

Besprechung am 19.11.2020

Übungsblatt 4

1) Übergangsdipolmoment

Überprüfen Sie, ob ein elektrischer Dipolübergang zwischen folgenden Wellenfunktionen stattfinden darf.

$$\psi_1(x) = x \cdot e^{-x^2} \quad \psi_2(x) = e^{-x^2} \quad \psi_3(x) = x^3 \cdot e^{-x^2}$$

2) Freiheitsgrade

Bestimmen Sie die Anzahl der Freiheitsgrade der folgenden Moleküle und geben Sie an, wie viele davon auf Translation, Rotation und Schwingung entfallen.

- a) H₂O
- b) CH₄
- c) Ca
- d) HCl
- e) Fulleren C₂₀

3) Symmetrieelemente von Molekülen

Charakterisieren Sie für jedes der folgenden Moleküle die Symmetrieelemente und bestimmen Sie die entsprechende Punktgruppe.

