

El buckminsterfullereno¹ y sus hermanos los fullerenos²

Alain Pénicaud*

Introducción

El C₆₀, por sus propiedades, su simetría fascinante, y los retos que presenta, se ha vuelto la molécula consentida de muchos científicos (químicos, fisicoquímicos, físicos, astrofísicos,...) en los últimos años. Varios artículos ya presentaron parte del tema al lector mexicano (Pisanty, 1991; Guevara, 1992; Terrones, 1993). En este artículo se intenta presentar un panorama general y actualizado, aunque obviamente no-exhaustivo (un libro entero no sería suficiente) de la química de los fullerenos. Por razón de espacio y para centrar el tema, no se hace mención de las otras formas de carbono, recientemente observadas (Iijima, 1991) o imaginadas (Mackay, 1991). Estas dos formas, los tubulenos y la schwarzita, respectivamente, están presentadas en el artículo de Terrones y col. (1993).

Un poco de geometría: el icosaedro truncado

El icosaedro truncado es uno de los doce poliedros Arquimedeanos que se obtienen truncando los poliedros Platónicos (de caras equivalentes). Arquímedes pudo haber sido el primero en dibujar un icosaedro truncado, pero parece que desafortunadamente la prueba escrita se perdió. El reporte más antiguo es el de Piero della Francesca (ca. 1450, biblioteca del Vaticano) seguido por el de Leonardo da Vinci en 1509 (da Vinci, 1509). En 1619, Kepler publicó una lista completa de los sólidos Arquimedeanos y les dio sus nombres modernos (Kepler, 1619). En 1758, Euler derivó la relación $C - E + F = 2$ (C : número de vértices, E : número de aristas, F : número de caras) para cualquier poliedro, la cual establece que un icosaedro truncado tiene doce caras pentagonales (Euler, 1758).

* Departamento de Química, CINVESTAV, Apdo. postal 14-740, 07000 México D.F., México

Recibido: 21 de agosto de 1994; Aceptado: 22 de septiembre de 1994.

(1) Para más información sobre el C₆₀ y los fullerenos:

(i) "Bucky news service" disponible en internet, mandando correo a Bucky@sol1.1.srn.upenn.edu.

(ii) "C₆₀: Buckminsterfullerene" de H. W. Kroto, A.W. Allaf y S.P. Balm, *Chem. Rev.* **91** (1991) 1213-1235.

(2) En los artículos en español que tratan del C₆₀, se habla de los fullerenos o de los fulerenos. La primera opción respeta la ortografía del apellido Fuller mientras la segunda respeta su pronunciación. He seguido en este artículo la elección de A. Garritz y J.A. Chamizo (*Química*, Addison-Wesley Iberoamericana, 1994).

Nacimiento del Buckminsterfullereno

Al parecer, la naturaleza hizo uso de la alta simetría del icosaedro truncado: Existen informes de un esqueleto fósil (Hoeckel, 1887) y otros de estructuras de virus (Caspar, 1962; Rueckert, 1969) con tal geometría. El tercer ejemplo natural de un icosaedro truncado es la molécula C₆₀ o el buckminsterfullereno.

El nacimiento del C₆₀ ocurrió en tres etapas aisladas. En la primera etapa tuvo su aparición en la imaginación de algunos químicos teóricos (Jones, 1966; Yoshida, 1971; Bochvar, 1973; Davidson, 1981; Stankevitch, 1984). La segunda etapa le dio existencia formal: en 1985, Harry Kroto (Universidad de Sussex, Inglaterra) y Rick Smalley y col. (Universidad de Rice, Texas) observaron un pico de masa 720 en el espectro de masas de un vapor de carbón formado al quemar una barra de grafito con un láser (Kroto, 1985). En una noche (¡dice la historia!, Kroto, 1992) y utilizando solamente sus imaginaciones, hicieron la hipótesis de una molécula de carbono puro, de estructura icosaédrica, para explicar la presencia del pico de masa 720. Estos autores bautizaron al C₆₀ como "buckminsterfullerene" del nombre del arquitecto R. Buckminsterfuller, que construyó domos geodésicos de estructura parecida a la del C₆₀. Finalmente en 1990, Wolfgang Krätschmer, Donald Huffman y col. sintetizaron macroscópicamente el C₆₀, con un arco eléctrico entre dos electrodos de grafito (Krätschmer, 1990).

La estructura icosaédrica del C₆₀ fue comprobada primero por resonancia magnética nuclear (un pico único de ¹³C para los 60 carbonos equivalentes en 142.5 ppm) (Taylor, 1990; Johnson, 1990), y luego por cristalografía de rayos X cuando se publicaron (con una semana de diferencia) las estructuras de dos derivados del C₆₀ (Hawkins, 1991; Fagan, 1991a).

Una forma canónica (¡de las 12500!) del C₆₀ se obtiene fácilmente de la Figura 1, poniendo dobles enlaces entre todos los hexágonos. Los valores de las distancias interatómicas (1.38 Å entre dos hexágonos y 1.43 Å entre un hexágono y un pentágono) reflejan que los dobles enlaces están parcialmente localizados. El esqueleto del C₆₀ tiene un diámetro de 10 Å, por lo que al tomar en cuenta la capa de van der Waals deja una cavidad interna de 7 Å, espacio más que suficiente para acomodar uno o más átomos. El C₆₀ presenta entonces un "adentro" y un "afuera" y vamos a ver que ambos lados se pueden aprovechar para preparar otros derivados.

