

# FULLERENOS: UMA NOVA FAMÍLIA DE COMPOSTOS DO CARBONO

JOSÉ LUÍS MARTINS

Departamento de Física, Instituto Superior Técnico, Lisboa — INESC, Lisboa

## Introdução

O  $C_{60}$  é uma molécula surpreendente e fascinante. Os sessenta átomos de carbono dessa molécula estão dispostos de uma maneira altamente simétrica formando uma estrutura com doze pentágonos e vinte hexágonos na qual todos os átomos ocupam posições equivalentes (Fig. 1). A recente descoberta e síntese em quantidades macroscópicas dessa molécula desencadeou uma actividade intensa de investigação das suas propriedades por vários grupos de físicos e químicos.

Grande parte do interesse nesta molécula deve ser atribuído ao fascínio que as formas geométricas de alta simetria exercem sobre o espírito humano. Os matemáticos gregos da antiguidade já conheciam os cinco poliedros regulares ou sólidos «platónicos» (tetraedro, cubo, dodecaedro, octaedro e icosaedro), sólidos de alta simetria que têm como faces polígonos regulares idênticos (1). Devido à influência da escola pitagórica, onde a matemática dedutiva coexistia com o misticismo religioso (2), houve várias tentativas de associar à existência destes cinco sólidos platónicos um significado cosmológico. Assim dos quatro elementos, os átomos da terra tinham a forma de cubos; os de fogo, tetraedros; os de ar, octaedros; e os de água icosaedros. Quanto ao dodecaedro, «tinha sido usado por deus na delineação do universo», segundo uma frase obscura de Platão (3) que revela bem a

importância dada pelos gregos aos poliedros com simetria pentagonal. Não é apenas no Ocidente que se atribuiu um significado esotérico aos poliedros regulares e à simetria pentagonal: na tradição hindu é o icosaedro que é associado ao plano do Universo. No princípio da era da ciência moderna ainda Kepler afirmava (4) que a órbita de Mercúrio pertencia a uma esfera que estava inscrita num octaedro, o qual era circunscrito pela esfera da órbita de Vénus. Na sua cosmogonia o icosaedro, o dodecaedro, o tetraedro e o cubo separavam as esferas de Vénus, Terra, Marte, Júpiter e Saturno. Havia apenas seis planetas porque existiam apenas cinco sólidos regulares!

As relações de simetria entre os diversos sólidos platónicos constituem a parte principal do livro XIII dos *Elementos* de Euclides. Este livro discute também algumas das figuras resultantes da intersecção dos sólidos platónicos, da

(1) A teoria dos sólidos regulares deve-se a Teeteto, o qual descobriu o octaedro e o icosaedro. A prova de que existem apenas cinco poliedros regulares convexos encontra-se no corolário da proposição 18 do livro XIII dos *Elementos* de Euclides.

(2) É extremamente curioso que a matemática enquanto ciência dedutiva tenha as suas origens numa comunidade religiosa que impunha aos seus membros tabus primitivos como seja o de não comer feijões, ou a proibição de apanhar objectos que tenham caído ao chão.

(3) Platão, *Timeo*.

(4) J. Kepler, *Mysterium Cosmographicum*, (1596).

Descoberta das macromoléculas  $C_n$

Os novos sólidos moleculares

Ligas de  $C_{60}$  com metais alcalinos

Propriedades físicas e supercondutividade

Aplicações

qual resultam sólidos semi-regulares por vezes chamados sólidos de Arquimedes. Devido ao desaparecimento de grande parte da literatura matemática da antiguidade, as

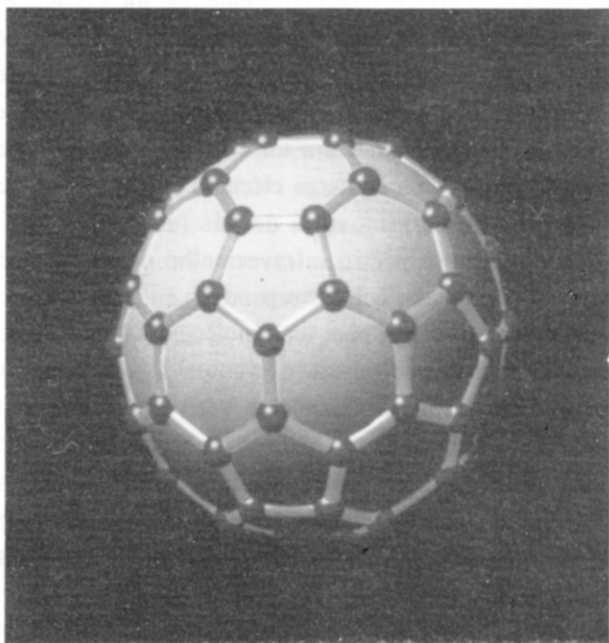


Fig. 1 — Modelo esquemático de uma molécula de  $C_{60}$ . As posições dos átomos são indicadas por esferas e os cilindros representam as ligações químicas covalentes. A esfera central que encobre parte da molécula foi acrescentada para realçar a sua esfericidade. De notar que todos os sessenta sítios atómicos são equivalentes.

