

Auswertung mit Python

February 6, 2026

1 Auswertung mit Python

```
[99]: import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from matplotlib import cm
from scipy.optimize import curve_fit
import glob
import re
def dat2array(file_path):
    data = []
    with open(file_path, 'r', encoding='utf-8') as file:
        for i, line in enumerate(file):
            line = line.replace(',', '.').replace('\t', ';').replace('\n', '')
            if i >= 39: # Skip header lines
                data.append(line.split(';'))
    freqs = [float(row[0]) for row in data]
    intensities = [float(row[1]) for row in data]
    return freqs, intensities
def extract_info(filename):
    match = re.search(r'0(\d+)_(\d+)K\.asc', filename)
    if match:
        return int(match.group(1)), int(match.group(2))
    return None, None
def gaussian(x, a, mean, sigma):
    return a * np.exp(-(x - mean) ** 2 / (2 * sigma ** 2))
```

```
[100]: # Hilfsfunktion: FWHM aus diskreten Daten via linearer Interpolation bestimmen
def _compute_fwhm_from_discrete(x, y, ymax=None):
    if x is None or y is None or len(x) == 0 or len(y) == 0:
        return None
    if ymax is None:
        ymax = max(y)
    half = ymax / 2.0
    idx_max = int(np.argmax(y))
    # Linke Halbwertsstelle
    left = None
    for i in range(idx_max, 0, -1):
```

```

y1, y2 = y[i-1], y[i]
if (y1 - half) * (y2 - half) <= 0: # Vorzeichenwechsel bzw. Schnitt
    x1, x2 = x[i-1], x[i]
    if y2 != y1:
        left = x1 + (half - y1) * (x2 - x1) / (y2 - y1)
    else:
        left = x[i]
    break
# Rechte Halbwertsstelle
right = None
for i in range(idx_max, len(y) - 1):
    y1, y2 = y[i], y[i+1]
    if (y1 - half) * (y2 - half) <= 0:
        x1, x2 = x[i], x[i+1]
        if y2 != y1:
            right = x1 + (half - y1) * (x2 - x1) / (y2 - y1)
        else:
            right = x[i]
    break
if left is None or right is None:
    return None
return abs(right - left)

```

```

[101]: def NLO_plot(middle_value, difference, filepath, suptitle, filename_prefix,
    ↪reference=False, compare=True, power="333µW", slit_width="210µm",
    ↪plotting="energy", normalisationfactor=3.7490887328811729e+12,
    ↪norm_intensitaet=6.6181976473128055e+13, refmeas="LNO-SHG",
    ↪show_errorbars=True):
    # Suffix für Dateiname wenn wavelength gepottet wird
    if plotting.lower() != "energy":
        filename_prefix += "_wavelength"
    # x_range: Filterung immer noch in nm (basiert auf Input-Parametern)
    x_range = (middle_value - difference, middle_value + difference)
    file_list = glob.glob(filepath)
    sorted_files = []
    for f in file_list:
        meas_no, temperature = extract_info(f)
        if meas_no is not None:
            sorted_files.append((f, meas_no, temperature))
    sorted_files.sort(key=lambda x: x[1])
    # Automatische Erkennung des Umkehrpunkts (Peak-Temperatur)
    if sorted_files:
        temps = [x[2] for x in sorted_files]
        max_idx = temps.index(max(temps))
    else:
        max_idx = -1
    extended_files = []

