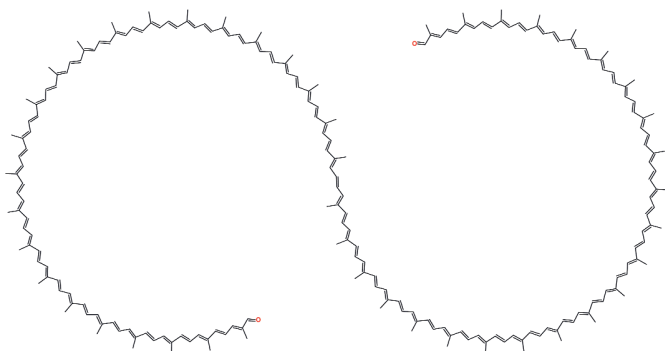




Végtelen történet a kémiában: az infinitén

Az elmúlt szűk tíz évben egymástól függetlenül két olyan molekulát is leírtak a szakirodalomban, amelyre az infinitén nevet javasolták a cikk szerzői. A névben az -én végződés a sok kettős kötést tartalmazó telítetlen szénhidrogén-szerkezetre utal, az „infinit” viszont nem a végtelen sok atomra, hanem arra, hogy a molekula geometriája a matematikában elterjedt ∞ jelle emlékeztet.

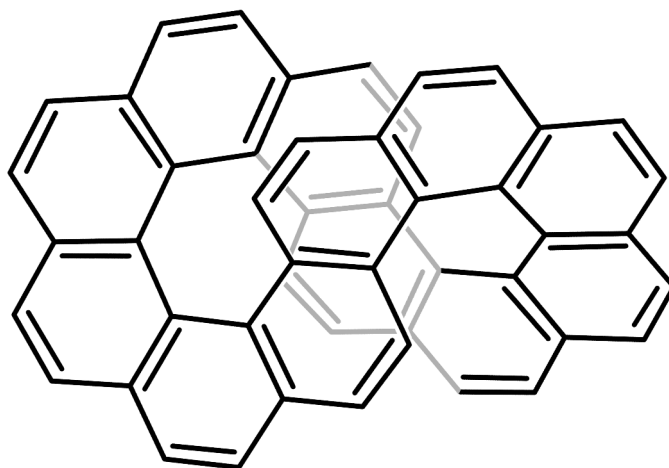
Az első ilyen munkában (Comput. Theor. Chem. 2018, 1125, 133–141) az elméleti számításokkal jellemzett molekula 46 izoprénegységből állt, s kiterjedt konjugált kettős kötési rendszert tartalmazott. A számításokat megalapozó, többféle kísérlettel is alátámasztott szerkezeti megfigyelés az volt, hogy a kisebb, de hasonló szerkezetű molekulákban a konjugáció nagy pontossággal egy síkban tartja a szénatomokat, de a kötésszögeket nem rögzíti teljesen az sp^2 -es hibridizációra várt 120° -os értékre. Egy izoprénegység így általában 13° -ot fordít a szénlánc tengelyén, így 28 egységből kört lehet elképzelni. Ha két, 23 egységet tartalmazó, forgó tengelyű szénláncot éppen egymással szemben kapcsolnak össze, akkor az elméleti várakozások szerint az ábrán bemutatott alakú molekula keletkezik. Ennek a két vége aldehidcsoporttal van lezárva, így az összegképlet $C_{230}H_{276}O_2$.



Az idézett cikk fő érdeklődési területe az ilyen típusú, egyre kiterjedtebb konjugációt tartalmazó láncok UV-látható tartományban tapasztalt elnyelési sajátságai voltak. Az eredmények szerint a lánc hossz növekedésével az elnyelési maximum eltolódása a nagyobb hullámhosszak felé felülről korlátos, a becslések szerint 615 nm-es határértékhez tart. A $C_{230}H_{276}O_2$ molekulaképletű, sík alkatú infinitén egy nagyjából $8,1 \times 4,2$ nm-es téglalapra férne rá, a láncban 136 és 146 pm hosszúságú szén-szén kötések váltják egymást.

A másik, ∞ jel alakú molekula 12 kondenzált benzolgyűrűből áll, összegképlete $C_{48}H_{24}$ (J. Am. Chem. Soc. 2022, 144, 862–871), szabályos neve ciklo[c.c.c.c.c.c.e.e.e.e.e.e]-dodekakiszbenzol. Ezt a molekulát megfelelő szintézisfolyamat kidolgozásával sikerült előállítani is, és szerkezetét röntgenkristallográfiai módszerrel meg tudták határozni.

A szerkezeti adatok szerint a két, egymással leginkább szemben, fedő helyzetben lévő és közel párhuzamos síkot alkotó benzolgyűrű középpontjának távolsága mintegy 320 pm. A molekula



helikális kiralitást mutat, enantiomerjeinek elválasztása is sikerült királis oszlopot használó nagy nyomású folyadékkromatográfia segítségével. Benne a legrövidebb szén-szén kötés hossza 133,4 pm, a leghosszabbé 148,4 pm.

Lente Gábor

WILEY-VCH

 **Chemistry Europe**
European Chemical Societies Publishing

What if your Chemistry research received 2x the citations and 3x the amount of downloads?



Submit your paper today.


www.chemistry-europe.org