Corso di Laurea Magistrale in Chimica delle Molecole di Interesse Biologico

Struttura e Dinamica di Biomolecole - 2005/2006

Laboratorio 1 - (21 marzo 2006)

1 Preliminari

1.1 Ripasso UNIX e configurazione utente

1. Aprire una sessione facendo login con il nome del vostro utente e password.
2. Aprire un terminale usando il menù principale del Desktop (tasto di partenza in basso a sinistra).
3. Ripassare la "sintassi generale di un comando"
4. Ripassare il "percorso assoluto e relativo" per indicare file e directory
5. Ripassare i comandi per la "gestione essenziale di file e directory"
6. Copiare il file `/home/infochim/etc/bashrc.global` su `~/.bashrc`
7. Copiare il file `/home/infochim/etc/init.el` su `~/.xemacs`
8. uscire dal terminale e rientrare

1.2 Editor di testo: [X]emacs

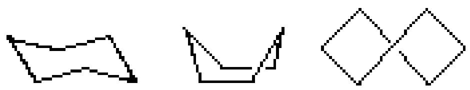
1. differenza tra editor di testo e word processor
2. Lanciare [x]emacs, col comando
   `[x]emacs`
3. provare a uscire
4. rientrare lanciando il comando in background
   `[x]emacs &`
5. osservare le varie aree dello schermo
   (a) barra menu
   (b) area di lavoro: il buffer
   (c) riga di stato (Mode Line)
   (d) minibuffer
6. menu, scorciatoie e comandi "complessi"
7. help: Apropos, Key, Whereis (locate); Tutorial
8. differenza tra buffer e file
9. scrivere un piccolo testo e salvarlo su file (es `~/.plan`)
10. "editare" una directory: dired

1.3 Ripasso shell

1. Ripassare la tabella sul reindirizzamento di input e output e sulla pipeline

2 Esempio dell'uso di xemacs, vmd e gnuplot: studio delle energie approssimate di varie conformazioni del cicloesano.

La molecola del cicloesano è costituita da 6 atomi di carbonio disposti ad anello con 2 atomi di H legati a ciascun C. È una molecola flessibile: mantenendo gli stessi legami, gli angoli tra di essi possono cambiare producendo diverse "conformazioni", tra le quali quelle cosiddette "a sedia", "a barca" e "avvitata (*twisted)*":



1. Copia del file con le coordinate e preparazione del file con le energie:
   (a) Creare la directory `cicloesano` nella vostra home directory.
   (b) Portarsi sulla directory `~infochim/PUB/cicloesano`. Essa contiene il file delle coordinate e le energie della molecola in 35 diverse conformazioni e un programma per l'estrazione delle energie da questo file. *N.B. Le energie sono state calcolate in modo approssimato e non corrispondono a quelle attualmente note.*
   (c) Selezionare le righe del file contenenti le energie, dando il comando

       grep HEAT cyclohexane_movie.xyz

   (d) costruire una *pipeline*: passare l'output del precedente comando come input del programma ./cyclo-print-energy (notare i caratteri ./ prima del nome del comando!).
   (e) redirigere l'output della precedente *pipeline* sul file `~/cicloesano/cyclo.dat`
   (f) copiare il file `cyclohexane_movie.xyz` sulla directory `~/cicloesano` con il nome `cyclo.xyz`
2. Visualizzazione delle varie conformazioni della molecola:
   (a) portarsi sulla directory `~/cicloesano/` e lanciare il comando `vmd` in *background.*
   (b) aprire il file `cyclo.xyz` (nella finestra "VMD Main" scegliere "File/New Molecule...")
   (c) Ruotare la molecola trascinando il mouse in modo che sia visibile la conformazione "a sedia" di partenza.
   (d) Scegliendo Mouse/Label/Atoms e Graphics/Labels, marcare gli atomi di carbonio 2(index=1) e 5(index=4).
   (e) Scegliendo Mouse/Label/Bonds marcare ora la distanza tra i due atomi. La distanza verrà rappresentata sulla molecola con una linea spezzata e un valore
   (f) Scorrere tutte le 35 istantanee (0-34) della molecola nelle varie conformazioni. Notare che il valore della distanza si aggiorna dinamicamente
3. Diagramma delle energie delle varie conformazioni:
   (a) Dalla directory `~/cicloesano/` lanciare il programma gnuplot
   (b) diagrammare i dati del file `cyclo.dat`, energia conformazionale in funzione del numero d'ordine dell'istantanea, dando il comando

       plot 'cyclo.dat' using 0:1

       I punti formano una curva con un minimo all'inizio, uno secondario nel mezzo, e uno alla fine.
   (c) Osservando i punti diagrammati e contemporaneamente scorrendo le istantanee su jmol determinare quali sono i valori della distanza 2-5 ai quali si hanno il primo, il secondo e il terzo minimo.
   (d) editare il file `~/cicloesano/cyclo.min` con `xemacs` e riportarvi questi valori di minimo della distanza 2-5. Es:

```
# distanza  energia

  2.853     -38.67
  2.666     -35.42
  2.860     -38.71
```

   (e) uscire da gnuplot dando exit