

1. Record Nr.	UNINA9910346937203321
Autore	Rappoport Dmitrij
Titolo	Berechnung von Raman-Intensitäten mit zeitabhängiger Dichtefunktionaltheorie
Pubbl/distr/stampa	KIT Scientific Publishing, 2007
ISBN	1000007191
Descrizione fisica	1 online resource (81 p. p.)
Soggetti	Chemistry
Lingua di pubblicazione	Tedesco
Formato	Materiale a stampa
Livello bibliografico	Monografia
Sommario/riassunto	Die Raman-Schwingungsspektroskopie ist eine der führenden Charakterisierungsmethoden für chemische Konstitution und liefert wertvolle Beiträge zur Strukturaufklärung großer Moleküle. Die Interpretation experimenteller Raman-Spektren wird durch den Vergleich der theoretischen Vorhersagen für Schwingungsfrequenzen und Raman-Intensitäten mit experimentellen Daten ermöglicht. Diese Arbeit umfasst die Entwicklung, Implementierung und Validierung effizienter Verfahren zur Berechnung der Raman-Intensitäten im Rahmen der zeitabhängigen Dichtefunktionaltheorie (TDDFT). Die Verwendung analytischer Gradientenmethoden eröffnet den Weg zur simultanen Berechnung der Raman-Intensitäten aller Schwingungsmoden eines Moleküls innerhalb der Polarisierbarkeitstheorie. Die entwickelten Verfahren werden hinsichtlich ihrer Genauigkeit und ihres Rechenaufwandes untersucht und zur Interpretation der Raman-Spektren von Fullerenen eingesetzt.