El diagrama de orbitales moleculares (C₆₀: Haddon, 1986; C₇₀: Lawson, 1992a) del C₆₀ está representado en la Figura 2. El orbital LUMO es triplemente degenerado y se encuentra en la

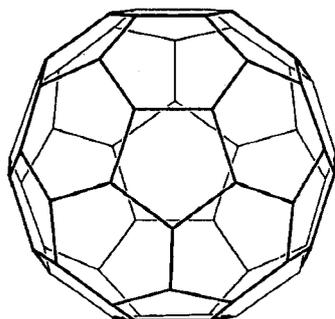


Figura 1. Representación esquemática del C₆₀.

parte no-enlazante del diagrama. Con este diagrama, se predijo el carácter aceptor de electrones del C₆₀, propiedad que se pudo verificar gracias a la preparación macroscópica de los fullerenos. Por voltamperometría cíclica, se comprobó que ambas moléculas pueden aceptar hasta 6 electrones por ondas reversibles sucesivas de un electrón (Xie, 1992). Además, por intercalación electroquímica de litio, se pudo llegar hasta el estado de reducción 12-, preparando un compuesto de estequiometría Li₁₂C₆₀ (Chabre, 1992).

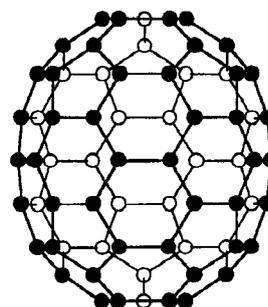


Figura 3. Representación esquemática del C₇₀.

La familia de los fullerenos

El C₆₀ es el más abundante de una familia infinita de moléculas-jaulas cerradas con esqueleto de carbono. Por extensión del nombre del C₆₀, estas moléculas fueron llamadas los fullerenos (*fullerenes*). Todos los fullerenos tienen 12 pentágonos (número requerido para cerrar sobre sí misma una red plana hexagonal) y un número variable de hexágonos. Aun cuando algunos cálculos teóricos predecían que fullerenos con ciclos de cuatro o siete carbonos serían energéticamente sólo un poco menos favorecidos, hasta la fecha no se ha caracterizado ningún fullereno de este tipo. Los fullerenos caracterizados son el C₇₀ (Taylor, 1990), el C₇₆ (Ertl, 1991), los C₇₈, C₈₂, C₉₀, C₉₆ (Kikuchi, 1992) y C₈₄ (Kikuchi, 1992; Meier, 1993). Debido a los bajos rendimientos de la síntesis por arco eléctrico (ver abajo), los fullerenos mayores (C_n, n > 70) requieren separaciones fastidiosas por HPLC con reciclaje (¡6 semanas para obtener 5 mg!). Las estructuras del C₇₀ y C₇₆ (¡quiral!) están representadas en las Figuras 3 y 4 respectivamente. El C₇₀ (Taylor, 1990) tiene cinco tipos de átomos de carbono mientras que el C₇₆ (Ertl, 1991) tiene 19, hechos que se reflejan en sus espectros de ¹³C.

Al aumentar el peso molecular existen los fullerenos gigantes

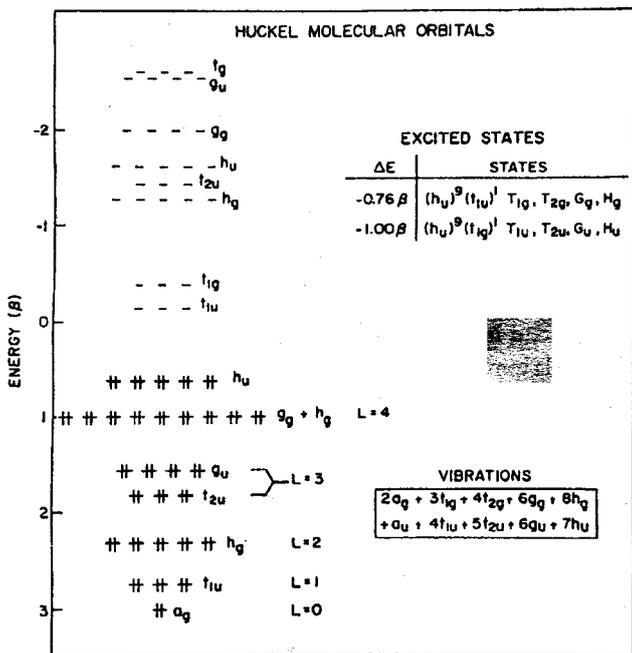


Figura 2. Diagrama de niveles energéticos HMO (Orbitales Moleculares de Hückel) para el C₆₀ (Haddon, 1986).

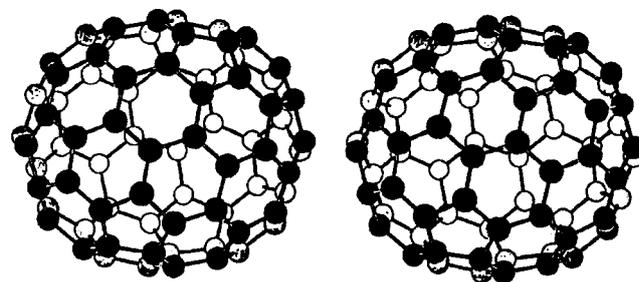


Figura 4. Representación estereoscópica del C₇₆.

que, según experimentos de microscopía electrónica, podrían tener una estructura de "muñecas rusas" (Kroto, 1992) en los que cada esqueleto de carbono estaría dentro de otro esqueleto más grande.

I. Preparación

El método de Kräschmer y Huffman consiste en poner casi en contacto a dos barras de grafito, en una atmósfera parcial de helio (≈ 100 mm Hg) y generar un arco eléctrico entre las dos barras (Figura 5). Después de la extracción con tolueno del hollín formado y de su evaporación, se obtiene una mezcla de C_{60} , C_{70} y fullerenos mayores en proporciones aproximadas de C_{60} : 84 %, C_{70} : 15 %, C_{76} : 0.5 %, C_{82} , C_{84} , C_{90} y C_{94} : 0.5 %. Una variación interesante del generador por arco eléctrico fue desarrollada por R. Smalley y col. utilizando como fuente de energía la luz solar (Chibante, 1993; Fields, 1993). Un método alternativo de síntesis fue publicado por J.B. Howard y col., en el cual los fullerenos se preparan quemando hidrocarburos en condiciones reductoras (Howard, 1991). Un aspecto interesante de esta síntesis es que al cambiar las condiciones de las llamas de hidrocarburos, se puede obtener mayoritariamente el C_{70} en lugar del C_{60} . Finalmente, se encontraron pequeñas cantidades de fullerenos "fósiles" en rocas precámbricas de Karelia, Rusia, (Buseck, 1992).