```

```

for i, (f, meas_no, temperature) in enumerate(sorted_files):
    # Bis zum Maximum (inklusive) ist heating=True, danach False
    heating = (i <= max_idx)
    extended_files.append((f, meas_no, temperature, heating))

temperatures = [x[2] for x in sorted_files]
if len(temperatures) == 0:
    print("Keine Dateien gefunden, die dem Pfad entsprechen.")
    return
norm = plt.Normalize(min(temperatures), max(temperatures))
colors = cm.plasma(norm(temperatures))
fig, (ax0, ax1) = plt.subplots(1, 2, figsize=(15, 5))
peak_list = []
temps_for_line = []
peaks_for_line = []
# Sammle Peak-Parameter je Messung für spätere Zusammenfassung
peak_metrics = [] # Einträge: dict(...)
for idx, (f, meas_no, temperature, heating) in enumerate(extended_files):
    freqs, intensities = dat2array(f) # nm, arb. u.
    # 1. Referenzkorrektur der Intensität (falls nötig, z.B. ND Filter, ↵Zeit)
    if reference:
        intensities = [val * 32.88 * (10/7) for val in intensities]
    # 2. Daten filtern (im Wellenlängenbereich)
    # Wir filtern zuerst in nm, da middle_value/difference in nm sind.
    filtered_data = [(fr, i) for fr, i in zip(freqs, intensities) if ↵x_range[0] <= fr <= x_range[1]]
    if not filtered_data:
        continue
    freqs_vec, ints_vec = zip(*filtered_data)
    freqs_vec = np.array(freqs_vec)
    ints_vec = np.array(ints_vec)
    # 3. Transformation (Wellenlänge vs. Energie)
    if plotting.lower() == "energy":
        # Umrechnung nm -> eV
        # E = hc / lambda. hc approx 1239.84 eV nm
        x_vals = 1239.84 / freqs_vec
        # Jacobian Transformation für Intensität: I(E) = I(lambda) * ↵lambda^2 / hc
        # Konstante hc ignorieren wir bei arb. u. -> I(E) ~ I(lambda) * ↵lambda^2
        # Intensität skaliert mit Quadrat der Wellenlänge
        y_vals = ints_vec * (freqs_vec ** 2)
        # Sortieren, da 1/x die Reihenfolge umkehrt
        sort_idx = np.argsort(x_vals)
        x_vals = x_vals[sort_idx]
        y_vals = y_vals[sort_idx]

```

```

else:
    # Wavelength plotting
    x_vals = freqs_vec
    y_vals = ints_vec
    # 4. Normierung für den linken Plot (Intensität)
    # Wenn norm_intensitaet=1, wird nichts geändert.
    y_vals_plot = y_vals / norm_intensitaet
    # Plotten der Messdaten
    ax0.plot(x_vals, y_vals_plot, color='lightgray', alpha=0.5, linewidth=0.
    ↵5)
    # --- Temperaturwert für rechten Plot ---
    temp_for_plot = temperature
    # 5. Gaussian Fit & Fläche
    try:
        # Startwerte schätzen
        # Amplitude, Mean, Sigma
        p0 = [np.max(y_vals), np.mean(x_vals), (np.max(x_vals)-np.
        ↵min(x_vals))/10]
        popt, pcov = curve_fit(gaussian, x_vals, y_vals, p0=p0, maxfev=5000)
        fitted_curve = gaussian(x_vals, *popt)
        # Plot Fit (normiert auf Höhe im linken Plot)
        ax0.plot(x_vals, fitted_curve / norm_intensitaet, color=colors[idx])
        # Fläche unter der Kurve (Trapez) oder Integral des Fits
        area = np.trapezoid(fitted_curve, x_vals)
        if area < 0: area = abs(area)
        # Peak-Parameter
        a_fit = popt[0]
        mean_fit = popt[1]
        sigma_fit = abs(popt[2])
        fwhm_fit = 2.0 * np.sqrt(2.0 * np.log(2.0)) * sigma_fit # ~2.355 *_
        ↵sigma
        # Fehlerberechnung aus Kovarianzmatrix
        # Fläche S = A * sigma * sqrt(2*pi)
        if pcov is not None and np.isfinite(pcov).all():
            # Gradientenvektor [dS/dA, dS/dMean, dS/dSigma]
            # dS/dA = sigma * sqrt(2*pi)
            # dS/dSigma = A * sqrt(2*pi)
            grad = np.array([sigma_fit * np.sqrt(2 * np.pi), 0, a_fit * np.
            ↵sqrt(2 * np.pi)])
            var_area = grad.T @ pcov @ grad
            area_err = np.sqrt(var_area)
        else:
            area_err = 0.0
    peak_metrics.append({
        'height': a_fit,
        'area': area,
        'area_err': area_err,