mais antigas referências conhecidas sobre a figura obtida pela intersecção de um dodecaedro e de um icosaedro são gravuras de artistas da renascença. A figura 2 mostra-nos o desenho do icosaedro truncado que Leonardo fez para o tratado *Divina Proportione* de Luca Paccioli. Se nessa figura nós prolongarmos os pentágonos obtemos um dodecaedro, ao passo que se prolongarmos os vinte hexágonos encontraremos as vinte faces triangulares do icosaedro. Mais prosaicamente, se pintássemos os pentágonos de preto e os hexágonos de branco, encontraríamos o conhecido «esférico» dos jogos de futebol (5).

Com este interesse histórico pela simetria, e em particular pela simetria icosaédrica, não é de admirar que a sugestão feita em 1985 por R. Smalley, H. Kroto e colaboradores (6) de que sessenta átomos de carbono formariam um agregado com a forma de icosaedro truncado fosse acolhido com grande entusiasmo. Segundo esses autores, a molécula formada por sessenta átomos de

carbono em que cada um deles ocupasse os vértices do icosaedro truncado (Fig. 1) seria excepcionalmente estável. A esta estrutura de  $C_{60}$  foi dado o nome de Buckminsterfullereno em honra do arquitecto Buckminster Fuller que desenhou várias cúpulas geodésicas com a simetria icosaédrica, e que desenvolveu uma «filosofia» excêntrica baseada nessa forma (7). É evidente que um nome químico tão comprido é raramente utilizado no dia a dia do laboratório, onde o termo coloquial de «Bucky-bola» é preferido. Podemos apenas especular que se o futebol americano não fosse jogado

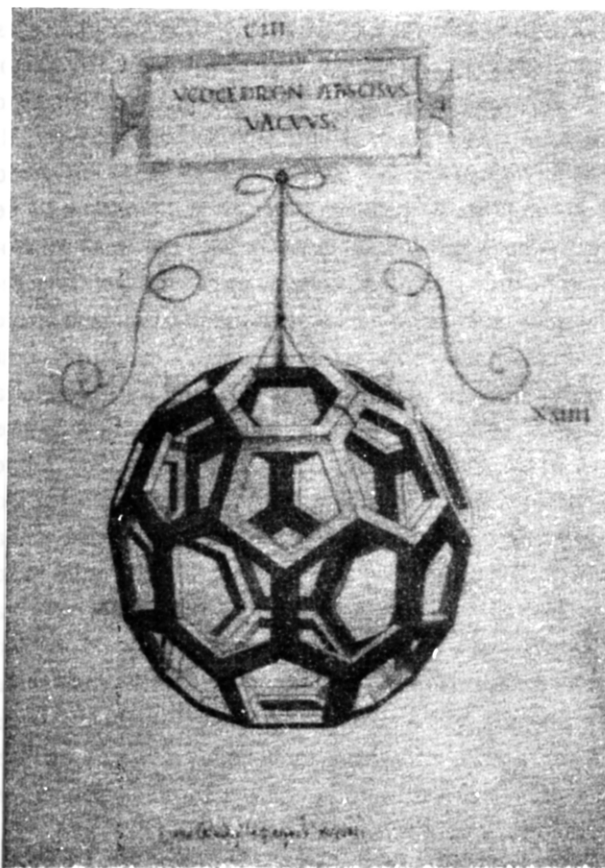


Fig. 2 — Desenho de Leonardo da Vinci de um icosaedro truncado, a figura geométrica do  $C_{60}$ .

(5) Segundo consta, este tipo de bola de futebol foi escolhido para aumentar o contraste da bola sobre o relvado durante as transmissões de jogos de futebol pela televisão a preto e branco.

(6) H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, e R. E. Smalley, *Nature* (London), **318**, 162 (1985).

(7) R. Buckminster Fuller, *Inventions — The Patented Works of Buckminster Fuller*, (St. Martins, New York, 1983). A mais famosa das suas cúpulas foi construída para a exposição universal de Montreal.

com as mãos e com uma bola oval, o  $C_{60}$  teria sido chamado de futeboleno.

