

Polymer-Elasticity

Systemvoraussetzungen

Benötigte Programme

- Matlab (= 2019a)
- Python (= 3.7)

Benötigte Matlab Apps

- Kraftkurven.mlapp

Benötigte Matlab Skripte

- polymer-elasticity (>= 2)

Benötigte Librarys

- Utility Function Library

Allgemeine Informationen

Mithilfe des Skriptes „polymer-elasticity“ kann das Modell der erweiterten, freiverbundenen Kette an Ergebnisse von Force-Clamp-Experimenten gefittet werden (und nur für diese Funktionalität wurde dieses Skript ausgelegt). Das Modell lautet wie folgt [1, 2]:

$$Ex(F) = L_C \cdot \left\{ \coth\left(\frac{F \cdot l_K}{k_B \cdot T}\right) - \frac{k_B \cdot T}{F \cdot l_K} \right\} \cdot \left(1 + \frac{F}{K_S \cdot l_K}\right)$$

Wobei $Ex(F)$ die Kraftabhängige Ausdehnung des gemessenen Moleküls und F die z-Richtung an das Molekül angelegte Kraft darstellen. Die freien Parameter des Modells sind

- K_S : Segment-Elastizität mit der Einheit Nm^{-1}
- L_C : Konturlänge des Moleküls mit der Einheit m
- l_K : Kuhn Länge (Monomerlänge) mit der Einheit m

Die konstanten Parameter zum einen die Boltzmann-Konstante k_B sowie die absolute Temperatur T .

Dieses Modell wird an die geplottete Umkehrfunktion (Weg vs. Kraft) an den in „polymer-elasticity“ ausgewählten Datenbereich angepasst.

Start des Programms

Vor dem Programmstart müssen folgende Punkte erfüllt sein:

- Die Utility Function Library muss persistent auf dem MATLAB-Pfad vorhanden sein
- In Matlab muss ein Python-Interpreter bestimmt worden sein (siehe Matlab-dokumentation zu pyversion)

Durchführung des Programmstarts:

1. Erstelle die Variable „DataSelection“ mithilfe der App Kraftkurven
 - a. Öffne Kraftkurven mithilfe des „Laden“ Buttons
 - b. Schließe alle Matlab-Figure-Tools
 - c. Rechtsklick auf einen beliebigen Graphen --> Graphen Staffeln
 - d. Rechtsklick auf einen bestimmten Graphen --> öffne Graph in neuer Abbildung

- e. Im neuen Fenster wieder alle Figure-Tools schließen
 - f. Rechtsklick auf den freien Bereich um den Graphen
 - g. Wählen eines bestimmten Auswahltypen und markieren der Daten
 - h. Rechtsklick auf den ausgewählten Datenbereich --> To Workspace
2. Start des Skriptes „polymer-elasticity“ durch klicken auf den Run-Button im Matlab-Editor oder durch drücken der Taste F5 bei aktiviertem Matlab-Editor

Bedienungsanleitung

Zur Bedienung dieses Skripts können weitere Informationen dem Hilfe-Tab auf dem Slide-Panel (das Panel mit dem Zeichen „>>“) entnommen werden.

Notizen

- In einem späteren Update ist vorgesehen, dass mit Rechtsklick auf die rechte Abbildung eine Grafik des Fits abgespeichert werden kann

References

- [1] A. Janshoff, M. Neitzert, Y. Oberdörfer, and H. Fuchs, “Kraftspektroskopie an molekularen Systemen: Einzelmolekülspektroskopie an Polymeren und Biomolekülen,” *Angewandte Chemie (International ed. in English)*, no. 112, pp. 3346–3374, 2000.
- [2] M. I. Giannotti and G. J. Vancso, “Interrogation of single synthetic polymer chains and polysaccharides by AFM-based force spectroscopy,” (eng), *Chemphyschem : a European journal of chemical physics and physical chemistry*, vol. 8, no. 16, pp. 2290–2307, 2007.