```

```

        'mean': mean_fit,
        'fwhm': fwhm_fit,
        'temperature': temperature,
        'fit_success': True,
    })
except (RuntimeError, ValueError):
    # Fallback ohne Fit
    ax0.plot(x_vals, y_vals_plot, color=colors[idx]) # Linienplot der
    ↵Daten
    area = np.trapezoid(y_vals, x_vals)
    if area < 0: area = abs(area)
    # Rechte Seite Marker (kein Errorbar möglich)
    ax1.scatter(temp_for_plot, area / normalisationfactor, u
    ↵color='black', marker='x')
    # Metriken (einfache Schätzung)
    peak_metrics.append({
        'height': np.max(y_vals),
        'area': area,
        'area_err': 0.0,
        'mean': x_vals[np.argmax(y_vals)],
        'fwhm': None,
        'temperature': temperature,
        'fit_success': False,
    })
if peak_metrics[-1]['fit_success']:
    pm = peak_metrics[-1]
    # Errorbar Plotting
    yerr_val = (pm['area_err'] / normalisationfactor) if u
    ↵show_errorbars else None
    ax1.errorbar(temp_for_plot, pm['area'] / normalisationfactor,
                 yerr=yerr_val,
                 color='black', fmt='o', ecolor='black', capsizes=3, u
    ↵elinewidth=1)
    temps_for_line.append(temp_for_plot)
    peaks_for_line.append(area / normalisationfactor)
# Indikator-Balken für Temperatur
sm = plt.cm.ScalarMappable(cmap=cm.plasma, norm=norm)
sm.set_array([])
cbar = plt.colorbar(sm, ax=ax0, orientation='vertical', pad=0.02)
cbar.set_label('Temperatur in K')
# Heat/Cool Linien im rechten Plot
heating_flags = [ht for _, _, _, ht] in extended_files]
if True in heating_flags and False in heating_flags:
    split_idx = heating_flags.index(False)
    ax1.plot(temps_for_line[:split_idx], peaks_for_line[:split_idx],
             color='red', linewidth=1.2, alpha=0.5, zorder=0)
    ax1.plot(temps_for_line[split_idx-1:], peaks_for_line[split_idx-1:],
             color='blue', linewidth=1.2, alpha=0.5, zorder=0)

```

```

else:
    color = 'red' if all(heating_flags) else 'blue'
    ax1.plot(temp_for_line, peaks_for_line, color=color, linewidth=2, ↴
    alpha=0.7, zorder=0)
# Achsenbeschriftungen / Limits
if plotting.lower() == "energy":
    ax0.set_xlabel('Energie in eV')
    e_min = 1239.84 / x_range[1]
    e_max = 1239.84 / x_range[0]
    ax0.set_xlim(e_min, e_max)
else:
    ax0.set_xlabel('Wellenlänge in nm')
    ax0.set_xlim(x_range)
ax0.set_ylim(bottom=0)
ax1.set_xlabel('Temperatur in K')
# Y-Labels mit dynamischer Anpassung
# Linker Plot: Intensität
if compare and not reference:
    ylabel_0_base = f'Intensität rel. {refmeas}'
elif reference:
    # Falls es sich selbst um die Referenz handelt
    ylabel_0_base = 'Intensität (arb. u.)'
else:
    ylabel_0_base = 'Intensität (arb. u.)'
ax0.set_ylabel(ylabel_0_base)
# Rechter Plot: Fläche
if compare and not reference:
    ylabel_1_base = f'Helligkeit (Fläche Gauß Fit) rel. {refmeas}'
else:
    ylabel_1_base = 'Helligkeit (Fläche Gauß Fit) (arb. u.)'
ax1.set_ylabel(ylabel_1_base)
fig.suptitle(suptitle, fontsize=16)
fig.text(0.5, 0.92, f"Messparameter: Leistung: {power}, ↴
    Spaltbreite={slit_width}", ha="center")
# Info-Box (Zusammenfassung des besten/höchsten Peaks)
if len(peak_metrics) > 0:
    best = max(peak_metrics, key=lambda d: d.get('area', float('-inf')))
    # Ausgabe der maximalen unnormierten Fläche
    print(f"Maximale Fläche (unnormiert) der hellsten Messung: {best. ↴
    get('area'):.16e}")
    print(f"Maximale Intensität (unnormiert) der hellsten Messung: {best. ↴
    get('height'):.16e}")
    # print(f"FWHM der hellsten Messung: {best.get('fwhm'):.4e} (Einheit ↴
    abhängig von Plotting)")
    lam0 = best.get('mean', None)
    fwhm = best.get('fwhm', None)
    hoehe = best.get('height', None)