### Descoberta do $C_{60}$

Embora a molécula de carbono com forma de bola de futebol tenha sido estudada como uma possibilidade teórica<sup>(8)</sup> antes das experiências de R. Smalley, esses estudos ficaram esquecidos na literatura, entre muitas outras especulações teóricas. A verdadeira história do  $C_{60}$  começou com a investigação de certas linhas de absorção interestelares que se desconfiavam serem devidas a moléculas exóticas de carbono  $C_n$ . Um dos cientistas interessado neste problema, o professor inglês H. Kroto, encontrava-se de visita à Universidade de Rice, no Texas, quando propôs uma colaboração com o Prof. R. Smalley dessa Universidade, o qual tinha desenvolvido uma máquina de produção de agregados atômicos de carbono por vaporização laser<sup>(9)</sup>. Eles e os seus colaboradores fizeram uma descoberta surpreendente: Os agregados de carbono com 60 átomos eram excepcionalmente abundantes nos espectros de massa!<sup>(6)</sup> Foi ao procurar uma explicação para esta estabilidade que postularam a estrutura em bola de futebol, na qual todos os 60 átomos ocuparem posições simetricamente equivalentes, e que satisfaz todas as regras básicas associadas com a ligação química do carbono. A estabilidade excepcional seria associada à estrutura altamente simétrica. Um outro facto curioso foi observado no decorrer das experiências: para agregados com cerca de mais de trinta átomos de carbono não se observavam agregados com número ímpar de átomos,  $C_{2n+1}$ , mas apenas agregados pares,  $C_{2n}$ . Este facto poderia ser explicado se todos esses agregados tivessem uma estrutura em gaiola formada por vários hexágonos e doze pentágonos.

Provar que o  $C_{60}$  produzido no laboratório tinha realmente a estrutura da bola de futebol revelou-se extremamente difícil, e houve mesmo algum ceticismo em relação à hipótese de que os agregados de carbono formavam gaiolas e de que o  $C_{60}$  tinha uma simetria icosaédrica<sup>(10)</sup>. É que estes agregados eram produzidos em ínfimas quantidades, sendo detectadas cerca de 10000 moléculas em cada experiência, e portanto era difícil medir as suas propriedades. Ao fim de vários anos de esforços, Smalley e os seus colaboradores, numa série de elegantes experiências, conseguiram provar que se tratava de uma estrutura em gaiola, visto que eram capazes de «prender» átomos no seu interior<sup>(11)</sup>, mas não

encontraram a prova concludente da simetria icosaédrica do  $C_{60}$ .

Enquanto os agregados de carbono eram produzidos em quantidades microscópicas, o seu interesse era apenas académico. O grande passo em frente que foi a produção desses agregados em quantidades macroscópicas veio de um grupo que também estava interessado nas linhas de absorção interestelares. Krätschmer, Huffman e colaboradores produziram uma fuligem de carbono fazendo passar uma descarga eléctrica entre duas barras de grafite numa atmosfera de gás inerte<sup>(12)</sup>. Eles observaram no espectro infravermelho dessa fuligem especial umas linhas que correspondiam ao que tinha sido teoricamente previsto para uma molécula icosaédrica de  $C_{60}$ . O problema de separar o eventual  $C_{60}$  do resto da fuligem foi resolvido quando se verificou que apenas parte dessa fuligem se dissolvia em benzeno, produzindo um líquido avermelhado, no qual cristalizaram por evaporação pequenos cristais de carbono puro aos quais foi dado o nome de fullerite. Os espectros de ressonância magnética nuclear (NMR), infravermelho, Raman, difracção de raios-X, e foto-emissão destes cristais foram

(8) E. Osawa, Kagaku (Kioto) **25**, 854 (1870). D. A. Bochvar e E. G. Gal'pern, Dokl. Akade. Nauk SSSR **209**, 610 (1973).

(9) O princípio de funcionamento da máquina de vaporização laser é o seguinte: Um pulso de raio laser é focado sobre a superfície da grafite (ou outro material se se quiser produzir outro tipo de agregado) vaporizando átomos de carbono; ao mesmo tempo que se produz a vaporização uma válvula rápida deixa entrar uma pequena quantidade de gás inerte que arrefece o vapor e o transporta através de um orifício de expansão supersónica. Antes da expansão as condições são tais que as colisões entre átomos de carbono são frequentes e agregados de carbono podem crescer por incorporação de átomos ou outros agregados. Depois da expansão supersónica, os agregados encontram-se no regime de jactos moleculares em que as colisões são raras, pelo que não há crescimento subsequente de agregados. O crescimento dos agregados é portanto limitado pelas condições cinéticas e modificando as condições de condensação é possível controlar o tamanho médio dos agregados obtidos no jacto molecular.

