

Estructura del futboleno, C_{60} .

FISICOQUÍMICA (I)

Futboleno – C_{60}

Alejandro Pisanty Baruch*

1. El chisme casi completo

En el medio científico hay gran excitación por conocer las propiedades de una nueva sustancia, el “futboleno”. Y no es para menos: se trata de una nueva forma del carbono puro, distinta completamente de los viejos conocidos grafito y diamante. Curiosamente para ser una

* Facultad de Química, UNAM, Ciudad Universitaria, 04510 México, D.F.
Recibido: 13 de mayo de 1991; **Aprobado:** 19 de mayo de 1991

NOTA. El futboleno plantea una oportunidad fantástica —que uno estaría moralmente obligado a desaprovechar— de reunir muchos temas separados de física atómica y molecular, de espectroscopía y espectrometría al modo de los físicos y al modo de los químicos, de física del estado sólido, de química orgánica, etcétera, es decir, una oportunidad excepcional de hablar de muchas cosas de las que uno no sabe.

Ni debiera uno meterse a estudiar un tema en el que no necesariamente va a hacer investigación, por el puro interés en reunir precisamente esa variedad de áreas. Es la clase de cosa más prohibida que hay en estos tiempos de evaluaciones, planes, proyectos, informes, “estímulos” y todo lo que mi amigo Emilio Orgaz llama “puntejadas”.

forma alotrópica estable a temperatura y presión ambientes y en la atmósfera, hasta ahora sólo se le conoce sintético.

La historia del futboleno es reciente, pero con alguna raíz a dos décadas de distancia. La posibilidad de que existieran compuestos con su estructura fue propuesta por primera vez (impresa) en Japón en los años setenta. Sin embargo su síntesis sólo se logró en 1985.

En ese año, los investigadores Kroto (inglés) y Smalley (americano), y sus colaboradores en la Universidad Rice en Houston, estaban realizando experimentos con el objeto de evaporar pequeñas cantidades de grafito en el vacío. Se proponían producir pequeños fragmentos moleculares, cadenas cortas de carbono, para tratar de correlacionar sus espectros con los observados por los astrónomos en el polvo intergaláctico.

En esos experimentos, se produce la evaporación del grafito por la aplicación de un rayo láser y las moléculas resultantes se estudian en un espectrómetro

de masas, el cual permite conocer la distribución de las masas de los fragmentos formados. Al variar las condiciones de reacción, es decir, la atmósfera de helio en la que ocurre la evaporación y otras variables experimentales, Kroto y Smalley observaron que se presentaba siempre un fragmento molecular formado por 60 carbonos. Su ubicuidad sugería que se trataba de una molécula sumamente estable.

Kroto y Smalley se dieron a la tarea de determinar qué estructura podía tener esa molécula, con un número tan desusadamente alto de átomos de carbono, que fuera excepcionalmente estable. Consideraron diversas estructuras que podrían derivarse de pequeños fragmentos de una lámina de átomos de carbono del grafito que, como se sabe, es un mosaico formado exclusivamente por hexágonos.

Al ver cómo podría enrollarse sobre sí mismo uno de estos objetos, formando uno de forma más bien globular, se dieron cuenta de que se podía formar algo parecido a un domo que uno de ellos había visto en Montreal. Una rápida visita a la biblioteca le puso en las manos al gran clásico de los domos, el arquitecto norteamericano Buckminster Fuller, y una rápida inspección de este libro le hizo notar que podía obtener una estructura como la que buscaba si no la formaba exclusivamente con hexágonos; en lugar de ello, debía incluir algunos pentágonos.

Doblando papel, Smalley pudo rápidamente construir un objeto con sesenta vértices que es un poliedro formado por 12 pentágonos y 20 hexágonos, distribuidos exactamente como en un balón de fútbol soccer. Al día siguiente en el laboratorio, tuvo que convencer a sus colegas de que esa era una hipótesis creíble. Lo logró cuando uno de sus químicos meticulosamente marcó con etiquetas los posibles dobles enlaces carbono-carbono y vio que alternaban estrictamente con los enlaces sencillos. De allí, una publicación en *Nature* y la fama. (Se sabe ahora que son muy estables las estructuras geodésicas en que los pentágonos no colindan; la más pequeña corresponde también al que puede ser el más pequeño futboleno estable, C₃₂).