```

```

flaeche = best.get('area', None)
flaeche_err = best.get('area_err', None)
parts = []
if lam0 is not None:
    if plotting.lower() == "energy":
        parts.append(f"Zentralenergie: {lam0:.3f} eV")
    else:
        parts.append(f"Zentralwellenlänge: {lam0:.2f} nm")
if fwhm is not None:
    unit = "eV" if plotting.lower() == "energy" else "nm"
    parts.append(f"FWHM: {fwhm:.3e} {unit}")
if hoehe is not None:
    val_show = hoehe / norm_intensitaet
    parts.append(f"Int.: {val_show:.3e}")
if flaeche is not None:
    val_show_area = flaeche / normalisationfactor
    area_str = f"Fläche: {val_show_area:.3e}"
    if flaeche_err is not None and flaeche_err > 0:
        val_show_err = flaeche_err / normalisationfactor
        area_str += f" ± {val_show_err:.1e}"
    parts.append(area_str)
info_text = " | ".join(parts) if parts else ""
if info_text:
    fig.subplots_adjust(bottom=0.18)
    fig.text(0.5, 0.01, info_text, ha='center', va='bottom',
             fontsize=10,
             bbox=dict(boxstyle='round', facecolor='white', alpha=0.9, ↵
             edgecolor='lightgray'))
# plt.show()
fig.savefig(f'./{filename_prefix}.png', dpi=600, bbox_inches='tight')
fig.savefig(f'./{filename_prefix}.pdf', dpi=600, bbox_inches='tight')
# Figur schließen, damit sie nicht angezeigt wird
plt.close(fig)

```

1.1 TBBB

[102]: NL0_plot(middle_value=700, difference=35, filepath='TBBB/1400nm/0.
 ↵333mW_Spalt210um/*.asc',
 suptitle='SHG Messung von TBBB bei 1400nm',
 ↵filename_prefix='TBBB_SHG_noErrorbar', show_errorbars=False)

Maximale Fläche (unnormiert) der hellsten Messung: 1.0467164796660785e+07
 Maximale Intensität (unnormiert) der hellsten Messung: 1.7326693296109611e+08

[103]: NL0_plot(middle_value=467, difference=35, filepath='TBBB/1400nm/0.
 ↵333mW_Spalt210um/*.asc',
 suptitle='THG Messung von TBBB bei 1400nm', filename_prefix='TBBB_THG',)

```
Maximale Fläche (unnormiert) der hellsten Messung: 4.3211775145533629e+07
Maximale Intensität (unnormiert) der hellsten Messung: 5.7614813716172898e+08
```

1.2 TCBC

```
[104]: NL0_plot(middle_value=700, difference=35, filepath='TCBC/1400nm/0.
↳333mW_Spalt210um/*.asc',
    suptitle='SHG Messung von TCBC bei 1400nm', filename_prefix='TCBC_SHG')
```

```
Maximale Fläche (unnormiert) der hellsten Messung: 2.7275524847579718e+08
Maximale Intensität (unnormiert) der hellsten Messung: 4.5588114873347025e+09
```

```
[105]: NL0_plot(middle_value=467, difference=35, filepath='TCBC/1400nm/0.
↳333mW_Spalt210um/*.asc',
    suptitle='THG Messung von TCBC bei 1400nm', filename_prefix='TCBC_THG')
```

```
Maximale Fläche (unnormiert) der hellsten Messung: 4.7203218376096152e+07
Maximale Intensität (unnormiert) der hellsten Messung: 6.1807786897993028e+08
```

