Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

Impact of Halogen Termination and Chain Length on π-Electron Conjugation and Vibrational Properties of Halogen-Terminated Polyynes

Autorzy

Simone Melesi

Pietro Marabotti

Alberto Milani

Bartłomiej Pigulski

Nurbey Gulia

Piotr Pińkowski

Sławomir Szafert

Mirella Del Zoppo

Chiara Castiglioni

Carlo S. Casari

Rok wydania

2024

Czasopismo

Journal of Physical Chemistry A

Numer woluminu

128

Strony

2703-2716

DOI

10.1021/acs.jpca.3c07915

Kolekcja

Naukowa

Streszczenie

We explored the optoelectronic and vibrational properties of a new class of halogen-terminated carbon atomic wires in the form of polyynes using UV–vis, infrared absorption, Raman spectroscopy, X-ray single-crystal diffraction, and DFT calculations. These polyynes terminate on one side with a cyanophenyl group and on the other side, with a halogen atom X (X = Cl, Br, I). We focus on the effect of different halogen terminations and increasing lengths (i.e., 4, 6, and 8 sp-carbon atoms) on the π-electron conjugation and the electronic structure of these systems. The variation in the sp-carbon chain length is more effective in tuning these features than changing the halogen end group, which instead leads to a variety of solid-state architectures. Shifts between the vibrational frequencies of samples in crystalline powders and in solution reflect intermolecular interactions. In particular, the presence of head-to-tail dimers in the crystals is responsible for the modulation of the charge density associated with the π-electron system, and this phenomenon is particularly important when strong I··· N halogen bonds occur.

Licencja otwartego dostępu

CC-BY

Licencja na prawach której można swobodnie kopiować, rozprowadzać, zmieniać i remiksować objęty prawem autorskim utwór (Utwór-przedmiot prawa autorskiego) pod warunkiem podania imienia i nazwiska autora utworu pierwotnego oraz źródła pochodzenia utworu.

Pełny tekst licencji:
https://creativecommons.org/licenses/by/3.0/pl/legalcode

Adres publiczny

http://dx.doi.org/10.1021/acs.jpca.3c07915

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Strona internetowa wydawcy

https://www.acs.org/content/acs/en.html

Plik został wygenerowany dnia 2026-11-05 06:16:06

Adres w repozytorium https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/VFEF7zK.