

1)

a)

VMD Visualisierung: h2o.mpg

Autokorrelationsfunktionen: akf.pdf und gemittelt: makf.pdf

Aufgrund der Periodizität der AKF wird ein Schwingungsspektrum mit einigen deutlichen Peaks erwartet.

Schwingungsspektren: fakf.pdf und gemittelt: fmakf.pdf

Das Spektrum der gemittelten Autokorrelationsfunktion ist deutlich glatter.

Die deutlichsten Peak Positionen sind in den Fouriertransformationen von akf und makf gleich:

1550cm<sup>-1</sup>  
3550cm<sup>-1</sup>

Diese decken sich mit den Literaturwerten mit einer Abweichung von ca. 5%:

1645cm<sup>-1</sup> v<sub>2</sub> bend  
3490cm<sup>-1</sup> v<sub>3</sub> asymmetric stretch

Diese Schwingungsmoden sind auch in h2o.mpg erkenntlich.

Ein kleinerer Peak in fmakf\_zoom.pdf, der in fakf.pdf nicht deutlich von anderen kleinen Peaks unterscheidbar ist:

3650cm<sup>-1</sup> v<sub>1</sub> symmetric stretch für Isotopologues

Was ziemlich unwahrscheinlich scheint.

In der Tabelle "Main vibrations of liquid ordinary and heavy water" ist für H<sub>2</sub>O eine Frequenz mit Fußnote (d) angegeben. (d) erwähnt eine nicht dominante Frequenz von 3650cm<sup>-1</sup> aus dem Raman Spektrum.