Pracownia wykorzystania zasobów internetowych

Magdalena Kuich

$26~\mathrm{maja}~2015$

Kolejne rozdziały będą się pojawiały w ciągu semestru.

Spis treści

| 1 | Tydzień pierwszy : 1.1 Podstawowe komendy programu : 1.2 Wyświetlanie danych : 1.3 Skrypt i tworzenie rysunków : 1.4 Tekst na wykresach oraz legenda : 1.5 Zadania : | 3 3 5 5 6 6 |
|---|--|-----------------------------------|
| 2 | Tydzień drugi 2.1 Baza danych ASD - nist.gov | 7 7 7 |
| 3 | Tydzień trzeci93.1Opcja multiplot93.2Baza danych RRUFF93.3Rysowanie histogramów103.4Dygitalizacja wykresów10 | • • • • |
| 4 | Tydzień czwarty14.1Krótko o środowisku ROOT14.2Rysowanie funkcji14.3Rysowanie wykresów1 | 1 2 2 |
| 5 | Tydzień piaty 14 5.1 Rysowanie wykresów z niepewnościami | 1 4 5 |
| 6 | Tydzień siódmy 10 6.1 Podstawy LATEX'a 10 | 3 6 |
| 7 | Tydzień ósmy 18 7.1 BibT _E X 18 7.2 Składanie tekstu z plików 18 7.3 Style bibliografii 19 | 3 3 3 9 |
| 8 | Tydzień dziewiaty 20 8.1 Bibliograficzne bazy danych 20 |) 0 |
| 9 | Tydzień jedenasty29.1Avogadro29.2Inne edytory "molekularne"29.3"AutoCAD" online29.4Rysowanie2 | L 1 2 2 |

| 10 Tydzień trzynasty | 23 |
|--|-----------|
| 10.1 Tworzenie własnego zasobu internetowego | 23 |

1 Tydzień pierwszy

Uruchom program Gnuplot wpisując w konsoli polecenie gnuplot. Program ten służy do wizualizacji oraz prostej analizy danych. Dzięki niemu można wykonywać wykresy 2D i 3D oraz dopasowywać funkcję do danych przy pomocy metody najmniejszych kwadratów. Rysunek 1 pokazuje powitalny ekran programu.

| 😣 🖱 🗊 mk_fuw@mk-fuw: ~ | | | | |
|--|--|--|--|--|
| mk_fuw@mk-fuw:~\$ gnuplot | | | | |
| G N U P L O T Version 4.6 patchlevel 4 last modified 2013-10-02 Build System: Linux x86_64 | | | | |
| Copyright (C) 1986-1993, 1998, 2004, 2007-2013 Thomas Williams, Colin Kelley and many others | | | | |
| gnuplot home: http://www.gnuplot.info faq, bugs, etc: type "help FAQ" immediate help: type "help" (plot window: hit 'h') | | | | |
| Terminal type set to 'wxt' anunlat> | | | | |
| → | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |

Rysunek 1: Ekran powitalny programu Gnuplot

1.1 Podstawowe komendy programu

Wpisując polecenie help wyświetlona zostaje lista tematów zawartych w manualu. Polecenie test wyświetla przykładowe opcje jakie mogą być użyte podczas tworzenia rysunku. Po wpisaniu tego polecenia ukaże się panel przedstawiony na rysunku 2. Gnuplot wspiera wiele róznych narzędzi graficznych. Polecenie



Rysunek 2: Panel testowy programu Gnuplot

set terminal informuje gnuplota jaki wynik jest oczekiwany. Polecenie set output powoduje 'przekierowanie' wyniku do pliku o określonym formacie. Polecenie plot służy do rysowania funkcji oraz wyświetlania danych zapisanych w pliku tekstowym.

- Zadanie: Narysuj funkcję f(x) = cos(2x) w zakresie od $-\pi$ do π
- Rozwiazanie:

```
gnuplot> set xrange [-pi:pi]
gnuplot> plot cos(2*x)
```

lub w jednej linijce:

gnuplot> plot [-pi:pi] cos(2*x)

mozna też tak: gnuplot> f(x) = cos(2*x) gnuplot> plot [-pi:pi] f(x)

Po wpisaniu powyższych poleceń powinien pojawić się panel z wyświetlonym wykresem funkcji. Polecenie set xrange pozwala ustalić zakres zmiennej. Podobnie set yrange ustala zakres możliwych wartości funkcji.

- Zadanie: Narysuj na jednym wykresie funkcję $f(x) = 3x^2$ oraz $g(x) = x^3 + 2$ dla $x \in (-10, 10)$
- Rozwiazanie:

```
gnuplot> f(x) = 3*x**2
gnuplot> g(x) = x**3 + 2
gnuplot> plot [-10:10] f(x), g(x)
lub prościej:
gnuplot> plot [-10:10] 3*x**2, x**3 + 2
```

Możemy dodawać następne funkcję oddzielając kolejne wyrażenia przecinkiem. Sposób rysowania funkcji tj. kolor i rodzaj linii, grubość linii itp. można zmieniać przy pomocy następujących opcji:

- \bullet l
wwartość zmiana grubości linii
- lt *wartość* zmiana rodzaju linii (np. ciągła, przerywana, itp.)
- lc rgb '#RRGGBB' zmiana koloru linii. W cudzysłów można także wpisać nazwę podstawowych kolorów np. red, green, blue, violet. W ogólności można otrzymać dowolny kolor z tablicy RGB wpisując odpowiednie wartości w systemie szesnastkowym. Paleta kolorów

Wartości poszczególnych parametrów można określić na podstawie panelu testowego z rysunku 2.

- Zadanie: Narysuj na jednym wykresie pięć linii o różnej skali grubości
- Rozwiazanie:

```
gnuplot> set xrange [0:10]
gnuplot> set yrange [0:10]
gnuplot> plot 0.25*x lw 1 lc rgb '#000000',\
> 0.5*x lw 3 lc rgb '#444444',\
> x lw 5 lc rgb '#888888',\
> 2*x lw 7 lc rgb '#bbbbbb',\
> 3*x lw 9 lc rgb '#ddddd'
```

Znak w tym przypadku służy do wskazania łamania wiersza. Dana funkcja może być także rysowana za pomocą punktów. Służy do tego opcja with points. Np.:

gnuplot> plot [0:3] exp(x) with points

Aby wybrać rodzaj punktu, podobnie jak w przypadku linii należy użyć odpowiedniej opcji:

- pt *wartość* rodzaj punktów (np. kwadrat, kropka, gwiazdka),
- ps wartość rozmiar punktów,
- lc rgb '#RRGGBB' kolor punktów, jak w przypadku linii.

