la concordancia fortuita de las frecuencias de B3LYP con las frecuencias experimentales anarmónicas condujo a un factor de escalamiento cercano a la unidad, con el que la desviación respecto al experimento sólo cambia de  $30 \text{ cm}^{-1}$  a  $26 \text{ cm}^{-1}$ .

Las funciones de onda del sistema, llamadas *orbitales moleculares*, se construyen como producto de las funciones de onda de cada componente. En la práctica es conveniente expandir los orbitales moleculares en términos de *funciones base*. La optimización de la estructura de  $C_{60}$  inicial, así como el posterior cálculo de las vibraciones, fueron realizados empleando una base de tamaño medio denominada 6-31G(d), con el funcional híbrido B3LYP, implementados en el programa *Gaussian 03*.<sup>10</sup> La visualización de los orbitales moleculares se hizo mediante el programa *Gaussview*.<sup>10</sup> Se ha reportado que tanto la base como el funcional anteriores han sido empleados en el caso del  $C_{60}$  con buenos resultados.<sup>11</sup>

Es importante mencionar que en este trabajo se emplea DFT; aunque existen cálculos previos en donde se han aplicado métodos *semiempíricos*,<sup>12</sup> los cuales son computacionalmente menos costosos; sin embargo, en dichos cálculos la diferencia entre las frecuencias vibracionales calculadas y las experimentales va de 15 a 21%. Lo anterior le da una ventaja significativa al empleo de DFT, cuando se requieren de manera más acertada las frecuencias vibracionales.

## Resultados

*Longitudes de enlace.* La optimización fue rápida, pues en seis pasos la estructura inicial convergió en una estructura que no perdió la simetría icosaedra (grupo puntual  $I_h$ ). Las longitudes de enlace encontradas fueron de dos tipos:  $1.3954 \text{ \AA}$  para los dobles enlaces, y  $1.4534 \text{ \AA}$  para los enlaces sencillos. Los dobles enlaces todos fueron radiales a los pentágonos. Los enlaces dobles son 96% más cortos que los enlaces simples.

*Orbitales moleculares.* Es conocido que los orbitales más cercanos al nivel de Fermi (orbitales de frontera) son los químicamente más importantes, porque representan los "sitios" en los cuales se puede adi-

cionar (LUMO) o extraer (HOMO) electrones más fácilmente de la molécula. Respecto a la simetría de los orbitales de frontera, se encontró que el orbital molecular más altamente ocupado (HOMO) posee una degeneración quintupla, y en el más bajo desocupado (LUMO) se encontró una degeneración triple. En la figura 2 se muestran las degeneraciones del LUMO, y la figura 3 muestra los cinco estados degenerados del HOMO. La diferencia energética (Gap) entre el HOMO y el LUMO calculado es de 2.7625 eV.

Los orbitales LUMO (figura 2) muestran igual signo de la función de onda electrónica (mismo color) en los enlaces entre un pentágono y un hexágono (enlaces [5,6]), lo cual indica que en una reacción éstos son los sitios preferidos por los grupos donadores de electrones. Como puede verse, los enlaces entre átomos de un pentágono y los átomos radiales a éste (enlaces [6,6]) presentan *carácter de antienlace* en los orbitales LUMO. Nótese que lo anterior se deduce del signo diferente de la función de onda electrónica, representado por diferente color, entre los átomos que forman los enlaces entre hexágono-hexágono.

En el caso de los orbitales HOMO (figura 3), el *carácter de enlace* se presenta en los enlaces entre hexágono y hexágono (enlaces [6,6]), es decir, dichos enlaces son los favorecidos ante el ataque de un grupo aceptor de electrones.

