

1)

a)

Visualisierung: data/wasser.mpg

Die Datei traj.xyz wurde getrimmt, sodass nur 2000 steps enthalten sind.
(ersten 21560 Zeilen)

Jedoch haben die Atome bei den verschiedenen mit "Step: 1" betitelten Steps verschiedene Positionen.

Geschwindigkeitautokorrelationsfunktion: images/akf.pdf

Schwingungsspektrum: images/spektrum.pdf

Die Peaks im H₂O-Einzelmolekül Spektrum sind deutlich stärker ausgeprägt, weshalb dieses in Abblidung images/spektrum.pdf durch 100 dividiert wurde.

An den Peakstellen des H₂O-Einzelmoleküls befindet sich immer auch ein Peak in dem Spektrum des flüssigen Wassers.

Des Weiteren hat das Wasser Spektrum deutlich mehr Peaks und ist chaotischer.

Grund hierfür ist die gegenseitige Wechselwirkung der Moleküle/Atome, welcher zur Folge hat das wesentlich mehr verscheidene Schwingungsmoden in den einzelnen Molekülen angeregt werden, aber auch zwei Moleküle können sich periodisch zueinander verhalten.

Der Diffusionskoeffizient nach Green-Kubo $D=1.665e-5$ lässt sich von a.u. in m^2/s umrechnen

$D=1.93e-9 m^2/s$

und liegt somit in der selben Größenordnung wie der Literaturwert für Wasser.

Der nach der Einstein-Formel beträgt (images/verschieb.pdf) $1.024e-5$ in a.u..

Also $D=1.19e-9 m^2/s$

Hierbei stimmt wieder die Größenordnung, jedoch ist der nach Green-Kubo berechnete deutlich näher am Literaturwert, obwohl nicht von 0 bis unendlich sondern lediglich bis 2000 a.u. integriert wurde.