

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 2016/2017



**UNI
FREIBURG**

Motivation

Warum dieser Methodenkurs?

Unterschiede zwischen Mathematica und Matlab

Warum Matlab?

Ein reales Beispiel

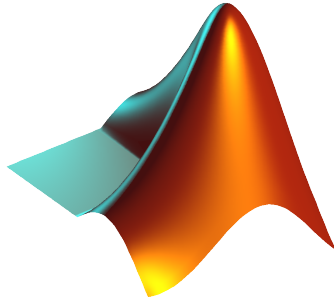
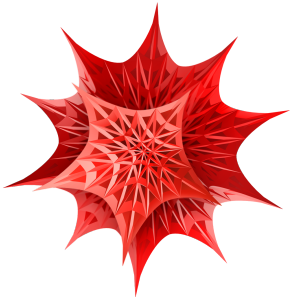
Inhalte und Struktur des Kurses

Wie läuft der Methodenkurs ab?

Inhalte

Material

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



Physikalische Chemie

Verständnis der Grundlagen und Hintergründe

- ▶ Theoretische Konzepte
 - oftmals analytische Lösungen komplexer Gleichungen
- ▶ Analyse experimenteller Daten
 - Prozessierung und Darstellung der Daten
 - Anpassung von (numerischen) Simulationen
- ☞ Unterstützung durch entsprechende Computerprogramme ist mittlerweile Standard

Anwendung von ... Mathematica in der Physikalischen Chemie

- ▶ Anwendung
 - Mathematica praktisch kennenlernen
 - Befähigung, Mathematica eigenständig zu verwenden
- ▶ Physikalische Chemie
 - Fragestellungen der Physikalischen Chemie im Fokus
 - Letztlich auf viele Fragestellungen anwendbar

Motivation zur Verwendung von Mathematica

- ▶ Nachvollziehen/Überprüfen komplexer Herleitungen
- ▶ Vertieftes Verständnis analytischer Zusammenhänge

Anwendung von ... Mathematica in der Physikalischen Chemie

and their eigenfunctions are

$$|E_0\rangle = |Z\rangle; |E_+\rangle = \sqrt{\frac{R-E}{2R}} |X\rangle + \sqrt{\frac{R+E}{2R}} |Y\rangle \quad (6.3.5a)$$

~~$$|E_+\rangle = \left\{ 1 + \frac{(E+R_z)^2}{B^2} \right\}^{-1/2} |X\rangle + \left\{ 1 + \frac{B^2}{(E+R_z)^2} \right\}^{-1/2} |Y\rangle \quad (6.3.5b)$$~~

~~$$|E_-\rangle = \left\{ 1 + \frac{B^2}{(E+R_z)^2} \right\}^{-1/2} |X\rangle - \left\{ 1 + \frac{(E+R_z)^2}{B^2} \right\}^{-1/2} |Y\rangle \quad (6.3.5c)$$~~

where

~~$$|E_-\rangle = -\sqrt{\frac{R+E}{2R}} |X\rangle + \sqrt{\frac{R-E}{2R}} |Y\rangle$$~~

☛ Lehrbücher sind nicht fehlerfrei...

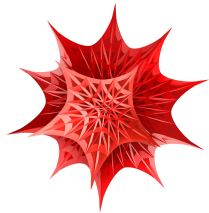
Anwendung von ... Matlab in der Physikalischen Chemie

- ▶ 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.

