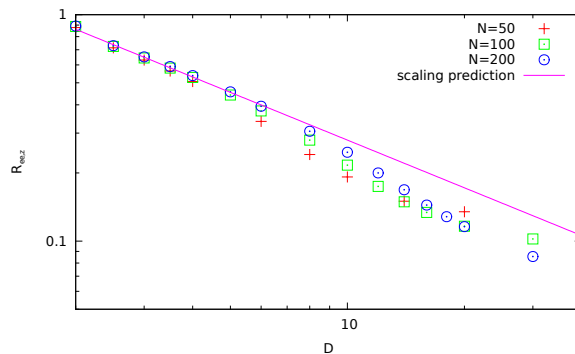
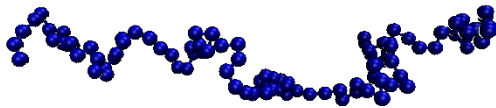


Übungsblatt 6: Bildbearbeitung und Graphen

23. 11. 2012

Allgemeine Hinweise

- Abgabetermin für die Lösungen ist **Donnerstag, 22. 11., 13:00**.
- Abgabe diesmal in mehreren Dateien, die Du im Anhang einer Email an Deinen Tutor schickst.
- Vergiss nicht, Deinen Namen als Kommentar an den Anfang der L^AT_EX-Datei zu schreiben.



Auf diesem Blatt lernt Ihr die Techniken kennen, mit deren Hilfe Bachelorarbeiten, Masterarbeiten, und Journalartikel entstehen. Die im folgenden benutzten Daten wurden tatsächlich 2007 im Journal of Chemical Physics veröffentlicht. Es handelt sich dabei um Messung des End-zu-End-Abstands eines Polymers, also einer Art mikroskopischer Perlenkette, in einer Röhre. Der End-zu-End-Abstand gibt dabei den Abstand zwischen den beiden äußeren Enden der Perlenkette an, ist also ein Maß für die Ausdehnung des Polymers. Durch die Einschränkung auf eine enge Röhre, wie etwa den Kanal eines Tintenstrahldruckers, wird das Polymer gestreckt. Dies kann man theoretisch für den Grenzfall eines sehr langen Polymers vorhersagen. Es gilt dann

$$R_{ee,z} \approx bND^{-0.7}, \quad (1)$$

wobei b die effektive Bindungslänge ist, N die Anzahl der Monomere (Perlen in der Kette), und D der Durchmesser der Röhre, in der das Polymer steckt.

Aufgabe 6.1: Erstellen eines Graphen (4 Punkte)

Im Verzeichnis `~arnolda/computergrundlagen/06` findet Ihr Dateien `end-to-end-distance-NNN.data`, die für Kettenlängen zwischen 50 und 200 den End-zu-End-Abstand enthalten. Schau Dir die Dateien mit einem Editor an. Sie enthalten in der ersten und zweiten Spalte D und N sowie $R_{ee,z}$ in der dritten Spalte. Die restlichen Spalten interessieren für diese Übung nicht.

Die Lösungsdatei dieser Aufgabe ist ein Gnuplot-Skript, das Du entweder separat Deiner Email befügst, oder wieder mit Hilfe von listings in Die Lösung zur letzten Aufgabe einbettetst.

6.1.1: Benutze `gnuplot`, um Dir für die gegebenen Kettenlängen $R_{ee,z}$ als Funktion von D anzuschauen. (1) besagt, dass die Länge bei festem Durchmesser proportional zu N sein sollte. Dividiere daher die Länge durch jeweils durch die Kettenlänge N . Die Kurven fallen nun in weiten Bereichen

aufeinander, was die Proportionalität zu N gut verifiziert. Speichere die notwendigen Befehle in dem Gnuplot-Skript. (1 Punkt)

Hinweis: Benutze dazu die `using`-Option von `plot`, um die passenden Spalten auszuwählen.

6.1.2: Um zu überprüfen, ob auch die $D^{-0.7}$ -Vorhersage in (1) gilt, ist es günstig, die Daten doppeltlogarithmisch darzustellen. Dadurch wird aus dem Potenzgesetz eine Gerade, die visuell leicht zu verifizieren ist, indem Du das Potenzgesetz $bD^{-0.7}$ mit $b = 1.4$ einzeichnest. Erweitere Dein Gnuplot-Skript entsprechend. (1 Punkt)

6.1.3: Mache nun diese Graphik bereit zur Publikation, indem Du den Kurven und Achsen aussagekräftige Namen gibst. Außerdem musst Du den Graphen noch in einer Datei speichern, um diesen in einen Artikel einbinden zu können. Ergänze Dein Skript mit Kommandos, um die Achsen und Kurven zu beschriften, sowie den Ergebnisgraphen im PDF-Format abzuspeichern. Das Ergebnis sollte in etwa wie die rechte Abbildung auf der Vorderseite aussehen. Erweitere Dein Gnuplot-Skript entsprechend. (2 Punkte)

Hinweis: Es ist nicht notwendig, die Beschriftung $R_{ee,z}$ genau zu reproduzieren, `R_eez` genügt. Wer es versuchen möchte, sollte sich über die "enhanced" Option der PDF/PS-Terminals von `gnuplot` informieren.

Aufgabe 6.2: Erstellen einer Illustration (2 Punkte)

Um dem Leser einen besseren Zugang zum untersuchten System zu bieten, sind Illustrationen wie auf der Vorderseite üblich. Diese ist aus der Datei `snapshot.png` hervorgegangen, die eine Aufnahme eines Polymers in einem (unsichtbaren) Zylinder darstellt. Leider ist die Rohaufnahme ungeeignet, weil einerseits der schwarze Hintergrund viel (Drucker-)Farbe kostet, und andererseits der leere Raum um das Polymer unnötig ist.

Benutze GIMP, um `snapshot.png` zurechtzuschneiden und mit einem weißen Hintergrund zu versehen, und gib die bearbeitete Datei mit ab.

Aufgabe 6.3: Wir schreiben einen Artikel (4 Punkte)

Hier benutzen wir noch einmal \LaTeX , um unsere beiden Abbildungen in eine richtigen, kleine Artikel zu verpacken. Als Stil benutzen wir diesmal REVTeX 4.0, das für Journal of Chemical Physics vorgeschrieben ist. Als Hilfe kannst Du die Vorlage `template.tex` benutzen, die den Vorlagen nachempfunden ist, die man meist von den Verlagen bekommt. Die hier erstellte \LaTeX -Datei gibst Du als Lösungsdatei ab.

6.3.1: Füge die beiden Abbildungen in `figure`-Umgebungen mit einer entsprechenden Bildunterschrift ein. (2 Punkte)

6.3.2: Verweise auf die Abbildungen im eigentlichen Text des Artikels. Dieser soll Gleichung (1) enthalten und ganz kurz beschreiben, worum es geht (Polymer, End-zu-End-Abstand, zylinderförmige Röhre, Potenzgesetz für lange Ketten). (1 Punkt)

6.3.3: Wie Ihr aus der Presse schon mitbekommen habt, sind Zitate sehr wichtig. Die Daten, die Ihr verwendet, stammen aus

A. Arnold, B. Bozorgui, D. Frenkel, B.-Y. Ha and S. Jun. *Unexpected relaxation dynamics of a self-avoiding polymer in cylindrical confinement*. J. Chem. Phys. 127:164903, 2007

Füge Deinem Dokument eine Referenzenliste mit diesem Eintrag hinzu und verweise darauf!

Hinweis: Du kannst hierfür einfach die `bibliography`-Umgebung im Template anpassen.