La separación de los diferentes fullerenos se hace mediante una cromatografía, de la cual se publicaron muchas variaciones (Taylor, 1990; Koch, 1991; Bhyrappa, 1992; Chatterjee, 1992;

Khemani, 1992; Scrivens, 1992). A la fecha la más eficiente parece ser la de James Tour y col. en donde el hollín es separado por cromatografía con una mezcla de sílica gel y carbón activado (Scrivens, 1992).

II. El C_{60} , más duro que el diamante

Cuando se le somete a una presión hidrostática (uniforme) de más de 20 GPa ($\approx 200\ 000$ atm), el C_{60} se vuelve ¡más duro que el diamante! (Ruoff, 1991) Se piensa que esto se debe a la estructura de su esqueleto y recuerda la resistencia casi infinita a la deformación de los domos geodésicos construidos por R. Buckminsterfuller (Sieden, 1989). Sin embargo, cuando se somete a una presión no-hidroestática, el C_{60} se puede transformar en diamante (Nuñez-Regueiro, 1992).

III. Reactividad química y derivados funcionalizados

La funcionalización del C_{60} es muy atractiva para los químicos orgánicos. Al igual que la química de los esteroides, desarrollada por variaciones sobre un esqueleto central policíclico, el C_{60} presenta una estructura central sobre la cual se puede jugar en tres dimensiones. Un libro recién publicado (Hirsch, 1994) y un artículo (Taylor, 1993) cubren los diferentes aspectos de la química de los fullerenos. La estructura del C_{60} lleva a la siguiente pregunta: ¿Reacciona como una molécula "superaromática" tridimensional o más bien como olefina? Hasta la fecha su reactividad química se inclina hacia la segunda hipótesis. En química de coordinación, fueron preparados varios complejos de tipo η^2 y caracterizados (Fagan, 1991a y b; Balch, 1991a, 1992 a y b, 1993a; Koefod, 1991) Existen también informes de un complejo $(\eta^2)_2$ de C_{60} (Rasinkangas, 1993) y otro η^2 de C_{84} (Balch, 1994). En química orgánica, el C_{60} actúa como una olefina deficiente en electrones. Su reactividad se describe por un carácter electrofílico y dieno/dipolarofílico (Hirsch, 1993a). Algunas reacciones están representadas en la Figura 6. Recientemente, se sintetizó un derivado de C_{60} con un aminoácido, soluble en medio acuoso y con actividad inhibitoria sobre la replicación por una enzima del virus de la inmunodeficiencia humana (VIH) (Friedman, 1993; Sijbesma, 1993).³

El esqueleto del C_{60} presenta múltiples sitios reactivos indiferenciables, por lo que potencialmente se pueden obtener productos de multi-adición difícilmente separables. Un método para obtener productos de adición selectiva es el uso de aniones del

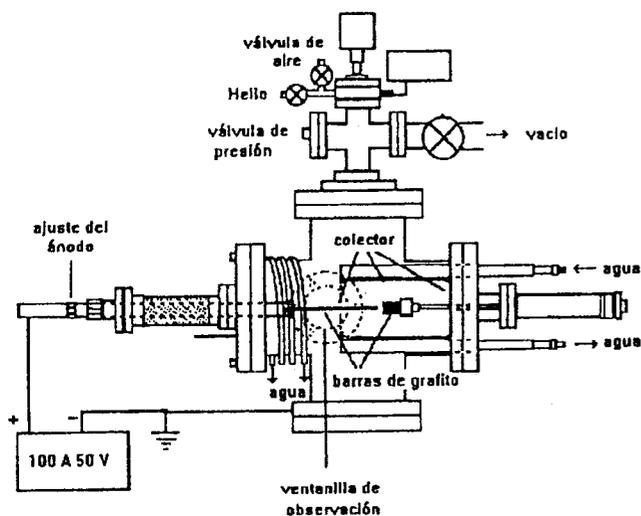


Figura 5. Evaporador de grafito para producir la "fullerita" (hollín de fullerenos) (Pérez Benítez, 1994).

(3) La actividad inhibitoria no quiere decir aún acción medicamentosa. Todavía se necesita investigar el grado y la especificidad de la inhibición. Sin embargo, el sitio receptor de la proteína presenta un hueco redondo donde cabe perfectamente el C_{60} . Con modificaciones químicas sobre la superficie del C_{60} se espera poder afinar el carácter inhibitorio y específico de las moléculas sintetizadas.

C_{60} como intermediarios de reacción, dando productos de n -adición donde n es la carga del anión. Este concepto fue recientemente utilizado para sintetizar $C_{60}(CH_3)_2$ por una reacción del dianión con yoduro de metilo (Caron, 1993).

IV. MATERIALES DERIVADOS DEL C_{60}

1. Sales

El carácter aceptor del C_{60} fue aprovechado para preparar sales de C_{60}^{n-} . Las más sobresalientes son sales de fórmula M_3C_{60} (M = metal alcalino) que exhiben una transición hasta un estado superconductor a 18 K [K_3C_{60} (Hebard, 1991)], y 33 K [Cs_2RbC_{60} (Tanigaki, 1991)]. También, reduciendo el C_{60} con el reductor orgánico tetrakis(dimetilamino)etileno (TDAE), se obtiene una sal que presenta una transición hasta un estado ferromagnético a 18 K (Allemand, 1991). Aprovechando el carácter reversible de la reducción del C_{60} , las sales monocristalinas de C_{60} se pueden sintetizar por electrocristalización, lo que permite obtener sus estructuras atómicas y relacionarlas con el estudio de sus propiedades físicas. De esta manera fueron sintetizadas las sales $[(C_6H_5)_4P]_2[C_{60}][I]_x$ (Pénicaud, 1993a) y $[(C_6H_5)_4P]_2[C_{70}][I]$. Una vista estereoscópica de la estructura de $[(C_6H_5)_4P]_2[C_{60}][I]_x$ se presenta en la Figura 7.

