

Modelo de papiroflexia para visualizar la estructura del C₆₀ y la quiralidad de nanotubos de carbono así como algunas propiedades



J. García-Robledo¹, H. Balmori²

¹Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas, ESIQIE. Edificio N° 7, Unidad Profesional Adolfo López Mateos. Colonia Lindavista, Delegación Gustavo A. Madero, México D.F., C.P. 07738.

²Centro de Nanociencias y micro y nanotecnologías. Calle Luis Enrique Erro s/n, Unidad Profesional Adolfo López Mateos, Col. Zacatenco, C.P. 07738, México D.F. Tel: 57 29 60 00, Ext. 57501, 46081, Fax: 46080, 57500.

E-mail: jaimefr_gr@yahoo.com

(Recibido el 25 de agosto de 2014; aceptado el 10 de abril de 2015)

Resumen

La construcción de modelos tridimensionales de nanoestructuras de carbono como el fullereno (C₆₀), se logró con el ensamble de módulos hechos por papiroflexia. El módulo primario representa el átomo de carbono y sus tres enlaces, que comparte con sus átomos vecinos. Fue posible la construcción de modelos de nanotubos en los cuales se observa cómo la red de hexágonos varía dando lugar a un nanotubo en zigzag, de silla (armchair) y quirales (chiral). En general, se distinguen tres tipos de nanotubos de capa única según su helicidad: tipo "armchair", zigzag y quiral. Puede considerarse que los nanotubos armchair y zigzag son nanotubos rectos mientras que los nanotubos quirales son retorcidos. La construcción de los nanotubos, y su posterior simulación usando los vectores quirales m y n , proporcionan una herramienta visual para entender las propiedades electrónicas y el potencial que tienen los nanotubos.

Palabras clave: C₆₀, Fullereno.

Abstract

The construction of three dimensional models of carbon nanostructures like fullerene (C₆₀) was achieved with the assembly of origami made modules. The primary module represents the carbon atom and its three links, which shares with its neighbor atoms. It was possible to construct models in which nanotubes show how the network hexagons vary resulting in a zigzag, chair and chiral nanotubes. In general, three types of single-layer nanotubes are distinguished according to their helicity: "armchair", zigzag and chiral. It can be considered that the armchair and zigzag nanotubes are straight while the chiral nanotubes are twisted. Building of nanotube models and subsequent simulation using the m and n chiral vectors provides a visual tool for understanding the electronic properties and the potential of nanotubes.

Keywords: C₆₀, Fullereno.

PACS: 01.40.-d, 01.40.gb, 01.50.-i,

ISSN 1870-9095

I. INTRODUCCIÓN

Los fullerenos son la tercera forma más estable del carbono, tras el diamante y el grafito. El fullereno más común es el C₆₀ (de 60 átomos de carbono). Hacia el año de 1985, los investigadores Harold Kroto y otros, de la Universidad de Rice en Houston, Texas, descubrieron una tercera forma alotrópica del carbono, se trataba de una sustancia donde cada molécula poseía sesenta átomos de carbono. Hallar un arreglo geométrico estable para tal molécula es todo un reto, pero finalmente se logró representar al el C₆₀ en forma de una estructura molecular parecida a un balón de fútbol soccer [1].

Los nanotubos de carbono fueron descubiertos por el físico japonés Sumio Lijima en 1991 [2]. Demostró con ello la existencia de otra familia de formas elementales de

carbono. Descubrió los nanotubos mientras realizaba un experimento para obtener fullerenos, haciendo pasar chispas eléctricas a través de barras de grafito vaporizándolas. Al observar las muestras mediante un microscopio electrónico de transmisión (HREM) encontró pequeños tubos de carbono de alrededor de un micrómetro de largo y de entre 1 y 100 nanómetros de diámetro, pero fue hasta 1993, cuando se consiguió obtener el primer nanotubo de capa sencilla, gracias a los físicos Sumio Lijima e Ichihashi [3]. Es por esto que el nombre de nanotubo proviene de este tipo de sistemas, dado que poseen una estructura tubular con diámetro de orden nanométrico.

