

Különleges formák szénatomokból vagy azok hidrogénnel képzett vegyületeiből

Bara Gabriella

vegyész MSc hallgató, Debreceni Egyetem.

Seprényi Kinga

középiskolai tanár, Medgyessy Ferenc Gimnázium,
Művészeti Szakgimnázium és Technikum,

Udvardy Antal

vegyész, egyetemi adjunktus, TTK Fizikai Kémiai Tanszék, Debreceni Egyetem

Absztrakt: A szén – mint a földi élet alapeleme – rendkívüli sokfélesége számos izgalmas allotróp módosulat, és különleges szerkezetű molekula kialakulását teszi lehetővé. A tanulmány bemutat néhány természetes és mesterséges szénallotrópot, valamint olyan figyelemre méltó szénhidrogéneket, amelyek háromdimenziós szerkezete ismert geometriai alakzatokra vagy akár matematikai szimbólumokra emlékeztet. A tanulmány elején röviden ismertetjük a molekulaszerkezetek meghatározásához alkalmazott legfontosabb modern nagyműszeres módszereket. Az írásunk célja a kémia vizuális, kreatív és interdiszciplináris oldalának bemutatása a különlegességek iránt érdeklődő nagyközönség számára is.

Kulcsszavak: allotróp, fullerén, kémia, Möbius-szalag, szerkezet, szén

Abstract: The extraordinary diversity of carbon, as the fundamental element of life on Earth, enables the formation of numerous fascinating allotropes and molecules with unusual structural architectures. This paper presents selected natural and artificial/synthetic carbon allotropes, as well as remarkable hydrocarbons whose three-dimensional structures resemble well-known geometric shapes or even mathematical symbols. First in this study, the most important modern instrumental techniques used for molecular structure determination are briefly introduced. The aim of this study was to highlight the visual, creative and interdisciplinary aspects of chemistry for a broader interested audience.

Keywords: allotrope, chemistry, carbon, fullerene, Möbius strip, structure

A kémia a modern életünk alapja. Minden, amit megeszünk, megérintünk, belélegzünk vagy érzékelünk, valamilyen kémiai folyamat eredménye. A kávé reggel, a gyógyszer, amit beveszünk, a tisztítószer, de még az is, hogy hogyan fő meg a tojás, vagy sül meg a hús – mind-mind a kémián múlik. Így bátran mondhatjuk, hogy a kémia – a fizikával és a matematikával – segít megérteni a mindennapi világunk működését.

A kémia sokak számára azonban elsősorban hosszú és unalmas absztrakt képletek, reakcióegyenletek és bonyolult fogalmak halmazának tűnik. Ugyanakkor a molekulák világa meglepően vizuális: az atomok térbeli elrendeződései gyakran jól ismert geometriai alakzatokra, matematikai szimbólumokra vagy hétköznapi tárgyakra emlékeztetnek. Ezeknek a formáknak a különlegessége szerkezetük fizikai és kémiai tulajdonságainak köszönhető. Jelen tanulmány célja, hogy a szén allotróp módosulatain és különleges szerkezetű szénhidrogénekben keresztül bemutassa a kémia kreatív oldalát, miközben betekintést nyújt a molekulaszervezetek meghatározásának modern módszereibe is.

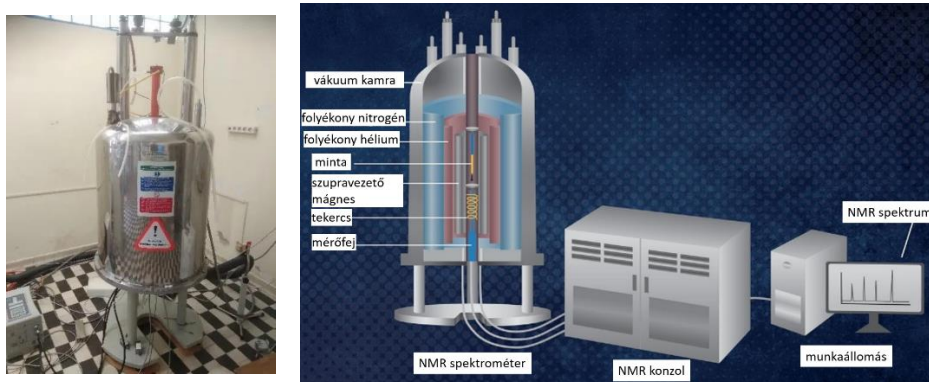
A dolgozat egyes részei a Magyar Kémikusok Lapja 2025 karácsonyi számában jelentek meg (Udvardy 2025).

Modern szerkezet-meghatározó módszerek

A vegyületek szerkezetének megismeréséhez modern szerkezetvizsgáló módszereket kell alkalmaznunk. Ezek közül a legfontosabbak a mágneses magrezonancia spektroszkópia (NMR) és az egykristály röntgendiffrakciós szerkezet-meghatározás, melyekről később részletesebben írunk. Az anyagunk elemösszetételére következtethetünk elemanalízis mérésekkel vagy tömegspektrometriás módszerekkel is.

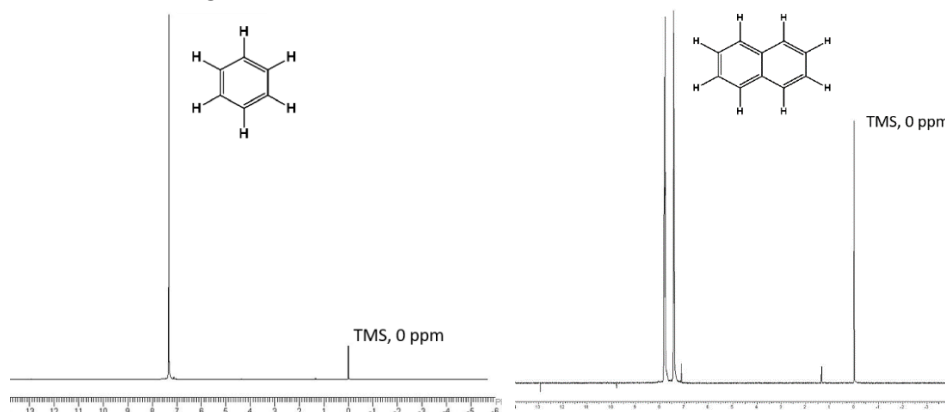
Az előállított új anyagok pontos szerkezetének felderítése mellett elengedhetetlen tisztaságuk ellenőrzése is. A szerves kémiában elterjedt a vegyületek olvadáspontjának meghatározása, amellyel arra következtethetünk, hogy valóban csak a kívánt terméket állítottuk elő. A tiszta anyagok éles, szűk tartományban olvadnak meg, míg a szennyezett anyagok szélesebb, elnyúlt hőmérséklet-tartományban, részletekben válnak folyékonnyá.