2. Fullerenos endoedrales⁴

Desde el descubrimiento del C_{60} , en 1985, se intentó con éxito encapsular átomos dentro de la molécula. Para describir estos materiales, Smalley y col. desarrollaron una nomenclatura específica donde el símbolo @ significa "dentro". Así, $La@C_{82}$ describe un compuesto donde cada molécula de C_{82} contiene un átomo de La, mientras que K_3C_{60} describe un compuesto que contiene tres átomos de potasio por molécula de C_{60} , en el cual el potasio se encuentra fuera de los fullerenos. La Figura 8, digna de un libro de texto, enseña el espectro de resonancia paramagnética electrónica de $La@C_{82}$ donde la señal debida al radical $C_{82}^{\cdot-}$ presenta una estructura hiperfina debida al acoplamiento del espín electrónico con el espín nuclear del lantano ($7/2$) (Johnson, 1992). Los fullerenos endoedrales se conocen a través de su firma por espectroscopía (de masas, de resonancia paramagnética electrónica, etcétera) como era el caso del C_{60} en 1985, pero no existe todavía un método de preparación macroscópica (ver abajo).

(4) En español se acostumbra llamar a los fullerenos que llevan un átomo en el interior como "encapsulados". Sin embargo, esta nomenclatura describe los compuestos al revés, los fullerenos son encapsulantes y no encapsulados. Por eso, en este artículo, se siguió la misma lógica que para la palabra inglesa "endohedral", utilizando "endoedral", con las raíces griegas "endo" (adentro) y "edro" (cara) que recuerda "poliedro".

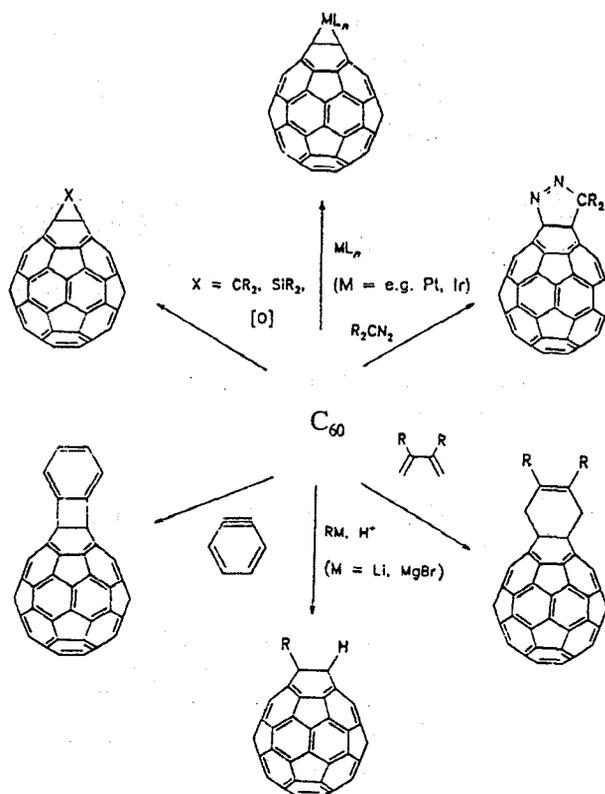


Figura 6. Síntesis de derivados exoedros de C_{60} (Hirsch, 1993a).

En efecto, actualmente los fullerenos endoedrales se sintetizan quemando barras de grafito dopadas con óxidos metálicos o con metales. Es sumamente baja la probabilidad de que en el plasma de reacción se encuentre un átomo metálico dentro del fullereno, *al momento de cerrarse sobre sí mismo*. Esto hace que los rendimientos en fullerenos endoedrales sean muy bajos, aún menores que los de los fullerenos mayores (C_{76} , etcétera).

V. Los aniones C_{60}^{n-}

El orbital LUMO accesible en el C_{60} lo hace una molécula activable electrónicamente. La adición de 3 electrones puede inducir, como en el caso de las sales M_3C_{60} , un carácter de superconductor. De allí el gran interés en caracterizar los aniones moleculares C_{60}^{n-} , para posteriormente extrapolar al caso de las sales superconductoras, en las que los aniones presentan interacciones intermoleculares a la escala de todo el material. Aparte de la difracción de rayos X y de la resonancia paramagnética electrónica, la espectroscopía de infrarrojo cercano se ha vuelto un instrumento privilegiado de caracterización, dado que la zona de 900 a 1400 nm presenta absorciones características del estado

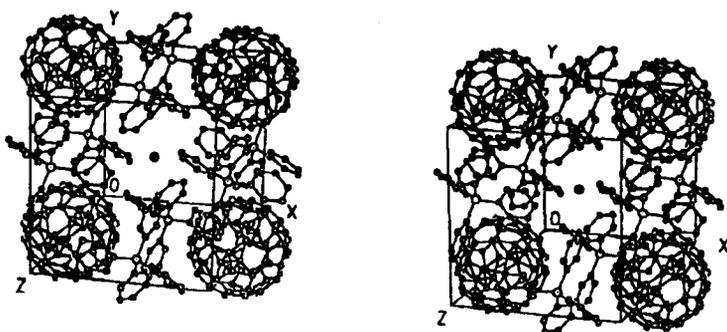


Figura 7. Vista estereoscópica de la celda unitaria de $[\text{C}_6\text{H}_5)_4\text{P}]_2[\text{C}_{60}][\text{I}]_x$ (para mayor claridad, se omitieron los yoduros en los vértices y los C_{60} en $(1/2, 1/2, 0)$ y $(1/2, 1/2, 1)$) (Pénicaud, 1993a).

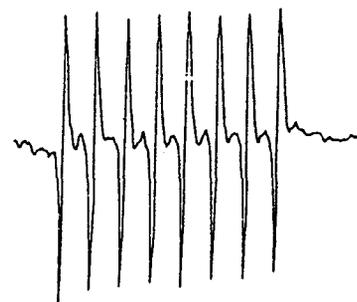
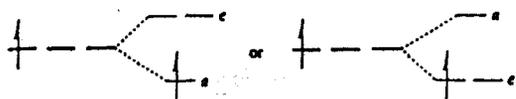


Figura 8. Espectro de RPE de $\text{La}@\text{C}_{82}$ (Johnson, 1992).

de reducción del fullereno (C_{60} : Heath, 1992; Lawson, 1992b; C_{70} : Lawson, 1992a).