Conviene recordar que esta estructura no fue inventada por los fabricantes de balones de fútbol, sino que es conocida desde la antigüedad. Lleva hoy el nombre de icosaedro truncado (puede efectivamente obtenerse a partir de un icosaedro, cortando de éste los vértices de manera apropiada). Tiene la misma simetría que un icosaedro y que un dodecaedro, y ha sido ilustrada entre otros por Leonardo da Vinci y por Johannes Kepler. Este último la consideraba parte de su esquema del universo, en el que los cuerpos celestes estarían distribuidos en capas sucesivas, como las de una cebolla, en los vértices de poliedros altamente simétricos. Entre muchas otras fuentes para asomarse a la geometría de este objeto, invito a consultar el fascinante libro *Symmetry through the eyes of a chemist*, de Istvan y Magdolna Hargittai.

Faltaba encontrar un nombre para la nueva sustancia. En honor a su arquitecto, llamaron buckminsterfullereno a la nueva sustancia. En su artículo en *Nature* dejan constancia de otras alternativas, como futboleno, bolenos, y varias más. En el mundo hispánico estamos prefiriendo futboleno, mientras que entre los angloparlantes el nombre en uso hoy es "buckyballs" y en muchos artículos empieza a aparecer simplemente la abreviatura *Bf* casi como un símbolo químico más.

Hablando de nomenclatura, anotaré que me parece que no es muy justo decir que el futboleno es un compuesto, ya que está formado exclusivamente por carbono; el futboleno es sólo una forma de un elemento. Así que trataré de referirme a él siempre como sustancia —o según el caso molécula o sólido— y que sólo una traición de Freud me permita volver a llamarlo compuesto.

Kroto y Smalley no eran los únicos interesados. Por muchos años Lamb y Huffman en Arizona habían estudiado también el polvo interestelar, e intentaron producir una especie de "polvo interestelar sintético". Junto con Krätschmer y colaboradores en Alemania, produjeron en 1990 un procedimiento de síntesis mucho más productivo que el de Smalley.

En la técnica de Krätschmer y Huffman, una fuente de potencia de soldador sirve para producir la evaporación de dos electrodos de grafito en un recipiente cerrado. De las paredes del recipiente se rasca después el hollín depositado, del cual se extrae por disolución en cloroformo una mezcla de C₆₀ y C₇₀, otro fullereno estable. Finalmente estos dos compuestos se separan por una de las técnicas más simples y comunes del laboratorio químico, la cromatografía en columna.

El anuncio de la técnica de Krätschmer y Huffman produjo una verdadera explosión entre los químicos y los físicos, ya que permite obtener décimas de gramo de C₆₀ por día (modificada por Haufler, Smalley y otros, llega a gramos por día actualmente).

Estas grandes cantidades permiten obtener C₆₀ sólido, purificarlo muy completamente, y someterlo a toda clase de estudios físicos y químicos.

Dice Stoddart, en una breve y excelente revisión (*Angewandte Chemie, International Edition in English* 30 [1], 70 (1991)) que sólo es cuestión de tiempo encontrar una síntesis de futbolenos que dé kilos por día. Los mejores rendimientos actuales son del orden de 15% respecto al material inicial del electrodo de grafito.

El cuento, bastante completo, de la historia del futboleno aparece en un artículo de Smalley en *The Sciences* de marzo/abril de 1991. Reunidos él, Kroto y Huffman en una sesión de medianoche del Congreso de Marzo de 1991 de la Sociedad Americana de Física, se veía un acuerdo general entre las distintas versiones de la historia y, en el trasfondo, creí entender un jaloneo por la prioridad en el descubrimiento. A no dudar está a la vista un Nobel, faltando saber a quién se le concede (y en qué, en química o en física —aunque difícilmente

un físico aceptará la ofensa de recibir incluso un premio Nobel en Química).

2. Estructura y su confirmación, además de espectros vibracionales

La audaz propuesta estructural de Smalley y Kroto se tiene prácticamente por confirmada. Las principales evidencias a favor de la estructura vienen hasta ahora de la espectroscopía.

