

El "mago de los modelos", nuestro colega poblano Aarón Pérez-Benítez, arremete desde Barcelona con esta propuesta.

# Un modelo tridimensional para la enseñanza de la simetría del fullereno $I_h-C_{20}$

Aarón Pérez-Benítez<sup>1</sup> y José Antonio Guevara García<sup>2</sup>

## ABSTRACT

In this paper a three-dimensional model illustrating all of the symmetry elements of the pentagonal dodecahedron is presented. It can be used for teaching the symmetry of the  $I_h-C_{20}$  fullerene and dodecahedrane, ( $I_h-C_{20}H_{20}$ ). A short comment about the Chemistry Nobel prize 1996 is also made.

Se presenta un modelo tridimensional que ilustra los 120 elementos de simetría de un dodecaedro pentagonal (DP). El DP es un poliedro regular formado por 12 caras pentagonales, 30 aristas y 20 vértices (figura 1a), con el que los antiguos griegos simbolizaban al universo (figura 1b). Para nosotros los químicos esta fórmula poliedral representa, estrictamente hablando, al dodecaedro ( $C_{20}H_{20}$ ) (figura 1c), aunque también puede utilizarse para representar a su análogo completamente deshidrogenado, el fullereno  $I_h-C_{20}$ , porque los dobles enlaces que se indican en la figura 2a para uno de sus híbridos de resonancia hipotéticos, estarían completamente deslocalizados en el híbrido real.

El fullereno  $I_h-C_{20}$  es el más pequeño de los fullerenos icosaédricos de la serie  $C_{20n}^2$  (donde  $n=1, 2, 3, \dots$ , etc.) y tiene muchas semejanzas estereoquímicas con el Buckminsterfullereno (figura 2b), pues también tiene un sólo tipo de vértices (y por tanto su espectro de RMN<sup>13</sup>C también presentaría una señal simple); y ambas formas geométricas pueden obtenerse truncando un icosaedro sin descenso de la simetría (Pérez-Benítez, 1997), por lo que presentan los mismos elementos de simetría:  $E$ , 12  $C_5$ , 12  $C_5^2$ , 20  $C_3$ , 15  $C_2$ ,  $i$ , 12  $S_{10}$ , 12  $S_{10}^3$ , 20  $S_6$  y 15  $\sigma$  del grupo puntual  $I_h$ .

Afortunadamente, el número de elementos de simetría que hay que representar se reduce a poco

más de la mitad porque las operaciones de simetría de los ejes de rotación impropia de orden diez generan a los ejes propios de orden cinco ( $S_{10}^2=C_5$ ). Análogamente, las operaciones de simetría de los ejes impropios de orden seis generan a los propios de orden tres ( $S_6^2=C_3$ ) (Cotton, 1971). En otras palabras, los ejes propios son colineales con los impropios (según la correspondencia mencionada), lo cual puede comprobarse analizando las figuras 3a y 3b que muestran una perspectiva del DP perpendicular a los ejes  $S_{10}(C_5)$  y  $S_6(C_3)$ .

Asimismo, la figura 3c muestra una perspectiva del DP casi perpendicular a uno de los ejes  $C_2$ . Estos ejes pasan por el centro de aristas opuestas por el centro del DP, siendo éste el centro de inversión ( $i$ ) de la molécula.

Cada uno de los planos de reflexión ( $\sigma$ ) pasa por pares de aristas opuestas por el centro de inversión y corta a cuatro pentágonos por la mitad. Así, en la figura 3a-c pueden identificarse, respectivamente, cinco, tres y dos de los planos de reflexión perpendiculares al plano del papel.

Uno de los principales problemas didácticos que se presentan en la enseñanza de la simetría es indicar la posición de los planos de reflexión; y en los sistemas de alta simetría, como es el caso del grupo puntual  $I_h$ , es técnicamente imposible indicar la posición de cada uno de ellos utilizando las manos u hojas de papel. Así que para obviar esta dificultad, en el diseño de los modelos ya están representados los planos de simetría (quince equivalentes para el DP) con líneas punteadas.