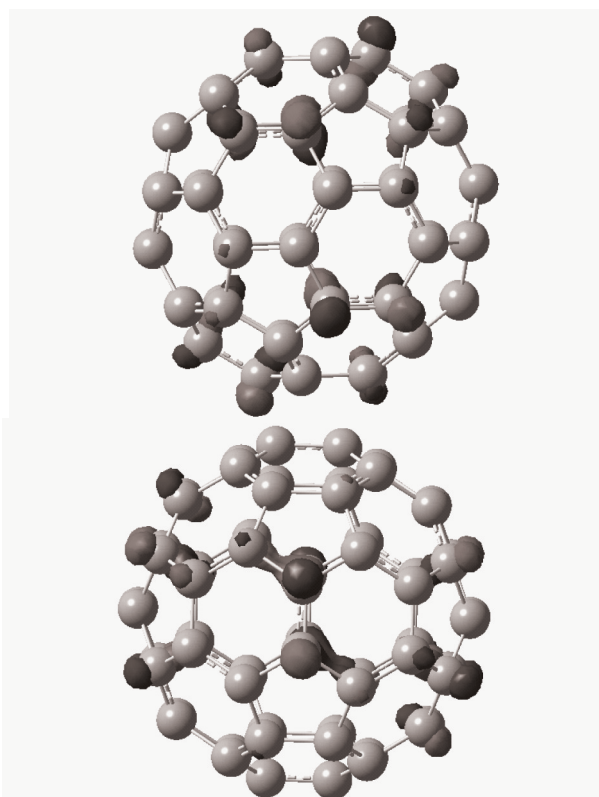
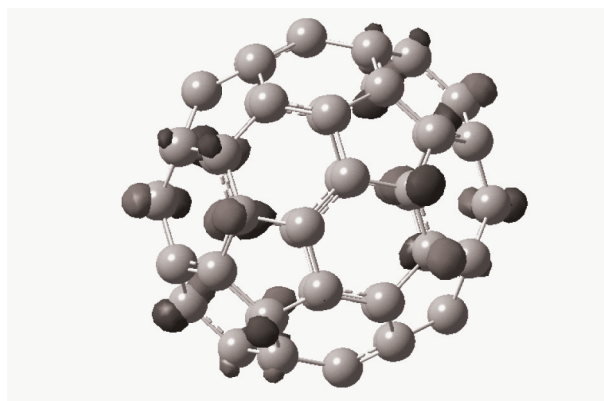
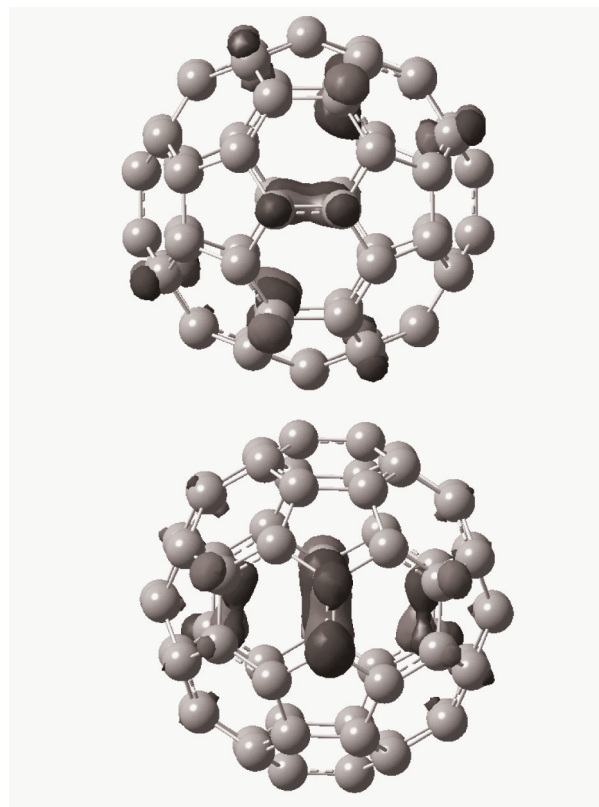


Fig. 2. Orbitales moleculares más bajos desocupados (LUMO) de  $C_{60}$  con simetría  $T_{1u}$ . Valor de la isodensidad de 0.05.