(10) É preciso notar que o espectro de massa observado depende das condições de condensação, e que nem em todos os casos o  $C_{60}$  é notavelmente mais abundante do que agregados de tamanho similar.

(11) F. D. Weiss, S. C. O'Brien, J. L. Elkind, R. F. Curl, e R. E. Smalley, J. Am. Chem. Soc., **110**, 110 (1988).

(12) W. Krätschmer, L. D. Lamb, K. Fostiropoulos, and D. Huddman, Nature (London) **347**, 354 (1990).

rapidamente obtidos após a sua síntese, e todos confirmaram que se tratava de uma molécula com sessenta átomos altamente simétrica. Por exemplo, o espectro de NMR continha apenas uma linha, confirmando que todos os átomos ocupavam posições equivalentes na molécula. Estava provado que o  $C_{60}$  tinha a simetria icosaédrica.

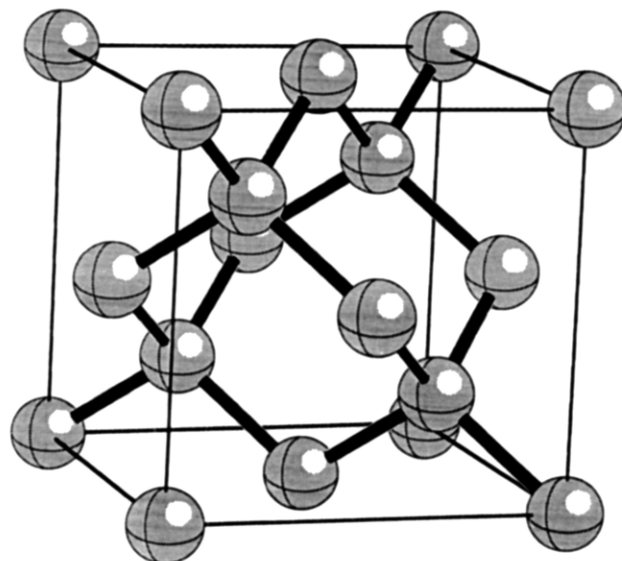
O  $C_{60}$  é apenas o mais abundante e «especial» membro de uma família de moléculas de carbono onde uma rede contendo hexágonos e pentágonos forma gaiolas fechadas. A fullerite obtida por evaporação simples contém cerca de 85% de  $C_{60}$ , sendo o resto formado por moléculas de  $C_{70}$ , e outros fullerenos, os quais podem ser separados e purificados por cromatografia. No meio do entusiasmo provocado pela descoberta do  $C_{60}$  foram encontradas outras formas curiosas do carbono, por exemplo longas agulhas formados por cilindros concêntricos em que cada um deles parece uma folha de grafite enrolada, os «bucky-tubos», ou bolas de várias camadas gráficas concêntricas, as «bucky-cebolas». A procura de outras «bucky-coisas» continua activamente.

### O carbono cristalino

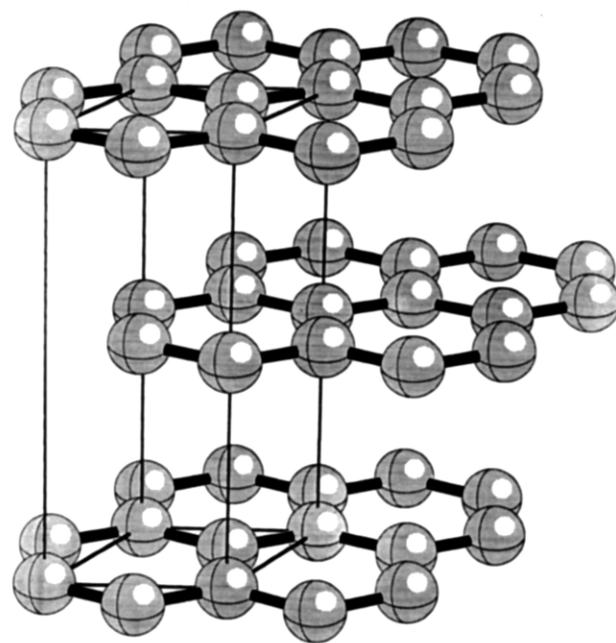
A aptidão do carbono para formar ligações covalentes com vários tipos de hibridização,  $sp$ ,  $sp^2$  e  $sp^3$ , é responsável pelo número enorme de moléculas orgânicas e biológicas. No entanto o carbono puro cristalino só era conhecido em duas formas (Fig. 3): a grafite e o diamante. A grafite é um composto lamelar com ligações químicas do tipo  $sp^2$ . Cada camada de grafite é formada por uma rede hexagonal de ligações fortes e curtas (1,42 Å) entre os átomos de carbono. A distância entre as camadas é grande (3,35 Å) e as ligações químicas entre elas são fracas. Esta fraqueza é responsável pelas propriedades lubrificantes da grafite, e permite que átomos estranhos possam ser introduzidos entre as camadas formando compostos intercalares. O diamante (e a sua variedade hexagonal, a lonsdaleite) tem uma hibridização  $sp^3$  formando uma rede tetraédrica de ligações curtas (1,54 Å) e fortes que são responsáveis pela dureza extraordinária do diamante e portanto pelas suas propriedades abrasivas.