El espectro de resonancia magnética nuclear de ^{13}C muestra una línea única, estrecha, con un corrimiento químico de 143.2 ppm. El hecho de que sea única esta línea es producto de que todos los átomos de carbono sean equivalentes entre sí por simetría, es decir, la molécula vista desde cada uno de ellos es exactamente igual (no ocurre esto por ejemplo en el segundo fullerenos más estudiado, C_{70} , con una estructura más alargada que C_{60} en la que hay cinco clases diferentes de carbonos). La posición de la línea en 143.2 ppm la ubica en un intervalo característico de carbonos con enlaces descritos por la hibridación sp^2 , típica de los electrones π de los sistemas de dobles enlaces conjugados.

Los espectros vibracionales muestran un número muy reducido de líneas, como corresponde también a una estructura molecular altamente simétrica en la que los numerosos modos normales vibracionales están reunidos en unos cuantos grupos de muy alta degeneración. Y vaya que llega a ser alta: algunas representaciones del grupo de simetría icosaédrico I_h son quíntuplemente degeneradas. Quizá la observación de espectros vibracionales más completa hasta la fecha sea la de Bethune y colaboradores, del laboratorio de la IBM de Almadén en San José, California. Sus mediciones de espectros infrarrojo y Raman producen un catálogo completo de las líneas espectrales de origen vibracional del C_{60} .

Las vibraciones y las rotaciones del C_{60} no son completamente independientes unas de otras; las constantes de acoplamiento rovibracional han sido calculadas recientemente y comparadas con los experimentos.

En estos días es posible ver realmente muchas estructuras atómicas y moleculares gracias al microscopio de tunelaje electrónico de barrido (STM). En esta técnica, un efecto cuántico llamado "efecto túnel" permite que una punta muy fina de un conductor recorra ("barra", de allí el término barrido) una superficie, registrando la mínima corriente eléctrica que se establece entre ella y la superficie. La interpretación de este registro permite producir una imagen de la superficie y de las moléculas depositadas en ella.

A fines de 1990 se publicaron en *Nature* dos informes distintos con imágenes de STM de C_{60} . La resolución en ellas es suficiente sólo para observar a las moléculas y sus agregados, pero no a los átomos individualmente. Los investigadores de la IBM han hecho circular ya extensamente nuevas imágenes de resolución atómica del futboleno. Éstas dejan a la vista claramente caras pentagonales y marcan así una evidencia

verdaderamente visual de la realidad de la estructura descrita.

Claro, en realidad desde 1985 todo químico o físico que supo de esta molécula vio capturada su imaginación. Es fascinante que exista en el mundo microscópico una estructura tan compleja. Intrigados por su enorme estabilidad, Huffman y otros se han dado a la tarea de buscar el futboleno en la naturaleza, principalmente en los espectros del polvo del espacio (sin éxito hasta ahora).

3. Estructura electrónica, principalmente teoría

Se han hecho desde 1985 numerosos estudios sobre C_{60} . Muchos de ellos han debido ser teóricos, por la escasez y dificultad de obtención del material que se sufrió hasta 1990, en que éstas fueron superadas por la técnica de Krätschmer. Así, cuando los físicos y los químicos empezaron a hacer experimentos abundantes y refinados en 1990 y 1991, disponían ya de una buena batería de cálculos de las propiedades del futboleno para orientarlos. Estos cálculos, puede decirse, andaban por allí esperando un experimento que los refutara o los confirmara.

Por ejemplo, de 1985 a 1990 se habían publicado cerca de una decena de cálculos teóricos de la estructura electrónica del futboleno y de las propiedades derivadas de esa estructura electrónica. Éstos van desde el nivel más crudo, usando el modelo de Hückel, hasta cálculos a primeros principios ("coupled Hartree-Fock") empleando conjuntos grandes de funciones de base (la más satisfactoria usada hasta la fecha, STO 6-31G*, es enorme; otra base satisfactoria, STO triple-zeta con polarización, está formada por 1140 funciones). Sin embargo, para el cálculo de algunas propiedades, los propios autores encuentran que la base 6-31G* es insatisfactoria.

Lo que ya se ha establecido claramente es que el futboleno C_{60} con estructura de icosaedro truncado es una molécula de capa cerrada, con un "gap" o brecha energética respetable, es decir, con una separación grande entre los orbitales más alto ocupado (HOMO) y más bajo no ocupado (LUMO) (decimos en los pasillos que para calcular esto se han tenido que sacar "lumo del lHOMO"). Esta separación es de alrededor de 8 eV.