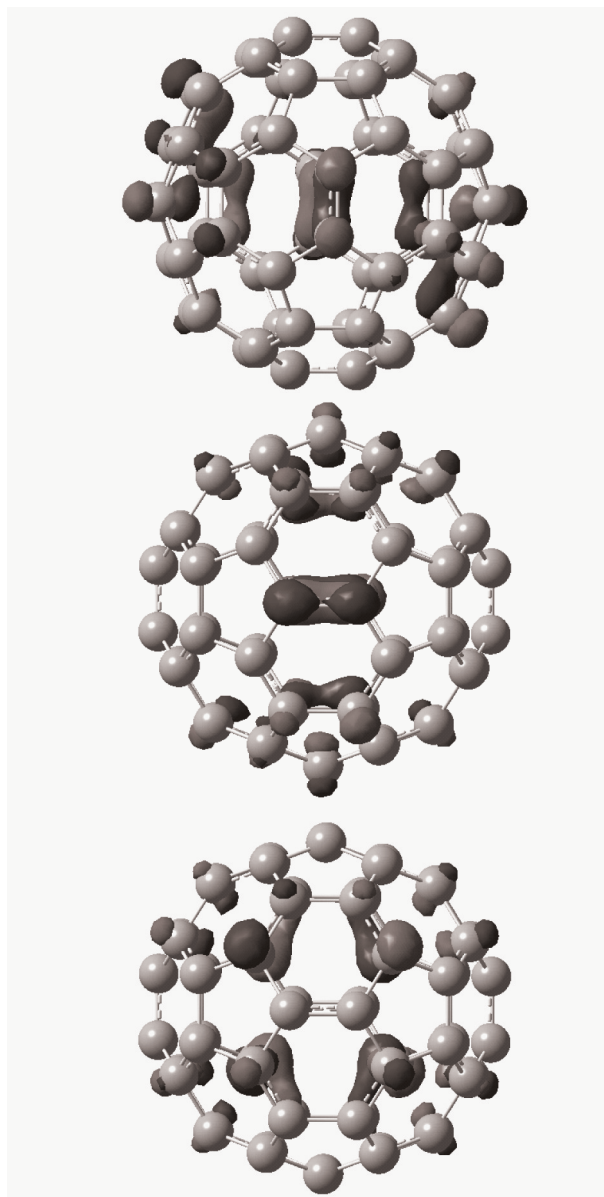


Fig. 3. Orbitales moleculares más altamente ocupados (HOMO) de  $C_{60}$  con simetría  $H_{1u}$ . Valor de la isodensidad de 0.05.

## Modos vibracionales

Al ser el  $C_{60}$  una estructura cerrada, el número de modos vibracionales está dado por  $3n-6$ , donde  $n$  es el número de átomos. La expresión anterior da un número de 174 modos vibracionales para el  $C_{60}$ , incluyendo las traslaciones y rotaciones. Debido a la simetría del  $C_{60}$ , se tienen 46 modos normales o estados vibracionales distintos, de ellos catorce corresponden a los diez activos en Raman y los cuatro en IR. La asignación de los 32 modos

vibracionales restantes ha permanecido en debate debido a que sus respectivas intensidades son demasiado pequeñas (tanto como  $10^{-2}$  veces menores), comparadas con las otras bandas activas en IR.<sup>13</sup>

En el caso de las frecuencias vibracionales activas en IR se obtuvo un buen acercamiento a las experimentales. En la figura 4 se muestra el espectro infrarrojo obtenido, el cual posee cuatro bandas.

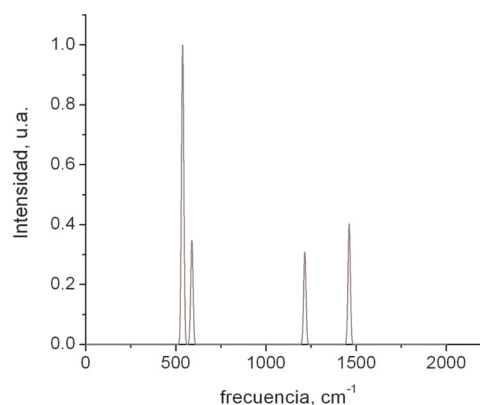


Fig. 4. Espectro IR de  $C_{60}$  calculado mediante B3LYP/6-31g(d).