1. $\text{C}_{60}^{\cdot-}$

A la fecha, han sido caracterizadas varias sales de $\text{C}_{60}^{\cdot-}$, principalmente por resonancia paramagnética electrónica, pero sólo de $[\text{C}_6\text{H}_5)_4\text{P}]_2[\text{C}_{60}][\text{I}]_x$ (Pénicaud, 1993a), $[\text{C}_6\text{H}_5)_4\text{P}]_2[\text{C}_{60}][\text{Cl}]$ (Bilow, 1994) y $[\text{Co}(\text{cp})_2]^+[\text{C}_{60}]^-$ (Balch, 1993b) se han obtenido sus estructuras atómicas (por difracción de rayos X). Una característica del radical $\text{C}_{60}^{\cdot-}$ es que presenta una señal de resonancia paramagnética electrónica de factor g muy bajo (1.999) (Allemand, 1990) para un radical orgánico (normalmente oscila entre 2.002 y 2.010). El espín no-apareado del radical $\text{C}_{60}^{\cdot-}$ se encuentra sobre un orbital triplemente degenerado. En consecuencia, el radical $\text{C}_{60}^{\cdot-}$ es susceptible de sufrir una transición de Jahn-Teller para encontrarse en un nivel de energía más bajo, según el esquema siguiente:



Con esta hipótesis se trató de explicar la aparición de una señal angosta extra en el espectro de resonancia paramagnética del radical $\text{C}_{60}^{\cdot-}$, (Stinchcombe, 1993) a altas temperaturas. Según esta hipótesis, la señal ancha del espectro (Figura 9) se debería al espín en el estado fundamental, mientras la señal angosta correspondería al espín en el estado excitado de Jahn-Teller.

2. C_{60}^{2-}

La única sal caracterizada por rayos X es $(\text{PPN})_2\text{C}_{60}$ (Paul, 1994) (PPN^+ : Bis (trifenilfosfina)iminio, $[(\text{CH}_3)_3\text{P}]_2\text{N}^+$). Un resultado sobresaliente de este trabajo es la observación de una elongación

sobre un eje del C_{60} al añadirle dos electrones. El estado electrónico del C_{60}^{2-} es todavía fuente de polémica; se ha explicado considerándolo de “bajo espín” y diamagnético (Khaled, 1994) o bien de “alto espín” y en un estado triplete ($S = 1$) (Dubois, 1992; Bhyrappa, 1993).

3. C_{60}^{3-}

Ninguna sal molecular de C_{60}^{3-} ha sido caracterizada estructuralmente hasta la fecha. Por resonancia paramagnética electrónica, se comprobó que el C_{60}^{3-} está en el estado de espín $1/2$ (bajo espín) (Dubois, 1992; Bhyrappa, 1993).

4. $\text{C}_{60}^{\cdot+}$ y $\text{C}_{76}^{\cdot+}$

Cuando se creía que, en solución, los fullerenos sólo eran estables en sus formas reducidas, se dio a la luz una onda de oxidación reversible para el C_{76} , (Li, 1992) y para el C_{60} (Xie, 1993). Sin embargo, ambos resultados han sido cuestionados. De ser verificados, se tendría la posibilidad de preparar nuevas sales, ahora catiónicas, de C_{60} y de investigar sus propiedades.

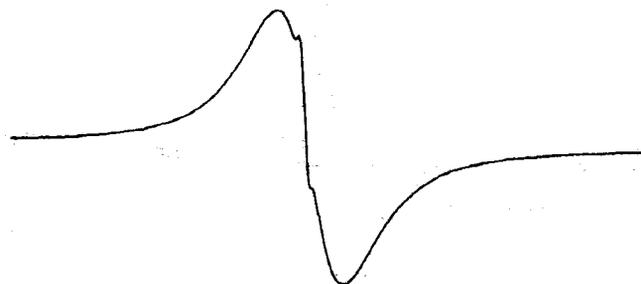


Figura 9. Espectro de RPE (polvo) del radical $\text{C}_{60}^{\cdot-}$ (Pénicaud, 1993b)

VII. Aplicaciones potenciales

- Obviamente, la posibilidad de superconductividad con materiales ligeros y a temperaturas superiores a la temperatura del nitrógeno líquido o, aún mejor, a temperatura ambiente, abre un sinnúmero de aplicaciones tecnológicas, desde trenes levitando sobre campos magnéticos hasta componentes electrónicos aún más potentes y miniaturizados que los actuales.
- El campo de los ferroimanes moleculares está todavía en su infancia, pero ya cuenta con un nuevo bebé, TDAE.C₆₀. En el futuro, podríamos tener nuevas herramientas para la conservación de la información gracias a materiales de este tipo. El campo de la investigación sobre medicamentos que sean inhibidores eficientes del virus VIH tiene un carácter de urgencia que, tal vez, sólo el programa de realización de la bomba H en el desierto de Los Álamos tuvo en la historia. Se trata de millones de vidas en tiempo "prestado" y de prevenir una epidemia que será catastrófica si no se para a tiempo (las epidemias no se caracterizan por incrementos lineales sino exponenciales con el tiempo).

La síntesis de un derivado de C₆₀ con actividad inhibitoria es sólo uno de muchos pasos de hormiga, uno de los cuales esperamos se desarrolle en una cura o una vacuna para el SIDA.

- ¡Una aplicación sorprendente pero que podría ser la primera en realizarse es la utilización de los fullerenos para propulsar cohetes! (Hruby, 1994). Actualmente en la propulsión electrostática,⁵ se utiliza Xe como propulsor, para obtener la mayor energía cinética posible. El C₆₀, casi-redondo, isotrópico, es una especie de superátomo, con un peso molecular de 720 en lugar de 131.30 del xenón.

