Corso di Laurea Specialistica in Chimica delle Molecole di Interesse Biologico

Struttura e Dinamica di Biomolecole - 2006/2007

Laboratorio 1 - (20 marzo 2007)

---

1 Preliminari

1.1 assegnazione account

- Assegnazione nome utente e password
- uso della posta elettronica su `studenti.fisica.unifi.it`

1.2 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/signorini/etc/bashrc.global` su `~/.bashrc`
7. Copiare il file `/home/signorini/etc/init.el` su `~/.xemacs`
8. uscire dal terminale e rientrare

1.3 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

1.4 Diagrammare dati e funzioni: `gnuplot`

1. diagrammare file di dati
2. diagrammare funzioni
3. fit di una funzione su dati

2 Esempio dell'uso della riga di comando, di **xemacs** e **gnuplot**: distribuzione "canonica" di gettoni su una scacchiera

2.1 creazione dei dati

Si usa il programma `boltz`

1. copiare il file di dati `c.in` su una directory sotto la propria home
2. copiare il programma
3. lanciare il programma con

   ```
   boltz c
   ```

4. esaminare i file di output `c.out` e `c.tbl con` xemacs

2.2 visualizzazione e fit

```
gnuplot> p(x)=1./q*exp(-beta*x)
gnuplot> fit p(x) 'c.out' u 0:1 via q,beta
gnuplot> plot 'c.out' u 0:1, p(x)
```