

Angewandte Berichtigung



An Unusually Small Singlet–Triplet Gap in a Quinoidal 1,6-Methano[10]annulene Resulting from Baird's $4n$ π -Electron Triplet Stabilization

B. C. Streifel, J. L. Zafra, G. L. Espejo,
C. J. Gómez-García, J. Casado,*
J. D. Tovar* **5986–5991**

Angew. Chem. **2015**, *127*

DOI: 10.1002/ange.201500879

Bei weiteren Synthesestudien in Zusammenhang mit dem chinoiden Molekül TMTQ erkannten die Autoren, dass die NMR-Spektren ihrer neuen chinoiden Derivate mit den in Abbildung S7 und S8 der Hintergrundinformationen dieser Zuschrift gezeigten identisch waren. Die schlechte Löslichkeit von TMTQ und verwandten Verbindungen führte zu der Erkenntnis, dass eine Verunreinigung beobachtet worden war, die auf der Grundlage von Vergleichen mit einer authentischen Probe als Triphenylphosphinoxid identifiziert wurde. Diese Verunreinigung entsteht vermutlich durch Oxidation der Liganden von $[\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4]$, das als Katalysator in der Takahashi-Kupplung eingesetzt wurde.

Eine deutlich reinere TMTQ-Probe wurde mit einer anderen Pd-Quelle nach mehrfacher Säulenchromatographie erhalten. Neue Spektren für Abbildung S7 und S8 und deren Interpretation sind als Hintergrundinformationen zu dieser Berichtigung verfügbar. Die UV-Vis-NIR-Absorptionsspektren sowie die IR- und Raman-Spektren von neuerlich gereinigtem TMTQ sind identisch mit denen in der Originalzuschrift, abgesehen von einigen Unterschieden im Fingerprint-Bereich des IR-Spektrums (1000 – 700 cm^{-1}), die nicht entscheidend für die präsentierte Analyse sind. An den Ergebnissen und Rückschlüssen der Originalzuschrift ändert sich daher nichts.

Die Autoren bitten, dieses Versehen zu entschuldigen. Sie danken Prof. Michael M. Haley (University of Oregon), der früh Bedenken über die VT-NMR-Daten äußerte und eigene Daten bereitstellte.^[1] Justin R. DeFrancisco (Johns Hopkins) klärte die Ursache der Verunreinigung auf und sammelte die neuen VT-NMR-Daten.

[1] G. E. Rudebusch, J. L. Zafra, K. Jorner, K. Fukuda, J. L. Marshall, I. Arrechea-Marcos, G. L. Espejo, R. Ponce Ortiz, C. J. Gómez-García, L. N. Zakharov, M. Nakano, H. Ottosson, J. Casado, M. M. Haley, *Nature Chem.* **2016**, DOI: 10.1038/nchem.2518.