VIII. RETOS

No faltan retos en el campo de los fullerenos y eso asegura un futuro próximo rico en eventos extraordinarios. Para mencionar sólo algunos:

1. La síntesis total del C₆₀

¡Es decir una síntesis de químico! Algunos se sienten incómodos con el método actual "de soldador". Aparte de consideraciones filosófico-estéticas y del reto sintético, la síntesis total del C₆₀

(4) La propulsión de cohetes consiste en un movimiento hacia adelante resultado de la expulsión hacia atrás de gases a alta velocidad. El principio de la propulsión está basado en la tercera ley de Newton del movimiento, que plantea que para toda acción hay una reacción igual y en sentido opuesto (S.S. Chin, *Missile configuration design*, McGraw Hill, 1961, p. 215).

permitiría: (i) mediante variaciones de la reacción, sintetizar los fullerenos mayores (actualmente casi-inalcanzables) y (ii) sobre todo, preparar fullerenos endoedrales mediante la incorporación de sales metálicas en el último paso de la síntesis.

Déjenme profundizar un poco en este último aspecto: (i) Al ser bastante grande la cavidad, se podría entonces introducir casi cualquier elemento de la tabla periódica (o combinaciones de ellos) resultando en un sinnúmero de moléculas y materiales a explorar. (ii) En las sales superconductoras M₃C₆₀, el C₆₀ está en el estado de reducción 3- y el empaquetamiento en el sólido, compacto, está dictado por el volumen del C₆₀. ¿Qué pasaría si uno pudiera preparar en cantidades macroscópicas Ln@C₆₀ (Ln: metal lantanoide)? Seguramente, dado que el tamaño del esqueleto del C₆₀ es constante, el empilamiento sería igual, y el C₆₀ estaría formalmente en el estado 3-! Muchos físicos ya tienen sus medidores listos, sólo faltan las muestras...

2. Superconductores

A pesar del rápido descubrimiento de sales superconductoras basadas en C₆₀ (algunos meses después de la publicación de su preparación macroscópica), todavía existen muy pocas sales de C₆₀⁻. El campo resulta casi virgen para investigadores con imaginación y habilidad.

3. Fullerenos endoedrales y fullerenos mayores

La existencia de estas dos clases de fullerenos se conoce gracias a varias técnicas espectroscópicas, como era el caso del C₆₀ en 1985. Aún sin esperar la síntesis total del C₆₀, alguien podría encontrar un método para preparar y/o separar los fullerenos endoedrales o los fullerenos mayores y así poner a la disposición de la comunidad científica internacional nuevas moléculas y nuevos materiales con los cuales combatir el aburrimiento.

4. Heterofullerenos

De la misma manera que el nitruro de boro es isoelectrónico al grafito, ¿qué sería de una jaula B₃₀N₃₀ comparada a una de C₆₀? (Xia, 1992; Silaghi-Dumistrescu, 1993). Cálculos teóricos señalan que su posibilidad de existencia en términos energéticos es real. De nuevo, falta el químico genial y/o terco para sintetizarlo. También, se contemplan los heterofullerenos de fórmula C_{60-n}A_n, especialmente con A = nitrógeno o boro. Para obtener una molécula isoelectrónica al C₆₀, se necesita substituir C por B⁻ o N⁺, así que estos heterofullerenos serían aniones o cationes gigantes de carga *n*.

5. Derivados

La química acuosa del C₆₀ está apenas saliendo de la cuna, con derivados que presentan grupos funcionales polares, o complejos, con fullerenos encapsulados en ciclodextrina (Andersson, 1992;

Kuthner, 1992). Seguramente, el desarrollo de la química "fullerénica" (por oposición a las químicas aromática y alifática) verá el descubrimiento de nuevas moléculas con propiedades interesantes y/o exóticas.

6. Complejos de coordinación

Como mencioné antes, la química de coordinación (Bowser, 1994) de los C₆₀, C₇₀ (Balch, 1991b) y C₈₄ (Balch, 1994) es, a la fecha, exclusivamente de tipo η². Sin embargo, en teoría, nada impide pensar en complejos de tipo η⁵ ó η⁶. Otra vez, los cálculos (Rogers, 1993) enseñan que... pero falta el químico...

Conclusión

Creo que con lo arriba mencionado, basta terminar con una cita general sobre el tema de los fullerenos:

After the "reign" of the physicists and physical chemists, it now appears to be the time of the preparative chemists. (Después del reinado de los físicos y fisicoquímicos, les toca ahora el turno a los químicos sintéticos). (Hirsch, 1993b). ■

