

FORMACIÓN DE FULERENOS A PARTIR DE PRECURSORES UNIMOLECULARES PLANOS.

Otero, G.¹, Biddau, G.², Sánchez-Sánchez C.¹, Caillard R.¹, López M. F.¹, Rogero C.³, Palomares J.¹, Méndez J.¹, Echavarren A. M.⁴, Pérez R.², Gómez-Lor B.¹ y Martín-Gago J. A.¹

¹*Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (CSIC). Cantoblanco, 28049-Madrid, España.*

²*Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada, Universidad Autónoma de Madrid, 28049-Madrid, España.*

³*Centro de Astrobiología – CSIC-INTA. Ctra. de Ajalvir Km.4, 28850 -Torrejón de Ardoz, Madrid, España.*

⁴*Institute of Chemical Research of Catalonia (ICIQ), Av. Països Catalans 16, 43007-Tarragona, España.*

oterog@icmm.csic.es

La formación controlada de fulerenos, hetero-fulerenos y endohedral-fulerenos es esencial para desarrollar aplicaciones nanotecnológicas basadas en ellos. En estos sistemas, caracterizados por moléculas de dimensiones nanométricas, el microscopio de efecto túnel (STM) se revela como una herramienta de caracterización muy importante debido a su carácter local permitiendo incluso el estudio de moléculas aisladas^{1,2}.

Dentro de la gran cantidad de moléculas y sustratos que se pueden estudiar hemos elegido el sistema formado por moléculas policíclicas aromáticas hidrogenadas (PAH) sobre Pt(111). En particular estudiamos el $C_{60}H_{30}$ ³ y $C_{57}H_{33}N_3$ ⁴ depositadas *in situ* a temperatura ambiente y la transformación que sufren al ser calentadas a 450°C. A estas temperaturas las moléculas pierden los átomos de H, plegándose sobre sí mismas para formar las moléculas cerradas⁵ C_{60} (fulereno) y $C_{57}N_3$ (triazafulereno). La Fig. 1 muestra un esquema representativo de este proceso.

En condiciones de ultra alto vacío hemos caracterizado con STM a temperatura ambiente (RT) y con fotoemisión de rayos X (XPS) la deposición y estructura de las moléculas planas y de las obtenidas luego del calentamiento sobre la superficie del Pt(111). El proceso de deshidrogenación lo hemos estudiado con espectroscopia de desorción térmica (TDS).

Al depositar bajos recubrimientos de estas moléculas sobre el Pt(111) obtenemos imágenes de STM como las mostradas en la Fig. 2a, correspondiente a $C_{60}H_{30}$. Vemos que a temperatura ambiente las moléculas se encuentran ancladas y distribuidas aleatoriamente sobre las terrazas superficiales. En la Fig. 2b, imagen de alta resolución de una molécula de $C_{57}H_{33}N_3$, vemos una forma triangular de 2.2nm de lado y 0.15nm de altura y tres lóbulos más brillantes que pueden ser relacionados con los brazos cortos de las moléculas. Por un lado, esto nos indica que las moléculas conservan su estructura plana después de la evaporación y por el otro que se encuentran paralelas a la superficie maximizando la interacción molécula-sustrato.

Al calentar estas muestras, cerrando las moléculas, obtenemos imágenes de STM como la mostrada en la Fig. 2c. Al igual que antes de calentar observamos que los fulerenos y triazafulerenos se encuentran anclados y distribuidos aleatoriamente sobre las terrazas superficiales. En imágenes de alta resolución como la mostrada en la Fig. 2d vemos en detalle los cambios topográficos que se han producido. La estructura triangular que caracteriza a las moléculas planas ha cambiado para formar estructuras redondeadas de 1.5nm de diámetro y 0.35nm de altura características de los fulerenos.

Referencias:

- [1] Pascual, J. I., Gómez-Herrero, J., Rogero, C., Baró, A., Sánchez-Portal, D., Artacho, E., Ordejón, P., Soler, J. M. *Chem. Phys. Lett.* **321** (1-2) (2000) 78.
 [2] Orzali, T., Petukhov, M., Sambì, M. & Tondello, E. *App. Surf. Sci.* **252** (2006) 5534.
 [3] Gómez-Lor, B., de Frutos, Ó. & Echavarren, A. M. *Chem. Commun.* (1999) 2431.
 [4] Gómez-Lor, B. & Echavarren, A. M. *Org. Lett.* **6** (2004) 2993.
 [5] Otero, G., Biddau, G., Sánchez-Sánchez, C., Caillard, R., López, M. F., Rogero, C., Palomares, F. J., Cabello, N., Basanta, M. A., Ortega, J., Méndez, J., Echavarren, A. M., Pérez, R., Gómez-Lor, B. & Martín-Gago, J. A. *Nature*. Aceptado para su publicación.