A mágneses magrezonancia spektroszkópia (Nuclear Magnetic Resonance, NMR) a molekulák szerkezetének meghatározására szolgáló, rendkívül érzékeny módszer. Az eljárás alapja, hogy bizonyos atommagok – például ^1H -, ^{13}C -, ^{15}N - vagy ^{31}P – külső mágneses térbe helyezve energiát nyelnek el, amikor rádiófrekvenciás sugárzással gerjesztjük őket. A Debreceni Egyetem Kémiai Intézetében található 400 MHz-es NMR készüléket az 1. ábrán láthatjuk.



1. ábra: A Bruker Avance I 400 MHz (Debreceni Egyetem) és a készülék vázlatos felépítése

A keletkező rádiófrekvenciás jel (rezonancia) függ a vizsgált mag kémiai környezetétől, így az NMR spektrum információt ad a kémiai kötések típusáról, a szomszédos atomokról és a molekula térszerkezetéről (2. ábra). Az NMR spektroszkópia kiemelkedően hasznos a szerves vegyületek, fémkomplexek és fehérjék szerkezetének meghatározásában is.



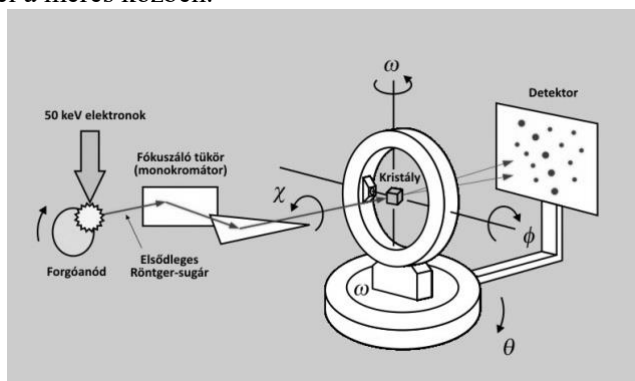
2. ábra: A benzol és a naftalin ^1H -NMR spektrumai
forrás: Sigma-Aldrich Co. LLC.

(Spectral Data were obtained from John Wiley & Sons, Inc.)

Az NMR és az MRI (Mágneses Rezonanciás Képző) ugyanazon a fizikai jelenségen alapul, amely során az atommagok erős mágneses térben rádiófrekvenciás jeleket bocsátanak ki. A fő különbség az alkalmazásban rejlik: míg az NMR-t elsősorban kémikusok használják molekulaszervezetek meghatározására, addig az MRI orvosi diagnosztikai eszköz, amely térbeli képet alkot a test belső lágy szöveteiről. Érdekesség, hogy az eljárást eredetileg NMRI-nek hívták, de a „nukleáris” jelzőt a negatív csengése miatt elhagyták az orvosi gyakorlatban, hogy ne ijessék meg a pácienseket.

Az anyagok pontos belső szerkezetét, vagyis azt, hogy az atomok hogyan helyezkednek el bennük – kapcsolódnak egymáshoz –, egykristály röntgendiffrakciós módszerrel (angolul: *Single Crystal X-ray Diffraction*) határozhatjuk meg. A 3. ábra egyszerűsítve mutatja be egy diffraktométer elvét. Szükségünk van egy jó minőségű egykristályra az adott anyagból, és sugárforrásként röntgensöveket alkalmazunk. Az egykristály tökéletesen rendezett belső szerkezetű, ami azt jelenti, hogy minden irányban folytonos rácsszerkezetű, amely általában 0,1–0,4 mm nagyságú. Fontos, hogy a minta ne legyen repedezett vagy ikerkristályos, mivel csak a hibátlan és tiszta egykristály képes olyan éles reflexiókat produkálni, amelyekből a molekula pontos, háromdimenziós atomi szerkezete, így a kötéshosszak és -szögek is meghatározhatók. A jó minőségű egykristályok növesztése már-már igazi művészet, és csak tökéletesen tiszta anyagokból lehetséges. Ezért nagyon fontos az anyagok tisztaságának ellenőrzése is.

Az egykristályt négy irányba (ω , χ , ϕ , θ) forgatjuk a nagyon érzékeny goniométerrel a mérés közben.



3. ábra: Röntgensugarak diffrakciója egykristályon, goniométeres elrendezésben és képalkotó detektorral

Forrás: <https://www2.sci.u-szeged.hu/inorg/MOMA/ch07s03.html> (Letöltve: 2025.03.18.)

A röntgensugarak a kristályrácsra „elhajlanak”, és így alakul ki a szórás kép, amelyet általában egy CCD-kamera rögzít. A felvett diffrakciós képből a szilárd fázisú szerkezet meghatározható. Hatalmas segítség ez az új anyagok, pl. gyógyszerek fejlesztésében a többi modern szerkezetvizsgáló módszerrel együtt (Bényei – Harmat 2012).

Az egykristály röntgendiffrakciós módszerrel meghatározott molekulaszerveket a Cambridge Egyetem által létrehozott CSD adatbázisban tárolhatjuk, amelyben 1965 óta kb. 1,41 millió szerkezetet helyeztek el a kutatók. A CSD-ben könnyedén kereshetünk a szerkezetek között is (Groom 2016). A tanulmányban bemutatott vegyületek szerkezeteit a Mercury programmal készítettük el.

A következő módszerrel pedig lefényképezhetjük a vegyületeinket. Az atomerő-mikroszkópia (Atomic Force Microscopy, AFM) olyan vizsgálati módszer, amellyel rendkívül apró, akár atomi méretű felszíni részleteket lehet „letapogatni”. A Debreceni Egyetemen elérhető egykristály röntgen diffraktométer, több NMR, valamint AFM készülék is.