Existen espectros IR y Raman experimentales reportados para el  $C_{60}$  (se invita al lector a consultar las referencias 7, 14 y 15).

Para obtener el factor de escalamiento, las cuatro bandas del espectro IR se ajustaron a las experimentales, por ejemplo, la banda en  $537\text{ cm}^{-1}$  se hizo corresponder con la experimental en  $527\text{ cm}^{-1}$ . El factor obtenido fue de aproximadamente 0.980996, valor que concuerda con el reportado previamente, en 2001, por Vincenzo Schettino *et al.*<sup>13</sup>

Una condición necesaria para asegurarse de que una molécula está energéticamente en un mínimo de la superficie potencial de energía es que no existan frecuencias negativas en su espectro vibracional.

Tabla I. Comparación entre los resultados obtenidos en este trabajo, contra valores experimentales y cálculos reportados en la bibliografía, para las frecuencias vibracionales activas en el IR del  $C_{60}$ .

Frecuencias, $\text{cm}^{-1}$ Calculada/escalada	Experimental		B3LYP/6-31g (d) Ref. 13
	Ref. 7/	Ref. 15	
537.2091/ 527	528/	526.7	528
588.4358/ 577.25	577/	576	577
1213.9040/1190.83	1183/	1182.8	1189
1459.9997/1432.25	1429/	1429.3	1431

El  $C_{60}$  optimizado en este trabajo no presentó frecuencias negativas.

En las figuras 5(a)-5(f) se muestran cuatro de los doce modos tridegenerados vibracionales que corresponden a las cuatro bandas activas en IR, además de dos modos activos en Raman con simetría  $A_g$ . En estas figuras la magnitud escalada de los vectores de desplazamiento está representada por el largo de las flechas. Además se muestra el icosaedro, como referencia para los desplazamientos de los átomos durante la vibración.

Se debe mencionar que los modos activos en IR son no simétricos y, por lo tanto, cambian el momento dipolar del  $C_{60}$ .

El modo vibracional en  $527\text{ cm}^{-1}$  (figura 5(a)), corresponde a una deformación de los enlaces que unen dos hexágonos. El modo vibracional en  $577.25\text{ cm}^{-1}$  (figura 5(b)) corresponde a un modo que podría considerarse de expansión-contracción (*breathing*) de toda la estructura. El modo en  $1190.83\text{ cm}^{-1}$  (figura 5(c)) corresponde a una distorsión de los pentágonos, es decir, a los enlaces que están entre pentágonos y hexágonos. El modo en

$1432.25\text{ cm}^{-1}$  (figura 5(d)) es atribuible a una deformación de los enlaces tanto en hexágonos como pentágonos.

También es importante presentar los modos activos en Raman con simetría  $A_g$ , ya que éstos representan vibraciones simétricas no degeneradas. El modo en  $1474.51\text{ cm}^{-1}$  (figura 5(e)) es el llamado pentagonal pinch y representa la contracción-expansión de los dobles enlaces radiales a los pentágonos.

Finalmente, el modo en  $487.36\text{ cm}^{-1}$  (figura 5(f)), representa un movimiento de expansión-contracción (*breathing*) del  $C_{60}$ .

A continuación, en la tabla II, se presentan las frecuencias de los 46 modos independientes calculados para el  $C_{60}$ .

En la tabla II se tienen los modos vibracionales activos en IR, siendo los que presentan simetría  $T_{1u}$ .