Los espectros fotoelectrónicos han confirmado experimentalmente las principales características calculadas hasta la fecha (a saber, que los estados más altos ocupados son de simetrías h_u , h_g y g_g ; la degeneración de los h es cuádruple y la de los g es quíntuple). El potencial de ionización es de 7.6 eV.

Desde luego esto requiere sacar del closet algunos conceptos químicos básicos y repintarlos. Esta separación y una importante deslocalización electrónica son características de los compuestos orgánicos aromáticos (como la serie benceno, naftaleno, fenantreno, antraceno...), que tienen como extremo al grafito. Hay que tener cuidado, sin embargo, porque la analogía con el grafito tiene límites: el grafito es un semimetal en el que

la separación entre HOMO y LUMO es cero para la capa bidimensional, es decir, considerando sólo al sistema π , y muy pequeña aun si se incluyen los efectos de interacción entre las capas planas de átomos que lo forman.

El otro punto a considerar al hablar de aromaticidad en el futboleno es que los químicos estamos acostumbrados a llamar aromáticos a sistemas moleculares planos. La extensión del concepto de aromaticidad, y la existencia del sistema π a tres dimensiones deben hacerse con cuidado. Entre otros, se ha ocupado de ello Haddon, quien describe en *Accounts of Chemical Research* **21**, 243 (1991) qué puede entenderse en tres dimensiones por "orbital π " (el híbrido entre s y p localmente ortogonal a los híbridos que describen enlaces σ) e ideas como la "rehibridación" que permiten estudiar sistemas aromáticos tridimensionales, como el que nos ocupa o bien algunos conocidos de mucho más tiempo para los químicos.

Así se vuelve más digerible una imagen básica del futboleno que describe su estructura electrónica: el futboleno se puede ver como un sólido casi esférico que tiene por dentro y por fuera de su cáscara una nube electrónica π . Como la ha mostrado Bernholc se ve además que se trata de una densidad electrónica distribuida en una región estrecha, cercana a la superficie descrita por los átomos, la cual deja un hueco grande de densidad electrónica casi nula en el centro de la molécula.

4. El pleito del diamagnetismo

Haddon es uno de los contendientes en la que parece ser en este momento la controversia más caliente alrededor de las propiedades moleculares del C_{60} . Ésta se refiere al magnetismo del futboleno. Kroto y Smalley, en el artículo fundador en *Nature* de 1985, especulaban que la deslocalización electrónica en C_{60} debería permitir que un campo magnético aplicado sobre la molécula induzca grandes corrientes eléctricas; éstas se deben formar de tal manera que se opongan al campo aplicado, fenómeno conocido como diamagnetismo.

Haddon y Elser han hecho un cálculo muy simplificado de las "corrientes de anillo" del futboleno, basado en el modelo de Hückel para los electrones π y en simplificaciones adicionales para describir el efecto del campo magnético. Según ellos, resulta que sorprendentemente las corrientes de anillo, y por lo tanto el diamagnetismo, están drásticamente suprimidos en el futboleno.

En contradicción con esto, Fowler, Lazzarotti y Zanasi, con base en uno de los cálculos de estructura electrónica más ambiciosos realizados hasta ahora sobre futboleno, encuentran que el diamagnetismo debe ser apreciable en el futboleno C_{60} . Concurren con su opinión un análisis empírico de Schmaltz, y un estudio de los corrimientos químicos en RMN del propio Fowler.

Claro está que la última palabra la tendrá el experimento. El análisis de RMN de Fowler es un paso

experimental pero está sujeto parcialmente a los efectos de la interpretación, y a incertidumbres que el propio Fowler es el primero en señalar. En particular, refiere que su base 6-31G* puede no llevar a convergencia una componente de la susceptibilidad que es una función de respuesta y se calcula como una perturbación a segundo orden.

En el Congreso de Marzo de 1991 de la Sociedad Americana de Física se hizo un anuncio de una medición experimental de la susceptibilidad magnética del futboleno que parece dar la razón a Elser y Haddon, es decir, un equipo de trabajo de los Laboratorios Bell formado entre otros por los propios Haddon y Elser encuentra que el diamagnetismo de C_{60} es pequeño y que por lo tanto lo serán también las corrientes anulares. Seguramente falta poco tiempo para tener una explicación consistente de todo lo medido, calculado y discutido sobre el diamagnetismo del futboleno.