Természetesen több hatékony nagyműszeres eljárás is ismert a vegyületeink szerkezetének meghatározásához, de jelen íráshoz a fentiek rövid bemutatása elegendő lesz.

A szén „klasszikus” allotróp módosulatai

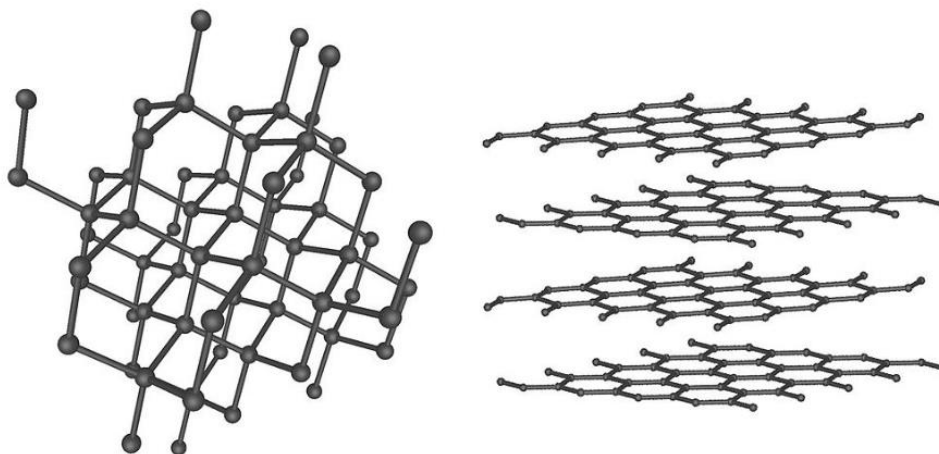
Az emberiség évszázadok (sőt évezredek) óta ismeri a szén „klasszikus” módosulatait, a gyémántot, a grafitot és az amorf szenet. A gyémántról már kisgyerekkorban is hallhattunk *A kis kakas gyémánt félkrajcárja* című meséből, amelyből 1951-ben vetítették le az első magyar, színes rajz-mesefilmet (Filmtett 2002). A középiskolai tanulmányainkban többször előkerült a gyémánt, nemcsak kémiából vagy fizikából, hanem magyar irodalomból is. Jókai Mór – a legmagyarabb író – egyik ismert ipari-társadalmi regénye a *Fekete gyémántok* (1870), amely egy tehetséges bányamérnök küzdelmén keresztül mutatja be a szénbányászat világát. A regény főszereplője Berend Iván, aki természettudósként bebizonyítja, hogy a grófnő gyémántja „ezernyi szikrát szórt a megsemmisítésére törő napsugárkatlanban”, és nem maradt meg a „drága kétkaratos briliánt”-ból semmi (Jókai, *Fekete gyémántok*, 1870).

A gyémánt tehát szénatomokból épül fel, és ez az egyetlen drágakő, amely egy elemből áll. A gyémánt a szén egy természetes allotróp módosulata. (Az allotrópia azt jelenti, hogy ugyanaz az elem azonos halmazállapotban többféle kristályszerkezettel előfordulhat, ezekben a módosulatokban az atomok elrendeződése eltérő. Ez hatással van a módosulatok fizikai és kémiai tulajdonságaira.) A szabályos gyémántrácsot (atomrács) a tetraéderes szénatomok kovalens kötéssel kapcsolják össze (4. ábra).

A gyémánt ipari felhasználása is jelentős, mivel a természetben előforduló anyagok közül a harmadik legkeményebb. Érdekes, hogy csiszolása is csak saját porával valósítható meg. Az elmúlt években mesterséges körülmények között is előállították a gyémántot nagy nyomáson és hőmérsékleten az úgynevezett HPHT-eljárással (high pressure–high temperature) legtöbbször tiszta grafitból. A gyémántnál keményebb, természetben is előforduló anyag a lonsdaleit, amely a Földön nagyon ritka, természetes szén allotróp (hexagonális gyémánt).

Ugyancsak a szén egyik „klasszikus” módosulata a grafit, amelyet hasonlóan a gyémánthoz mesterségesen is előállíthatunk (4. ábra). (Beck 1996) Míg a gyémánt nagyon kemény, addig a grafit olyan „puha”, hogy írhatunk is vele. A grafit esetében ez azzal magyarázható, hogy réteges kristályszerkezetű módosulat. A szénatomok a grafitban hatszöges hálózatot alkotnak (hasonló formájú, mint a

méhsejt), ahol az atomok kovalens kötással kapcsolódnak egymáshoz egy-egy síkon belül (4. ábra). Ezek a síkok azonban egymáshoz képest csak gyenge kölcsönhatásokkal kapcsolódnak, így könnyen elválhatnak egymástól. Így magyarázhatjuk a grafittal való írást is, ugyanis a ceruza hegye és a papír közötti súrlódás hatására ezek a rétegek könnyen elcsúsznak és elválnak egymástól. A leváló, vékony grafitrészek rátapadnak a papír érdes felületére, így ott sötét nyomot hagynak, azaz írunk vagy rajzolunk a grafitceruzával. Az iparban is kihasználhatjuk ezt a réteges szerkezetet, ugyanis ezért jó elektromos vezető és kenőanyag a grafit. Már a neolitikumban használták festékekben a kerámiák díszítésére.



4. ábra: A gyémánt (atomrács) és a grafit szerkezete (molekularács)

A kristályos módosulatok mellett megemlíthetjük még az amorf szént is, pl. a kokszot, kormot vagy a faszent.

A szén mesterséges allotróp módosulatai

A szén mesterségesen előállított allotróp módosulatai a fullerének. Az első képviselőjük a focilabdára emlékeztető (üreges, gömbszerű vegyület) C_{60} volt, amelynek angol elnevezése buckminsterfullerene (az amerikai építész R. Buckminster Fuller után, akinek geodéziai kupolája ezen a szerkezeti elven alapul) vagy egyszerűen csak footballene. Zárt, poliéderes szerkezete 12 öt-, és 20 hatszög alakú gyűrűből áll (6. ábra, a focilabda). A C_{60} felfedezése előtt csak a gyémántot és a grafitot ismertük pontosan definiált szénallotrópként.