Bibliografía

- Allemand, P.M.; Srdanov, G.; Koch, A.; Khemani, K.C.; Wudl, F.; Rubin, Y.; Diederich, F.; Alvarez, M.M.; Anz, S.J.; Whetten, R.L. *J. Am. Chem. Soc.*, **113**, 2780-2781, 1990.
- Allemand, P.M.; Khemani, K.; Koch, A.; Wudl, F.; Holczner, K.; Donovan, S.; Grüner, G.; Thompson, J.D. *Science*, **253**, 301, 1991.
- Andersson, T.; Nilsson, K.; Sundahl, M.; Westman, G.; Wenerström, O. *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, 604-605, 1992.
- Balch, A.L.; Catalano, V.J.; Lee, J.W. *Inorg. Chem.* **30**, 3980-3981, 1991. (a)
- Balch, A.L.; Catalano, V.J.; Lee, J.W.; Olmstead, M.M.; Parkin, S.R. *J. Am. Chem. Soc.*, **113**, 8953, 1991. (b)
- Balch, A.L.; Catalano, V.J.; Lee, J.W.; Olmstead, M.M. *J. Am. Chem. Soc.*, **114**, 5455-5457, 1992. (a)
- Balch, A.L.; Lee, J.W.; Noll, B.C.; Olmstead, M.M. *J. Am. Chem. Soc.*, **114**, 10984-10985, 1992. (b)
- Balch, A.L.; Lee, J.W.; Noll, B.C.; Olmstead, M.M. *Inorg. Chem.* **32**, 3577-3578, 1993. (a)
- Balch, A.L.; Lee, J.W.; Noll, B.C.; Olmstead, M.M., resultados no publicados, 1993. (b)
- Balch, A.L.; Ginwalla, A.S.; Lee, J.W.; Noll, B.C.; Olmstead, M.M. *J. Am. Chem. Soc.*, **116**, 2227-2228, 1994.
- Bhyrappa, P.; Pénicaud, A.; Kawamoto, M.; Reed, C. A. *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, 936, 1992.
- Bhyrappa, P.; Paul, P.; Stinchcombe, J.; Boyd, P.D.W.; Reed, C.A. *J. Am. Chem. Soc.* **115**, 11004-11005, 1993.
- Bilow, U.; Jansen, M. *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, 403, 1994.
- Bochvar, D.A.; Gal'pern, G.E.; *Dokl. Chem. (Engl. Trans.)*, **209** 239-241, 1973.
- Bowser, J.R. Organometallic derivatives of fullerenes, *Adv. Organomet. Chem.*, **36**, 57-94, 1994.
- Buseck, P.R.; Tsipursky, S.J.; Hettich, R. *Science* **257**, 215, 1992.
- Caron, C.; Subramanian, R.; D'Souza, F.; Kim, J.; Kutner, W.; Jones, M.T.; Kadish, K.M. *J. Am. Chem. Soc.*, **115**, 8505-8506, 1993.
- Caspar, D.L.D.; Klug, A. "Physical principles in the construction of regular viruses", Cold Spring Harbor Symposium on Quantitative Biology, vol. 27, pp.1-24, 1962.
- Chabre, Y.; Djurado, D.; Armand, M.; Romanov, W.R.; Coustel, N.; Mc Cauley, J.P.; Fischer, J.E.; Smith, A.B., *J. Am. Chem. Soc.*, **114**, 764, 1992.
- Chatterjie, K.; Parker, D.H.; Wurtz, P.; Lykke, K.R.; Gruen, D.M.; Stock, L.M. *J. Org. Chem.* **57**, 3253, 1992.
- Chibante, L.P.F.; Thess, A.; Alford, J.M.; Diener, M.D.; Smalley, R.E. *Journal of Physical Chemistry*, **97**, 8696-8700, 1993.
- da Vinci, L. *Divina Proportione*, Luca Pacioli, 1509.
- Davidson, R.A.; *Theoret. Chim. Acta (Berlin)*, **58**, 193-231, 1981.
- Dubois, D.; Jones, M.T.; Kadish, K.M. *J. Am. Chem. Soc.*, **114**, 6446-6451, 1992.
- Ettl, R.; Chao, I.; Diederich, F.; Whetten, R.L. *Nature*, **353**, 149-153, 1991.
- Euler, L. *Elementa Doctrinae Solidorum*, 1758.
- Fagan, P.J.; Calabrese, J.C.; Malone, B.; *Science*, **252**, 1160, 1991. (a)
- Fagan, P.J.; Calabrese, J.C.; Malone, B. *J. Am. Chem. Soc.*, **113**, 9408-9409, 1991. (b)
- Fields, C.L.; Pitts, J.R.; Hale, M.J.; Bingham, C.; Lewandowski, A.; King, D.E. *Journal of Physical Chemistry*, **97**, 8701-8702, 1993.
- Friedman, S.H.; Decamp, D.L.; Sijbesma, R.P.; Srdanov, G.; Wudl, F.; Kenyon, G.L. *J. Am. Chem. Soc.*, **115**, 6506-6509, 1993.
- Guevara García, J.A.; Pérez Benítez, A.; González Vergara, E. *Elementos*, **2**, (16), 24, 1992.
- Haddon, R.C.; Brus, L.E.; Raghavachari, K. *Chem. Phys. Lett.*, **125**, 459-464, 1986.
- Hawkins, J. M.; Meyer, A.; Lewis, T.A.; Loren, S.; Hollander, F.J.; *Science*, **252**, 312, 1991.
- Heath, G.A.; McGrady, J.E.; Martin, R.L.; *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, 1272-1274, 1992.
- Hebard, A.F.; Rosseinsky, M. J.; Haddon, R. C.; Murphy, D.W.; Glarum, S. H.; Palstra, T.T.M.; Ramirez, A.P.; Kortan, A.R. *Nature*, **350**, 600, 1991.
- Hirsch, A. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **32**, 1138-1141, 1993. (a)