Sendo a grafite e o diamante conhecidos desde há muito tempo, e sendo o carbono um dos elementos mais abundantes, faz com que a descoberta do  $C_{60}$  fullerite tenha sido surpreendente. A molécula do  $C_{60}$  é parecida

com uma rede hexagonal de grafite enrolada à volta de uma esfera, mas contendo doze «defeitos» pentagonais, os quais são necessários para fechar uma rede poliédrica que além dos pentágonos só contém hexágonos. O comprimento das ligações químicas são de 1,40 Å e de 1,46 Å respectivamente para as arestas entre dois hexágonos e para a aresta do pentágono. O diâmetro correspondente da «bola de futebol» é de 7 Å. Sendo a



(A)



(B)

Fig. 3 — Modelo esquemático da estrutura do diamante (A) e da grafite (B), os dois outros cristais de carbono.

superfície da molécula do  $C_{60}$  parecida com a da grafite, é de esperar que a interacção entre elas seja fraca, e que os cristais de  $C_{60}$  sejam formados à base de empilhamentos densos destas «esferas». No cristal de  $C_{60}$  a separação entre as bolas é grande (3 Å), e o empilhamento é muito denso, do tipo cúbico de face centrada (13).

Embora cada átomo de carbono tenha apenas três vizinhos no  $C_{60}$ , a curvatura da malha das ligações químicas faz com que a hibridização  $sp^2$  se misture um pouco com a hibridização  $sp^3$ . Três de cada um dos quatro electrões de valência de cada átomo de carbono são partilhados pelos noventa orbitais ligantes do tipo  $\sigma$  que se formam ao longo de cada uma das noventa arestas do icosaedro truncado. Os orbitais anti-ligantes do tipo  $\sigma$  encontram-se vazios e estão bem separados em energia dos orbitais  $\sigma$  ligantes. O quarto electrão de cada átomo de carbono (sessenta no total) é partilhado pelos orbitais do tipo  $\pi$ . Estes são formados a partir de orbitais atómicos radialmente, os quais são essencialmente do tipo  $p$  com uma mistura de  $\approx 8\%$  de carácter  $s$ . As ligações do tipo  $\pi$  não são localizadas (isto é, são aromáticas), sendo um pouco mais fortes ao longo das arestas entre hexágonos do que nas arestas pentagonais. Como há sessenta orbitais do tipo  $\pi$  apenas metade se encontram ocupados, e os orbitais de fronteira dos quais depende o comportamento químico do  $C_{60}$  são desse tipo.

Devido à sua semelhança com a grafite, devíamos esperar que a superfície das bolas do  $C_{60}$  seja «escorregadia», e portanto que as energias associadas às diferentes possíveis orientações das moléculas seja pequena. De facto, a orientação das moléculas do  $C_{60}$  na rede cristalina é uma das suas propriedades mais interessantes. Acima de uma temperatura de 240 K a sua orientação é desordenada, podendo considerar-se que as bolas se encontram «rodando» sobre si mesmas. Abaixo dessa temperatura aparece uma super-estrutura ordenada de orientações das moléculas onde os «saltos» entre orientações equivalentes são bastantes frequentes.