5. ábra: A C_{60} szén-diszulfidos oldata

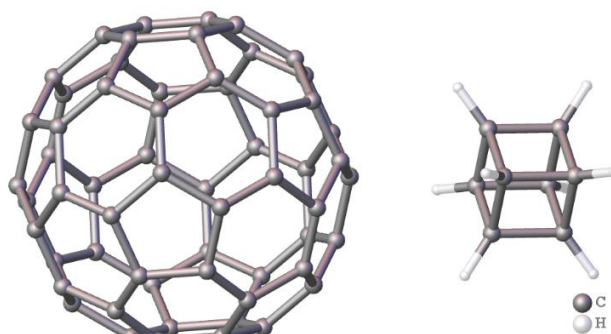
A „focilabda”, amely fekete-koromra hasonlító por, sajátos halványlila színnel oldódik pl. szén-diszulfidban (5. ábra). Érdekes, hogy a fullerének – a C_{70}

oldata vöröses-barna –, szemben a szén többi allotróp módosulatával oldódnak egyszerű szerves oldószerekben (toluol, szén-diszulfid, diklórmetán).

A fullerének előállításáért és jellemzéséért Kroto, Curl és Smalley kémiai Nobel-díjat kaptak 1996-ban. A C_{60} előállításáról, névadásának történetéről és a 40 évvel ezelőtti felfedezés részleteiről a Magyar Kémikusok Lapja 2025. szeptemberi számában emlékeztek meg (Hargittai 2025 és Hargittai B. – Hargittai I. 2025).

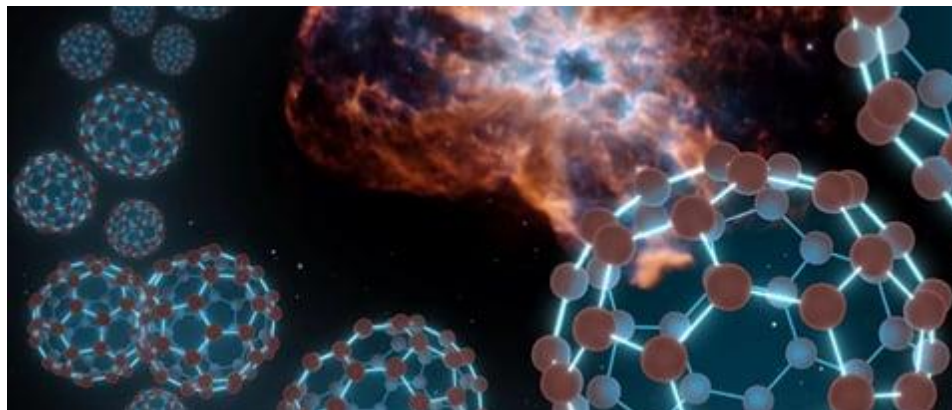
Mivel ezeket a vegyületeket fel tudjuk oldani, így egykristály röntgendiffrakcióra alkalmas kristályokat is tudunk belőlük növeszteni. A CSD adatbázisban több C_{60} szerkezetet is találunk, azonban legtöbbjük geometria bizonytalansága nagy. Ez a „labdák” folyamatos forgása miatt van. Ezt úgy küszöbölhetjük ki, hogy vagy alacsony hőmérsékleten kell végezni a diffrakciós adatok gyűjtését, vagy még célravezetőbb valamilyen segédanyaggal összekristályosítani; szerencsére a fullerének több szerves anyaggal is képeznek kokristályokat (olyan szilárd anyag, amely két vagy több különböző molekulából áll).

A HUN-REN Wigner Intézetében kristályosították össze a C_{60} -at és a kocka szerkezetű kubánt (C_8H_8) (6. ábra).



6. ábra: A C_{60} és a kubán szerkezete
(Bortel 2020)

Természetesen az itt bemutatott példán kívül is több kutató határozott meg C_{60} -szerkezeteket, sőt beszámoltak a vegyületcsalád különböző változatairól is. A világűrben is kimutatták néhány képviselőjüket (C_{60} és C_{70}) a Spitzer Űrteleszkóppal (Cami 2010).



7. ábra: Fullerének a világűrben

forrás: NASA/JPL-CALTECH HUBBLE IMAGE CREDIT: NASA, ESA, STSCI

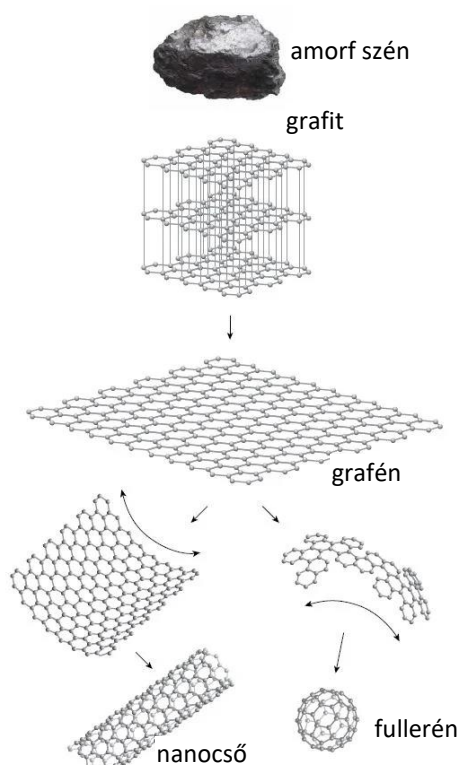
Mielőtt rátérnénk a szénnanocsövek bemutatására, lényeges megemlíteni a grafént is. Ez nem más, mint a szén nanoszerkezetű allotróp módosulata, egy egyetlen atom vastagságú grafitréteg. Természetesen a grafithez hasonlóan ezt is méhsejtszerű (hatszög) elrendezésben álló szénatomok alkotják. A grafén egy végtelen kiterjedésű aromás óriásmolekulának tekinthető, amely a legvékonyabb és a legerősebb „szénháló”. Fontos, hogy a grafittal ellentétben a grafénnek nem háromdimenziós a szerkezete.