## Comentarios finales y conclusiones

A través del empleo del método de primeros principios de la teoría del funcional de la densidad se

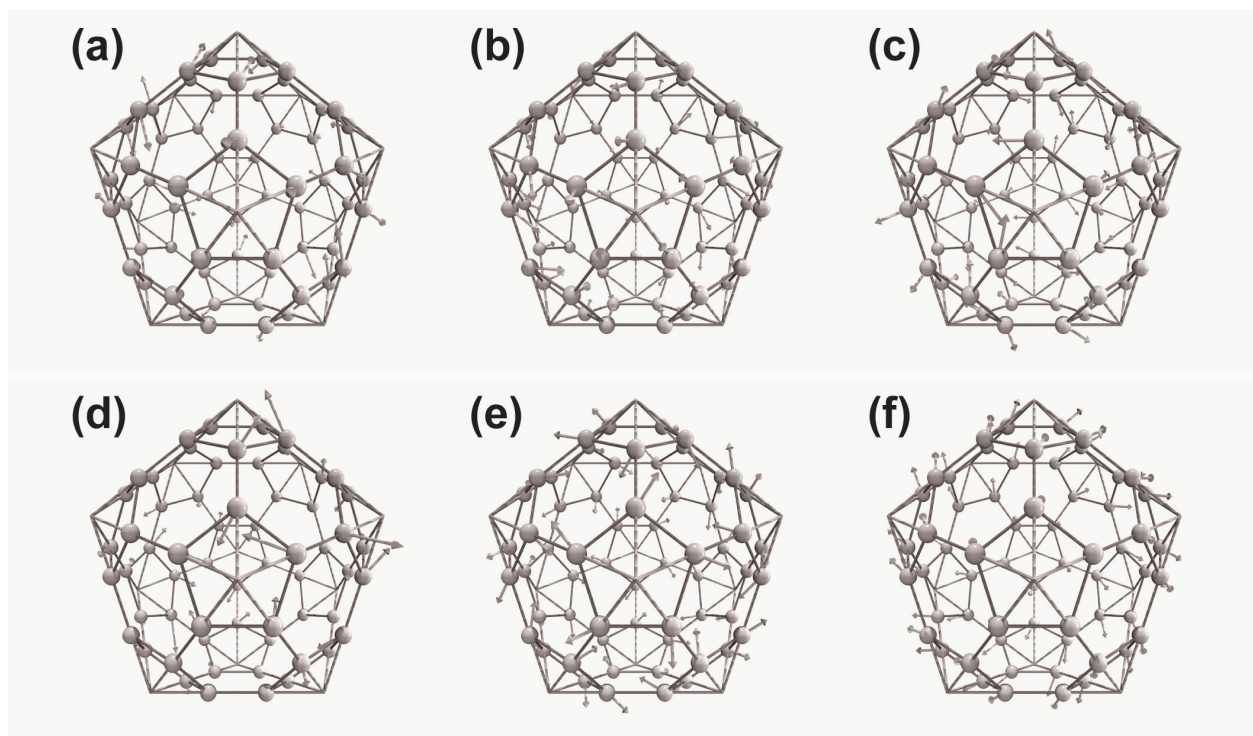


Fig. 5. Frecuencias características de  $C_{60}$ . Las imágenes (a) a (d) corresponden a modos activos en el infrarrojo; (e) y (f) corresponden a modos activos en Raman. (a) Modo activo en IR,  $527\text{ cm}^{-1}$ ; (b) modo activo en IR,  $577.25\text{ cm}^{-1}$ ; (c) modo activo en IR,  $1190.83\text{ cm}^{-1}$ ; (d) modo activo en IR,  $1432.25\text{ cm}^{-1}$ ; (e) modo  $A_g$  activo en Raman,  $1474.51\text{ cm}^{-1}$ ; (f) modo  $A_g$  activo en Raman,  $487.36\text{ cm}^{-1}$ .

Tabla II. Frecuencias escaladas obtenidas en este trabajo para los 46 modos de vibración independientes del C y las obtenidas en la referencia 13.

