Alexander Neuwirth, Übung12, NLPP, Wed Jan 16 00:07:21 CET 2019, Jim Bachmann

1)

a)

Autokorrelationsfunktionen: akf.pdf und gemittelt: makf.pdf
Schwingungsspektren: fakf.pdf und gemittelt: fmakf.pdf
Das Spektrum von der gemittelten Autokorrelationsfunktion ist deutlich glatter.

Die Peak Positionen sind in akf und makf gleich. Ein Vergleich mit der Literatur zeigt für die ersten deutlichsten peaks:

500cm-1 ~ L_1 librations 1500cm-1 ~ v_2 bend 22000cm-1 ~ av_1+bv_3; a+b=7 25000cm-1 ~ av_1+bv_3; a+b=8