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 UNIX[1] 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: emacs[2]

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

---

[1] fare 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