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]:

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

* : Segment-Elastizität mit der Einheit
* : Konturlänge des Moleküls mit der Einheit
* : Kuhn Länge (Monomerlänge) mit der Einheit

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

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
   1. Öffne Kraftkurven mithilfe des „Laden“ Buttons
   2. Schließe alle Matlab-Figure-Tools
   3. Rechtsklick auf einen beliebigen Graphen --> Graphen Staffeln
   4. Rechtsklick auf einen bestimmten Graphen --> öffne Graph in neuer Abbildung
   5. Im neuen Fenster wieder alle Figure-Tools schließen
   6. Rechtsklick auf den freien Bereich um den Graphen
   7. Wählen eines bestimmten Auswahltypen und markieren der Daten
   8. 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.