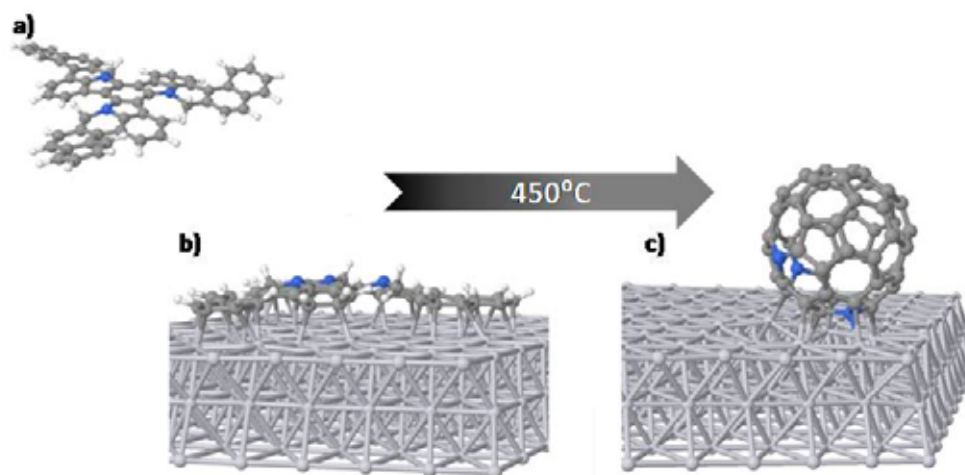
Figuras:

Figura 1. Esquema representativo del proceso de ciclodeshidrogenación. a) Molécula de $C_{57}H_{33}N_3$ libre. b) Al estar depositadas se encuentran planas y paralelas a la superficie del Pt(111). c) Al calentar a $450^\circ C$ se produce la ciclodeshidrogenación formando un triazafulereo.

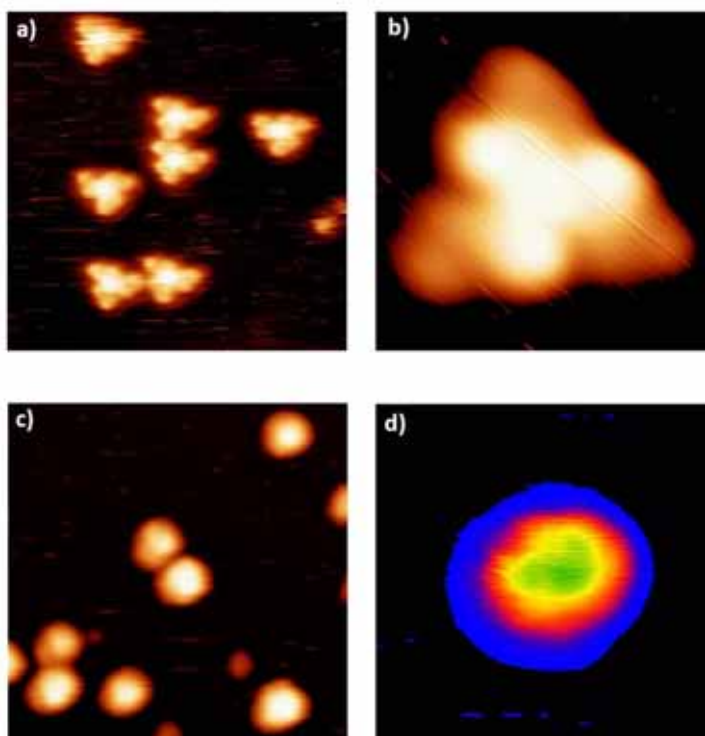


Figura 2. Imágenes de STM de $C_{57}H_{33}N_3$ y $C_{57}N_3$. Antes de calentar se observa la forma triangular de las moléculas planas a) y b). Tanto la forma redondeada de las moléculas después de calentar (c) como los orbitales moleculares (d) son característicos de los fulerenos cerrados.