A grafént ötletesen állította elő Geim és Novoselov (Manchesteri Egyetem), oly módon, hogy a grafitból egy speciális ragasztóval „szedte le” a grafén-síkokat. A felfedezésük és a kétdimenziós grafénnel kapcsolatos úttörő kísérleteik 2010-ben fizikai Nobel-díjat értek (8. ábra). A grafén és származékai rendkívüli mechanikai, elektromos (a szilícium kiváltására alkalmazhatják a félvezetőkben) és hővezetési tulajdonságokkal (jobb hővezető minden ismert anyagnál) rendelkeznek. Ezek miatt a nanotechnológia és az anyagtudomány egyik legígéretesebb anyaga.

A szénnanocsövek (carbon nanotubes, CNTs) hosszú, belül üres, henger alakú szerkezetek, amelyek formálisan a grafénlapokból „gömbülnek” össze (8. ábra), és az emberi hajszálnál négy nagyságrenddel vékonyabbak. Ezeket a csöveket egy atomnyi vastagságú grafénréteg alkotja, és lehetnek egy- vagy többrétegű hengerek. Ezeket a CNT-ket is tekinthetjük a szén mesterséges allotróp módosulatainak. film

A nanocsövek rendkívül erősek és rugalmasak, miközben nagyon könnyűek. Elektronikai tulajdonságaik a szerkezetüktől függően lehetnek fémes vagy félvezető jellegűek. Jó hővezetők a hosszirányban, azonban a keresztirányú hővezetésük csekély. Kémiai szempontból stabilisak, de bizonyos vegyületekkel funkcionálizálhatók, így például gyógyszerhordozóként is használhatók.

A nanocsövek nanoelektronikai eszközök, érzékelők és kompozitanyagok fejlesztésében kapnak szerepet. Laboratóriumban állítják elő őket kémiai gőzfázisos vagy ív-kisüléses módszerekkel. A geometria miatt a nanocsöveknek nagyon nagy a felület/térfogat aránya, ami hasznos a katalízisben és az energiatárolásban. Kutatások folynak annak érdekében is, hogy a CNT-ket rugalmasságuk és vezetőképességük miatt a jövőbeni hajlékony elektronikai eszközökben hasznosítsák.



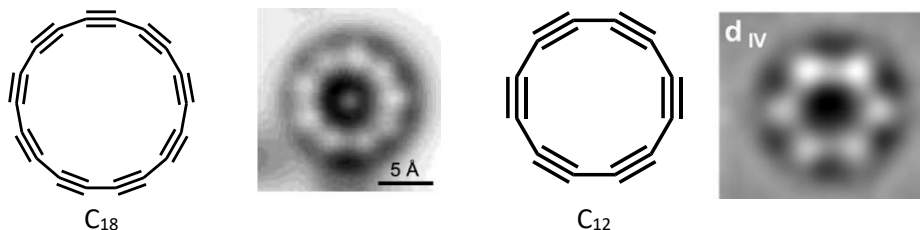
8. ábra: Az amorf széntől a C₆₀-ig
forrás: The Nobel Prize in Physics 2010

ugyanakkor nagy reakcióképességű „molekuláris szenet” eredményez. A ciklo[C₁₈]szén felfedezése azért jelentős, mert a grafít, a gyémánt és a fullerének után ez egy új, stabil allotróp módosulata a szénnek, amely a jövő „molekuláris elektronikájának” építőköve lehet (Anderson – Gross 2020). A ciklo[C₁₈]szén után még a ciklo[C_n]szén n=6, 10, 12, 14, 16 vegyületeket is előállították, és le is „fényképezték” őket.

A fullerének és a szénnanocsövek számos érdekes fizikai jelenséget mutatnak: bizonyos fématomokkal komplexet képezve, például szupravezető tulajdonságú vegyületek állíthatók elő. Emellett az anyagtudományban (pl. fotoaktív réteg felhasználása napelemekben), a nanotechnológiában (szénnanocsövek), és a biomedicinában is kiemelt kutatási területet jelentenek mind a mai napig, többek között a célzott gyógyszerhordozás lehetősége miatt.

A fullerének és szénnanocsövek felépítéséről további részleteket is olvashatnak a Kürti Jenő és Koltai János jegyzetében (Kürti – Koltai 2013).

A ciklo[C₁₈]szén a szén egyik legújabb, 2019-ben kísérletileg is igazolt allotróp módosulata, amely egy 18 szénatomból álló, gyűrű alakú molekula. Különlegessége a belső szerkezetében rejlik: a kutatások szerint váltakozó egyes és hármas kötések alkotják a gyűrűt (az AFM felvétele mutatja), ami egy rendkívül stabilis, de

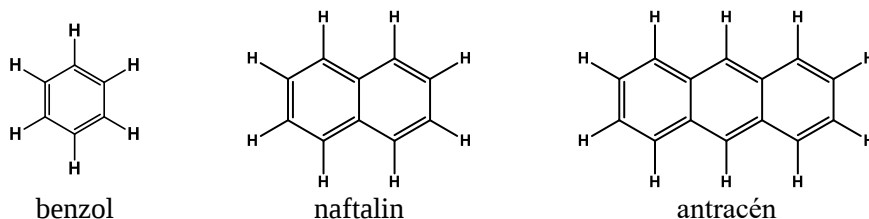


9. ábra: A ciklo[C₁₈]szén és ciklo[C₁₂]szén szerkezete és AFM felvétele

A tanulmány első részében láthattunk olyan szén allotróp módosulatokat, amelyek tetraéderekből épültek fel, hatszögekből felépülő síkokat (ezek töltik ki legjobban a síkot), kör, henger vagy akár focilabdára hasonlító anyagokat. A következő részben a „hatszög” lesz a főszereplő.

Izgalmas szerkezetű szénhidrogének

A benzol szerkezetét és képletét (C₆H₆) sokan felismerik középiskolai tanulmányaikból, és ez a jól ismert molekula, a „hatszög” számos további vegyület „építőköve”. Benzolgyűrűkből áll a naftalin is, amelyet molyirtásra is használunk, a vegyület könnyen szublimál, így jellegzetes szagát távolról is érezzük. Az antracénben – nevét a görög szén szóból eredeztetjük – három benzolgyűrű kapcsolódik össze (10. ábra). Az antracént szerves félvezetőkben használják.