1.3 LNO

1.3.1 Vergleichsmessung

```
[106]: # Definiere den Wellenlängenbereich wie bei LNO SHG
x_range = (700 - 35, 700 + 35) # anpassen falls verändert!
# Lade die Vergleichsmessungen "mit" und "ohne" ND2.0:
files_ohne = glob.glob('LNO/1400nm/0.333mW_Spalt210um/Vergleichsmessung ND2.0/
↳ohne*.asc')
files_mit = glob.glob('LNO/1400nm/0.333mW_Spalt210um/Vergleichsmessung ND2.0/
↳mit*.asc')
# Wähle jeweils die erste Datei (ggf. anpassen, falls mehrere vorhanden)
file_ohne = files_ohne[0]
file_mit = files_mit[0]
# Lade die Daten
freqs_ohne, intensities_ohne = dat2array(file_ohne)
freqs_mit, intensities_mit = dat2array(file_mit)
# Filtere den Bereich wie bei x_range
filtered_data_ohne = [(fr, i) for fr, i in zip(freqs_ohne, intensities_ohne) if
↳x_range[0] <= fr <= x_range[1]]
filtered_data_mit = [(fr, i) for fr, i in zip(freqs_mit, intensities_mit) if
↳x_range[0] <= fr <= x_range[1]]
filtered_freqs_ohne, filtered_intensities_ohne = zip(*filtered_data_ohne) if
↳filtered_data_ohne else ([], [])
filtered_freqs_mit, filtered_intensities_mit = zip(*filtered_data_mit) if
↳filtered_data_mit else ([], [])
# Plotten
fig, ax0 = plt.subplots(figsize=(8, 5))
```

```

ax0.plot(filtered_freqs_ohne, filtered_intensities_ohne, label='ohne ND2.0'\
         ↴Filter', color='blue')
ax0.plot(filtered_freqs_mit, filtered_intensities_mit, label='mit ND2.0'\
         ↴Filter', color='orange')
ax0.set_title('Vergleich: LNO Messung ohne vs. mit ND2.0 Filter', fontsize=14)
ax0.set_xlabel('Wellenlänge in nm', fontsize=12)
ax0.set_ylabel('Intensität (log) in arb. u.', fontsize=12)
ax0.set_yscale('log')
ax0.legend(fontsize=12)
ax0.grid(True, which="both", ls="--", alpha=0.5)
peak_ohne = max(filtered_intensities_ohne)
peak_mit = max(filtered_intensities_mit)
peak_ohne_x = filtered_freqs_ohne[filtered_intensities_ohne.index(peak_ohne)]
peak_mit_x = filtered_freqs_mit[filtered_intensities_mit.index(peak_mit)]
# Berechne den Skalierungsfaktor
skalierungsfaktor = peak_ohne / peak_mit
ax0.annotate(f'Peak: {peak_ohne:.1e}', xy=(peak_ohne_x, peak_ohne), \
             ↴xytext=(peak_ohne_x, peak_ohne*0.2),
             arrowprops=dict(arrowstyle='->', color='blue'), color='blue', \
             ↴fontsize=10, fontweight='bold')
ax0.annotate(f'Peak: {peak_mit:.1e}', xy=(peak_mit_x, peak_mit), \
             ↴xytext=(peak_mit_x, peak_mit*2),
             arrowprops=dict(arrowstyle='->', color='orange'), color='orange', \
             ↴fontsize=10, fontweight='bold')
# Faktor deutlich im Plot anzeigen
textstr = f'Ermittelter Skalierungsfaktor:\n{skalierungsfaktor:.2f}'
props = dict(boxstyle='round', facecolor='wheat', alpha=0.5)
ax0.text(0.05, 0.95, textstr, transform=ax0.transAxes, fontsize=12,
         verticalalignment='top', bbox=props)
# plt.tight_layout()
# plt.show()
fig.savefig('ND2-Skalierung.pdf', dpi=600, bbox_inches='tight')
plt.close(fig)
print(f"Skalierungsfaktor (ohne ND2.0 / mit ND2.0): {skalierungsfaktor:.2f}")

```

Skalierungsfaktor (ohne ND2.0 / mit ND2.0): 32.88

1.3.2 SHG

```
[107]: NL0_plot(middle_value=700, difference=35, filepath='LNO/1400nm/0.'\
                 ↴333mW_Spalt210um/*.asc',
                 suptitle='SHG Messung von LNO bei 1400nm', filename_prefix='LNO_SHG', \
                 ↴reference=True)
```