Np:

gnuplot> plot [0:3] exp(x) with points pt 7 ps 1 lc rgb 'blue'

Aby określić liczbę punktów przed poleceniem plot należy użyć polecenia set sample. Przykładowo:

gnuplot> set sample 20

gnuplot> plot [0:3] exp(x) with points pt 7 ps 1 lc rgb 'blue'

Aby narysować punkty połączone linią, należy użyć opcji with linespoints:

gnuplot> plot [0:3] exp(x) with linespoints pt 7 ps 1 lc rgb 'blue'

1.2 Wyświetlanie danych

Program Gnuplot umożliwia wyświetlanie danych zapisanych w pliku tekstowym formacie kolumnowym. Domyślnie pierwszą kolumnę traktuje jako X, drugą jako Y oraz opcjonalnie trzecią jako errY (niepewność Y). Istnieje możliwość 'wybierania' kolumn, które mają zostać wyświetlone. Służy do tego polecenie using x:y, gdzie x oznacza kolumnę stanowiącą argumentów, a y wartości.

- Zadanie: Wyświetl dane znajdujące się w pliku pod adresem www.fuw.edu.pl/~mkuich/fermi.dat. Użyj punktów • w kolorze niebieskim.
- Rozwiazanie: Plik należy pobrać na swój komputer, następnie jeżeli jesteśmy w katalogu, w którym znajduje się plik w Gnuplocie wydajemy polecenie:

```
gnuplot> plot 'fermi.dat' pt 7 lc rgb 'blue'
```

lub

```
gnuplot> plot 'fermi.dat' using 1:2 pt 7 lc rgb 'blue'
```

Dane można wyświetlać jednocześnie ze zdefiniowanymi funkcjami podobnie jak w przypadku kilku funkcji.

• Zadanie: Wyświetl te same dane znajdujące się w pliku pod adresem www.fuw.edu.pl/~mkuich/ fermi.dat. Użyj punktów • w kolorze niebieskim. Razem z danymi narysuj funkcję, która opisuje punkty pomiarowe. Funkcja ta ma postać:

$$P(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1}$$
(1)

• Rozwiazanie: Plik należy pobrać na swój komputer, następnie jeżeli jesteśmy w katalogu, w którym znajduje się plik w Gnuplocie wydajemy polecenie:

```
gnuplot> plot 'fermi.dat' pt 7 lc rgb 'blue', 1/(exp((x-a)/b) + 1)
```

gdzie stałe a oraz b należy tak dobrać aby funkcja pokrywała się z punktami.

1.3 Skrypt i tworzenie rysunków

Wszystkie polecenia użyte do tej pory w konsoli programu Gnuplot można zapisać w skrypcie tj. w oddzielnym pliku tekstowym. Plik ten zwyczajowo posiada rozszerzenie .gp. Skrypty są wygodne kiedy chcemy zapisać wykres w postaci pliku graficznego. Do wyboru jest wiele formatów graficznych. W dalszej części pokazane zostanie jak tworzyć plik graficzny w formacie .eps.

- Zadanie: Napisz skrypt, który tworzy wykres funkcji f(x) = exp(2x) w skali logarytmicznej i zapisuje go w pliku wykres.eps.
- Rozwiazanie: Przykładowy skrypt wygląda następująco:

```
set terminal postscript eps color font 22
set output "wykres.eps"
set logscale y
plot exp(2*x)
```

Skrypt należy zapisać w pliku np. skrypt.gp i następnie wykonać polece- nie w terminalu:

```
$>gnuplot skrypt.gp
```

Po wykonaniu polecenia w tym samym katalogu powstanie plik z rysunkiem.

1.4 Tekst na wykresach oraz legenda

Do opisu osi służą polecenia: set xlabel "oś x" i set ylabel "oś y". Aby umieścić tekst na rysunku należy użyć polecenia

set label "Napis" at x,y

gdzie x i y oznaczają współrzędne początku napisu względem odpowiednich osi. Istnieje możliwość możliwość obracania wstawianego tekstu za pomocą polecenia rotate by np:

set label "Napis" at x,y rotate by +45 left

Istnieje także możliwość umieszczania w napisach indeksów górnych i dolnych. Aby to zrobić należy w skrypcie umieścić opcję terminala 'enhanced' tj.:

set terminal postscript eps color font 22 enhanced

Aby umieścić strzałkę należy użyć polecenia

set arrow from x1,y1 to x2,y2

W tym przypadku dodatkowo można użyć poleceń formatujących takich samych jak przy rysowaniu wykresu. Przykładowo:

set arrow from 10,10 to 20,10 lw 6 lc rgb 'red'

Do formatowania legendy służy polecenie: set key.

- Zadanie: Narysuj dwie dowolne funkcje, z których jedna bedzie podpisana w legendzie jako 'Funkcja nr 1' druga zaś nie będzie wyszczególniona w legendzie. Legendę umieść z lewej strony wykresu.
- Przykładowe rozwiazanie:

set key left bottom
plot x**2 t "Funkcja nr 1", sin(x) not

1.5 Zadania

Zadanie 1: Napisz skrypt, który wczyta dane z pliku fermi.dat. Użyj punktów • w kolorze niebieskim, opisz je etykietą Dane. Razem z danymi narysuj na zielono funkcję, która opisuje punkty pomiarowe i podpisz ją prawdopodobieństwo. Funkcja ta ma postać:

$$P(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1}$$
(2)

Niech oba zbiory wartości będą wyszczególnione w legendzie. Legendę umieść w prawym górnym rogu wykresu i narysuj ją w ramce. Opisz odpowiednio osie wykresu. Nad wykresem umieść tytuł Rozkład Fermiego-Diraca

2 Tydzień drugi

Wykonując jakikolwiek eksperyment fizyczny - autorski, czy też ćwiczenie na pracowni, dobrze sprawdzić swoje rezultaty z danymi powszechnie uznanymi za referencyjne. Kilka przykładowych baz danych: nist.gov

pdg.lbl.gov www.nndc.bnl.gov mpod.cimav.edu.mx rruff.info

2.1 Baza danych ASD - nist.gov

Baza ASD zawiera informacje dotyczące poziomów energetycznych i linii widmowych dla atomów i jąder atomowych w szerokim zakresie energetycznym. Baza ta jest dostępna bezpłatnie pod adresem: nist.gov/pml/data/asd.cfm

