

Construyendo Fullerenos C_{60} a partir del Icosaedro

Raúl Santoy Flores, Alfredo Tlahuice Flores

*Universidad Autónoma de Nuevo León
Facultad de Ciencias Físico Matemáticas*

24 de mayo de 2022

1. Resumen

En este reporte se realiza el cálculo de las posiciones del Fullerenos C_{60} , un alótropo del C, a partir del icosaedro, un sólido platónico, también se le conoce como el icosaedro truncado. Se emplea una optimización geométrica del icosaedro truncado para obtener las posiciones del fullereno que van más acorde a la teoría DFT, esto mediante la paquetería ORCA. Se estudia los tipos de enlaces y las contribuciones de carga que genera para distintas caras en el C_{60} .

2. Introducción

El Fullerenos C_{60} es un alótropo del C, se encuentran y se forman principalmente en el espacio interestelar y en formaciones geológicas en la Tierra. Los fullerenos se han hallado en meteoritos que fueron formados a partir de estrellas, que los expulsaron al espacio al extinguirse [1].

El C_{60} es un moléculas de dimensión $0D$, es decir, no se pueden reducir sus dimensiones aun más, además presenta una alta simetría de tipo icosaedro, en total existen 120 transformaciones de simetría, siendo las 60 simetrías rotacionales (o que conservan la orientación), incluidas las transformaciones que combinan una reflexión y una rotación. Esto la hace la molécula más simétrica, cuenta con 12 caras pentagonales y 20 hexagonales, tiene la forma de un balón de fútbol [1].

Químicamente la molécula C_{60} es muy electronegativa y forma fácilmente compuestos con átomos donadores de electrones. Una combinación obvia es la molécula C_{60} con un metal alcalino, ya que son muy electropositivos [1].

3. Diseño del C_{60}

El proceso mediante el cual se trunca el icosaedro para formar C_{60} es mediante la intercalación de dos posiciones entre los vértices del icosaedro y suprimiendo los vértices de este último. En la figura (1a) se muestra una ilustración del icosaedro truncado, siendo los vértices de color azul las posiciones del icosaedro y las de color gris del C_{60} .

El siguiente código fuente muestra la obtención del C_{60} teniendo las posiciones del icosaedro ya capturadas.

```
// ----- CALCULANDO POSICIONES C60 -----
#for(i,0,11)
  #for(j,i,11)
    #declare d = VDist(pos[i],pos[j]);
    #if (d<4.25 & d!=0)
      #declare c60 = pos[i] + (pos[j]-pos[i])/3;

      sphere{ c60, r
        texture{pigment{color NeonPink}
          finish{ diffuse 0.8616
            specular 0.7196}
        }
      }

      #declare c60 = pos[i] + 2*(pos[j]-pos[i])/3;

      sphere{ c60, r
        texture{pigment{color NeonPink}
          finish{ diffuse 0.8616
            specular 0.7196}
        }
      }

    #end
  #end
#end
```

Listing 1: Código en POV-Ray para la obtención del icosaedro truncado

Para obtener posiciones más apegadas a la realidad empleamos una paquetería de Química Cuántica llamada ORCA que se basa en la teoría del funcional de la densidad (DFT), es una teoría muy completa y que en la actualidad compete y ofrece resultados e inclusive nuevos diseños experimentales que producen buenos resultados. Es por ello que entramos las posiciones obtenidas del icosaedro truncado y realizamos un calculo de optimización geométrica (OPT) que busca que la sumatoria de fuerzas sea igual a cero sobre cada uno de los átomos, esto mediante el siguiente script. Se utiliza un funcional PBE y se declaran las posiciones en formato .xyz, carga 0 y multiplicidad 1.

```
! PBE DEF2-SVP OPT PDBFILE
! TightOPT
! TightSCF
! Largeprint
* xyzfile 0 1 c60.xyz
```

Listing 2: Optimización geométrica en ORCA para el icosaedro truncado

4. Resultados

En la figura (1b) se muestra las posiciones del fullereno ya calculadas en la optimización geométrica realizada en ORCA, lo cuál nos permite calcular las distancias de los distintos tipos enlaces que se forman dado la vecindad entre dos hexágonos (6-6) o un hexágono y un pentágono (6-5). Tomando en cuenta una hibridación sp^2 de un átomo de carbono enlazado directamente a tres átomos vecinos de carbono [2], las distancias entre estos átomos de enlaces (6-6) se encuentra que es de 1,407 Å y la de enlace (5-6) es de 1,458 Å lo cuál muestra un enlace doble para la vecindad entre hexágonos y un enlace simple para la vecindad entre hexágono y pentágono.