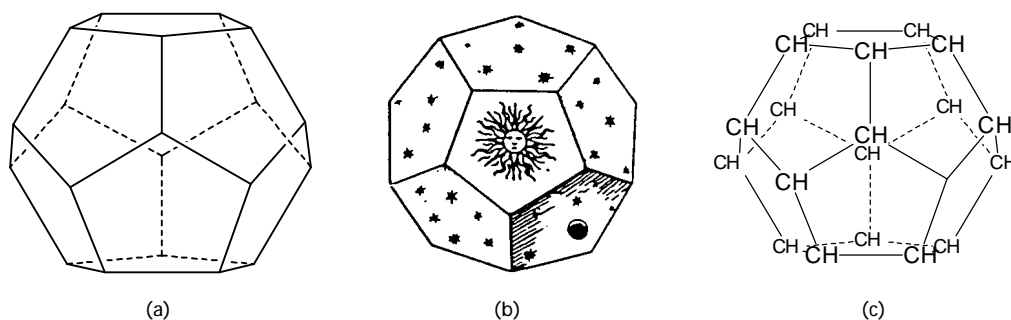
La plantilla para el DP está en la figura 4 y el modelo con todos sus elementos de simetría (como se ha descrito anteriormente) se muestra en la figura 5.<sup>1</sup>

Finalmente queremos compartir con el club de

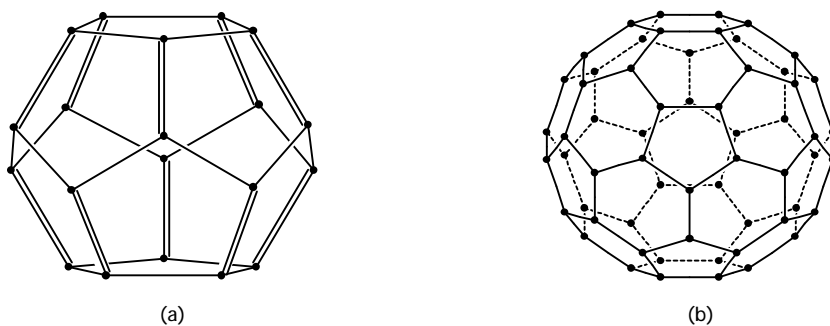
(<sup>1</sup>) Dirección provisional: Institut de Ciència de Materials de Barcelona, Campus de la UAB-Bellaterra, 08193, ESPAÑA. Fax (34-3) 580-57-29. E-mail: aaron@icmab.es

(<sup>2</sup>) Facultad de Ciencias Químicas-DISO. Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Av. 14 Sur y Av. San Claudio, Col. San Manuel, Puebla, Pue. 72570, MÉXICO. Recibido: diciembre 15, 1996; aceptado: febrero 8, 1997.

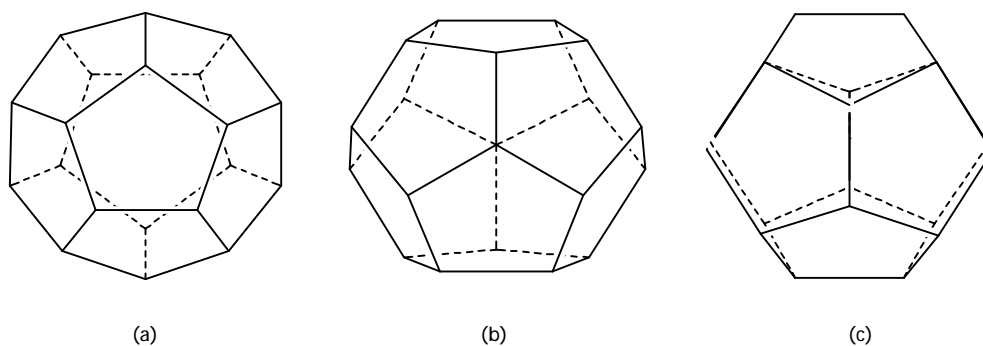
(<sup>1</sup>) Y como todo buen mago de los modelos (como me calificó Garriz en 1994) me guardo los detalles de la construcción bajo la manga; pero para ser justo con nuestros lectores y también para jugar por partida doble, los descubriré en el artículo "Un modelo tridimensional del Buckminsterfullereno ilustrando sus elementos de simetría", que enviaré en breve a *Educación Química* para su probable publicación.