| Mr NIST Atomic Spectra 🛪 📃 | | |
|---|--|-----|
| < 🔾 😋 🗈 nist.gov/pm//data/asd.cfm | | * 0 |
| 🔢 Apps 🗈 NA61 Welcome L 💢 CERN Hotel Rese | | |
| | NST WITTING INTERNET ALL ALL ALL ALL ALL ALL ALL ALL ALL AL | |
| | NEST Hans + PML + Physical Reference Data + Atomic Spectra Database | |
| | Version History & Claston Historyation Disconner Wyberz język 🥤 🗴 Severa 🛙 🖬 🖓 💭 | |
| | NIST Atomic Spectra Database | |
| | Wome is the M17 Areas Garden Scattanes, M17 Brailed Followice Database F1. The spectroscope data risk between the makes and any plane and any plane based on the interplane of the makes and any plane and any plane based on the plane based on the interplane of the spectra based on the plane based on the plane based on the plane based on the interplane of the spectra based on the plane bas | |
| | Lives weakeypt care with all encode greats thermal of a magnetic encode greats thermal of a magnetic encode great thermal and digitized where available. | |
| | LIVELS Every levels of a particular atom or ion displayed in order of NIST ASD Team | |
| | Considering and an experimental set of advances and advances and advances and advances and advances and advances and advances advance | |
| | Additional Information about the database may be obtained through the following Infis: and Wollgang L. Wiene | |
| | Atomic Spectroscopy Outlines basic atomic physics concepts, explains terminology Mesander Kramica, Yuri Ratcherle, and Kares Oten | |
| | ADD Intre & Community Sector Address Harters Function, Arms Sciences on Arms Arms Sector Arms | |
| | The feature profession stress or elevative to VST control systems data and | |
| | *200, 1081, 1081, 1091, 1099, 1099, 1000, 1091, 1090, 1090, 1090, 1091, 1091, 1090, 2000, 2000, Other INST Atamic Spectrasceptic Calat. *201, 2010, 2011, 2012, 2013, 2014, 1091, 1091, 1090, 1090, 2010, 2014 | |

Rysunek 3: Ekran powitalny bazy danych ASD

- Zadanie: Pobierz z bazy danych ASD dane dotyczące lini widmowych Ar w zakresie światła widzialnego. Następnie sporządź skrypt Gnuplot, prezentujacy te dane.
- Rozwiązanie: Strona powitalna bazy danych ASD została przedstawiona na rysunku 3. W onie tym należy wyrać opcję Lines. W następnym oknie podać nazwę pierwiastka i zakres widmowy. Dane są w formacie wielokolumnowym. W kolumnie 4. mamy długość fali, a w kolumnie 6. 'natężenie' promieniowania.

2.2 Baza danych XCOM - nist.gov

Baza XCOM zawiera informację dotyczącą współczynnika absorpcji dla promieniowania elektromagnetycznego w szerokim zakresie energii dla pierwiastków, związków chemicznych oraz mieszanin. Baza ta jest dostępna bezpłatnie pod adresem: physics.nist.gov/PhysRefData/Xcom/html/xcom1.html

- Zadanie: Pobierz z bazy XCOM dane dotyczące współczynnika absorpcji dla CaCO₃ w zakresie energii promieniowania od 0.001 MeV do 100000 MeV. Następnie sporządź skrypt programu Gnuplot, prezentujący te dane.
- Rozwiazanie: Strona powitalna bazy danych XCOM została przedstawiona na rysunku 4 W tym oknie należy wybrać opcję pierwiastka, związku chemicznego lub mieszaniny. W przypadku CaCO₃ wybieramy opcję "Compound". W następnym oknie (widocznym na 5 należy podać formułę związku oraz zakres energii. Dodatkowo można wybrać poszczególne wkłady współczynnika absorbcji. Na następnej stronie możemy wybrać interesujące nas dane, pobrać je i zapisać w pliku tekstowym. Dane są w formacie dwukolumnowym. Pierwsza kolumna zawiera energię w MeV, druga zaś masowy współczynnik absorbcji w cm²/g. Po sporządzeniu rusunku można zmienić format wyświetlanych skali z np.: 1000 na 10³. W tym celu należy dodać w skrypcie komendę:

| e -> C physics.nisc.gov/Physicerbata// | (com/html/xcom1.html | ☆ 😂 🗉 |
|---|---|-------|
| NUSSE National harbords all Standards and Tabhaslage Physical Mass. Laboratory | XCOM | |
| Element/Compound/Mixture Selection | | |
| In this database, it is possible to obtain photon cross | section data for a single element, compound, or mixture (a combination of elements and compounds). Please fill out the following information: | |
| Help | | |
| | Identify material by: | |
| | Element Conjunt Mixiare | |
| | Method of entering additional energies: (optional) | |
| | Enter additional energies by hand Additional energies from file (Note: Your browser must be file-upload compatible) | |
| | | |

Rysunek 4: Ekran powitalny bazy danych XCOM

| NET XCOM: Compound C × | | | |
|--|---|---|-------|
| ← → C [] physics.nist.gov/cgi-bin/Xcom/ | .com2 | | ☆ 😊 🗉 |
| Fill out the form to select the dat | a to be display | ed: | |
| Help | | | |
| Formula for compound (e.g. H2O for water): Ca | CO3 | | |
| Optional output title: data | | | |
| Craph options: Total Attenuation with Coherent Scattering Total Attenuation without Coherent Scattering Coherent Scattering Coherent Scattering Phare Production in Nacionar Field Phare Production in Nacionar Field None | Additional energies in Note: Energies must b One energy per line. E Energy Range: Minimum: 0.001 Maximum: 100000 | MW: (equinant) (ep to 100 allowed) = between 0.001 - 100000 MeV (1 keV - 100 GeV) (only 4 significant figures will be med), ink lines will be ignored. ≥ Include the standard grid MeV MeV | |
| Subme information Reset | | | |

Rysunek 5: Okno wyboru związku chemicznego

set format x "10^%L"

- Zadanie: Porównaj ze sobą współczynniki absorpcji dla dwóch wybranych pierwiastków w wybranym zakresie energii. Odpowiednie wykresy sporządź w programie Gnuplot.
- Zadanie: Natężenie wiązki promieniowania elektromagnetycznego po przejściu przez substancję o grubości d zmienia się zgodnie ze wzorem:

$$I(d) = I_0 e^{-\mu d} \tag{3}$$

gdzie: $I_0 = 1$ to natężenie wiązki padającej, μ to liniowy współczynnik absorbcji (w cm⁻¹). Dla wybranej substancji (np. Cr) sporządź wykres zawierający krzywe I(d) dla trzech długości fali promieniowania: 0.04 Å, 0.4 Åoraz 0.7 Å. Zakres *d* przyjmij od 0 do 1 mm. W rozwiązaniu zadania pomocne będą następujące zasoby internetowe:

- kalkulator pozwalający przeliczyć długość fali na energię: https://www2.chemistry.msu.edu/ faculty/reusch/virttxtjml/cnvcalc.htm
- lista pierwiastków wg ich gęstości: http://chemistry.about.com/od/elementfacts/a/elementdensity.
 htm

3 Tydzień trzeci

3.1 Opcja multiplot

Funkcja multiplot umożliwia w programie Gnuplot tworzenie wielu wykresów na jednym rysunku. Oto przykładowy skrypt:

```
set output 'rysunek.eps'
set terminal postscript eps color enhanced font 22 size 16cm,8cm
set multiplot
set title "Funkcja kwadratowa"
set origin 0, 0
set size 0.5, 1
set xrange [-3:3]
set yrange [0:5]
set grid
set xlabel "x"
set ylabel "f(x)"
plot x**2 title "x^2"
set origin 0.5, 0
set title "Funkcja wykladnicza"
set xlabel "y"
set ylabel "g(y)"
plot 0.5 \exp(-x) title \exp(-y)/2"
unset multiplot
```

Skrypt ten stworzy dwa wykresy przedstawione na rysunku 6. W powyższym skrypcie użyte zostały na-



Rysunek 6: Funkcja multiplot

stępujące nowe polecenia:

- set multiplot włączenie trybu multiplot
- set origin ustalenie współrzędnych pierwszego wykresu (lewy dolny róg)
- \bullet set size ustalenie wielkość wykresu względem całego rysunku w zakresie od 0 do 1
- set grid włączenie siatki
- Zadanie: Zmień powyższy rysunek tak aby wykresy były jeden nad drugim
- Zadanie: Sporządź rysunek, na którym widoczne są cztery różne rysunki.