A partir de 1992 los científicos Noriaki Hamada, Shin-ichi Sawada y Oshiyama observaron que había muchas maneras de enrollar una hoja de grafito para obtener dichos

nanotubos, desarrollando una nomenclatura para esto [4] conocida como la quiralidad.

II. CLASIFICACIÓN DE LOS NANOTUBOS

De acuerdo con el número de capas:

a) Nanotubos de capa única (SWNT).- Son los que se pueden describir como una capa bidimensional de grafito “enrollada” formando un cilindro de décimas de micrones de longitud y radio del orden de los nanómetros, los cuales además pueden poseer en sus extremos semiestructuras de fullerenos.

b) Nanotubos de capa múltiple (MWNT).- Son aquellos formados por capas concéntricas de forma cilíndrica.

De acuerdo con los índices de Hamada (n, m).

Los índices de Hamada son un par de números enteros (n, m) que describen el número de vectores unitarios a lo largo de las direcciones a_1 y a_2 , véase la Figura 1.

Los nanotubos pueden ser metálicos o semiconductores.

Para que un nanotubo sea metálico debe de cumplirse que la diferencia $n-m$ (n y m son los índices de Hamada, parámetros que indican la forma en que se enrollaría la lámina de grafito) debe ser múltiplo de 3, en caso contrario será semiconductor.

1. Nanotubos armchair.- Si ($n = m$) y posee un ángulo quiral de $\theta = 0^\circ$.
2. Nanotubos zigzag.- Presenta ($m = 0$) y poseen una helicidad de $\theta = 30^\circ$.
3. Nanotubos quiral.- Si ($n > m > 0$) y poseen una helicidad de $0^\circ < \theta < 30^\circ$.

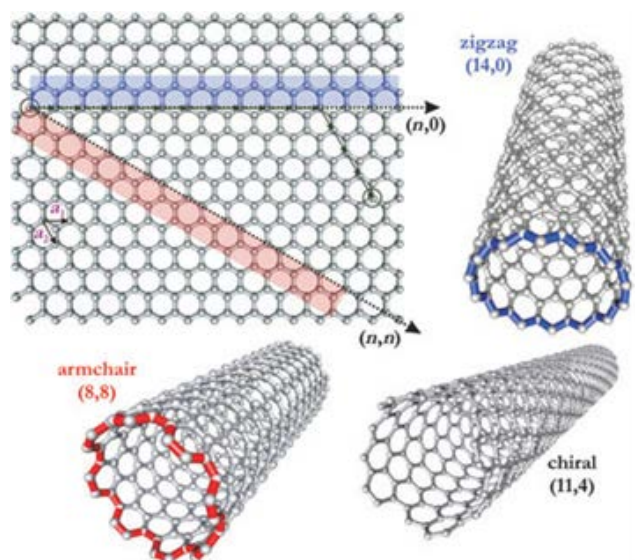


FIGURA 1. Distintas maneras de enrollar la hoja de grafito de tal forma que coincidan dos sitios cristalográficamente equivalentes de la red hexagonal. Además dependiendo de la forma de envolverse se pueden presentar los tres tipos de nanotubos.

III. METODOLOGÍA

El uso de la papiroflexia para el diseño de moléculas en química es una técnica empleada para la enseñanza [4], aunque tiene poca difusión podría proporcionar una alternativa lúdica para el diseño y modelado de moléculas como los fullerenos y los nanotubos. El uso de esta técnica emplea las bondades del doblado de papel, el cual proporciona un modo de representar el ensamble de los átomos y de simular los enlaces químicos, manteniendo los ángulos a los cuales dicho enlace se presenta al unirse a otro átomo.

En este trabajo, se emplea la papiroflexia para el diseño de fullerenos C_{60} y nanotubos. A continuación se muestra la secuencia para la fabricación y diseño de las unidades y la forma de realizar los ensambles para generar el C_{60} y los nanotubos.