Representación irreducible	Frecuencia, cm <sup>-1</sup> (referencia 13)	Frecuencia, cm <sup>-1</sup> (este trabajo)
A <sub>g</sub>	496	487.36
	1468	1474.51
H <sub>g</sub>	264	260.84
	430	429.10
	709	707.25
	773	772.72
	1101	1105.12
	1251	1252.14
	1425	1426.73
T <sub>1u</sub>	525	527
	578	577.26
	1182	1190.84
	1433	1432.25
T <sub>1g</sub>	560	561.15
	825	824.18
	1260	1277.34
T <sub>2g</sub>	552	555.65
	713	724.37
	796	789.45
	1345	1345.60
G <sub>g</sub>	485	481.09
	567	565.25
	751	742.35
	1078	1073.89
	1315	1308.56
A <sub>u</sub>	1497	1508.29
	956	947.42
T <sub>2u</sub>	341	335.55
	706	710.68
	963	958.74
	1166	1178.16
	1540	1536.44
G <sub>u</sub>	354	352.12
	741	738.19
	756	752.49
	972	964.33
	1307	1309.28
	1428	1435.87
H <sub>u</sub>	403	400.29
	533	531.71
	665	666.50
	738	729.54
	1215	1221.10
	1341	1344.38
	1566	1577.06

obtuvieron las frecuencias vibracionales del fullereno más simétrico. Estos resultados son comparables en precisión a los reportados previamente.<sup>15</sup> Asimismo, se obtuvieron el orbital molecular más altamente ocupado (HOMO), que posee una degeneración quintupla, y el más bajo desocupado (LUMO), que posee una degeneración triple.

Las coordenadas iniciales del C<sub>60</sub> no se tomaron de trabajos de otros grupos, sino del Laboratorio de Diseño Molecular de la FCFM. Haber partido de una estructura que posee la simetría icosaedra desde el inicio permitió reducir de manera muy drástica el tiempo de cálculo. Por ejemplo, para la optimización y el cálculo del espectro infrarrojo se requirió un tiempo de cómputo de aproximadamente 34 hrs., empleando una estación de trabajo con un procesador de 3.0 GHz y con 1GB de memoria en RAM, cuando el cálculo considera las características de simetría. Sin las consideraciones de simetría, el tiempo de cálculo puede incrementarse a más de una semana, en un equipo de características similares.

La animación de los modos vibracionales activos en IR se encuentran disponibles en una página web.<sup>16</sup>

## Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo financiero del Consejo Estatal de Ciencia y Tecnología de Nuevo León, a través del proyecto *Síntesis y caracterización de materiales nanoestructurados con aplicaciones en energía y salud*, de Conacyt, con el proyecto de Ciencia Básica 43772, y de Paicyt, a través del proyecto CA1267-06.

## Resumen

Mediante el uso del método del funcional de la densidad (DFT) se obtuvo el espectro vibracional del C<sub>60</sub>. Con el empleo del funcional híbrido B3LYP y la base 6-31G (d), se encontraron los valores de frecuencia vibracional, con buen acuerdo con los reportados en la bibliografía. Las frecuencias obtenidas en 527 cm<sup>-1</sup>, 577.25 cm<sup>-1</sup>, 1190.83 cm<sup>-1</sup> y 1432.25 cm<sup>-1</sup>, corresponden a modos activos en el IR. Además, los 46 modos vibracionales indepen-

dientes para C<sub>60</sub> fueron encontrados con valores muy cercanos a los reportados previamente. La asignación de la simetría correspondiente a cada modo vibracional fue directa al haber obtenido una estructura optimizada con la simetría I<sub>h</sub>. Durante la etapa de relajación se obtuvo la simetría y degeneración correcta de los orbitales moleculares. Finalmente, en la realización del cálculo, el tiempo disminuye drásticamente, si se parte de una estructura ideal, cuyas distancias entre átomos enlazados es aquella presente en el grafito. Por otra parte, el valor del *Gap* obtenido estuvo dentro del rango esperado.