3.2 Baza danych RRUFF

Baza danych RRUFF zawiera informacje dotyczące spektroskopii ramanowskiej dobrze poznanych minerałów i ich związków. Na rysunku 7 przedstawiono ekran startowy bazy. Baza jest bezpłatna i można ją znaleźć pod adresem: http://rruff.info/.



Rysunek 7: Ekran powitalny bazy RRUFF

- Zadanie: Wykorzystaj opcję multiplot dla narysowania 4 widm ramanowskich dla związków zawierających węgiel, ale nie zawierających wodoru.
- Rozwiązanie: Strona powitalna bazy danych RRUFF została przedstawiona na rysunku 7. W tym oknie należy sprecyzować związek chemiczny lub podać pierwiastek jaki ma zostać zawarty w poszukiwaniu (czy też wykluczony). Należy sporządzić skrypt wczytujący dane z 4 plików wejściowych, rysujący 4 wykresy z wykorzystaniem opcji multiplot.

3.3 Rysowanie histogramów

Aby narysować histogram w programie Gnuplot będziemy korzystać przygotowanych wcześniej danych tj. plik z danymi powinien w kolumnie pierwszej zawierać przedziały histogramowania natomiast w kolumnie drugiej liczbę przypadków dla konkretnego przedziału. Podczas rysowania należy użyć opcji boxes. Oto przykład:

```
set style fill solid
set boxwidth 5.0
plot 'plik.txt' using 1:2 with boxes fs solid border -1
```

W powyższym skrypcie użyte zostały następujące nowe polecenia:

- set style wypełnienie pod wykresem
- set boxwidth ustalenie szerokości kolumn
- plot ... with boxes rysowanie histogramu
- Zadanie: Narysuj histogram, bazując na danych z pliku histogram1.txt, który znajdziesz pod adresem: www.fuw.edu.pl/~mkuich/histogram1.txt. A następnie dapasuj do danych odpowiednią funkcję. Zgadnij jaką...

3.4 Dygitalizacja wykresów

WebPlotDigitizer jest narzędziem umożliwiającym dygitalizację rysunków. Jest dostępny online pod adresem: http://arohatgi.info/WebPlotDigitizer/app/

- Zadanie: Zdygitalizuj wykres cosinus'a w funkcji okna Hamminga. Wykres znajduje się pod adresem: www.fuw.edu.pl/~mkuich/cos_haming.jpg
- Rozwiązanie: Na rysunku 8 został przedstawiony ekran startowy narzędzia WebPlotDigitizer. W lewym górnym rogu znajduje sie menu File, gdzie można wczytać rysunek. Następnie należy skalibrować osie i wybrać opcję dygitalizacji.
- Dopasuj funkcję do punktów, otrzymanych poprzez zdygitalizowanie danych z obrazka dostępnego pod adresem: www.fuw.edu.pl/~mkuich/Gaussian.jpg



Rysunek 8: Ekran startowy narzędzia WebPlotDigitizer

4 Tydzień czwarty

4.1 Krótko o środowisku ROOT

ROOT jest to obiektowe środowisko programistyczne (ang. framework) wspomagające pisanie skryptów i programów dedykowanych analizie danych. Powstał w 1994 roku w laboratorium CERN na potrzeby analizy danych fizyki wysokich energii i jest od tego czasu stale rozwijany. ROOT bazuje na języku programowania C++ i jest z nim kompatybilny. Posiada wbudowany interpreter oraz kompilator C++. Link do dokumentacji ROOT'a: https://root.cern.ch/drupal/. ROOT został zainstalowany na Waszych komputerach. Jednak, aby korzystać z niego w najprostszy sposób (czyli podobnie, jak z gnuplota), należy ustawić zmienne środowiskowe. W tym celu w katalogu domowym należy utworzyć plik tekstowy (ale bez rozszerzenia) o nazwie .bashrc, który powinien zawierać następujące polecenie:

export PATH=\$PATH:/work/programs/ROOT/bin

Po ustawieniu zmiennych środowiskowych, można uruchomić ROOT'a wpisując w konsoli polecenie root. Pokaże się ekran startowy, jak na rysunku 9. Aby zamknąć aplikację należy wpisać w konsoli ROOT'a .q



Rysunek 9: Ekran powitalny ROOT'a

4.2 Rysowanie funkcji

4.2.1 Funkcje 1D

Przykład skryptu pokazującego, jak narysować proste, jednowymiarowe funkcje za pomocą ROOT'a znajduje się w pliku macro_1.c. Plik znajduje się pod adresem: www.fuw.edu.pl/~mkuich/pzi/macro_1.c. Plik zawiera:

- **#include** <...> załączenie kilku bibliotek ROOT'a niezbędnych do rysowania funkcji, wykresów, itp.
- int macro_1()... ciało skryptu, gdzie sekwencyjnie umieszczone są kolejne funkcje:
 - TCanvas *canvas1 = new TCanvas(...) tworzenie okna wykresu
 - TF1 *f1 = new TF1(...) tworzenie fukncji 1D
 - f1->Draw() polecenie rysowania
 - oraz inne dodatkowe opcje dotyczące przypisywania wartości parametrów fukcji, koloru linii, skali logarytmicznej, multiplotowania, itp.
 - TMath::Pi() to funkcja z biblioteki TMath, która zwraca wartość liczby π .
 - TMath::Cos(x) i tym podobne pojawiające się w kolejnych skryptach, to są funkcje z biblioteki TMath, które zwracają wartość predefiniowanej funkcji w zależności od podanego argumentu, np. cos(x).

Aby uruchomić skrypt, w terminalu wpisz polecenie root macro_1.c. Uwaga - uruchamiamy ROOT'a w tym samym katalogu, w którym znajduje się nasz skrypt. Uruchomi się środowisko ROOT'a, a skrypt zostanie zinterpretowany przez wbudowany Interpreter i wykonany. Jednakże dobrym nawykiem jest kompilowanie swoich skryptów za pomocą wbudowanego Kompilatora. Kompilacji dokonuje sie za pomocą polecenia root macro_1.c+. Skrypt się kompiluje, następnie wykonuje.

