

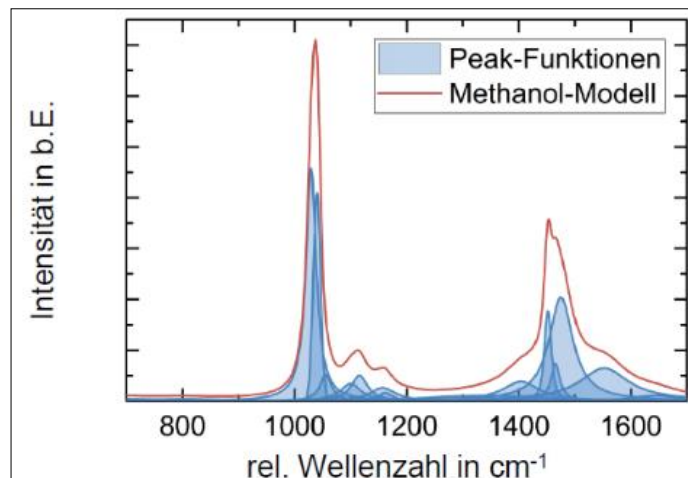
# Weight it till you make it – Optimierung der Auswertung von Raman-Spektren

## Forschungsschwerpunkt

Messtechnik, Verfahrenstechnik

## Unser Profil

Der Lehrstuhl für Technische Thermodynamik (LTT) der RWTH Aachen unter Leitung von Prof. Dr.-Ing. André Bardow beschäftigt sich in der Energie- und Verfahrenstechnik mit dem „thermodynamischen Aufzug“: vom Molekül bis zum Prozess.



Die Messsystemtechnik-Gruppe am LTT ist ein interdisziplinäres Team junger Wissenschaftler, die experimentell und theoretisch arbeiten. Wir beschäftigen uns mit der Entwicklung nicht-invasiver, orts- und zeitaufgelöster Messmethoden sowie mit der modellgestützten, experimentellen Ermittlung von Stoffdaten.

## Hintergrund

Die Raman-Spektroskopie bietet die Möglichkeit einer schnellen und nicht-invasiven Konzentrationsbestimmung. In der Messsystemtechnik-Gruppe wird dies in Kombination mit Mikrofluidik beispielsweise zur Bestimmung von Diffusionskoeffizienten und Flüssig-Flüssig-Gleichgewichten genutzt.

Für die quantitative Auswertung der gemessenen Ramanspektren kommt die Auswertemethode *Indirect Hard Modeling* zum Einsatz. Dabei werden für Reinstoffe Spektrenmodelle aus einer Summe von Peakfunktionen erstellt. Aus der Überlagerung dieser Reinstoffspektrenmodelle lassen sich dann aus dem gemessenen Gemischspektrum die Konzentrationen aller Komponenten bestimmen. Im Gegensatz zu univariaten Auswertemethoden wird hierbei das gesamte Spektrum zur Ermittlung der Konzentrationen verwendet. Den entscheidenden Schritt zur Konzentrationsbestimmung stellt das „Fitting“ dar, bei dem das Residuum zwischen Modell und Spektrum mit Hilfe einer klassischen Least-Square-Optimierung minimiert wird. Es konnte bereits gezeigt werden, dass einige Bereiche des Spektrums größeren Einfluss auf die Konzentrationsbestimmung haben als andere. Somit ist der exakte Fit in einigen Bereichen wichtiger als in anderen. Ein gewichtetes Least-Square-Fittings soll in Zukunft die Qualität der Modelle verbessern. Die optimale Wahl dieser Gewichte soll auf Grundlage von Kalibrationsspektren erfolgen.

## Aufgabenstellung

Das Ziel dieser Arbeit ist es eine Methode zu entwickeln, mit deren Hilfe das Gemischspektrum automatisch in Bereiche aufgeteilt wird, deren unterschiedliche Gewichtung beim Fitting zu einem optimalen Modell führt.

## Dein Profil

Du studierst CES, Maschinenbau, Wirt.-Ing. MB, Chemie, Physik oder einen vergleichbaren Studiengang. Du hast Spaß daran dich in neue Themengebiete einzuarbeiten und hast schon einmal mit Matlab gearbeitet.

## Unser Angebot

Du arbeitest in einem jungen, motivierten Team an einem spannenden Thema. Wenn Du Interesse hast, melde dich oder komm vorbei.

Arbeitsbeginn: ab sofort / nach Absprache  
Bei Interesse wende dich bitte an:

Justus Wöhl, M.Sc.  
Tel.: 0241 80 98175  
justus.woehl@lth.rwth-aachen.de

Carsten Flake, M.Sc.  
Tel.: 0241 80 95261  
carsten.flake@lth.rwth-aachen.de