**Palabras clave:** DFT, Fullerenos, IR, Simulaciones.

## Abstract

We carried out a DFT calculation series to obtain the vibrational spectrum for C<sub>60</sub>. We found that with the B3LYP functional and 6-31G (d) basis, we were able to get good agreement on the values of vibrational frequencies when compared with previous reports. We also found that the vibrational frequencies of 527 cm<sup>-1</sup>, 577.25 cm<sup>-1</sup>, 1190.83 cm<sup>-1</sup>, and 1432.25 cm<sup>-1</sup> were IR active modes. The 46 independent modes and their values were close to those existent in the literature. Finally, we correctly obtained the degeneracy and symmetry for Molecular Orbitals.

**Keywords:** DFT, Fullerenes, IR spectrum, Simulations.

## Referencias

1. H.W. Kroto, J.R. Heath, S. C. O'Brien, R.F. Curl and R.E. Smalley, *Nature*, 318, 162, (1985).
2. Xiaoni Yang et al. 2005. Nanoscale morphology of high-performance polymer solar cells, *Nanoletters*, 5, 579-583.
3. Luis Echegoyen, Lourdes E. Echegoyen. 1998. Electrochemistry of fullerenes and their derivatives, *Acc. Chem. Res.*, 31, 593-601.
4. R.W. Lof, M.A. Van Veenendaal, B. Koopman, H.T. Jonkman, G.A. Sawatzky. 1992. Band Gap, excitons and coulomb interactions in solid C<sub>60</sub>, *Phys. Rev. B*, 68, 3924-3927.
5. Susumu Saito, Atsushi Oshiyama. 1991. Cohesive mechanism and energy bands of solid C<sub>60</sub>. *Phys. Rev. Lett.*, 66, 20, 2637-2640.
6. P.W. Fowler, D.E. Manopoulos. 1995. *An atlas of fullerenes*, Clarendon Press, Oxford.
7. W. Kratschmer, Lowell D. Lamb, K. Fostiropoulos & Donald R. Huffman. 1990. Solid C<sub>60</sub>: A new form of carbon, *Nature*, 347, 354-357.
8. P. Hohenberg, W. Kohn. 1964. Inhomogeneous electron gas, *Physical Review*, 136, 3B, B864-B871.
9. W. Kohn, L.J. Sham. 1965. Self-Consistent equations Including Exchange and correlation Effects, *Physical Review*, 140, A1133-A1138.
10. Gaussian 03, Revision B.03, M. J. Frisch et al., Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 2003. <http://www.gaussian.com> GaussView, Version 3.09, Roy Dennington II, Todd Keith, John Millam, Ken Eppinnett, W. Lee Hovell, and Ray Gilliland, Semichem, Inc., Shawnee Mission, KS, 2003.
11. Cheol Ho Choi, Miklos Kertesz, Laszlo Mihaly. 2000. Vibrational Assignment of all 46 fundamental of C<sub>60</sub> and C<sub>60</sub>6-: Scaled Quantum Mechanical Results Performed in Redundant Internal Coordinates and Compared to Experiments, *J. Phys. Chem. A.*, 104, 102-112.
12. Khrisnan Raghavachari, Celeste McMichael Rohlfing. 1991. Structures and vibrational frequencies of C<sub>60</sub>, C<sub>70</sub> and C<sub>84</sub>, *J. Phys. Chem.*, 95, 5768-5773.
13. Vincenzo Schettino, Marco Pagliaci, Lucia Ciabini and Gianni Cardini. 2001. The Vibrational spectrum of fullerene C<sub>60</sub>, *J. Phys. Chem A.*, 105, 11192-11196.
14. Ran Liu, M.V. Klein. 1992. Raman study of vibrational properties in solid C<sub>60</sub>, *Phys. Rev B.*, 45, 11437-11440.
15. Matthias Krause et al. 1998. Vibrational signatures of fullerene oxides, *J. Chem. Soc., Faraday Trans.*, 94, 2287-2294.
16. [www.fcfm.uanl.mx/ifi/Galeria.htm](http://www.fcfm.uanl.mx/ifi/Galeria.htm)

*Recibido:* 10 de noviembre de 2006

*Aceptado:* 23 de abril de 2007