

A three-shell supramolecular complex enables the symmetry-mismatched chemo- and regioselective bis-functionalization of C₆₀

Nat. Chem. 2021 13, 420-427. <https://doi.org/10.1038/s41557-021-00658-6>

Ubasart, E., Borodin, O., Fuertes-Espinosa, C.

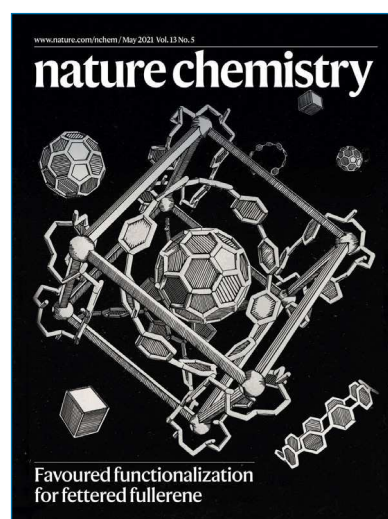
Youzhi Xu, Cristina García-Simón, Laura Gómez, Judith Juanhuix, Felipe Gándara, Inhar Imaz, Daniel MasPOCH, Max von Delius and Xavi Ribas

Una muñeca rusa molecular permite la síntesis exclusiva de bis-aductos de fullerenos de manera regioselectiva

En el marco del proyecto de tesis del doctorando Ernest Ubasart, hemos diseñado un complejo supramolecular de tres capas (C₆₀⊂[10]CPP⊂nanocapsula) para conseguir la funcionalización regioselectiva del C₆₀ y formar exclusivamente el isómero *trans*-3 de bis-aductos en ciclopropanaciones tipo Bingel. El trabajo se ha publicado en el número de mayo 2021 de la revista *Nature Chemistry*.

Nuestro grupo de investigación QBIS-CAT ha estado trabajando en nanocápsulas supramoleculares durante casi una década. En 2014, diseñamos una nanocápsula prismática tetragonal capaz de encapsular los fullerenos de C₆₀ a C₈₄. Este fue el comienzo de una fructífera historia a lo largo de estos años sobre el estudio de la química en el espacio confinado de las nanocápsulas, con especial interés en la purificación de fullerenos y metalofullerenos endoédricos (EMF). Más recientemente en 2020, las nanocápsulas supramoleculares se utilizaron como máscaras para la formación regioselectiva de tetraquis-aductos en el cinturón ecuatorial. Este fue un hito en el campo y nos impulsó a continuar la investigación de la estrategia de la máscara supramolecular.

En colaboración con el grupo del Dr. Max von Delius (Universidad de Ulm, Alemania) aunamos esfuerzos para sofisticar el sistema y combinar la estrategia de máscaras supramoleculares con anillos de cicloparafenilenos ([10]CPP). Así, divisamos la encapsulación de C₆₀@[10]CPP en una nanocápsula más grande y la funcionalización regioselectiva del C₆₀. Sintetizamos el complejo ternario tipo Matryoshka, y seguidamente observamos una regioselectividad exquisita de la ciclopropanación Bingel para bis-aductos *trans*-3 de C₆₀. Se obtuvieron buenos monocristales tanto de la Matryoshka sin reaccionar como del *trans*-3 bis-aducto-Matryoshka y logramos su difracción en el Sin-crotrón ALBA de Barcelona, gracias a la colaboración con el grupo del Prof. D. MasPOCH (ICN2) y del Dr. F. Gándara (CSIC-Madrid). Los datos cristalográficos fueron cruciales para comprender la reactividad precisa en dos enlaces [6,6] específicos de la esfera C₆₀, que dan exclusivamente el isómero *trans*-3 de bis-aductos en ciclopropanaciones tipo Bingel.



El conocimiento sobre cómo controlar la funcionalización regioselectiva de los fullerenos obtenidos con este nuevo sistema supramolecular, similar a las “muñecas rusas”, puede conducir a la implementación de los derivados puros de fullerenos en una amplia gama de dispositivos electrónicos y fotovoltaicos.

El artículo ha merecido la portada de la revista *Nature Chemistry* en su número de mayo 2021 (imagen).

Este hallazgo ha sido destacado en la revista *C&EN*, como se puede ver en este enlace:

<https://cen.acs.org/materials/nanomaterials/Nested-nanostructures-direct-fullerene-functionalization/99/i14>

El artículo es:

Ubasart, E., Borodin, O., Fuertes-Espinosa, C. Youzhi Xu, Cristina García-Simón, Laura Gómez, Judith Juanhuix, Felipe Gándara, Inhar Imaz, Daniel MasPOCH, Max von Delius and Xavi Ribas. A three-shell supramolecular complex enables the symmetry-mismatched chemo- and regioselective bis-functionalization of C₆₀. *Nat. Chem.* 2021 13, 420-427. DOI: 10.1038/s41557-021-00658-6.

Los artículos reseñados en esta sección deben dirigirse directamente al editor: sierraor@ucm.es

El Comité Editorial de *Anales de Química* seleccionará las reseñas para su publicación