Esto ultimo y lo reportado en [2], nos habla de la contribución de carga que tienen los enlaces dobles que rodean a un pentágono, en la figura (2) se ilustra lo anterior, es decir de la contribución de los orbitales s.

Enlaces	6-6	6-5
Referencia [2]	1.391 Å	1.449 Å
ORCA	1.407 Å	1.458 Å
Δd	0.016 Å	0.009 Å

Cuadro 1: Comparando distancias de enlace en fullereno con cálculos de ORCA (A. Mateo-Alonso [2])

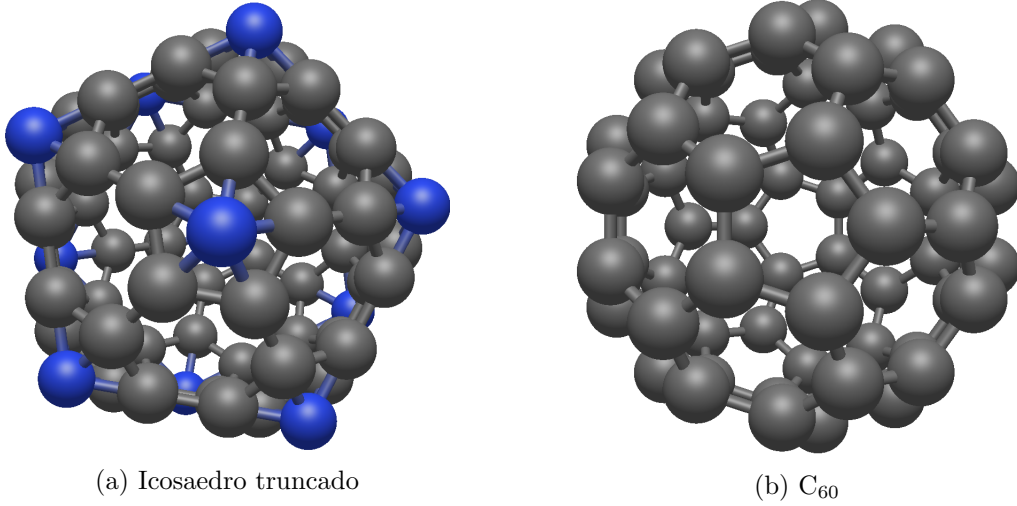


Figura 1: Proceso de obtención del fullereno C_{60} a partir del icosaedro

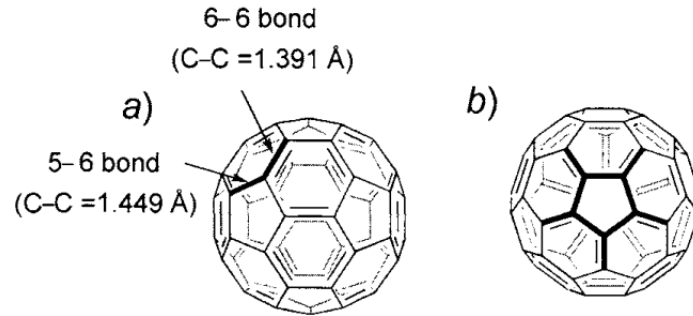


Figura 2: (a) Diferentes tipos de enlaces (A. Mateo-Alonso [2]) (b) Contribución de los enlaces dobles al pentágono.

5. Conclusiones

Se abordó un estudio didáctico en la obtención de las posiciones del fullereno C_{60} a partir del icosaedro truncado, lo cuál nos ofrece una aproximación del C_{60} sin embargo, es difícil dar detalle de los enlaces si no se hace un cálculo de relajamiento estructural donde las fuerzas de interacción entre carbonos se lleven al mínimo. Se logró entender la contribución de carga de los enlaces dobles a las caras pentagonales. Conocer y disponer de estas posición del fullereno es de interés para futuros estudios de interacción con distintos átomos y poder ofrecer comparaciones con los niveles de energía Homo-Lumo respectivamente. Respecto a los resultados, se puede decir que ORCA ofrece buenas aproximaciones a lo ya reportado, a pesar de que este no se basa en cálculos con simetría.

Referencias

- [1] O. Vasilievna Kharissova, U. Ortiz Méndez, *La estructura del fullereno C60 y sus aplicaciones*, Ciencia UANL, 2002, vol. 004, pp. 475-479
- [2] A. Mateo-Alonso, D. Bonifazi and M. Prato, *Chapter 7 - Functionalization and applications of [60]fullerene* 10.1016/B978-044451855-2/50010-3, Carbon Nanotechnology, 2006, Pages 155-189.