Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

Vibrational and nonlinear optical properties of amine-capped push-pull polyynes by infrared and Raman spectroscopy.

Autorzy

Pietro Marabotti

Alberto Milani

Andrea Lucotti

Luigi Brambilla

Matteo Tommasini

Chiara Castiglioni

Patrycja Męcik

Bartłomiej Pigulski

Sławomir Szafert

Carlo Spartaco Casari

Rok wydania

2021

Czasopismo

Carbon Trends

Numer woluminu

5

Strony

100115/1-100115/11

DOI

10.1016/j.cartre.2021.100115

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Streszczenie

The vibrational properties of a series of push-pull polyynes have been studied by infrared and Raman spectroscopy. Thesimultaneous activation of astrong infrared and Raman mode, i.e. the collective vibration of CC bonds of the sp carbon chain, highlightsthe effectiveness of a polyyne bridge in promoting charge transfer betweenthe electron donor(D)andacceptor(A)ends, thus suggesting that ad-hocfunctionalized polyynes are worth being explored as building blocks of organic materials with attractive first-order optical nonlinearity. The optical, electronic,and vibrational properties of these moleculeshave been investigated with the support of density functional theory calculations, as well as the electronic and vibrational first hyperpolarizabilities (β).The mid-low region of the IR spectra(800-1600 cm-1)has been analyzed in detail,searching for marker bands of the specific terminationsof the different sp carbon chainsthus achievinga complete vibrational characterization ofsp hybridized push-pull systems.

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/10.1016/j.cartre.2021.100115

Typ publikacji

Artykuł

Strona internetowa wydawcy

http://www.elsevier.com

Plik został wygenerowany dnia 2026-11-04 02:57:22

Adres w repozytorium https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/vsQOD67.