5. El futboleno sólido

Para la fase sólida del futboleno, que constituye como dije al principio una nueva forma alotrópica del carbono, se ha podido establecer que se trata de una fase hexagonal de empaquetamiento denso casi ideal; los cristales obtenidos hasta ahora son ligeramente desordenados pero permiten establecer las constantes de malla como $a = 10 \text{ \AA}$ y $c = 16 \text{ \AA}$, que corresponden a un empaquetamiento de esferas casi ideal. Ha habido debate con los investigadores de los Laboratorios Bell de la AT&T y de algunas otras instituciones, que encuentran una estructura de empaquetamiento denso de esferas distinta, a saber, cúbica centrada en las caras (*fcc*).

Las moléculas de futboleno en el cristal podrían no estar todas orientadas igualmente. El hecho de que sean casi esféricas vuelve difícil determinar esta anisotropía. Los experimentos de RMN muestran una rotación rápida de las moléculas; ésta aparece inhibida al depositar C_{60} sobre oro o grafito, lo cual permite tomar las imágenes de STM con resolución a nivel atómico citadas antes.

Aparentemente el futboleno sólido tiene muchos modos normales de movimiento de baja energía; una fracción importante de ellos podría ser de carácter rotacional. Entre otros informes que sólo conozco fragmentariamente, quiero destacar la posibilidad, que aparece en los experimentos de Meijer y Bethune, de que el futboleno sólido tenga estados electrónicos extendidos —de éstos resultaría algún carácter metálico.

En un artículo que debió publicarse en *Nature* en abril pasado, los investigadores de la AT&T informan que al impurificar el futboleno sólido con metales alcalinos han logrado obtener muestras con buena conductividad eléctrica y, lo que es más interesante, tienen evidencia aparentemente incontestable de que el futboleno impurificado con potasio es superconductor, con una temperatura crítica de superconductividad alrededor de los 18 K. Cabe subrayar que el potasio está alojado en los

espacios intersticiales que quedan entre las distintas moléculas de futboleno, y no insertado en ellas.

La temperatura crítica de 18 K es sumamente alta, ya que el sistema de referencia aquí debe ser grafito intercalado que la tiene quizás un orden de magnitud inferior. Está por caracterizarse toda la fenomenología de este sistema, pero de entrada se puede sospechar que el origen de la superconductividad aquí sea un mecanismo BCS tradicional.

Me "suenan" a que pueda suceder lo siguiente: la gran disponibilidad de estados vibracionales (y rotacionales y rovibracionales) de las "moleculotas" enlazadas entre sí más bien débilmente pone a la mano muchos posibles acoplamientos entre el electrón y la malla. Si el metal alcalino, o éste más los estados electrónicos extendidos propios que podría tener el futboleno, ponen en la malla suficientes electrones "metálicos", es posible alguna interacción del tipo del acoplamiento electrón-fonón que dé lugar a la superconductividad. Especulación de lego. Ciertamente hay una renovada expectativa de conocer los resultados de investigaciones hechas sobre el futboleno por esta razón.

Como quiera, hay que notar aquí algo importante: la molécula del futboleno tiene un radio llamativamente pequeño para el número de átomos que la forman. Es apenas un poco mayor que muchos átomos de metales pesados. Eso quiere decir que el futboleno simula a un átomo casi inerte, prácticamente esférico, y con una masa atómica que vale ¡720 unidades atómicas!

Precisamente por ser tan pesado debe tener vibraciones muy "blandas", con un espectro casi continuo que empieza a frecuencias muy bajas.

6. Química, fantasía y avance

Quiero referirme finalmente a la fascinación química por el futboleno. No sólo llama la atención de los químicos la alta simetría de la molécula. También es llamativo que una molécula con tantos átomos no sea un cúmulo más apretado sino que en cambio posea un hueco grande en su interior (de unos 3 Å). En este hueco caben uno o dos átomos metálicos y es fácil imaginar futbolenos que contengan pequeñas moléculas orgánicas "enjauladas" o "estuchadas".

Digo que es fácil imaginar y no implica esto que sea fácil producir tales moléculas. Pero los químicos están intrigados por las propiedades que podrían tener el futboleno y sus derivados.

En primer lugar podría pensarse en las aplicaciones del futboleno de carbono puro como ya lo conocemos. Entre otras, Huffman ha hablado de hacer puntas para microscopios de tunelaje electrónico que tengan en el vértice una sola molécula de C_{60} . ¿Un lubricante al modo del grafito? Hay muchas ideas en esta línea.

