

DOBLE VÍA

Precisiones sobre la geometría de la molécula de la portada de enero 2008

Nuestro querido amigo Aarón Pérez Benítez nos entregó esta carta sobre la geometría de la molécula del fullerano $I_h-C_{180}H_{180}$ que apareció en nuestra portada del número de enero-marzo de 2008, gracias a la gentileza de la revista ChemPhysChem y del autor, el profesor Linnolahti. Además del análisis de la estereoquímica de esa molécula, Aarón nos proporciona una plantilla para modelarla, por lo que esta carta podría considerarse como artículo de la sección CÓMO SE MODELA. Gracias Aarón.

Acerca de la estereoquímica del fullerano $I_h-C_{180}H_{180}$

Estimado Andoni:

En la portada de la revista número 1 (enero de 2008), volumen 19 de *Educación Química* apareció publicada la imagen de una molécula bellísima y aparentemente complicada de visualizar: el fullerano $I_h-C_{180}H_{180}$, el pariente totalmente hidrogenado del fullerano I_h-C_{180} (figura 1).

Con el fin de apoyar a nuestros lectores a conceptualizar la estructura del $I_h-C_{180}H_{180}$, hasta ahora sólo probablemente existente en el polvo interestelar, me permito hacer los siguientes comentarios:

1. Nótese que las terminaciones “ano” y “eno” indican que estas moléculas están totalmente hidrogenadas y deshidrogenadas, respectivamente, según las reglas de nomenclatura propuestas por la IUPAC (Moss, 2008).
2. El hecho de agregar un hidrógeno a cada uno de los carbonos del C_{180} para obtener el $C_{180}H_{180}$ implica un cambio en la geometría de estos carbonos (ahora muy cercana a la tetraédrica), pero eso no conlleva una pérdida de la simetría molecular icosaédrica, I_h , de acuerdo con los estudios teóricos reportados por Linnolahti y sus colaboradores (Linnolahti, 2006). Por lo tanto, su estereoquímica puede ser estudiada de la misma manera en la que se hizo para el I_h-C_{500} (Pérez-Benítez, 2000); es decir, con-

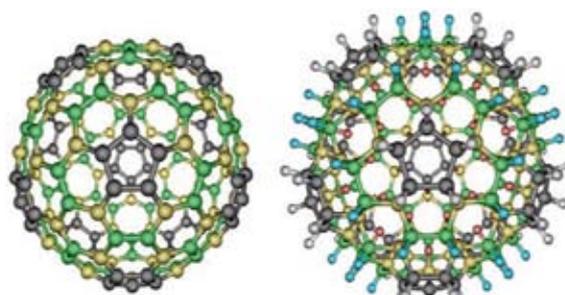
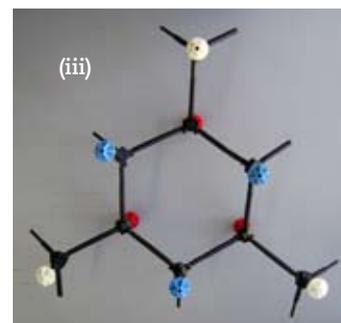
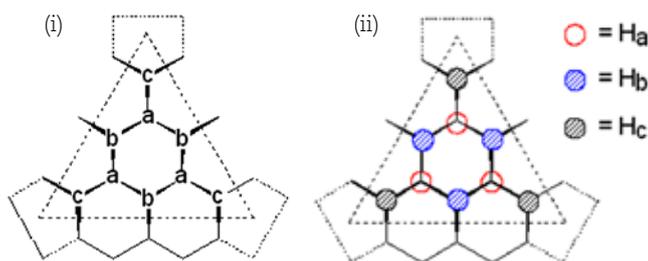


Figura 1. El fullerano C_{180} (izquierda) y el fullerano $C_{180}H_{180}$, dos bellísimas moléculas icosaédricas (tomada de Linnolahti, 2006).

siderando solamente una de las 20 secciones triangulares del icosaedro imaginario en el que pueden inscribirse este tipo de moléculas. Estas secciones triangulares se señalan con líneas punteadas en las figuras 2-4.