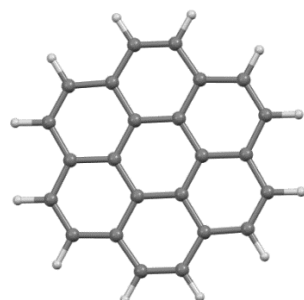


10. ábra: A benzol és néhány származéka

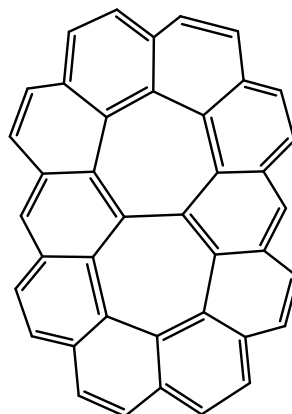
A benzolhoz hasonlóan síkalkatú koronén vagy más néven a szuperbenzol (C₂₄H₁₂, 11. ábra), hét kondenzált benzolgyűrűből áll (Fawcett – Trotter 1966). A sárga színű vegyület érdekessége, hogy a természetben is megtalálható a karpát-ásványban.

A vörös színű dikoronilén (C₄₈H₂₄, benzo[1,2,3-bc:4,5,6-b'c']dikoronilén, 11. ábra, Goddard 1995) a kőolajfeldolgozás során alkalmazott katalitikus hidrokraakolás melléktermékeként jelenik meg. (A hidrokraakolás ipari eljárás, amely nagy molekulatömegű szénhidrogének elegyének hidrogén jelenlétében végzett katalitikus lebontására szolgál.) A dikoronilén feltehetően két koronén molekula kondenzációja során keletkezik. Óvatos becslések szerint a hidrokraakolás során évente több száz tonna dikoronilént termelnek világszerte. A vegyületnek ismert a molekulászerkezete (sík alkatú), és a kedvező fizikai-kémiai tulajdonságai miatt az elválasztás-technikai alkalmazhatóságát kutatják.

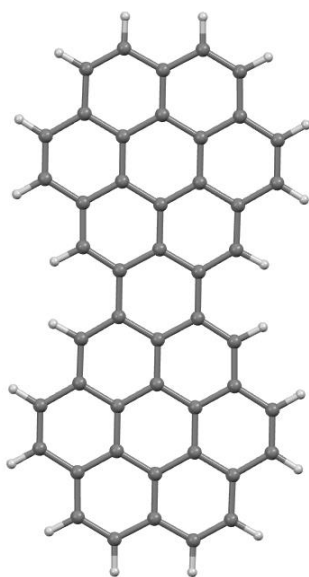
Tíz benzolgyűrű „összekapcsolásával” épül fel a [7.7]cirkulén, amely nyolcas alakú (11. ábra). A vegyület előállítása meglehetősen bonyolult, többlépéses folyamat; a szintetikus kémia eljárásainak egész tárházát kell felhasználni – különösen ötletes megoldások szükségesek, a 8-alak közepén látható kötés kialakításához. A tiszta állapotban sárga vegyület meglehetősen stabil (Yamamoto 1991). A tisztán előállított [7.7]cirkulén képződését ^1H és ^{13}C NMR mérésekkel igazolták, de a feltételezhetően nyereg alakú molekulákat nem vizsgálták egykristály röntgendiffrakciós módszerrel.



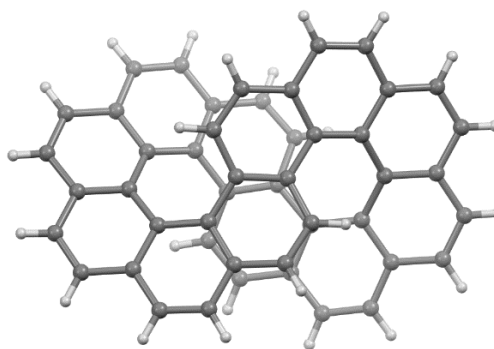
koronén



[7.7]cirkulén, a 8-as alakú szerkezet

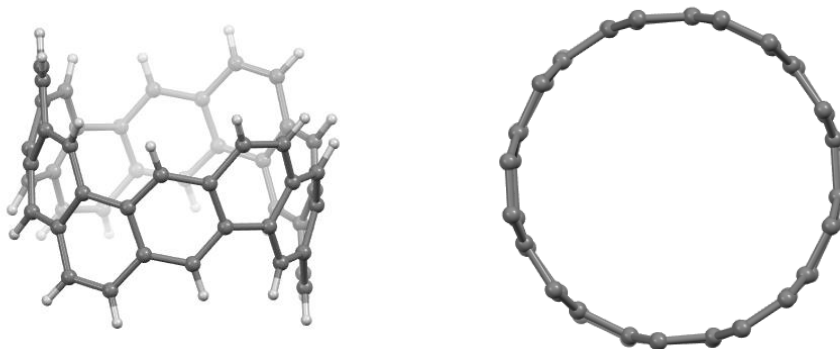


dikoronilén

infinite, ∞ **11. ábra:** További szénhidrogének

A matematikában használatos ∞ alakú molekulává kondenzálódhat 12 benzolgyűrű, az infinitén ($C_{48}H_{24}$, a Staab–Vögtle–Diederich nevezéktan szerinti nevén: ciklo[c.c.c.c.c.c.c.e.e.e.e.e.e]-dodekakiszbenzol). A Nagoya Egyetem (Japán) kutatói az infinitén vegyület szilárd fázisú szerkezetét is meghatározták (11. ábra) (Krzeszewski – Ito – Itami 2022). Az infiniténről és rokon vegyületeiről további érdekességeket találhatnak a *Magyar Kémikusok Lapjának* 2025. nyári számában (Lente 2025).

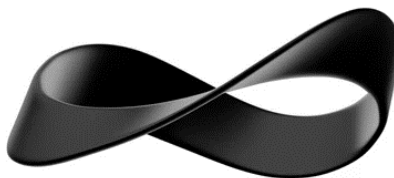
A fenti molekulával megegyező összegképletű [6,6]szén nanobelt (szénnanoöv, $C_{48}H_{24}$, ciklo[c.d.e.d.c.d.e.d.c.d.e.d]-dodekakiszbenzol) ugyancsak Itami és munkatársai állították elő (12. ábra). Ez a nagy „gyűrű” 12 benzojegységből (hat-szögből) áll, és az infiniténhez hasonlóan a szerkezetét is meghatározták egykristály röntgen diffrakciós módszerrel (Povie 2017). A hulahoppkarikához hasonlító nanoöv „építőeleme” lehet molekuláris gépeknek, főleg azért, mert ezek a vegyületek könnyen módosíthatók reaktív csoportokkal, így még nagyobb egységeket is tervezhetünk velük.