### Espectro electrónico do $C_{60}$

O espectro electrónico do  $C_{60}$  cristalino foi observado pelas técnicas de foto-emissão e foto-emissão inversas, respectivamente para os estados ocupados e vazios, revelando uma grande riqueza de pormenor (Fig. 4) (14,15). Nem a grafite nem o diamante possuem tantos picos espectrais bem definidos. A densidade de estados calculada teoricamente (14,15) encontra-se em excelente

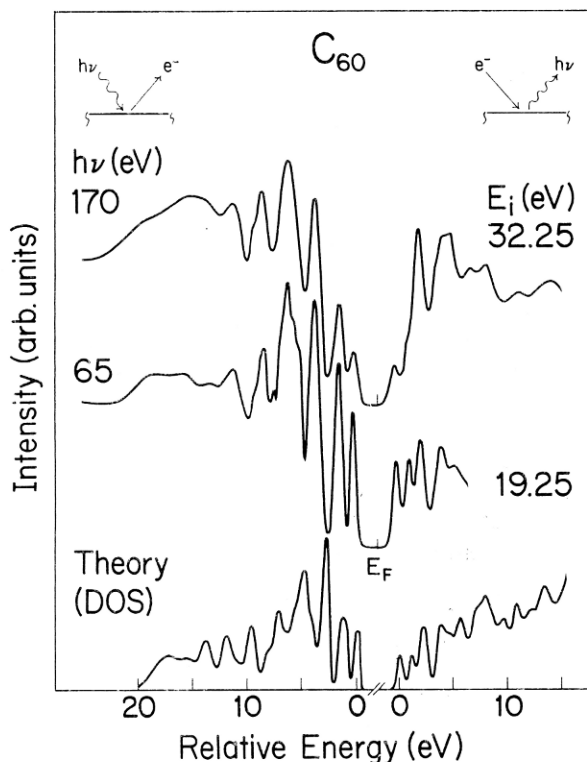


Fig. 4 — A comparação entre a densidade teórica de estados electrónicos (em baixo, indicada pelo acrónimo inglês DOS) e os experimentais de foto-emissão (centro-esquerda) e foto-emissão inversa (centro direita) para o  $C_{60}$  sólido mostra um bom acordo entre teoria e experiência. No topo os processos de foto-emissão e foto-emissão inversa estão representados esquematicamente.

(13) W. I. F. David *Et. al.*, *Nature (London)* **353**, 147 (1991).

(14) J. H. Weaver, J. L. Martins, T. Komeda, Y. Chen, T. R. Ohno, G. H. Kroll, N. Troullier, R. E. Hautler, e R. E. Smalley, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 1741-1744 (1991). M. B. Jost, N. Troullier, D. M. Poirier, J. L. Martins, J. M. Weaver, L. P. F. Chibante, e R. E. Smalley, *Phys. Rev. B-Rapid Commun.* **44**, 1966-1969 (1991). J. L. Martins, N. Troullier, e J. H. Weaver, *Chem. Phys. Lett.* **180**, 457-460 (1991).

(15) O processo de foto-emissão ocorre quando um fóton incidente sobre uma superfície arranca um electrão. Medindo a energia do fóton incidente e a energia dos electrão emitido deduz-se a energia que o electrão tinha antes de ser arrancado (energia inicial). A intensidade de electrões emitidos com uma dada energia depende do número de que têm a energia inicial apropriada. No processo de foto-emissão inversa um electrão incidente numa superfície emite um fóton. A intensidade de fótons emitidos depende do número de estados electrónicos disponíveis para a transição. A densidade de estados teórica mostra o número de estados electrónicos existentes a uma dada energia, de acordo com uma solução aproximada da equação de Schrödinger para os electrões do sólido.

acordo com os resultados experimentais, o que permite uma identificação dos vários picos presentes no espectro electrónico. A estrutura electrónica do  $C_{60}$  está intimamente ligada à sua forma esférica. Os electrões de valência estão concentrados na superfície da esfera (Fig. 5), e as suas funções de onda exibem uma semelhança com as funções harmónicas esféricas, particularmente no que diz respeito à topologia das respectivas linhas nodais. Isto permite uma indexação das funções de onda. Por exemplo, o orbital vazio de mais baixa energia, é um orbital de tipo  $\pi$ , de degenerescência três, que se assemelha a uma harmónica esférica de momento angular  $l = 5$ .

