

Anwendung von (Mathematica und) Matlab in der Physikalischen Chemie

1. Motivation Inhalte und Struktur des Kurses

Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

Dr. Till Biskup

Institut für Physikalische Chemie
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg
Wintersemester 2015/16



**UNI
FREIBURG**

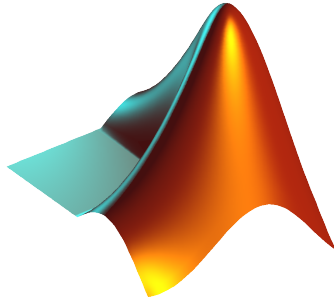
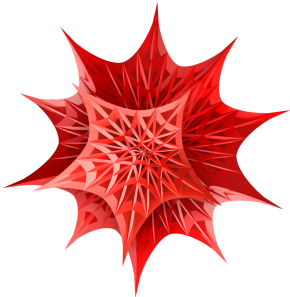
Motivation

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“



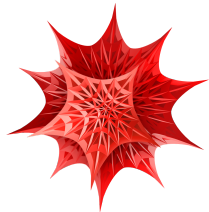
Anwendung von ... Matlab in der Physikalischen Chemie

- ▶ 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 (verstehen) und (sinnvoll) darstellen.

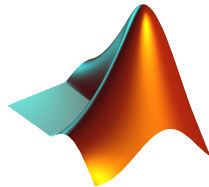
Mathematica



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

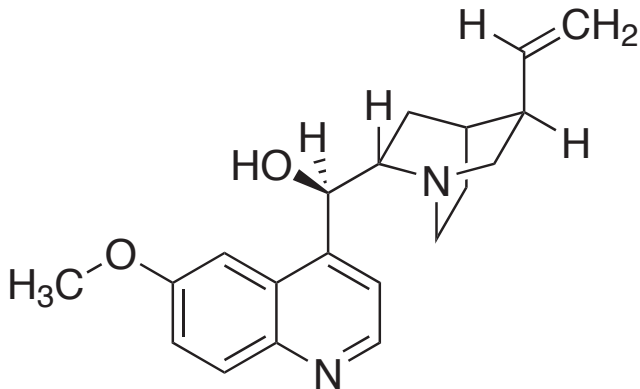
Matlab

- ▶ 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

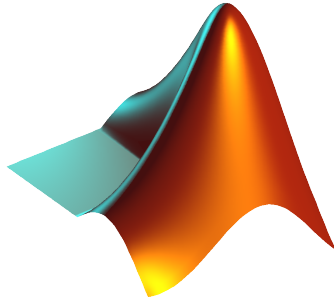
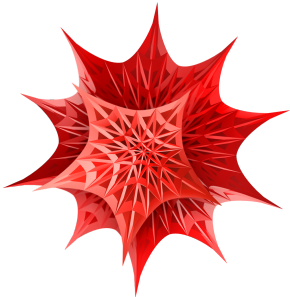
Kurze Wiederholung: Der Fluoreszenz-Versuch im PCG

- 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