12. ábra: A [6,6]szén nanoöv szerkezete
(A rendezetlen oldószermolekulákat nem tüntettem fel.)

A Möbius-szalagszerű szénhidrogének

Sheldon Cooper, az *Agymenők* (*The Big Bang Theory*) című sorozat kultikus elméleti fizikusa is többször beszél a matematikából ismert Möbius-szalagról. A tanulmányunk következő részében nézzünk meg olyan molekulákat, amelyek erre az alakzatra hasonlítanak.



13. ábra: Egy Möbius-szalag

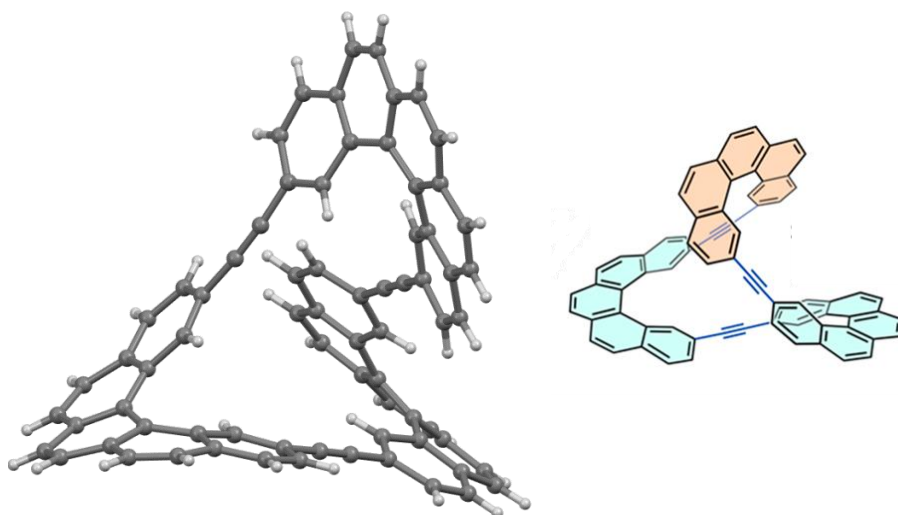
A Möbius-szalag egy különleges, egészen meglepő geometriai forma. Könnyen elkészíthetjük úgy, hogy egy papírcsík egyik végét félfordulattal megcsavarjuk (180°), majd összeragasztjuk a másik végével. Az így kapott szalagnak meglepő módon csak egy oldala és egy éle van. Ezért a Möbius-szalag ellentmond a hétköznapi tapasztalatainknak, hiszen a legtöbb tárgynak két oldala van – ennek viszont csak egy.

A művészetben is inspirációt jelent ez a forma, ugyanis különleges formájú ékszereket és műtárgyakat hívhat életre. A Möbius-szalagot felismerhetjük a következő szimbólumokban és épületben is:



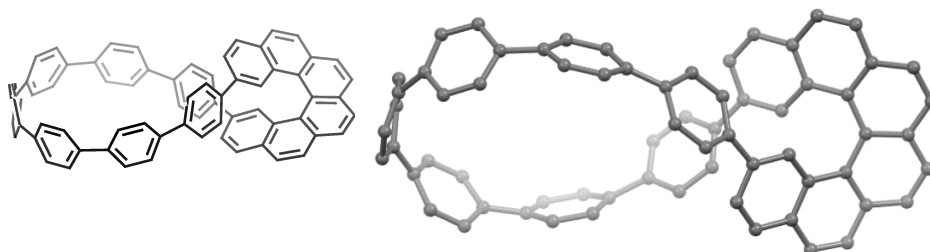
14. ábra: Az újrahasznosítás nemzeti jelképe; a Google Drive (2012-2016), Möbius-szalagszobor EGO3D, a NASCAR Hall of Fame and Museum, Charlotte, North Carolina (US) (forrás: architype.net)

A Möbius-szerű molekulák előállítását jelentős kihívás a kémikusok számára, elsősorban a csavart makrociklusok miatt. 2020-ban Moore és munkatársai a 15. ábrán látható Möbius-szalag alakú trisz((etinil)[5]helicén) nanoszenhidrogénról számoltak be. A kémikusok az anyagot magas hozammal tudták előállítani – a soklépéses reakcióút közti termékeinek összetételét és szerkezetét modern módszerekkel ellenőrizték –, és a szerkezetét is sikerült meghatározniuk egykristály röntgen diffrakciós módszerrel (Jiang 2020).



15. ábra: A trisz((etinil)[5]helicén) szerkezete
(A rendezetlen oldószer-molekulákat nem tüntettem fel.)

Šolomek és munkatársai előállítottak egy Möbius-szalag-szerű konjugált szénvázat; vegyük észre, hogy ez is „hatszögekből” áll. A vegyület szerkezetét meghatározták NMR spektroszkópiai és röntgen diffrakciós módszerrel is (Malinčík 2022). Jól láthatjuk, hogy ez a szénhidrogén jelentősen különbözik a 12. ábrán bemutatott nanoövtől.



16. ábra: A Möbius-szalag szerkezete
(A rendezetlen oldószer-molekulákat nem tüntettem fel.)

Az elmúlt években számos Möbius-szalag-szerű vegyületet állítottak elő és jellemeztek a kutatók. Ezen a népszerű kutatási területen találkozhatunk oxigén-, nitrogén- vagy kénatomokat tartalmazó alakzatokkal is. Ezeknek a vegyületeknek a szintézise kulcsfontosságú a funkcionális anyagok fejlesztésében, az anyagtudományon belül a nanotechnológiában, az elektronikában, az optikában, valamint az orvosi biológiai alkalmazásokban.