- 1.- Se parte de dos triángulos equiláteros de 2 cm de lado obtenidos de papel flexible. En la parte central de uno de los triángulos se realiza una perforación en forma de triángulo para representar el átomo de carbono, el cual se ubicara en un vértice (Figura 2).

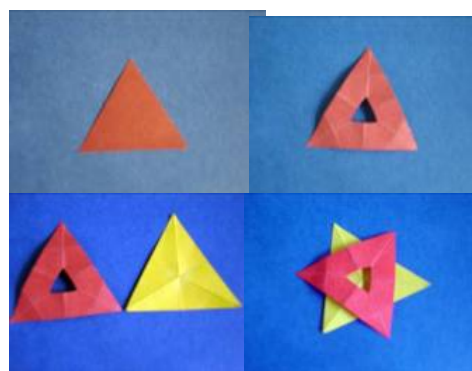


FIGURA 2. Primeros o unidades primarias para formar el modelo de un átomo de carbono por papiroflexia.

- 2.- Con los dos triángulos se forma un módulo o unidad que se ensambla con otros módulos similares, para el ensamble final de la estructura deseada como se presenta en la Figura 3.

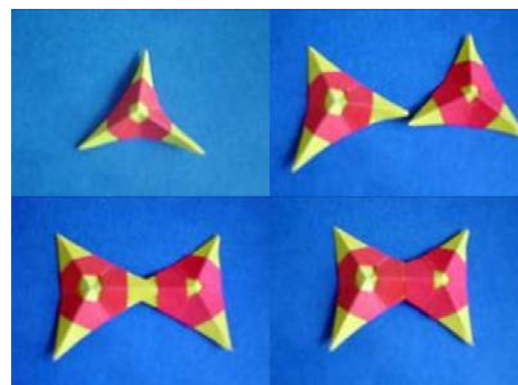


FIGURA 3. Ensamble de módulos de papiroflexia.

3. El acople de los módulos resulta sencillo, se unen mediante la extensión, introduciendo la punta de un módulo en otro hasta chocar con la pared del triángulo envolvente. Así, el módulo o unidad primaria representa a un átomo de carbono que puede tener tres átomos vecinos. Continuando con los ensambles podemos construir un pentágono o un hexágono requerido para formar el fullereno (Figura 4).

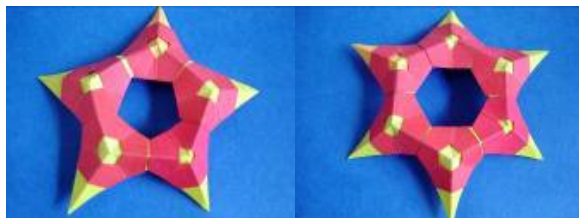


FIGURA 4. Formación de pentágonos y hexágonos a partir de las unidades primarias.

- 4.-Para construir el fullereno podemos comenzar a partir de ensamblar un pentágono. El pentágono tendrá cinco extensiones libres que compartirá para enlazarse y formar un arreglo de hexágonos, entonces el pentágono se rodeará por cinco hexágonos que corresponden a sus cinco lados (Figura 5).

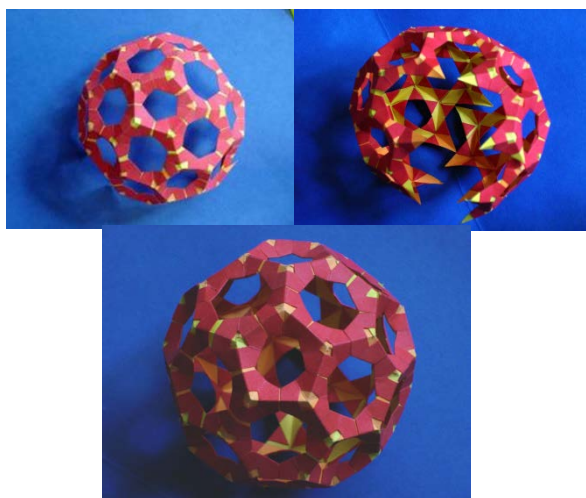


FIGURA 5. Ensamble final del fullereno C₆₀.