3. Desde un punto de vista exterior a la molécula y perpendicular al plano formado por los tres átomos de carbono marcados con la letra “a” de esa sección, se puede realizar un dibujo en proyección de cuña (figura 2i), en el que tres de los sustituyentes de cada C_a (los dos C_b 's y el C_c) se encuentran cercanos al observador y el cuarto sustituyente (H_a) se encuentra alejado del observador; es decir, hacia el exterior y el interior del plano del papel (figuras 2ii y 3). Así que en un cuarto plano, todavía más cercano al observador que el formado por los C_b 's y C_c 's, se encuentran los hidrógenos H_b y H_c (figura 2ii).
4. La equivalencia entre los carbonos de esa sección —y de ahí sus etiquetas— se determinó en función de su conectividad: los vértices “c” forman parte de un pentágono y dos hexágonos, es decir son vértices 5:6:6. A un enlace de distancia de ellos se encuentran los vértices “a” y a dos enlaces los “b”; por lo tanto, aunque ambos son 6:6:6, son diferentes entre sí.
5. La desigualdad que hay entre los carbonos determina automáticamente la desigualdad que hay entre los hidrógenos unidos a ellos, por lo que en la figura 2ii se etiquetan

Figura 2. Sección triangular del fullerano $I_h-C_{180}H_{180}$ mostrando sus tipos de átomos de carbono (i) y de hidrógeno (ii), en relación 3a:3b:3c. En (iii) se presenta un modelo de bolas y varillas en el que se aprecia al ciclo de seis carbonos en conformación de silla.



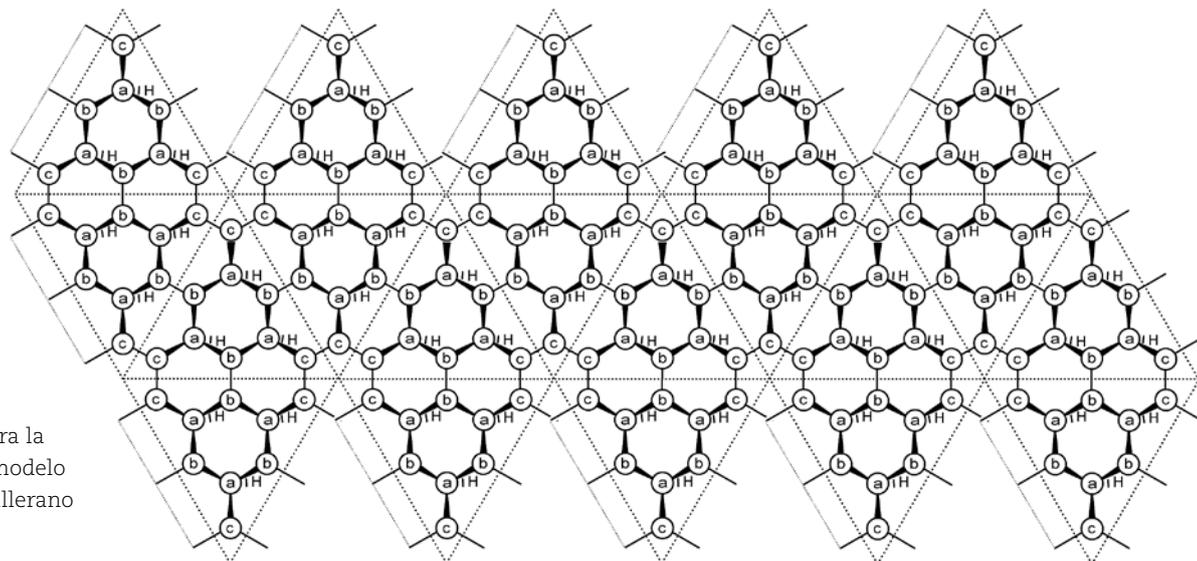


Figura 3. Plantilla para la construcción de un modelo tridimensional del fullerano $I_h-C_{180}H_{180}$.