Maximale Fläche (unnormiert) der hellsten Messung: 3.7490887329303589e+12
 Maximale Intensität (unnormiert) der hellsten Messung: 6.6181976472945719e+13

1.3.3 THG

```
[108]: NLO_plot(middle_value=467, difference=35, filepath='LNO/1400nm/0.  
↪333mW_Spalt210um/*.asc',  
    suptitle='THG Messung von LNO bei 1400nm', filename_prefix='LNO_THG')
```

Maximale Fläche (unnormiert) der hellsten Messung: 1.0449557816307251e+09

Maximale Intensität (unnormiert) der hellsten Messung: 1.3942079736818483e+10

1.4 TIBI

1.4.1 SHG

```
[109]: NLO_plot(  
    middle_value=700, difference=35, filepath='TIBI_400uW_1400nm/*.asc',  
    suptitle='SHG Messung von TIBI bei 1400nm', filename_prefix='TIBI_SHG',  
    power="400µW", slit_width="280µm", compare=False,  
    reference=False, normalisationfactor=6.7143405909607100e+08,  
    norm_intensitaet=9.7393162943605690e+09)
```

Maximale Fläche (unnormiert) der hellsten Messung: 6.7143405909607100e+08

Maximale Intensität (unnormiert) der hellsten Messung: 9.7393162943605690e+09

1.4.2 THG

```
[110]: NLO_plot(  
    middle_value=467, difference=190, filepath='TIBI_400uW_1400nm/*.asc',  
    suptitle='THG Messung von TIBI bei 1400nm',  
    ↪filename_prefix='TIBI_THG_noErrorbar',  
    power="400µW", slit_width="280µm", compare=True,  
    normalisationfactor=6.7143405906491041e+08, norm_intensitaet=9.  
    ↪7393162937730503e+09,  
    refmeas="TIBI-SHG", show_errorbars=False)
```

Maximale Fläche (unnormiert) der hellsten Messung: 3.7206097359220743e+07

Maximale Intensität (unnormiert) der hellsten Messung: -7.8485786621733122e+09

1.5 TISI

1.5.1 SHG

```
[111]: NLO_plot(  
    middle_value=700, difference=35, filepath='TISI_400uW_1400nm/*.asc',  
    suptitle='SHG Messung von TISI bei 1400nm', filename_prefix='TISI_SHG',  
    power="400µW", slit_width="280µm", compare=False, reference=False,  
    normalisationfactor=4.1730454417941847e+09,  
    norm_intensitaet=7.8205974137625458e+10)
```

Maximale Fläche (unnormiert) der hellsten Messung: 4.1730454417941847e+09

Maximale Intensität (unnormiert) der hellsten Messung: 7.8205974137625458e+10

Vergleichsmessung (reproduktivität:)

```
[112]: NL0_plot(  
    middle_value=700, difference=35, filepath='TISI_400uW_1400nm/*.asc',  
    suptitle='zweite SHG Messung von TISI bei 1400nm',  
    filename_prefix='TISI_SHG_reproduction',  
    power="400µW", slit_width="500µm", compare=False, reference=False,  
    normalisationfactor=2.3234362914695725e+09,  
    norm_intensitaet=9.7906818154833618e+10)
```

Maximale Fläche (unnormiert) der hellsten Messung: 2.3234362914695725e+09

Maximale Intensität (unnormiert) der hellsten Messung: 9.7906818154833618e+10

1.5.2 THG

```
[113]: NL0_plot(  
    middle_value=467, difference=190, filepath='TISI_400uW_1400nm/*.asc',  
    suptitle='THG Messung von TISI bei 1400nm', filename_prefix='TISI_THG',  
    power="400µW", slit_width="280µm", compare=True,  
    normalisationfactor=4.1730454418659124e+09,  
    norm_intensitaet=7.8205974134100433e+10,  
    refmeas="TISI-SHG")
```

Maximale Fläche (unnormiert) der hellsten Messung: 3.2116164198759556e+07

Maximale Intensität (unnormiert) der hellsten Messung: 1.6168114967745182e+08