4.2.2 Funkcje 2D

Przykład skryptu pokazującego, jak narysować proste, dwuwymiarowe funkcje za pomocą ROOT'a znajduje się w pliku macro_2.c. Plik znajduje się pod adresem: www.fuw.edu.pl/~mkuich/pzi/macro_2.c. W skrypcie zaprezentowano opcje definiowania i rysowania funkcji dwuwymiarowych. Uruchomienie skryptu za pomocą polecenia root macro_2.c+.

4.3 Rysowanie wykresów

Przykład skryptu pokazującego, jak narysować proste wykresy 1D i 2D za pomocą ROOT'a znajduje się w pliku macro_3.c. Plik znajduje się pod adresem: www.fuw.edu.pl/~mkuich/pzi/macro_3.c. Nowości w pliku:

- TGraph *wykres1 = new TGraph() utworzenie wykresu 1D o nazwie wykres1,
- wykres1->SetPoint(i,x,y) wypełnienie wykresu punktami o współrzędnych x i y oraz liczbie porządkowej i,
- TGraph2D *wykres2 = new TGraph2D() utworzenie wykresu 2D
- wykres2->SetPoint(k,x,y,z) wypełnienie wykresu punktami o współrzędnych x, y i z oraz liczbie porządkowej k,
- opcje opisywania osi, nadawania tytułu wykresowi oraz opcje formatowania wykresu (style, kolory, rozmiary), do opcji podano odnośnik do stron internetowych.

Przykład skryptu pokazującego, jak narysować proste wykresy 1D i 2D wczytując dane prosto z pliku znajduje się w pliku macro_4.c. Uwaga - pliki wejściowe powinny być odpowiednio sformatowane (dwu- lub trój-kolumnowe) oraz powinny znajdować się w tym samym katalogu, co nasz skrypt. Możemy wczytać pliki znajdujące się w innym katalogu, ale wraz nazwą pliku należy podać także pełną ścieżkę do pliku. Przed uruchomieniem skryptu pliki wejściowe (z danymi) należy przekopiować ze strony:

- plik exponent.dat znajduje się pod adresem: www.fuw.edu.pl/~mkuich/pzi/exponent.dat
- plik higgs.dat znajduje się pod adresem: www.fuw.edu.pl/~mkuich/pzi/higgs.dat

Skrypt znajduje się pod adresem: www.fuw.edu.pl/~mkuich/pzi/macro_4.c. Nowości w pliku:

- TGraph *wykres1 = new TGraph("exponent.dat", "%1g %1g") utworzenie wykresu 1D o nazwie wykres1, który będzie zawierał dane z pliku exponent.dat; pierwsza kolumna w pliku wejściowym domyślnie zawiera współrzędne x, a druga y; w przypadku takiego rozwiązania już nie potrzebujemy polecenia SetPoint, gdyż punkty zostaną wpisane do wykresu automatycznie,
- wykres1->Fit("f_exp")) służy do fitowania wcześniej zdefiniowanej funkcji f_exp do wykresu,
- TGraph2D *wykres2 = new TGraph2D("higgs.dat", "%lg %lg %lg"); utworzenie wykresu 2D o nazwie wykres2, który będzie zawierał dane z pliku higgs.dat; pierwsza kolumna w pliku wejściowym domyślnie zawiera współrzędne x, druga y, a trzecia z.

5 Tydzień piaty

5.1 Rysowanie wykresów z niepewnościami

Przykład skryptu pokazującego, jak narysować prosty wykres z niepewnościami wczytując dane prosto z pliku znajduje się w skrypcie macro_5.c. Skrypt znajduje się pod adresem: www.fuw.edu.pl/~mkuich/pzi/macro_5.c. Dane wejściowe dla tego skryptu znajdują się w pliku: kaon.dat, pod adresem: www.fuw.edu.pl/~mkuich/pzi/kaon.dat. Nowości w skrypcie:

- TGraphErrors *wykres1_err = new TGraphErrors("kaon.dat", "%lg %lg %lg" utworzenie wykresu 1D o nazwie wykres1_err, który będzie zawierał dane z pliku kaon.dat; pierwsza kolumna w pliku wejściowym domyślnie zawiera współrzędne x, druga y, a trzeba niepewności współrzędnej y. Dla dwuwymiarowych wykresów istnieje analogiczna funkcja TGraph2DErrors().
- Zadanie: Bazując na strypcie macro_4.c sporządź wykres, na którym znajdą się 3 widma ramanowskie: aspiryny, kwarcu i kofeiny (tj. 3 widma na jednym wykresie).
- Wskazówka: Zapisz dane w 3 osobnych plikach (bez nagłówków), stwórz 3 obietky TGraph (po jednym dla każdego pliku), sformatuj odpowiednio każdy wykres i narysuj w jednym oknie za pomocą opcji "same".

5.2 Rysowanie histogramów

Przykład skryptu pokazującego, jak narysować proste histogramy 1D i 2D za pomocą ROOT'a znajduje się w pliku macro_6.c. Plik znajduje się pod adresem: www.fuw.edu.pl/~mkuich/pzi/macro_6.c. Nowości w pliku:

- TH1D *histogram1 = new TH1D("histogram1", "tytul", 10, 0, 10) utworzenie histogramu 1D o nazwie histogram1, tytule tytul, liczbie binów równej 10, współrzędnej pierwszego binu w zerze i ostatniego bionu w dziesiątce,
- histogram1->Fill(x) zwiększenie wartości binu o współrzędnej x o 1,
- TH2D *histogram2 = new TH2D("histogram2","tytul histogramu2",20, 0,10, 20, 0, 10) utworzenie histogramu 2D o nazwie histogram2, tytule tytul histogramu 2, liczbie binów równej dla x-sów równej 20, współrzędnej pierwszego binu x-sowego w zerze i ostatniego bionu x-sowego w dziesiątce, liczbie binów równej dla y-ków równej 20, współrzędnej pierwszego binu y-kowego w zerze i ostatniego bionu y-kowego w dziesiątce.
- histogram2->Fill(x,y) zwiększenie wartości binu o współrzędnych xy o 1,
- opcje opisywania histogramów i rysowania histogramów (odnośnik do strony: https://root.cern. ch/root/html/THistPainter.html)

Przykład wczytania danych z pliku do histogramu oraz fitowania funkcji do histogramu znajduje się w przykładowym skrypcie macro_7.c, który znajduje się pod adresem: www.fuw.edu.pl/~mkuich/pzi/macro_7.c. Wczytywanie z pliku jest zrealizowane za pomocą operatorów strumienia wejścia C++. Fitowanie funkcji do histogramu odbywa się w dokładnie taki sam sposób jak fitowanie wykresów. Wczytywanie danych do histogramów 2D i fitowanie histogramów 2D wygląda analogicznie.