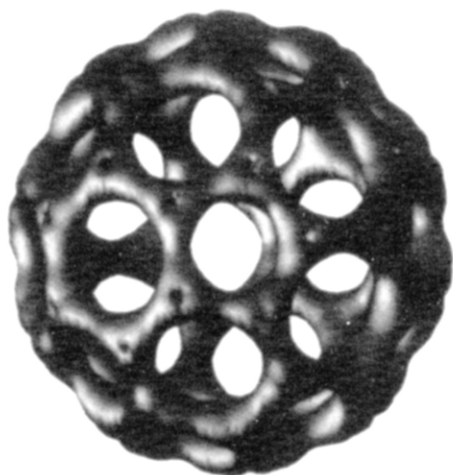


Fig. 5 — A superfície de igual densidade de electrões de valência do  $C_{60}$  obtida teoricamente mostra uma grande semelhança com a figura 2. As zonas de maior densidade de electrões estão no interior dessa superfície.

### Ligas do $C_{60}$ com metais alcalinos

Uma das descobertas que gerou mais interesse sobre os fullerenos foi a observação em cristais de  $C_{60}$  com metais alcalinos de supercondutividade (16) com temperaturas críticas que atingem  $T_c = 31.3$  K para o  $Rb_2CsC_{60}$ . Esta temperatura é cerca de 50% superior às temperaturas críticas obtidas para as ligas intermetálicas e só é superada pela família dos óxidos de «alta temperatura» à qual pertence o  $YBa_2Cu_3O_7$ .

No  $C_{60}$  sólido, as moléculas formam um empilhamento compacto. Devido ao grande tamanho da

molécula os interstícios que restam nessas estruturas são suficientemente grandes para acomodar íons de átomos alcalinos. O número e tipo de átomos encontrados nesses sítios intersticiais depende do raio iónico do metal alcalino e do tamanho do sítio intersticial. Para um ião pequeno como o sódio chegam a formar-se fases como o  $Na_{11}C_{60}$ . Para íons maiores como o potássio ou o rubídio é possível introduzir um máximo de seis átomos alcalinos por cada molécula do  $C_{60}$ . A ligação química entre os átomos alcalinos e o  $C_{60}$  é do tipo iónico, sendo o electrão de valência do átomo alcalino transferido para as moléculas de  $C_{60}$  (17). Como o orbital vazio de mais baixa energia do  $C_{60}$  é três vezes degenerado, este fica completamente ocupado nos compostos de tipo  $A_6C_{60}$ , e estes são isolantes. Por enquanto, o comportamento metálico foi apenas observado para os compostos alcalinos do  $C_{60}$  de composição  $A_3C_{60}$ , são estes compostos os que apresentam supercondutividade a temperaturas relativamente altas. (A supercondutividade foi também observada na liga alcalino-terrosa  $Ca_5C_{60}$ ).

O recobrimento entre os orbitais de condução do  $C_{60}$  centrados em moléculas diferentes é pequeno, pelo que os efeitos de correlação electrónicos são bastante fortes. Isto revela-se no carácter isolante dos compostos  $A_4C_{60}$ , e na largura demasiado grande da banda de condução do  $K_3C_{60}$  observada em espectroscopia de foto-emissão (18). As características e consequências desta forte correlação electrónica são ainda matéria de acesso debate.

### Mecanismo da supercondutividade nos fulleritos alcalinos

Como a temperatura crítica para a ocorrência da supercondutividade é bastante alta nas ligas do  $C_{60}$  com metais alcalinos,  $T_c = 19$  K no  $K_3C_{60}$ ,  $T_c = 31$  K para o  $Rb_2CsC_{60}$ , podemos perguntar se o mecanismo responsável pela supercondutividade é o tradicional de interacção entre electrões e fónons, ou se estamos em presença de um novo mecanismo. Esta é a mesma questão que foi feita após a descoberta da supercondutividade a alta temperatura nos óxidos de cobre e que ainda não teve uma resposta definitiva. No caso dos compostos do  $C_{60}$  a evidência até à data parece indicar que estamos na

(16) A. F. Hebard *et al.*, Nature (london) **350**, 600 (1991).

(17) P. Benning, J. L. Martins, J. H. Weaver, L. P. F. Chibante, e R. E. Smalley, Science, **252**, 1417-1419 (1991).

(18) P. J. Benning, F. Stepniak, D. M. Poirier, J. L. Martins, J. H. Weaver, L. P. F. Chibante, e R. E. Smalley, Phys. Rev. B (em publicação).

presença do mecanismo tradicional de formação de pares de electrões de Cooper pela interacção dos electrões com as vibrações internas das moléculas do  $C_{60}$ . No entanto ainda é cedo para chegar a uma conclusão definitiva.