IV. RESULTADOS

Los nanotubos de carbono pueden considerarse como láminas de grafito enrolladas en forma de tubos. Los nanotubos pueden ser abiertos o cerrados, en cuyo caso la estructura que cierra el nanotubo es similar a la mitad de un fullereno. Por lo que se encontró que dos tipos de nanotubos fueron generados a partir del semifullereno, dando lugar a dos nanotubos cerrados de capa única.

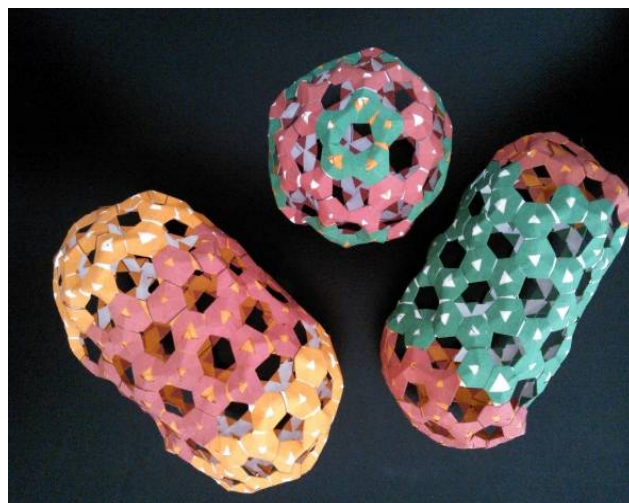


FIGURA 6. Nanotubos obtenidos por papiroflexia a partir del semifullereno.

Es posible construir el modelo de los dos nanotubos hechos por papiroflexia por medio de técnicas computacionales y calcular con algún software de simulación que ambos modelos son estables energéticamente. Es posible además visualizar el HOMO y el LUMO (Figura 7). La modelación muestra una clara diferencia en los orbitales moleculares de las dos estructuras. Lo cual nos indica diferencias en las propiedades de conducción de los modelos simulados. En química cuántica muchas veces se usan los orbitales frontera HOMO y LUMO para justificar ciertas reacciones químicas.

Éstos son los acrónimos de: orbital molecular ocupado de más energía (HOMO de sus siglas en inglés Highest Occupied Molecular Orbital) y orbital molecular no ocupado de más baja energía (LUMO de sus siglas en inglés Lowest Unoccupied Molecular Orbital), respectivamente.

La diferencia de energía entre el HOMO y LUMO se denomina hueco HOMO-LUMO (en inglés HOMO-LUMO gap). El HOMO es a los semiconductores orgánicos y puntos cuánticos, lo que la banda de valencia es a los semiconductores inorgánicos.

La misma analogía existe entre el LUMO y la banda de conducción. La diferencia de energía entre el HOMO y LUMO es la energía de la banda prohibida.

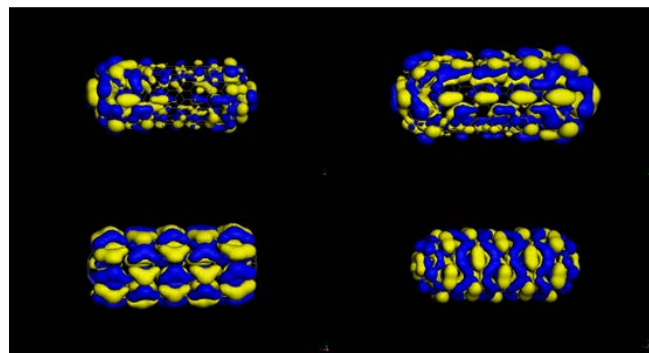


FIGURA 7. Simulación del HOMO y LUMO de los nanotubos cerrados tipo silla (5,5) y tipo zigzag (10,0).