En segundo lugar es intrigante saber cuáles serían las propiedades y los usos de futbolenos modificados químicamente. Por ejemplo, el $C_{60}F_{60}$ podría ser un ultralubricante, el extremo de los teflones. Algunos

cálculos teóricos predicen que esta molécula podría ser estable. Ya se ha logrado hidrogenar al futboleno hasta alcanzar la fórmula $C_{60}H_{36}$; ésta es la hidrogenación más alta que permite la síntesis de Birch, puesto que deja un doble enlace en cada pentágono de la molécula y destruye completamente la conjugación.

Esa reducción de Birch fue hecha por Smalley y colaboradores; en el mismo artículo donde la describen, informan también de la reducción electroquímica. Se ha probado que existen iones estables del futboleno tanto positivos como negativos.

La fotofísica del futboleno estudiada hasta ahora permite sugerir que se trata de un generador potencial de oxígeno singulete.

Smalley ha estudiado aspectos de la química del futboleno. Ha estudiado su descomposición al irradiarlo con láser; propone para ella un mecanismo concertado de pérdida de unidades C_2 . Éste ha sido disputado por Radi y otros, que sugieren más bien la imagen del futboleno como una "gota" de unidades C_2 ; los enlaces dentro de cada unidad son de 7 a 10 eV, y entre ellas de 3 a 4.6 eV.

Otros estudios de Smalley incluyen la combustión del futboleno, y sus reacciones de agregación de unidades C_2 hasta producir ya sea hojas gigantes abiertas de mosaicos de carbono, o bien grafito amorfo. Realiza estas reacciones en condiciones de levitación, técnica que por cierto sigue aplicando a otros problemas como la química del etileno (¿Se acuerdan de que Houston es "zona petrolera"? Los primeros experimentos de los grupos alrededor de Smalley y Kroto se hicieron en laboratorios de la Exxon...).

Smalley estudia la coalescencia de fullerenos. Los selecciona por masas, luego los trata con láser y sigue sus reacciones. Los fullerenos ionizados se agregan para formar moléculas con 120, 180 o más átomos de carbono.

Para Kroto, vivimos en la era postbuckminsterfullereniana de la química del carbono. Refiere entre otros el trabajo de Ozawa para sintetizar C_{60} por decarboxilación de cromanuleno.

Entre las numerosas especulaciones acerca del futboleno, cabe citar la hipótesis de que por su estabilidad en condiciones extremas pueda haber catalizado reacciones abióticas, capaces de producir las moléculas orgánicas que se observan en el espacio. Y ciertamente se estudiarán las propiedades catalíticas de los futbolenos.

Es igualmente atractiva la posibilidad de estudiar la química de futbolenos que contengan átomos metálicos en su cavidad interior. Si bien estos átomos no participarían directamente en las reacciones, sí permitirían ajustar muy refinadamente las propiedades químicas de las moléculas resultantes.

Otra especulación muy intrigante se abre hacia el camino de los futbolenos "grandes". ¿Qué clase de estructura tienen moléculas con por ejemplo 540 átomos de carbono? Es posible que estén formadas por capas

sucesivas de átomos y no ya por un solo poliedro como los futbolenos de 60 o 70 carbonos.

Para los químicos sucede por último que las síntesis conocidas hasta ahora son antiestéticas y antiquímicas. Lo que un químico orgánico querría encontrar es una síntesis de químico, no de soldador. Quiere decir esto que se trata de sintetizar los futbolenos por medio de una sucesión de reacciones todas ellas controlables, de energías comparativamente bajas, a partir de compuestos orgánicos de pesos moleculares relativamente bajos.

La jaula poliédrica más grande sintetizada hasta ahora es el dodecaedro $C_{20}H_{20}$. Este compuesto, producido por Paquette en 1982, tiene un esqueleto dodecaédrico de 20 carbonos, y un hidrógeno enlazado con cada uno de ellos. La extraordinaria dificultad de alcanzar esta síntesis no trasluce en los artículos de las revistas de publicación química original, y ha sido narrada de manera atractiva por el propio Paquette en *Strategy and Tactics of Organic Synthesis*; este artículo es mejor que una novela para cualquiera con un mínimo de conocimientos de química.

