

» Theorie zur Entstehung der kugelförmigen Fullerene bestätigt

Aus flach wird rund

Obwohl die fussballartigen Moleküle aus Kohlenstoffatomen schon seit Jahrzehnten bekannt sind, birgt ihre Entstehung noch immer Rätsel. Während einige Forscher davon ausgingen, dass die Bildung eines Fullerenes auf Molekülebene anfängt und immer mehr Bausteine hinzukommen, deuteten andere Beobachtungen darauf hin, dass grössere Strukturen aus vielen Kohlenstoffatomen wie beispielsweise Graphen in kleinere zerlegt werden. Diese «Top-Down»-Theorie konnten amerikanische Wissenschaftler jetzt auf molekularer Ebene bestätigen.

» Sabine Goldhahn

Sphärische Fullerene wie beispielsweise das 60 Kohlenstoffatome enthaltende Buckminster-Fulleren bestehen aus zwölf Fünfecken und einer variablen Anzahl von Kohlenstoff-Sechsecken. Durch diese Konfiguration erhalten sie ihre runde Form und sehen aus wie ballförmige Käfige. Sie haben viele Eigenschaften, die für Forschung und Industrie von Interesse sind. So gehen sie mit vielen anderen Atomen Verbindungen ein und eignen sich als Katalysatoren für chemische Reaktionen. Zudem ist ihre Struktur ideal, um fremde Atome in den «Kohlenstoff-Käfig» einzusperren, um beispielsweise Supraleiter oder Medikamente herzustellen. Auch für die Solarindustrie und die Optoelektronik sind sie potenziell von Interesse. Doch bislang waren ihre Einsatzmöglichkeiten begrenzt, da man noch

nicht einmal sicher wusste, wie sie überhaupt entstehen.

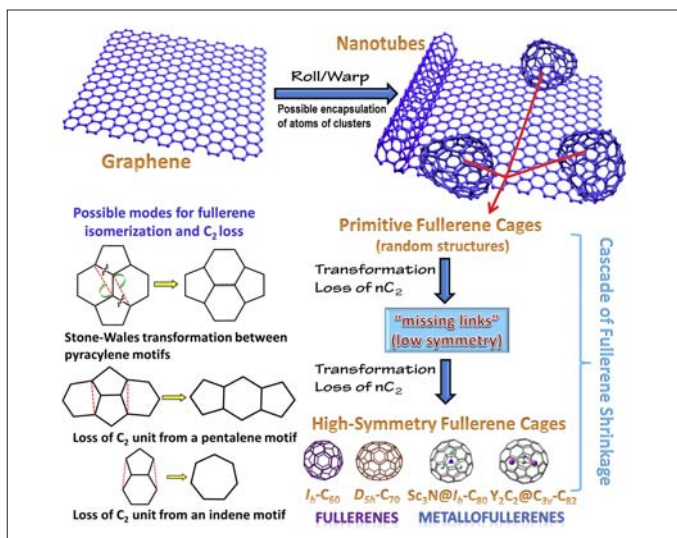
So könnten die Kohlenstoff-Käfige entsprechend der sogenannten «Bottom-up»-Theorie Molekül für Molekül aufgebaut werden, indem immer wieder neue C_2 -Einheiten hinzukommen. Neuere Forschungen hingegen sprechen dafür, dass der Aufbau der Kohlenstoff-Kugeln genau andersherum verläuft. Sie werden geformt, indem grosse Fullerene Kohlenstoffatome verlieren und dadurch schrumpfen. Grosse Strukturen aus Kohlenstoff werden damit in Einzelteile zerlegt.

«Eingesperrtes» Kontrastmittel ist vielversprechend

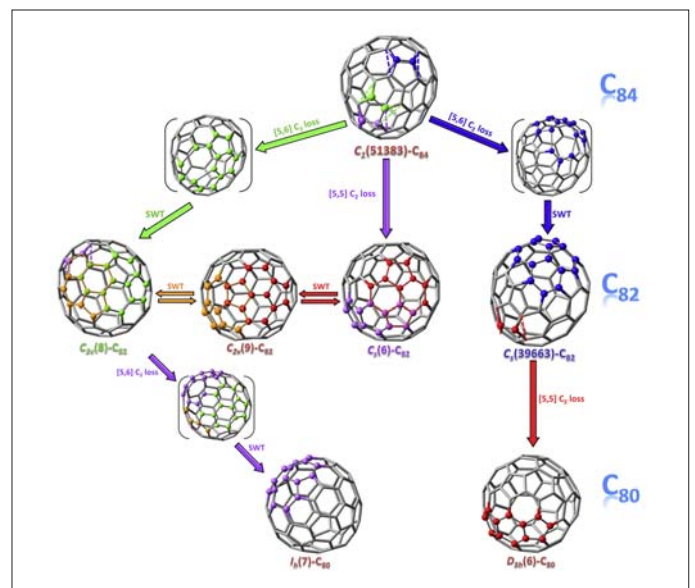
«Dass wir endlich die molekularen Mechanismen verstehen, wie Fullerene und ihre vielen Formen gebildet werden, ist nicht

nur von rein wissenschaftlichem Interesse», unterstreicht Harry Dorn vom Virginia Tech Carilion Research Institute in Roanoke, dessen Spezialgebiet Metallofullerene sind – sphärische Kohlenstoffe, in die Metallatome eingeschlossen sind. «Wir erlangen auch ein besseres Verständnis, wie man Fullerene herstellen kann.»