- Zadanie: Bazując na stryptach macro_6.c i macro_7.c sporządź histogram 2D, na którym znajdą się dane wczytane z pliku: histogram2D.dat. Dane znajdziesz pod adresem: www.fuw.edu.pl/~mkuich/ pzi/histogram2D.dat. Następnie spróbuj dofitować funkcje 2D do tego histogramu.
- Wskazówka: Histogram stwórz w oparciu o skrypt macro_6.c, następnie wypełnij go wczytując dane podobnie, jak w skrypcie macro_7.c. Fitowanie histogramu 2D odbywa się analogicznie, jak w przypadku histogramu 1D. Funkcja ma postać:

$$z = A * exp(-x^2/(2\sigma^2)) * exp(-y/b) * y$$
(4)

gdzie: A jest stałą normalizacyjną, σ to szerokość rozkładu dla współrzędnych x, a b to pozycja maksimum we współrzędnych y. Wartości początkowe możesz odczytać z fukresu.

5.3 Bazy danych - Fluorescence Dye

Istnieje wiele baz zawierających dane spektroskopii fluorescencyjnej. Taka metoda spektroskopii jest jest wykorzystania do badania/rozpoznawania cząsteczek zawierających fluorofor, który jest odpowiedzialny za ich fluorescencję. Najczęściej fluoroforem jest grupa funkcyjna, zdolna do absorpcji energii o określonej długości fali, a później do wyemitowania innej długości fali (ściśle określonej). Ilość energii, jak i długość fali emitowanej zależy od właściwości fluorofora, ale też od środowiska chemicznego w jakim on działa (na przykład pH czy siły jonowej). Zależności te są podstawą w zastosowaniu fluoroforów w biochemii, na przykład immunofluorescencji. Fluorofory mogą mieć możliwość przyłączenia ich do wybranej, innej cząsteczki, na przykład białka w celu jego późniejszej wizualizacji. Istnieją też białka naturalnie wyposażone we fluorofory, na przykład Green Fluorescent Protein czy Red Fluorescent Protein. Obecnie istnieje cała gama różnych fluoroforów o różnych właściwościach, co umożliwia dobranie ich do wybranego celu. Poniżej przykłady 3 darmowych baz danych zawierające dane spektroskopowe:

- http://www.spectra.arizona.edu/
- https://www.micro-shop.zeiss.com/?s=1692662875410d3&l=en&p=us&f=f&a=i
- http://www.fluorophores.tugraz.at/substance/
- Zadanie: W pliku zagadka.dat, dostępnym pod adresem www.fuw.edu.pl/~mkuich/pzi/zagadka. dat, znajdują się widma pewnego związku chemicznego... Znając te widma odnajdź właściwy związek chemiczny. W pierwszej kolumnine zapisano długość fali, w drugiej widmo absorbcyjne, w trzeciej widmo emisyjne.
- Wskazówka: Radzę skorzystać z ostatniej bazy z trzech podanych...
- Zadanie: znajdź widmo 3 róźnych źródeł światła lampy rtęciowej, halogenu wolframowego i lasera kryptonowo-argonowego.

6 Tydzień siódmy

6.1 Podstawy LATEX'a

IATEXjest środowiskiem służącym do profesjonalnego składania tekstu. Wyczerpujący manual znajduje się pod adresem: http://tobi.oetiker.ch/lshort/lshort.pdf. Jego wersja w języku polskim jest dostępna pod adresem: http://zelmanov.ptep-online.com/ctan/lshort_polish.pdf. W obu instrukcjach zawarto opis filozofii środowiska IATEXoraz podstawowe polecenia. Natomiast obszerną bazę szablonów IATEX'owych można znaleźć pod adresem: http://www.latextemplates.com/. Jeśli filozofia składania tekstu w IATEX'u nie jeste totalnie obca, to najporęczniejszym tutorialem może okazać się: http: //en.wikibooks.org/wiki/LaTeX.

Podczas zajęć będziemy korzystać z darmowego środowiska do kompilacji tekstu IATEX'
owego: https://www.sharelatex.com/

Poniżej przykładowy kod źródłowy, w którym zawarte są podstawowe komendy IATEX'owe:

```
\documentclass[a4paper, 10pt, onecolumn]{article}
\usepackage[polish]{babel}
\usepackage[utf8]{inputenc}
\usepackage{polski}
\usepackage{indentfirst}
\usepackage{graphicx}
\title{Tytuł dokumentu}
\author{Imie i nazwisko autora}
\date{\today}
\begin{document}
\maketitle
\begin{abstract}
... przykładowy tekst ...
\vspace{1cm}
\end{abstract}
\tableofcontents
\newpage
\section{Wstep}
... przykładowy tekst ...
\begin{equation}
\label{pitagoras}
a^2 + b^2 = c^2
\end{equation}
\section{Wyniki}
W wyniku pomiarów otrzymałem \begin{Large}wyniki\end{Large}, z których każdy może wyciągnąć:
\begin{itemize}
\item \textbf{to}
\item \textit{co}
\item \textsc{chce}
\end{itemize}
\subsection{Pomiar pierwszy}
\label{sec:2.1}
\indent
... przykładowy tekst ... i ładny rysunek poniżej, patrz: rys. \ref{rys1}. Sówka patrzy z niedowierzaniem
... aż brzydkie literki cisną się na usta... od $\alpha$ do $\Omega$
\begin{figure}[h!]
\centering
\includegraphics[width=0.6\textwidth]{sowa.jpg}
\caption{Rysunek do raportu.}
\label{rys1}
\end{figure}
```

\subsection{Pomiar drugi} ... przykładowy tekst z cytowaniem ... \cite{art:1} i odnośnikiem do tabeli \ref{tab1}. \begin{table}[h] \centering \caption{Opis tabeli} $\blue {tab1}$ \begin{tabular}{||1|c|c||} \hline \hline \small{Próbka} & \small{\$V_c\$ [nm\$^3\$]} & \small{\$D_c\$ [nm]} \\ \hline \small{n-Cr2(29nm)} & 3054 & 18 \\ \small{n-Cr3(31nm)} & 2145 & 16 \\ \small{n-Cr4(65nm)} & 4189 & 20 \\ \hline \hline $\end{tabular}$ \end{table} \section{Podsumownie} ... przykładowy tekst ... w podrozdziale \ref{sec:2.1}. \addcontentsline{toc}{section}{Literatura} \begin{thebibliography}{99} \bibitem{art:1} I. Nazwisko, {\tt Czasopismo X}, rok, strona. \end{thebibliography} %\newpage \addcontentsline{toc}{section}{Spis tabel} \listoftables %\newpage \addcontentsline{toc}{section}{Spis rysunków} \listoffigures \end{document}

• Zadanie: Skompiluj przykład w środowisku ShareLATEX, a następnie bazując na przykładzie napisz coś z sensem ;)

7 Tydzień ósmy

7.1 BibT_EX

7.1.1 Wprowadzenie

Program BibT_EXsłuży do formatowania listy cytowań, które chcemy dołączyć do dokumentu tworzonego przy pomocy I^AT_EX'a. Sposób ten jest wygodną alternatywą dla środowiska thebibliography, w momencie kiedy pracujemy z dużą bazą cytowań. Baza bibliograficzna używana przez BibT_EXznajduje się w oddzielnym pliku tekstowym - z rozszerzeniem .bib.