- como H_a , H_b y H_c y en Ziii se modelan con esferas rojas, azules y blancas, respectivamente.
- Para obtener esa disposición de los hidrógenos del hexágono central de dicha sección se requiere una conformación de silla con seis hidrógenos axiales: tres apuntando al observador (los azules) y tres alejándose de él (los rojos). Los tres blancos pertenecen a los ciclos de cinco carbonos y también apuntan hacia el observador (figura Ziii).
 - Multiplicando los tres H's interiores (H_a) y los seis exteriores (H_b y H_c) que hay en cada sección de la molécula, por las 20 caras que constituyen un icosaedro, se obtienen los 60 hidrógenos interiores y los 120 hidrógenos exteriores del $C_{180}H_{180}$ que se comentaron en la página 1 de la revista *Educación Química* mencionada. Sin embargo, ahora podemos puntualizar que la relación entre ellos es: $60H_b:60H_a:60H_c$.
 - La estereoquímica de esta molécula puede ser analizada objetivamente si se elabora un modelo molecular recortando la plantilla de la figura 3. Al eliminar las puntas y pegar las pestañas se forman pentágonos huecos a través de los cuales se pueden observar a los pentágonos alternados de los vértices opuestos. Este hecho permite ubicar en esos sitios a los 12 ejes impropios de rotación-reflexión de orden diez, S_{10} , que caracterizan al grupo puntual I_h (Dresselhaus, 2007). El modelo terminado se presenta en la figura 4.

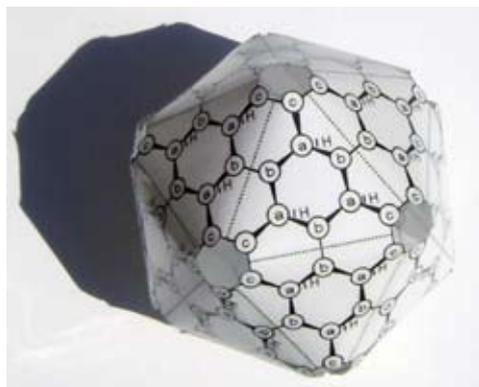


Figura 4. Modelo tridimensional del fullerano $I_h-C_{180}H_{180}$.

- Este estudio no tendría mucho sentido sino es porque se puede predecir el aspecto que tendrían los espectros de resonancia magnética nuclear de ^{13}C y 1H . Dado que la relación de carbonos es 1:1:1, el espectro de RMN ^{13}C presentaría tres señales de igual intensidad, muy probablemente con desplazamiento químico $C_c > C_b > C_a$. Del mismo modo, el espectro de RMN 1H presentarían tres multipletes con integrales 1:1:1 y desplazamiento químico $H_c > H_b > H_a$, pues los H_a se encuentran muy protegidos al estar dentro de la molécula y, por lo tanto, requerirían mayor intensidad del campo magnético aplicado para resonar. En contraste, los H_c están geoméricamente más expuestos en los vértices del icosaedro que los H_b en las caras y requerirían menor intensidad del campo aplicado. Dejo como ejercicio para los estudiantes de una clase de espectroscopia de RMN la determinación de la multiplicidad de las señales de los espectros mencionados.

Aarón Pérez-Benítez

Facultad de Ciencias Químicas de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla. 14 sur y av. San Claudio, colonia San Manuel, 72570 Puebla, Pue.

Correo electrónico: aronper@siu.buap.mx

Referencias

- Dresselhaus, M.S., Dresselhaus, G., Jorio, A., *Group theory: Application to the physics of condensed matter* (p. 485), Berlin: Springer-Verlag, 2007.
- Linnolahti, M., Karttunen, A.J., Pakkanen, T.A., *ChemPhysChem.*, 7(8), 1661–1663, 2006.
- Moss, G.P., Powell, W.H., Nomenclature for the $C_{60}-I_h$ and $C_{70}-D_{5h(6)}$ Fullerenes (IUPAC Recommendations 2002), consultada por última vez el 23 de diciembre de 2008, de la URL <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/fullerene/>
- Pérez-Benítez, A. y Santiesteban, F., Acerca de la estereoquímica del fullereno gigante I_h-C_{500} : Un modelo tridimensional y cálculo de las líneas de su espectro de RMN ^{13}C , *Educ. quim.*, 11(2), 284, 2000.