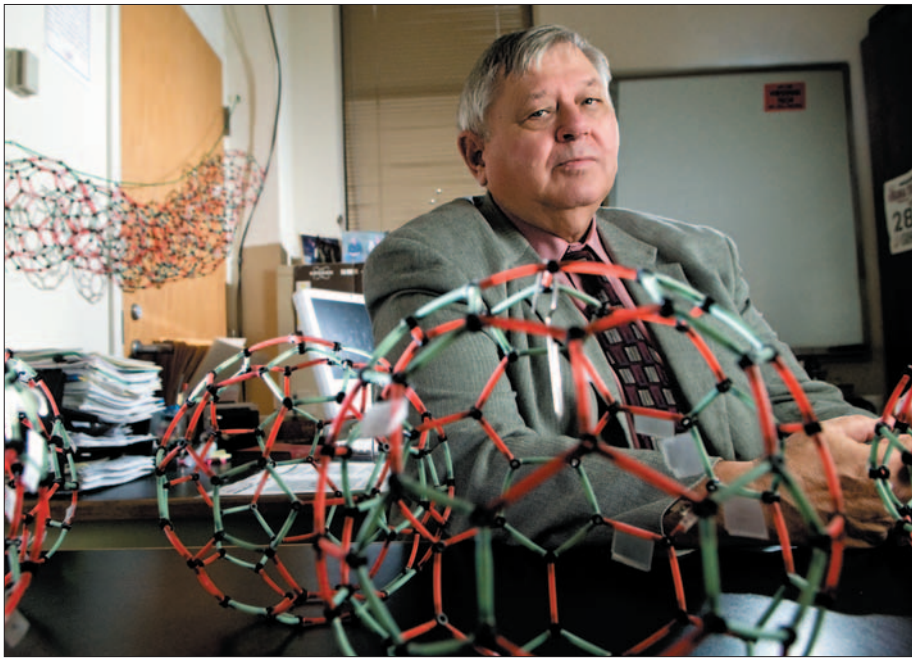
Fullerene und Metallofullerene werden schon heute in zahlreichen biomedizinischen Studien untersucht. Für medizinische Anwendungen versprechen sich Fachleute besonders viel, denn die Metallatome können nicht mit ihrer Umgebung reagieren, weil sie in die Kohlenstoffkäfige eingeschlossen sind. Dadurch wird das Risiko für Nebenwirkungen verringert. Ein Beispiel hierfür ist unter anderem das Kontrastmittel Gadolinium, das man häufig für magnetresonanztomografische Untersuchungen in



Die Entstehung von Fullerenen nach der «Top-Down»-Theorie. Zunächst wird Graphen in andere Nanostrukturen umgewandelt. Aus grossen, asymmetrisch geformten Fullerenen entstehen durch Verlust von Kohlenstoffmolekülen die symmetrischen Kohlenstoff-Käfige.



Überblick über die strukturelle Neuordnung der Fullerene, angefangen mit dem Kohlenstoff-Käfig $C_1(51383)-C_{84}$



Harry Dorn vom Virginia Tech Carilion Research Institute vor dem Modell eines Kohlenstoff-Fussballs.

der Medizin verwendet. Eingeschlossen in einen Käfig aus Kohlenstoffatomen sei es in der medizinischen MR-Tomografie bis zu vierzigmal effektiver als in herkömmlicher Form, berichtet das Virginia Tech Institute. Aber auch auf die Krebstherapie mit Metallofullerenen setzt man Hoffnungen. Denn umschlossen von einem Kohlenstoffkäfig könnte man radioaktive Substanzen zur Therapie besser in das betroffene Gewebe schleusen, ohne dass andere Organe in Mitleidenschaft gezogen werden.

Bruch von Molekülbindungen bringt Stabilität

Der amerikanischen Forschergruppe ist es jetzt gelungen, die Entstehung der kugelförmigen Fullerene genauer zu erklären. Mittels NMR-Spektroskopie und Einkristall-Röntgenstrukturanalyse fanden Dorn und seine Kollegen heraus, dass asymmetrisch geformte Fullerene kollabieren können und sich dabei in symmetrische und stabile Fullerene umwandeln. Die untersuchten Metallofullerene ($M_2C_2@C_1(51383)-C_{84}$ bestanden aus 84 Kohlenstoffatomen mit je zwei im Käfig eingeschlossenen zusätzlichen Kohlenstoff- und Metallatomen (Yttrium bzw. Gadolinium). Bei ihren Experimenten entdeckten Dorn und sein Team, dass nur ein paar Molekülbindungen brechen müssen, um den stabilen symmetrischen Zu-

stand zu erreichen. Das bestätigt den Forschern zufolge die Theorie, dass Fullerene aus einem Graphenfilm entstehen können, wenn sie sich durch Bindungsbruch zu symmetrischen Molekülen umorganisieren.

Quellen: *Nature Chemistry*,
Virginia Tech University

Originalpublikation

J Zhang et al.,
«A missing link in the transformation from asymmetric to symmetric metallofullerene cages implies a top-down fullerene formation mechanism», *Nat Chem* 5(10), 880–885 (2013)

Kontakt

Prof. Harry C. Dorn
Virginia Tech Carilion Research Institute
Roanoke/Virginia
USA
hdorn@vtc.vt.edu
<http://research.vtc.vt.edu/employees/harry-dorn/>



Reinraumsysteme

Von der Planung bis zur Qualifizierung

- innovativ
- modular
- wirtschaftlich

SCHILLING
ENGINEERING

Industrial Handling

Cleanroom Systems

SCHILLING ENGINEERING

Dorfstrasse 60
CH-8219 Trasadingen
Tel. +41 (0) 52 / 212 789-0
www.SchillingEngineering.ch