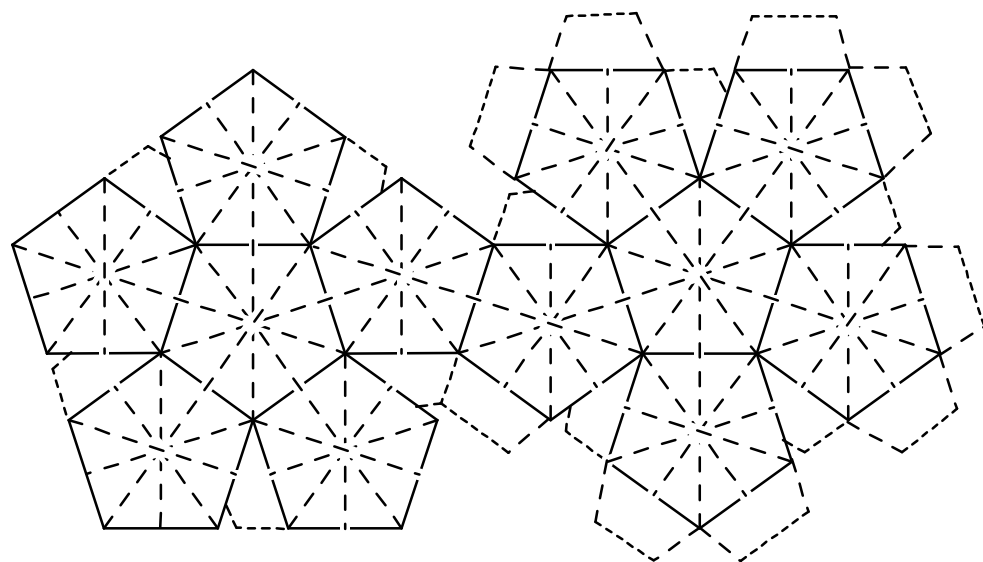
**Figura 1.**  
 a) El dodecaedro pentagonal (DP);  
 b) representación platónica del Universo;  
 c) el dodecaedrano ( $C_{20}H_{20}$ ).



**Figura 2.**  
 Dos de los fullerenos icosaédricos.  
 a) El fullereno  $I_h-C_{20}$   
 b) El Buckminsterfullereno, ( $I_h-C_{60}$ ).



**Figura 3.**  
 Vista perpendicular a los ejes de simetría del dodecaedro pentagonal:  
 a) eje impropio de rotación-reflexión de orden diez,  $S_{10}$ ;  
 b) eje impropio de rotación-reflexión de orden seis,  $S_6$ ;  
 c) eje propio de rotación de orden dos,  $C_2$ .



**Figura 4.**  
 Plantilla para la construcción de un modelo tridimensional de un dodecaedro pentagonal. Las alturas de los pentágonos indicadas con líneas punteadas definen la localización de los planos de simetría en el modelo terminado.

fanáticos de los fullerenos, la enhorabuena por la asignación del premio Nobel de Química 1996 a H.W. Kroto, R.F. Curl y R.E. Smalley (Moreno, 1996; Stevenson, 1996; Bal, 1996; Baum, 1996; Internet a), por el descubrimiento en 1985 de la nueva forma alotrópica del carbono puro (Kroto, 1985), abanderada por la molécula con forma de balón de fútbol que “vino del espacio” y que saltó a la fama en 1991 [el Buckminsterfullereno fue nombrado “la molécula del año” en la revista *Science* (Koshlan, 1991)] principalmente porque la síntesis macroscópica de la fullerita (Krätschmer, 1990) permitió no sólo corroborar su fantástica estructura, sino también el desarrollo explosivo de la química de los fullerenos (Hirsch, 1994; Internet b).

Ojalá que algún día el fullereno  $I_h-C_{20}$ , contradiciendo a los cálculos teóricos y desobedeciendo a la regla de los pentágonos aislados por hexágonos (IPR) cumplida por los fullerenos  $C_{60}$ ,  $C_{70}$ ,  $C_{76}$ ,  $C_{78}$ ,  $C_{80}$ ,  $C_{82}$  y  $C_{84}$  hasta ahora caracterizados (Krätschmer, 1990; Taylor, 1990; Ettl, 1991; Kikuchi, 1992; Meier, 1993; Wakabayashi, 1994; Hennrich, 1996; Internet c), pueda ser sintetizado químicamente como lo fue el dodecaedro mismo (Paquette, 1989; Prinzbach, 1994).

¡Por lo visto trabajar con los fullerenos es como jugar a la lotería con billete ganador porque ya tenemos asegurado el placer de deleitarnos con sus exquisitas simetrías! ¿No lo creen así los amables lectores?

