



Comment on “CCSD study of anharmonic Raman cross sections of fundamental, overtone, and combination transitions”

Submitted by Florent Rachet on Mon, 05/11/2015 - 12:02

Titre	Comment on “CCSD study of anharmonic Raman cross sections of fundamental, overtone, and combination transitions”
Type de publication	Article de revue
Auteur	Chrysos, Michel [1], Kremer, David [2]
Pays	Etats-Unis
Editeur	John Wiley & Sons
Ville	New-York
Type	Article scientifique dans une revue à comité de lecture
Année	2013
Langue	Anglais
Date	15/12/2013
Numéro	24
Pagination	2634-2636
Volume	113
Titre de la revue	International Journal of Quantum Chemistry
ISSN	1097-461X
Mots-clés	anharmonic effects [3], CCSD [4], CCSD(T) [5], contact transformation theory [6], Raman spectroscopy [7], spectral absolute intensities [8]
Résumé en anglais	Equations (36) and (37) in L. N. Vidal, P. A. M. Vazquez, <i>Int. J. Quantum Chem.</i> 2012, 112, 3205 are wrong. The agreement between theoretical and experimental Raman cross sections is greatly improved with use of the corrected expressions.
Notes	Voir aussi : L. N. Vidal and P. A. M. Vazquez, “CCSD study of anharmonic Raman cross sections of fundamental, overtone, and combination transitions,” <i>Int. J. Quantum Chem.</i> , vol. 112, no. 19, pp. 3205-3215, Oct. 2012. doi:10.1002/qua.24144 [9]
URL de la notice	http://okina.univ-angers.fr/publications/ua11193 [10]
DOI	10.1002/qua.24514 [11]
Titre abrégé	Int. J. Quantum Chem.

Liens

[1] <http://okina.univ-angers.fr/michel.chrysos/publications>

[2] <http://okina.univ-angers.fr/dkremer/publications>

[3] [http://okina.univ-angers.fr/publications?f\[keyword\]=18180](http://okina.univ-angers.fr/publications?f[keyword]=18180)

[4] [http://okina.univ-angers.fr/publications?f\[keyword\]=18182](http://okina.univ-angers.fr/publications?f[keyword]=18182)

[5] [http://okina.univ-angers.fr/publications?f\[keyword\]=18183](http://okina.univ-angers.fr/publications?f[keyword]=18183)

[6] [http://okina.univ-angers.fr/publications?f\[keyword\]=18181](http://okina.univ-angers.fr/publications?f[keyword]=18181)

- [7] [http://okina.univ-angers.fr/publications?f\[keyword\]=7281](http://okina.univ-angers.fr/publications?f[keyword]=7281)
- [8] [http://okina.univ-angers.fr/publications?f\[keyword\]=18179](http://okina.univ-angers.fr/publications?f[keyword]=18179)
- [9] <http://dx.doi.org/10.1002/qua.24144>
- [10] <http://okina.univ-angers.fr/publications/ua11193>
- [11] <http://dx.doi.org/10.1002/qua.24514>

Publié sur *Okina* (<http://okina.univ-angers.fr>)