Do ponto de vista teórico, o valor da temperatura crítica para a supercondutividade pode ser aproximadamente escrita como  $T_c \approx \Theta \exp(-1/(\lambda - \mu^*))$ , onde  $\Theta$  é a temperatura de Debye, e  $\lambda$  e  $\mu^*$  são dois parâmetros sem dimensões que medem, respectivamente, a magnitude da interacção atractiva electrão-fonão e a repulsão Coulombiana efectiva (isto é, blindada) entre electrões. Nos compostos do  $C_{60}$  a temperatura de Debye que mede a energia de vibração dos fonões é bastante alta,  $\Theta \approx 1100$  K, porque os átomos de carbono são leves e as ligações químicas fortes. É esta alta frequência de vibração que dá origem à alta temperatura de supercondutividade. Os valores calculados para os outros parâmetros,  $\lambda \approx 0,5$  e  $\mu^* \approx 0,15$ , são típicos dos valores encontrados noutros supercondutores.

As indicações de que o mecanismo de supercondutividade é devido à interacção entre electrões e fonões são as seguintes: O efeito isotópico foi observado para a substituição do carbono, e tem a magnitude esperada para um supercondutor que é descrito pelos parâmetros  $\lambda \approx 0,5$  e  $\mu^* \approx 0,15$ . Foi observado que a temperatura crítica  $T_c$  é aproximadamente linear na constante de rede do composto  $A_3C_{60}$ , este efeito é facilmente explicado por teorias que fazem participar as vibrações da molécula do  $C_{60}$ , mas não por outras teorias. Algumas linhas Raman encontradas nos compostos  $A_6C_{60}$  e  $C_{60}$  desaparecem no composto  $A_3C_{60}$ , o que é o comportamento esperado se a largura dessas linhas é aumentada significativamente pela interacção dessas vibrações com os electrões de condução.

Se o mecanismo responsável pela supercondutividade é tradicional, então muitos dos parâmetros e aproximações utilizados na sua descrição teórica encontram-se perto dos limites de validade da teoria. As ligas dos metais alcalinos com o  $C_{60}$  seriam então sistemas óptimos para testar experimentalmente os limites de validade das teorias tradicionais da supercondutividade.

### Aplicações

Embora a supercondutividade dos compostos alcalinos com o  $C_{60}$  seja uma das suas propriedades físicas mais interessantes, estes compostos reagem fortemente com o oxigénio e portanto será difícil encontrar quem queira utilizar um supercondutor que arde espontaneamente. No entanto se considerarmos que as

outras duas formas de carbono cristalino, a grafite e o diamante, têm grandes aplicações industriais (sem falar nas potenciais aplicações do diamante se ele fosse barato) será de estranhar que o  $C_{60}$  não venha a ser útil a breve prazo. Tem-se especulado bastante sobre as suas possíveis aplicações tecnológicas: por exemplo o  $C_{60}$  poderia ser um óptimo lubrificante, um rolamento de esferas molecular, mas tal não foi confirmado. Outra sugestão é que a alta estabilidade do  $C_{60}$  torna-o um bom candidato para ser utilizada em motores iónicos para foguetões.

É no campo da química que deveremos esperar as mais importantes aplicações desta nova forma de carbono. Desde que o  $C_{60}$  começou a ser produzido em quantidades macroscópicas já se aprendeu a modificá-lo, de modo a que possa ser utilizado como mais um grupo funcional de química orgânica. Os mais optimistas comparam o  $C_{60}$  ao benzeno e prevêm uma riqueza da química dos fullerenos semelhante à dos compostos aromáticos. Uma propriedade única do  $C_{60}$  é que um átomo que seja colocado no interior da gaiola (nos compostos alcalinos os iões estão entre as gaiolas) fica isolado quimicamente do exterior. Isto poderia ser extremamente útil em medicina para introduzir metais pesados no corpo humano com pequenos riscos de que venham a ser metabolizados. Embora já se tenha produzido quantidades macroscópicas de La no interior de  $C_{84}$ , o progresso nesta direcção tem sido difícil, mas há esperança de que se possa vir a manipular o  $C_{60}$  de modo a introduzir vários tipos de átomos no seu interior, aumentando consideravelmente o número de compostos derivados do  $C_{60}$ .

### Conclusão

A actividade de investigação desenvolvida após a síntese em quantidades macroscópicas de  $C_{60}$  tem sido recompensada com a descoberta de novas formas de carbono e com a observação das suas propriedades surpreendentes. Tudo leva a crer que esta actividade continuará a ser frutífera e que esta nova forma de carbono encontrará aplicações tecnológicas interessantes.

*Nota* — Artigos de interesse geral sobre os fullerenos podem ser encontradas no *Scientific American* de Outubro de 1991, e nos *Physics Today* de Novembro de 1991 e Novembro de 1992.