Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche, Curriculum "Struttura, dinamica e reattività chimica"

Struttura e Dinamica Molecolare di Sistemi Biologici - 2009/2010

Laboratorio 1 - (6 novembre 2009)

1 Preliminari

1.1 assegnazione account

• Assegnazione nome utente e password

1.2 ripasso UNIX¹ 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.
- 3. Ripassare la "sintassi generale di un comando" [tab. 4.1]
- 4. Ripassare il "percorso assoluto e relativo" per indicare file e directory [fig. 4.1]
- 5. Ripassare i comandi per la "gestione essenziale di file e directory" [tab. 4.2]
- 6. Copiare il file "signorini/etc/bashrc.global su "/.bashrc
- 7. Copiare il file "signorini/etc/init.el su "/.emacs
- 8. uscire dal terminale e rientrare

1.3 Editor di testo: emacs²

- 1. differenza tra editor di testo e word processor ³
- 2. Lanciare emacs, col comando

emacs

- 3. provare a uscire
- $4.\,$ rientrare lanciando il comando in background

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. editare il file ~/.plan
 - (a) inserire n.o matricola e codice corso di laurea
- 10. "editare" una directory: dired

¹fare riferimento alle dispense sul "sistema operativo" in http://www.chim.unifi.it/u/signo/did/unix

 $^{^{2}}$ sez. 5.1

 $^{^{3}}$ sez. 4.5.1

2 Installazione e test del programma ORAC

2.1 installazione

Scaricare la versione aggiornata del programma ORAC dal sito ufficiale http://www.chim.unifi.it/orac, spacchettarla e compilarla sul proprio PC seguendo le istruzioni.

2.2 test

Eseguire i test fondamentali (directory tests/basic_tests) Analisi del file di input