### Referencias

- Bal, P., *Nature* 1996, 383, 561.  
 Baum, R., *Chem. Eng. News*, 1996, 74, No. 42, 7.  
 Cotton, F.A., *Chemical Applications of Group Theory*. Wiley, New York, 1971.  
 Ettl, R., Chao, I., Diederich, F., y Whetten, R.L., *Nature* 1991, 353, 149.  
 Garritz, A., *Educ. quim.*, 5 [2] 66 (1994).  
 Hennrich, F.H., Michel, R.H., Fischer, A., Richard-Schneider, S., Gilb, S., Kappes, M.M., Fuchs, D., Bürk, M., Kobayashi, K. and Nagase, S. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 1996, 36, No. 15, 1732.  
 Hirsch, A., *The Chemistry of the Fullerenes*. Thieme, New York, 1994.

Internet:

- a) Página de la fundación Nobel de Estocolmo: <http://www.nobel.se>;  
 b) Envíe el mensaje SUBSCRIBE o BIBLIO al “Bucky news service”, a la dirección [bucky@sol1.lsrn.upenn.edu](mailto:bucky@sol1.lsrn.upenn.edu)

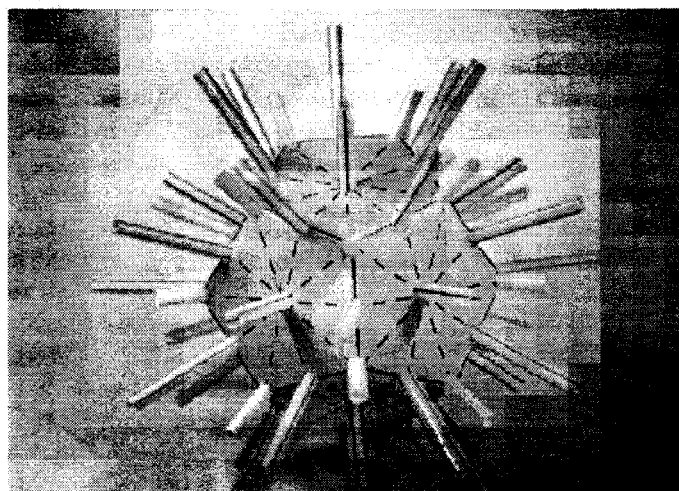


Figura 5. Modelo tridimensional de un dodecaedro pentagonal que ilustra sus elementos de simetría.

c) Excepto la estructura del  $D_{2h}-C_{80}$  (Hennrich, 1996), las estructuras de los “fullerenos puros” pueden visualizarse en: <http://www.susx.ac.uk/Users/Kroto/fullerenes.html>

- Kikuchi, K., Nakahara, N., Wakabayashi, T., Suzuki, S., Shironktru, H., Miyake, Y., Saito, K., Ikemoto, I., Kainosho, M. and Achiba, Y., *Nature* 1992, 357, 142.  
 Koshlan, D.E. Jr., *Science* 1991, 254, 1705.  
 Krätschmer, W., Lamb, L.D., Fostropoulos, K. and Huffman, D.R., *Nature* 1990, 347, 354.  
 Kroto, H.W., Heath, J.R., O’Brien, S.C., Curl, R.F. and Smalley, R.E., *Nature* 1985, 318, 162.  
 Meier, M.S., Guarr, T.F., Selegue, J.P. and Vance, V.K., *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* 1993, 63.  
 Moreno, R., *El País*, 10 de octubre de 1996, 30.  
 Paquette, L.A., *Chem. Rev.* 1989, 89, 1051 y referencias citadas.  
 Pérez-Benítez, A., *J. Chem. Educ.* 1997, en arbitraje.  
 Prinzbach, H. and Weber, K., *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* 1994, 33, 2239 y referencias citadas.  
 Stevenson, R., *Chem. in Britain*. 1996, 32, No. 11, 22.  
 Taylor, R., Hare, J.P., Abdul-Sada, A.K. and Kroto, H.W., *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* 1990, 1423.  
 Wakabayashi, T., Kikuchi, K., Suzuki, S., Shiromaru, H. and Achiba, Y., *J. Phys. Chem.* 1994, 98, 3090 y referencias citadas.

### Agradecimientos:

Agradezco a la Secretaría de Educación Pública por el apoyo financiero (SEP 911155) y al Institut de Ciència de Materials de Barcelona por el apoyo técnico. ■