Összefoglalás

A kémia nemcsak komoly tudomány, hanem tele van kreativitással és érdekes formákkal is. Ma már pontos módszerekkel tudjuk vizsgálni a molekulákat, egykristály röntgen diffrakcióval meg tudjuk határozni a pontos szerkezetüket, de ha nem sikerül kristályosítani a vegyületet, szerkezetét elméleti számolásokkal megjósolhatjuk. A röntgen diffrakciós szerkezet-meghatározás segítségével feltárulhat nagymolekuláink pontos háromdimenziós szerkezete, például az itt – a teljesség igénye nélkül – megemlített szénhidrogéneknek, fulleréneknek, Möbius-szalagszerű vegyületeknek, de a tanulmányban nem említett fehérjéknek is meghatározható a háromdimenziós szerkezete.

Az itt bemutatott anyagok nemcsak a tudomány fejlődését segítik, hanem megmutatják, hogy a kémia lehet látványos és inspiráló a laikus érdeklődők számára is.

Köszönetnyilvánítás:

A dolgozat megírása az RRF-2.3.1-21-2022-00009 azonosítószámú, Megújuló Energiák Nemzeti Laboratórium megnevezésű projekt a Széchenyi Terv Plusz program keretében, az Európai Unió Helyreállítási és Ellenállóképességi Eszközének támogatásával valósult meg. Bara Gabriella köszöni a Debreceni Egyetem Tehetséggondozó Programjának (DETEP) és a Hatvani István Szakkollégiumnak a támogatását.

Irodalom

- Anderson, Harry.L. – Gross, Leo., et al. (2020). „Synthesis of cyclo[18]carbon via debromination of $C_{18}Br_6$ ” *Journal of the American Chemical Society* 142(30), 12921–12924. <https://doi.org/10.1021/jacs.0c05033>
- Beck Mihály (1996). „Változatok egy elemre” *Természet Világa* 127(11), 482–485. <https://www.termvil.hu/archiv/tv9611/fulleren.html#6> (Letöltve: 2025.02.11.)
- Bényei Attila – Harmat Veronika (2012). Röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálat (Elektronikus jegyzet) <https://harmatv.web.elte.hu/Rontgendiffrakcio-jegyzet/Rontgendiffrakc-szerk-vizsg.pdf> (Letöltve: 2025.12.31.)
- Bortel, Gábor et al. (2020). „Recognition-Control and Host–Guest Interactions in High-Symmetry Cocrystals of Fullerenes with Cubane and Mesitylene” *Crystal Growth & Design* 20(6), 4169–4175. <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.0c00440>
- Cami, Jan et al. (2010). „Detection of C_{60} and C_{70} in a Young Planetary Nebula” *Science*, 329, 1180–1182. <https://doi.org/10.1126/science.1192035>
- Dilmaç, Alicia M. et al. (2017). „Propellanes—From a Chemical Curiosity to “Explosive” Materials and Natural Products” *Angewandte Chemie International Edition* 56, 5684–5718. <https://doi.org/10.1002/anie.201603951>
- Fawcett J.K –Trotter J. (1966). „The Crystal and Molecular Structure of Coronene” *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences* 289, 366–376. <https://doi.org/10.1098/rspa.1966.0017>

- Filmtett 2002 A magyar rajzfilmművészet, Az animációs film története 4/3.
<https://filmtett.ro/cikk/1439/az-animacios-film-tortenete-4-3> (letöltés 2026. 02. 06.)
- Goddard, Richard et al. (1995). „Crystallization of Large Planar Polycyclic Aromatic Hydrocarbons: The Molecular and Crystal Structures of Hexabenzob[bc,ef,hi,kl,no,qr]coronene and Benzo[1,2,3-bc:4,5,6-b'c']dicoronene” *Journal of the American Chemical Society* 117(1), 30–41. <https://doi.org/10.1021/ja00106a004>
- Groom, Colin. R. et al. (2016). „The Cambridge Structural Database” *Structural Science Crystal Engineering Materials* B72, 171–179.
<https://doi.org/10.1107/S2052520616003954>
- Hargittai Balázs – Hargittai István (2025). „A C₆₀ előállítása – képes megemlékezés” *Magyar Kémikusok Lapja* 9 273–275. <https://doi.org/10.24364/MKL.2025.09>
- Hargittai István (2025). „Buckminsterfullerén – mi van a név mögött?” *Magyar Kémikusok Lapja* 9, 270–272. <https://doi.org/10.24364/MKL.2025.09>
- Jiang, Xing et al. (2020). Kinetic Control in the Synthesis of a Möbius Tris((ethynyl)[5]-helicene) Macrocyclic Using Alkyne Metathesis *Journal of the American Chemical Society*, 142, 6493–6498. <https://doi.org/10.1021/jacs.0c01430>
- Krzeszewski, Maciej – Ito, Hideto – Itami Kenichiro (2022). „Infinitene: A Helically Twisted Figure-Eight [12]Circulene Topoisomer” *Journal of the American Chemical Society* 144(2), 862–871. <https://doi.org/10.1021/jacs.1c10807>
- Kürti Jenő – Koltai János (2013) Szén nanoszerkezetek: fullerének, szén nanocsövek (oktatási tananyag), ELTE TTK, <https://fizipedia.bme.hu/images/2/26/Szennano.pdf> (letöltés 2026. 02. 06.)
- Lente Gábor (2025). „Végtelen történet a kémiában: az infinitén” *Magyar Kémikusok Lapja* 7–8, 216. https://www.mkl.mke.org.hu/images/Dokumentumtar/2025/2025-julius/MKL_2025-julius-augusztus_LenteG_Vegtelen_tortenet.pdf (letöltés: 2025. 12. 31)
- Malinčík, Juray et al. (2020). Circularly Polarized Luminescence in a Möbius Helicene Carbon Nanohoop. *Angewandte Chemie International Edition* 61, e202208591. <https://doi.org/10.1002/anie.202208591>
- Povie, Guillaume et al. (2017). „Synthesis of a carbon nanobelt” *Science* 356, 172–175. <https://doi.org/10.1126/science.aam8158>
- Udvardy Antal (2025). „A molekulák játékos arca Kémia a fantázia határán”. *Magyar Kémikusok Lapja* 12, 354–359. <https://doi.org/10.24364/MKL.2025.12>
- Yamamoto, Koji et al. (1991). „[7.7]Circulene, a Molecule Shaped Like a Figure of Eight” *Angewandte Chemie International Edition* 30, 1173–1174. <https://doi.org/10.1002/anie.199111731>