Plik .bib składa się z serii bloków, które odpowiadają kolejnym pozycjom bibliograficznym. Wygodną cecą $BibT_EX$ 'a jest to, że pozycje nie muszą odpowiadać kolejności występowania w tekście (np. pracy dyplomowej). BibT_EX sam dba o to, aby końcowy efekt był odpowiednio posortowany. Oto przykład pozycji bibliograficznej zapisanej w pliku .bib:

```
@article{Fra00,
 author={ M. M. Fraga et al.},
 journal={IEEE Trans. Nucl.Sci.},
 volume=\{47\},
 pages={933},
year={2000},
}
@book{St78,
 author={A. Strzałkowski},
 title={Wstęp do fizyki jądra atomowego.},
publisher={PWN},
year={1978},
}
@misc{nist,
url="http://www.nist.gov/pml/data/asd.cfm",
note="http://www.nist.gov/pml/data/asd.cfm/, 30.06.2013"
7
```

Każda pozycja rozpoczyna się od znaku © po czym następuje słowo kluczowe. Oto kilka przykładów:

- Carticle dla artykułu
- @book dla książki
- **@inproceedings** dla materiałów konferencyjnych
- **Cmisc** jeżeli nic innego nie pasuje

Pełną listę słów kluczowych można znaleźć pod adresem: https://en.wikipedia.org/wiki/BibTeX

7.2 Składanie tekstu z plików

Tak, jak bibliografię można umieścić w pliku zewnętrzym, tak też poszczególne części naszego tekstu. Jest to szczególnie wygodne przy składaniu tekstów długich - prac dyplomocych czy książek.

Przykład wykorzystania takiej metody poniżej:

```
\documentclass[12pt,a4paper,twoside]{report}
\usepackage[polish]{babel}
\usepackage[utf8]{inputenc}
\usepackage{polski}
\usepackage{graphicx}
\usepackage{indentfirst}
\usepackage[nottoc]{tocbibind} %add bibliography to table of contents automatically
\usepackage{cite} %get nice bibliography number [3{5] instead of [3,4,5]
\usepackage[bindingoffset=1cm,centering,margin=2.3cm,top=1in,bottom=1in]{geometry}
```

\title{Przykład składania pliku \LaTeX 'owego z wielu plików} \author{Imie i nazwisko autora} \date{\today} \begin{document} \maketitle \tableofcontents \newpage \input{abstract.tex} \newpage \input{intro.tex} \newpage \input{results.tex} \newpage \input{summary.tex} \bibliographystyle{unsrt}%Used BibTeX style is unsrt \bibliography{references} \newpage \listoftables \newpage \listoffigures \appendix \input{appendix.tex} \end{document}

W ten sposób możemy złożyć tekst z dowolnej liczby rodziałów. Każdy plik "składowy" załączamy do dokumentu komendą:

```
\input{nazwa_pliku.tex}
```

Wewnątrz pliku "składowego" tekst formatujemy IATEX'owo, ale nie umieszczając preambuły. Preambuła umieszczona w pliku głównym jest wspólna dla wszystkim plików "składowych".

Bibliografię dodajemy do dokumentu komendą:

\bibliographystyle{unsrt} \bibliography{references}

W pierwszej linijce definiujemy style naszej bibliografii. W drugiej dodajemy plik references.bib - uwaga - mozna zapisać z rozszerzeniem lub bez.

• Zadanie: Bazując na przykładzie z poprzednich zajęć, podziel swój dokument na pliki składowe i skonstruuj swój plik główny, jak wyżej. Dodaj kilka pozycji w swojej bibliografii (strona internetowa, książka, artykuł).

7.3 Style bibliografii

Poniższa tabela pokazuje jakie style cytowania mogą być użyte w tekście. Tabela zawiera tylko podstawowe style. Więcej przykładów można znaleźć w linkach poniżej:

http://www.univie.ac.at/nuhag-php/bibtex/bibstyles.pdf

http://www.mackichan.com/index.html?techtalk/632.htm~mainFrame

| Styl | Format | Referencja | Sortowanie |
|----------|----------------------|---------------|---------------|
| abbrv | H. J. Simpson | ID | po autorze |
| plain | Homer Jay Simpson | ID | po autorze |
| unsrt | Homer Jay Simpson | ID | po referencji |
| alpha | Homer Jay Simpson | Sim95 | po autorze |
| abstract | H. J. Simpson | Simpson-1995a | |
| apa | Simpson H. J. (1995) | Simpson1995 | |

Tabela 1: Style bibliografii

• Zadanie: Wypróbuj różne style bibliografii - z tego conajmniej 3 spoza tabeli w skrypcie.

8 Tydzień dziewiaty

8.1 Bibliograficzne bazy danych

http://www.buw.uw.edu.pl/ - Bibliotek UW

- Zadanie: Korzystając z kompilatora ShareIAT_EXi środowiska BibT_EXsporządź dokument zawierający bibliografię. Bibliografia powinna sortować rekordy w kolejności alfabetycznej, wg nazwiska autora (automatycznie).
- Zadanie: Znajdź artykuł opisujący sposób pomiaru wydajności kwantowej w ośrodkach rozpraszania z czasopisma JOURNAL OT APPLIED PHYSICS, wpisz go do swojej bibliografii.
- Zadanie: Znajdź najnowsze wydanie podręcznika R. Feynmana, zawierającego informacje na temat mechaniki ośrodków ciągłych. Wpisz go do swojej bibliografii.

https://pbn.nauka.gov.pl/ - Polska Bibliografia Naukowa

- Zadanie: Znajdź swojego promotora i sprawdź ile publikacji napisał, jako wykładowca UW.
- Zadanie: Znajdź publikację Twojego promotora, która tematyką jest najbardziej zbliżona do tematyki Twojej pracy licencjackiej. Wpisz ją do swojej bibliografii.

http://www.sciencedirect.com/

• Zadanie: Znajdź publikację na temat właściwości transportowych grafenu, wiedząc, że opublikowano ją w czasopiśmie PHYSICS LETTERS A w sierpniu 2013 roku. Wpisz ją do swojej bibliografii.

http://www.scopus.com/

- Zadanie: Sprawdź ile artkułów na temat półprzewodników zostało opublikowanych w czasopiśmie JOURNAL OF APPLIED CRYSTALLOGRAPHY w roku 2008.
- Zadanie: Znajdź ponownie swojego promotora i dowiedz się jaki ma współczynnik Hirscha (h-index).
- Zadanie: Znajdź ponownie swojego promotora i dowiedz się w jakim czasopiśmie najczęściej publikował.

http://materials.springer.com/ - właściwości pierwiastków, czasopisma, itp.