El dodecaedro es un antecedente importante al que ciertamente hay que considerar, pero se impone un punto de vista sobrio. Lo separa del futboleno no sólo un salto importante en el número de átomos del esqueleto, sino el hecho de que es un hidrocarburo. No parecen concebibles medios químicos sencillos para retirar todos los átomos de hidrógeno.

Posiblemente haya que buscar vías mixtas de las químicas orgánica, inorgánica, y organometálica (listo ésta por separado para no pelearme por a cuál de las otras pertenece). Ciertamente hay numerosos laboratorios metidos ya en esta refriega; algunas referencias destacan los esfuerzos, hasta ahora infructuosos, de Whetten en Los Ángeles. Se señala, en cambio, el trabajo de Heath (en Berkeley), que ha logrado con éxito osmilar el C_{60} en una reacción común para funcionalizar hidrocarburos insaturados. Así, aun en ausencia de una verdadera síntesis orgánica del futboleno, se empieza a desarrollar la química orgánica de este compuesto y sus derivados.

7. Más cosas (pocas)

Se realizan un sinnúmero de otros estudios sobre el futboleno, o mejor dicho, sobre los futbolenos. Cada quien hace lo que sabe hacer y aprende un poco más para aplicarlo también. Se le miden espectros, se le calculan propiedades en teoría de gráficas, se le irradia para descomponerlo y se determina la cinética y el mecanismo de sus reacciones, se le comprime y se


vuelve a medir todo...

De lo más llamativo (independientemente de cuán fundamental sea su contribución) es la completísima simulación molecular de Bernholc usando el método de Car y Parrinello. Su producto de más "gancho" es un video de la optimación de la geometría, y de algunas de las vibraciones de la molécula.

Otras especulaciones recientes: ¿se podrá sintetizar el análogo del futboleno con boruro de nitrógeno? ¿Cómo se comporta el sistema de 60 electrones π , visto como un sistema de electrones prácticamente bidimensional pero con la topología de una esfera?

Y ya. Seguramente el lunes a las 10 de la noche habré visto mucho más. Éste es un tema fascinante porque tiene justo la velocidad para ir siguiendo sus principales novedades. No se lo pierdan.

8. Coda

Este artículo debe una parte de su información y de sus especulaciones a los participantes en un seminario-taller sobre futboleno que se llevó a cabo el 13 de mayo de 1991 en el Instituto de Investigaciones en Materiales de la UNAM. Agradezco la invitación que me hizo Emilio Orgaz para participar en él, la cual me llevó a preparar este texto. 

Bibliografía

- Bethune, D. S., G. Meijer, W. C. Tang, H. J. Rosen, W. G. Golden, H. Seki, C. A. Brown y M. S. de Vries, "Vibrational Raman and infrared spectra of chromatographically separated C_{60} and C_{70} fullerene clusters", *Chem. Phys. Lett.* vol. 179, 1991, p. 181.
- Elser, V. y R. C. Haddon, "Icosahedral C_{60} : an aromatic molecule with a vanishingly small ring current magnetic susceptibility", *Nature*, vol. 325, 1987, p. 792 ss.
- Fowler, W. P., P. Lazzeretti, M. Malagoli y R. Zanasi, "Magnetic properties of C_{60} and C_{70} ", *Chem. Phys. Lett.* vol. 179, 1991, p. 174.
- Fowler, W. P., P. Lazzeretti y R. Zanassi, "Electric and magnetic properties of the aromatic sixty-carbon cage", *Chem. Phys. Lett.* vol. 165, 1990, p. 79.
- Krätschmer, W., L. D. Lamb, K. Fostiropoulos y D. R. Huffman, "Solid C_{60} : a new form of carbon", *Nature* vol. 347, 1990, p. 354 ss.
- Kroto, H. W., J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl y R. E. Smalley, " C_{60} : Buckminsterfullerene", *Nature* vol. 318, 1985, p. 162.
- Reber, C., L. Yee, J. McKiernan, J. I. Zink, R. S. Williams, W. M. Tong, D. A. A. Ohlberg, R. L. Whetten y F. Diederich, "Luminescence and absorption spectra of C_{60} films", *J. Phys. Chem.* vol. 95, 1991, p. 2127 ss.
- Smalley, R. C., "Giant balls of carbon", *The Sciences*, marzo/abril de 1991, p. 22.
- Stoddart, J. F., "The third allotropic form of carbon", *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* vol. 30, 1991, p. 70.