- Hirsch, A. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 32, A-184, 1993. (b)
- Hirsch, A., *The Chemistry of Fullerenes*, Thieme Organic Chemistry Monograph series, 1994.
- Hoeckel; Ernst; Report on Radiolaria, en *Voyages of H.M.S. Challenger 1873-1876. Zoology*, vol. 18, part II (Eyre and Spottiswoode, London). ver Fig. 1, dibujo 111, p. 1634, 1887.
- Howard, J.B.; McKinnon, J.T.; Makarovsky, Y.; Lafleur, A.L.; Johnson, M.E. *Nature*, 352, 139-141, 1991.
- Hruby, V.; Martinez-Sanchez, M.; Bates, S.; Lorents, D. *25th American Institute of Aeronautics and Astronautics (370 L'enfant Promenade, S.W. Washington, D.C. 20024, USA) Plasma dynamics and Lasers Conference*, Colorado Springs, Junio 1994.
- Iijima, S., *Nature*, 354, 56-58, 1991.
- Johnson, R.D.; Meijer, G.; Bethune, D.S.; *J. Am. Chem. Soc.*, 112, 8983, 1990.
- Johnson, R.D.; de Vries, M.S.; Salem; Bethune, D.S.; Yannoni, C.S. *Nature*, 355, 239-240, 1992.
- Jones, D.E.H.; *New Scientist*, Daedalus column, Nov.3, 1966.
- Kepler, J. *Harmonices Mundi, libro II*, 1619.
- Khaled, M.M.; Carlin, R.T.; Trulove, P.C.; Eaton, G.R.; Eaton, S. S. *J. Am. Chem. Soc.*, 116, 3465-3474, 1994.
- Khemani, K.C.; Prato, M.; Wudl, F. *J. Org. Chem.* 57, 3254, 1992.
- Kikuchi, K.; Nakahara, N.; Wakabayashi, T.; Honda, M.; Matsumiya, H.; Moriwaki, T.; Suzuki, S.; Shiromaru, H.; Saito, K.; Yamauchi, K.; Ikemoto, I.; Achiba, Y. *Chem. Phys. Lett.*, 188, 177-180, 1992.
- Koch, A.S.; Khemani, K.C.; Wudl, F.; *J. Org. Chem.* 56, 4543, 1991.
- Koefod, R.S.; Hudgens, M.F.; Shapley, J.R. *J. Am. Chem. Soc.*, 113, 8957-8958, 1991.
- Kräschmer, W.; Lamb, L.D.; Fostiropoulos, K.; Huffman, D.R. *Nature*, 347, 354, 1990.
- Kroto, H.W.; Heath, J.R.; O'Brien, S.C.; Curl, R.F.; Smalley, R.E. *Nature*, 318, 162, 1985.
- Kroto, H.W., *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 31, 11-246, 1992.
- Kuthner, W.; Boulas, P.; Kadish, K.M. *J. Electrochem. Soc.* 139, 243C, 1992.
- Lawson, Del R.; Feldheim, D.L.; Foss, C.A.; Dorhout, P.K.; Elliott, C.M.; Martin, C.R.; Parkinson, B. *J. Phys. Chem.*, 96, 7175-7177, 1992. (a)
- Lawson, Del R.; Feldheim, D.L.; Foss, C.A.; Dorhout, P.K.; Elliott, C.M.; Martin, C.R.; Parkinson, B.A. *J. Electrochem. Soc.*, 139, L68-L71, 1992. (b)
- Li, Q.; Wudl, F.; Thigen, C.; Whetten, R.L.; Diederich, F. *J. Am. Chem. Soc.*, 114, 3994-3996, 1992.
- Mackay, A.L.; Terrones, H. *Nature*, 352, 762, 1991.
- Meier, M.S.; Guarr, T.F.; Selegue, J.P.; Vance, V.K. *J. Chem. Soc. Chem. Commun.*, 63-65, 1993.
- Núñez-Regueiro, M.; Monceau, P.; Hodeau, J.L. *Nature*, 355, 237-239, 1992.
- Paul, P.; Xie, Z.; Bau, R.; Boyd, P.D.W.; Reed, C.A. *J. Am. Chem. Soc.*, 116, 4145-4146, 1994.
- Pénicaud, A.; Pérez-Benítez, A.; Gleason V., R.; Muñoz P., E.; Escudero, R. *J. Am. Chem. Soc.* 115, 10392-10393, 1993. (a)
- Pénicaud, A.; Pérez-Benítez, A., resultados no publicados, 1993. (b)
- Pérez Benítez, A. *Tesis de maestría*, Universidad Autónoma de Puebla, 1994.
- Pisanty, A. *Educ. Quím.* 2, 140, 1991.
- Rasinkangas, M.; Pakkanen, T.T.; Pakkanen, T.A.; Ahlgrén, M.; Rouvinen J. *J. Am. Chem. Soc.*, 115 4901, 1993.
- Rogers, J.R.; Marynick, D.S. *Chem. Phys. Lett.* 205, 197-199, 1993.
- Rueckert, R.R.; Dunker, A.K.; Stoltzfus, C.M. "The Structure of Mouse-Eberfeld Virus: A Model", *Proc. Nat. Acad. Sci.*, 62, 912, 1969.
- Ruoff, R.S.; Ruoff, A.L. *Nature*, 350, 663-664, 1991.
- Scrivens, W.A.; Bedworth, P.V.; Tour, J.M. *J. Am. Chem. Soc.*, 114, 7917-7919, 1992.
- Sieden, L.S., *Buckminsterfuller Universe, an Appreciation*, Plenum Press, 1989.
- Sijbesma, R.P.; Srdanov, G.; Wudl, F.; Castoro, J.A.; Wilkins, C.; Friedman, S.H.; Decamp, D.L.; Kenyon, G.L. *J. Am. Chem. Soc.*, 115, 6510-6512, 1993.
- Silaghi-Dumistrescu, I.; Haiduc, I.; Sowerby, D.B. *Inorg. Chem.* 32, 3755-3758, 1993.
- Stankevitch, I.V.; Nikerov, M.V.; Bocharov, D.A.; *Russ. Chem. Rev. (Engl. Transl.)* 53, 640-654, 1984.
- Stinchcombe, J.; Pénicaud, A.; Bhyrappa, P.; Boyd, P.D.W.; Reed, C. A. *J. Am. Chem. Soc.*, 115, 5212-5217, 1993.
- Tanigaki, K.; Ebbesen, T.W.; Saito, S.; Nizurki, J.; Tsai, J.S.; Kubo, Y.; Kuroshima, S. *Nature*, 352, 222, 1991.
- Taylor, R.; Hare, J.P.; Abdul-Sada, A.K.; Kroto, H.W.; *J. Chem. Soc. Chem. Commun.*, 1423, 1990.
- Taylor, R.; Walton D.R.M. *Nature*, 363, 685-693, 1993.
- Terrones, H.; Morán López, J.L. *Ciencia y Desarrollo*, p. 22, Nov./Dic., 1993.
- Xia, X.; Jelski, D.A.; Bowser, J.R.; George, T.F. *J. Am. Chem. Soc.*, 114, 6493-6496, 1992.
- Xie, Q.; Pérez-Cordero, E.; Echegoyen, L. *J. Am. Chem. Soc.*, 114, 3978-3980, 1992.
- Xie, Q.; Arias, F.; Echegoyen, L. *J. Am. Chem. Soc.*, 115, 9818-9819, 1993.
- Yoshida, Z.; Osawa, E.; *Aromaticity* (en japonés), Kagakudojin, Kyoto, pp. 174-178, 1971.