• Zadanie: Wiedząc, że wzór strukturalny aniliny wygląda następująco: www.fuw.edu.pl/~mkuich/ pzi/formula.png, znajdź rysunek 3D tej struktury oraz dokument opisujący właściwości dielektryczne tego związku.

https://inspirehep.net/ - high energy physics http://worldwide.espacenet.com/ - patenty https://scholar.google.com/ - baza google

Pod tym adresem znajdziesz wykaz wyrażeń i skrótów bibliograficznych: http://poledyt.amu.edu. pl/download/Wyrazenia%20i%20skroty%20bibliograficzne.pdf

9 Tydzień jedenasty

9.1 Avogadro

Avogadro jest zaawansowanym narzędziem do rysowania cząsteczek i związków chemicznych. Program ten został zaprojektowany na potrzeby modelowania molekularnego, bioinformatyki, materiałoznawstwa i innych działów nauki powiązanych z tematem modelowania molekularnego.

Aplikację Avogadro można znaleźć online pod adresem: https://www.rollapp.com/app/avogadro. Na rysunku 10 przedstawiono panel startowy aplikacji. Wg mnie dużym minusem tej aplikacji jest fakt, że pozwala na export grafiki wyłącznie do "chmury". Jednak jeśli ktoś z tego korzysta, to może być przydatnym narzędziem.



Rysunek 10: Panel startowy aplikacji Avogadro

9.2 Inne edytory "molekularne"

Dostępne są również inne narzędzia do rysowania cząsteczek i związków chemicznych, choć nie tak dopracowane, jak Avogadro. Oto kilka przykładów:

- 1. http://www.webqc.org/moleculareditor.php wymaga JavaScript'a, ale ma także wiele przydatnych narzędzi:
 - kalkulatory jednostek,
 - "narzędzia" chemiczne np. kalkulator bilansowania reakcji chemicznych
 - tabele stałych chemicznych i fizycznych
- 2. https://marvinjs-demo.chemaxon.com/latest/editor.html bardzo łatwe narzędzie
- 3. http://www.chemicalize.org/ bardzo fajne narzędzie, które dostarcza także informacje o właściwościach i geometrii cząsteczek
- 4. https://www.molecular-networks.com/online_demos/corina_demo_interactive bardzo proste demo
- 5. http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/edit2/index.html narzędzie do rysowania wzorów strukturalnych
- Zadanie: Za pomocą narzędzi chemicznych dołączonych do edytora 1, oblicz objętość tlenku azotu w temperaturze pokojowej i przy ciśnieniu normalnym korzystając z prawa Van der Waalsa.
- Zadanie: Za pomocą narzędzi chemicznych dołączonych do edytora 1, oblicz masę molową estru, który pachnie, jak sosna.

- Zadanie: Za pomocą wybranego edytora narysuj cząsteczkę CaCO₃ lub inny bardziej skomplikowany związek chemiczny.
- Zadanie: Za pomocą edytora 3 narysuj cząsteczkę kofeiny oraz znajdź w nim informacje na temat geometrii cząsteczki, refrakcji cząsteczki, rozkładu ładunku w cząsteczce oraz jej nazwę w standardzie IUPAC.

9.3 "AutoCAD" online

AutoCAD jest narzędziem do tworzenia rysunków technicznych, daje wiele możliwości dla specjalistycznego wykorzystania. Bardzo okrojoną wesję można znaleźć pod adresem: https://client.autocad360.com/

• Zadanie: Stwórz nowy projekt w aplikacji autocad360, w której próbujesz odwzorować rysunek 11.



Rysunek 11: Przykładowy rysunek stworzony w aplikacji autocad360

9.4 Rysowanie

Czasem znajomość edytorów graficznych online jest przydatna. Oto kilka linków do przydatnych narzędzi:

- http://www.abcya.com/abcya_paint.htm (dla osób mniej zaawansowanych plastycznie)
- http://www.sumopaint.com/home/ (nieco bardziej zaawansowany paint)
- http://www.queekypaint.com/app/ (nieco bardziej zaawansowany paint)
- http://www190.lunapic.com/editor/?action=paint-bucket (edytor zdjęć)
- http://www.psykopaint.com/painter.html (edytor zdjęć)
- http://www.escapemotions.com/experiments/flame/ (coś dla ludzi z duszą artysty)

10 Tydzień trzynasty

10.1 Tworzenie własnego zasobu internetowego

Korzystając z możliwości html'a, css'a i JavaScript'a stworzymy kalkulator: http://www.codecademy.com/courses/web-intermediate-en-jfhjJ/0/1

- html pozwala opisać strukturę informacji zawartych wewnątrz strony internetowej, nadając znaczenie poszczególnym fragmentom tekstu – formując hiperłącza, akapity, nagłówki, listy – oraz osadza w tekście dokumentu obiekty plikowe np. multimedia bądź elementy baz danych np. interaktywne formularze danych. HTML umożliwia określenie wyglądu dokumentu w przeglądarce internetowej. Do szczegółowego opisu formatowania akapitów, nagłówków, użytych czcionek i kolorów, zalecane jest wykorzystywanie kaskadowych arkuszy stylów.
- **CSS** to kaskadowe arkusze stylów (ang. Cascading Style Sheets, w skrócie CSS) to język służący do opisu formy prezentacji (wyświetlania) stron WWW. Arkusz stylów CSS to lista dyrektyw (tzw. reguł) ustalających w jaki sposób ma zostać wyświetlana przez przeglądarkę internetową zawartość wybranego elementu (lub elementów) (X)HTML lub XML. Można w ten sposób opisać wszyst-kie pojęcia odpowiedzialne za prezentację elementów dokumentów internetowych, takie jak rodzina czcionek, kolor tekstu, marginesy, odstęp międzywierszowy lub nawet pozycja danego elementu względem innych elementów bądź okna przeglądarki. Wykorzystanie arkuszy stylów daje znacznie większe możliwości pozycjonowania elementów na stronie, niż oferuje sam (X)HTML.
- JavaScript skryptowy język programowania, najczęściej stosowany na stronach internetowych. Skrypty służą najczęściej do zapewnienia interaktywności poprzez reagowanie na zdarzenia, sprawdzania poprawności formularzy lub budowania elementów nawigacyjnych. Skrypty JavaScriptu uruchamiane przez strony internetowe mają znacznie ograniczony dostęp do komputera użytkownika.
- **jQuery** lekka biblioteka programistyczna dla języka JavaScript, ułatwiająca korzystanie z Java-Scriptu. Większość wtyczek i skryptów opartych na jQuery działa na stronach nie wymagając zmian w kodzie HTML (np. zamienia klasyczne galerie złożone z miniatur linkujących do obrazków w dynamiczną galerię).

Jeśli nie znacie podstaw html'a i CSS'a, a chcecie poznać - proponuję przejść kilka bezpłatnych kursów na http://www.codecademy.com/