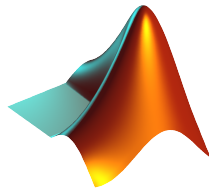
Mathematica

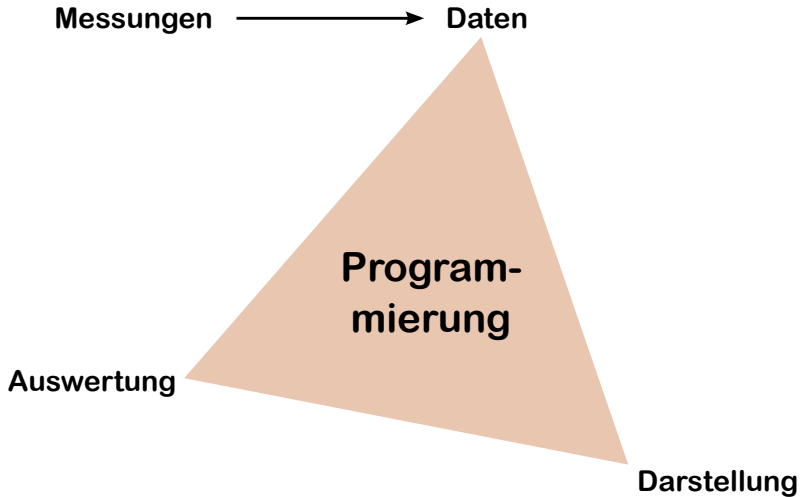


- ▶ Computeralgebrasystem (CAS)
- ▶ (analytische) Lösungen komplexer Gleichungen
- ▶ Symbolische Mathematik

Matlab

- ▶ Datenverarbeitung
- ▶ Numerische Simulationen
- ▶ Komplexere Programmierungen





Motivation zur Verwendung von Matlab

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

Warum Matlab

- ▶ Komplexe Auswertungen
 - Nicht mehr einfach bzw. per Hand durchführbar
 - Automatisierung durch Programmierung einzelner Schritte
 - Reproduzierbarkeit und Nachvollziehbarkeit
- ▶ Einfache Erlernbarkeit von Matlab
 - Programmiersprache mit Ähnlichkeiten zu C und Pascal
 - Grafische Oberfläche
 - Relativ einfach und schnell erste Erfolge

Reales Beispiel: (alter) 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

Wiederholung: Der (alte) 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

Anwendung ... in der Physikalischen Chemie

- ▶ Anwendung
 - Mathematica und Matlab praktisch kennenlernen
 - Befähigung, die Programme eigenständig zu verwenden
- ▶ Physikalische Chemie
 - Fragestellungen der Physikalischen Chemie im Fokus
 - Letztlich auf viele Fragestellungen anwendbar

Motivation für den Kursteil „Matlab“

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

Organisatorische Details

- ▶ Zwei Kursteile
 - Mathematica – Tage 1–2, Dozent: Stefan Weber
 - Matlab – Tage 3–5, Dozent: Till Biskup

- ▶ Zeiten
 - 9–12 und 13–16 Uhr
 - Zwischendurch flexible Pausen

- ▶ Anwendung im Fokus
 - Zugang zu den Programmen kommt durch ihre Nutzung.
 - Zu jedem einzelnen Block gibt es praktische Übungen.
 - Die Dozenten sind in dieser Zeit für Rückfragen verfügbar.

Hinweis zu den praktischen Übungen

- ▶ Die Übungszettel sind tendenziell zu umfangreich.
 - Nicht frustrieren lassen, wenn man nicht fertig wird.
 - Einladung zur eigenständigen Weiterbeschäftigung
- ▶ Die Dozenten sind im Kurs für Rückfragen verfügbar.
 - Nutzen Sie die Chance...
 - Die praktische Arbeit steht im Mittelpunkt.
- ▶ Es wird (am Ende des Kurses) Lösungen geben.
 - Möglichst umfangreiche und kommentierte Lösungen
 - Wichtig: Es gibt viele mögliche Lösungen, die hier vorgestellten sind nicht notwendigerweise optimal.

Inhalte

- 1 Motivation ✓
- 2 Einleitung: Matlab
- 3 Interaktive Kommandozeile
- 4 Skripte und Funktionen
- 5 Grundlegende Sprachkonzepte
- 6 Grundlegende Dokumentation
- 7 Datenein- und -Ausgabe
- 8 Grafiken

Inhalte

- 9 Schritte in die Praxis:
Vorstellung des Projekts
 - 10 **Praktische Arbeit**
 - 11 Diskussion der Ergebnisse
Präsentation möglicher Lösungen
 - 12 Ausblick
- ☛ Schritte 1 bis 8 dienen der Vorbereitung von
und der Befähigung zur eigenen praktischen Arbeit.

Zusätzliches Material

- ▶ Folien
 - Zum Nachschlagen (insbesondere Teile 2 bis 8)
- ▶ 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/ws2016/>

...gleich geht's weiter

Vorschau: [Einleitung: Matlab](#)

- ▶ Allgemeines zu Matlab
- ▶ Stärken und Schwächen von Matlab
- ▶ Matlab – eine praktische Einführung
- ▶ Hilfe zur Selbsthilfe