Otros nanotubos construidos se logran al introducir el heptágono y pentágonos simultáneamente. Los grupos de Chernozatonskii [6] y Dunlap [7] fueron los primeros en proponer estas nuevas estructuras e identificaron la posición de los defectos en donde el heptágono se encuentra en posición opuesta al pentágono en la red de hexágonos, considerando esta conjetura se puede ubicar en el modelo los defectos y construir la unión de dos nanotubos (Figura 8).

Una vez que se consiguió construir las nanouniones se comprobó que el ángulo formado entre cada uno de los brazos de la unión suele estar entre 170° y 140° como fue reportado por Dunlap. En el modelo construido se encuentra que el codo Dunlap proporciona un doblez en un nanotubo además de un cambio en el arreglo en los hexágonos, esto es, de un nanotubo silla se produce un nanotubo en zigzag (Figura 8).

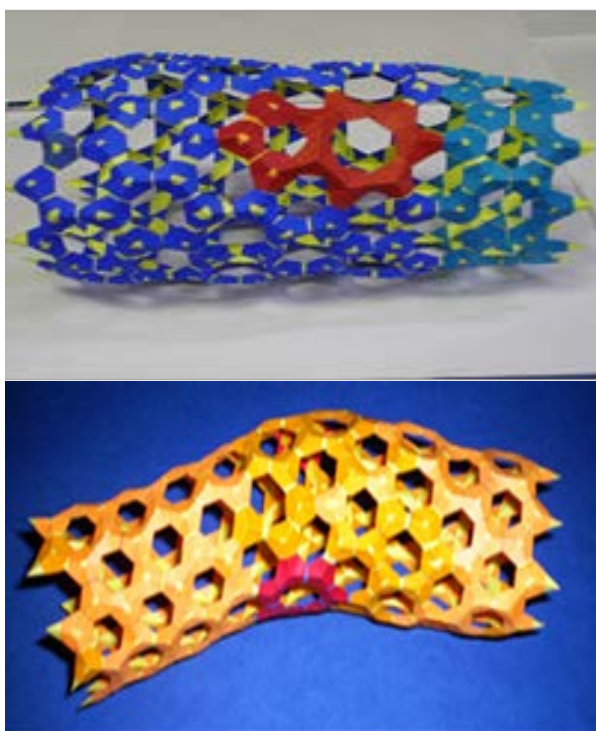


FIGURA 8. Modelo de la unión de dos nanotubos.

V. CONCLUSIONES

La técnica de ensamble de modelos tridimensionales por papiroflexia, permite la visualización de los defectos topológicos como son los pentágonos en los fullerenos, así como la quiralidad de los diferentes nanotubos modelados con esta técnica.

Algunos tipos diferentes de nanotubos cerrados fueron construidos con la red de hexágonos y además cerrados con el semifullereno C_{60} , este es el caso del nanotubo tipo silla con vectores quirales ($m=n$) (5,5) y el nanotubo tipo zigzag (10,0). También fue posible la construcción de la unión de dos nanotubos a través de un codo Dunlap, el cual consiste en un heptágono y un pentágono colocados en posiciones opuestas en la red de hexágonos.

REFERENCIAS

- [1] KROTO, Harry Kroto General information. Available in: www.kroto.info/General_info/PublicationList2.html.
- [2] Iijima, S., *Helical microtubules of graphitic carbon*, Nature **354** (1991).
- [3] Iijima, S. & Ichihashi, T., *Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter*, Nature **363**, 603-605 (1993).
- [4] Noriaki, H., Shin-ichi, S. & Atsuh, O., *New one-dimensional conductors: Graphitic microtubules*, Phys. Rev. Lett **68**, 1579 (1992).
- [5] 1000 grullas, *Química y papiroflexia*. Available in: <http://www.iqm.csic.es/are/chemori/>
- [6] Chernozatonskii, L. A. *Intrinsic electron transport properties of carbon nanotube Y-junctions*, Phys. Lett. **A172**, 173 (1992).
- [7] Dunlap, B. I., *Constraints on small graphitic helices*, Phys. Rev. **B50**, 8134 (1994).