

Anwendung von (Mathematica und) Matlab in der Physikalischen Chemie

1. Motivation Inhalte und Struktur des Kurses

Albert-Ludwigs-Universität Freiburg



**UNI
FREIBURG**

Dr. Till Biskup

Institut für Physikalische Chemie
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg
Wintersemester 2013/14

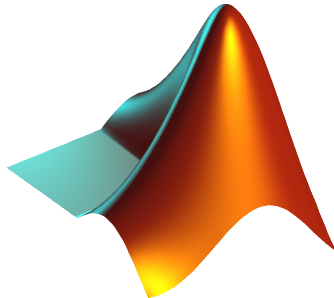
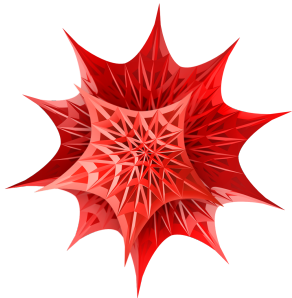
Motivation

- Warum ein Methodenkurs „Matlab in der PC“?
- Unterschiede zwischen Mathematica und Matlab
- Ein reales Beispiel

Inhalte und Struktur des Kurses

- Wie läuft der Methodenkurs ab?
- Inhalte
- Material

Methodenkurs „Anwendung von Mathematica und Matlab in der Physikalischen Chemie“



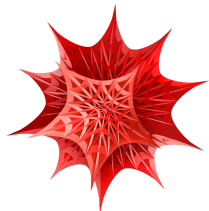
Anwendung von ... Matlab in der Physikalischen Chemie

- ▶ Anwendung
 - Matlab praktisch kennenlernen
 - Befähigung, Matlab in Eigenregie weiter zu verwenden
- ▶ Physikalische Chemie
 - Fragestellungen der Physikalischen Chemie im Fokus
 - Letztlich auf viele Fragestellungen anwendbar

Motivation zur Verwendung von Matlab

- ▶ Wir haben Daten gemessen und wollen diese Daten auswerten und (sinnvoll) darstellen.

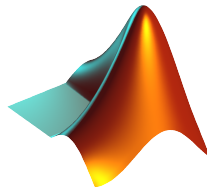
Mathematica



- ▶ (analytische) Lösungen komplexer Gleichungen
- ▶ Symbolische Mathematik

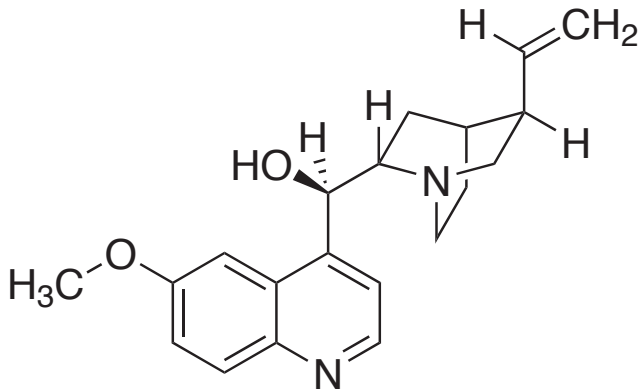
Matlab

- ▶ Datenverarbeitung
- ▶ Numerische Simulationen
- ▶ Komplexere Programmierungen



Motivation

Ein reales Beispiel



Ein reales Beispiel: Fluoreszenz-Versuch aus dem PCG

- ▶ Ausgangslage
 - Daten wurden alle gemessen
 - Daten liegen als Textdateien (ASCII) vor
- ▶ Zielstellung
 - Vollständige Auswertung gemäß Fragestellung
 - Abbildungen, die den Assistenten zufriedenstellen (und den wissenschaftlichen Standards entsprechen)
- ▶ Vorgehen
 - 1 Pflichtenheft erstellen (was muss getan werden?)
 - 2 Notwendige Grundlagen von Matlab aneignen
 - 3 Auswertung gemäß Pflichtenheft in Matlab programmieren

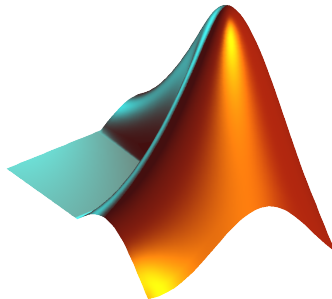
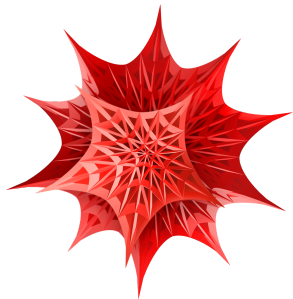
Kurze Wiederholung: Der Fluoreszenz-Versuch im PCG

- 1 Anregungs- und Emissionsspektren
 - Spektren darstellen
 - Maximum hervorheben
- 2 Konzentrationsabhängigkeit der Fluoreszenz
 - Intensität als Funktion der Konzentration darstellen
 - Lineare und nichtlineare Kurvenanpassung
- 3 Bestimmung des Chiningehalts von Tonic Water
 - Lineare Regression
- 4 Dynamische Fluoreszenzlöschung (Stern-Volmer)
 - Lineare Regression mit festem y-Achsen-Abschnitt

Pflichtenheft: Einzelne Schritte der Auswertung

- ▶ Daten einlesen
 - Daten importieren in Matlab
- ▶ Spektren darstellen
 - Daten in Matlab grafisch darstellen (plotten)
 - Achsenbeschriftungen gemäß Vorgaben
 - Abbildungen aus Matlab exportieren
- ▶ Intensitäten für eine Wellenlänge aus mehreren Spektren
 - Mehrere Spektren einlesen
 - Zugriff auf einen bestimmten Wert in einem Vektor
- ▶ Lineare und nichtlineare Kurvenanpassung
 - Matlab-Routinen zur Kurvenanpassung

Methodenkurs „Anwendung von Mathematica und Matlab in der Physikalischen Chemie“



Anwendung von ... Matlab in der Physikalischen Chemie

- ▶ Anwendung
 - Matlab praktisch kennenlernen
 - Befähigung, Matlab in Eigenregie weiter zu verwenden
- ▶ Physikalische Chemie
 - Fragestellungen der Physikalischen Chemie im Fokus
 - Letztlich auf viele Fragestellungen anwendbar

Motivation für den Kurs

- ▶ Auswertung des Fluoreszenzversuchs aus dem PCG
- ▶ Übertragung auf aktuelle eigene Fragestellungen
- ▶ Hilfe zur Selbsthilfe: eigenständig weitermachen

Inhalte

- 1 Motivation
- 2 Einleitung: Matlab
- 3 Grundlegende Sprachkonzepte
- 4 Schritte in die Praxis:
Von den Rohdaten zur fertigen Auswertung
- 5 **Praktische Arbeit**
- 6 Ausblick

☞ Schritte 1 bis 4 dienen der Vorbereitung von
und der Befähigung zur eigenen praktischen Arbeit.

Zusätzliches Material

- ▶ Folien
 - Zum Nachschlagen (insbesondere Teile 2 bis 4)
- ▶ Daten aus dem Fluoreszenz-Versuch
 - Grundlage für die eigene praktische Arbeit
- ▶ Weiterführende Informationen und Links
 - Hilfe zur Selbsthilfe

Homepage zur Veranstaltung

<http://till-biskup.de/de/lehre/mathematica-matlab/>

...gleich geht's weiter

Vorschau: [Einleitung: Matlab](#)

- ▶ Matlab in der Physikalischen Chemie
- ▶ Stärken und Schwächen von Matlab
- ▶ Allgemeines zu Matlab
- ▶ Matlab – eine praktische Einführung