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
- 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 (e
s~/.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
 $\tt boltz$

- 1. copiare il file di dati ${\tt c.in}$ 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)