

Esercitazione 2 (3)

1. Aprire un terminale. Editare il file `~/2.risposte` con `pico`. In questo file devono essere riportate le risposte ad alcune domande dei seguenti esercizi. Aprire un altro terminale.
2. Fare la lista della directory `/local/iraf/imdirs/anna` (usare il comando `ls -l`).
3. Usare `man ls` per esaminare le varie opzioni POSIX del comando `ls`; usare una o più di queste opzioni per visualizzare una lista dei file (e sottodirectory) di `/local/iraf/imdirs/anna` ordinate secondo l'orario, dalla più antica alla più recente. Qual è il file o sottodirectory modificato più di recente? (Riportare la risposta nel file `~/2.risposte` aperto all'inizio)
4. Quante sono le sottodirectory di `/local/iraf/imdirs`? (Riportare la risposta nel file `~/2.risposte` aperto all'inizio). Suggerimento:
 - (a) usare il carattere di reindirizzamento dell'output (`>`) per mettere l'output del comando `ls -l` nel file temporaneo `a.000`
 - (b) usare il comando `wc -l < a.000` per contare il numero di righe di questo file
 - (c) ottenere lo stesso risultato senza passare attraverso il file temporaneo, combinando i due comandi precedenti in una *pipeline*.
5. Il file `~/infochim/wrk/telefonico.txt` contiene un elenco telefonico del personale dell'Università. Usare il comando `grep` per selezionare le righe relative a persone che si chiamano Michele. Usare il comando `sort` in successione (*pipeline*) a `grep` per ordinare queste righe in ordine alfabetico di cognome (la prima parola). Dirigere l'output sul file `~/2.michele`
6. Portarsi sulla directory `~/infochim/wrk/pdb`. Questa directory contiene file di coordinate molecolari scritte nel formato PDB: le coordinate degli atomi si trovano nelle righe che cominciano per `ATOM` o `HETATM`, una riga per atomo, come nel seguente esempio:

ATOM	1	N	MET	1	127.117	33.271	-15.101	1.00	0.00	N
ATOM	2	CA	MET	1	126.476	34.059	-14.008	1.00	0.00	C
ATOM	3	C	MET	1	124.981	34.233	-14.286	1.00	0.00	C
ATOM	4	O	MET	1	124.194	34.449	-13.383	1.00	0.00	O
ATOM	5	CB	MET	1	127.188	35.411	-14.022	1.00	0.00	C
ATOM	6	CG	MET	1	128.474	35.312	-13.199	1.00	0.00	C
ATOM	7	SD	MET	1	129.210	36.956	-13.022	1.00	0.00	S

L'ultima colonna indica la specie atomica.

Usando i comandi `grep` e `wc`, contare quanti atomi di N sono contenuti nelle molecole descritte nei seguenti file:

- `1a5e.pdb`

- 1qu5.pdb
- 3rpb.pdb

(Riportare la risposta nel file ~/2.risposte aperto all'inizio)

- Usare il comando `echo` per stampare su video la frase "Nel mezzo del cammin di nostra vita". Dirigere l'output di questo comando sul file ~/2.terzina. Sempre usando `echo` e l'operatore ">>" aggiungere in coda a questo file, una alla volta, le seguenti righe:

```
mi ritrovai per una selva oscura
che la diritta via era smarrita
```

- Le variabili `HOSTNAME` e `TERM` sono predefinite e contengono, rispettivamente, il nome del vostro calcolatore e il tipo di terminale. Stampare su video il loro contenuto. Stampare su video la frase "Nome calcolatore: ...; tipo terminale: ..." facendo in modo che al posto di ... compaia, nell'ordine, il nome del vostro calcolatore e il tipo di terminale. NB: il carattere ";" deve risultare stampato su video. Dirigere l'output del comando sul file ~/2.info
- Creare la directory ~/tmp e copiarvi tutti i file della directory /etc/sysconfig il cui nome finisce per d
- Copiare il file ~/infochim/wrk/pdb/butane-a.pdb nella vostra home directory con il nome butano.pdb. Lanciare il comando


```
jmol butano.pdb
```

 in *background*.
 - dal menu `Display`► `Atom Labels` selezionare `Atom Numbers`
 - dal menu `Measure`► `Distance` calcolare la distanza tra l'atomo 1 e l'atomo 2 (selezionarli con il tasto sinistro del mouse, poi premere il bottone `Add to Measurement List`); e quella tra l'atomo 2 e l'atomo 3. Sono uguali o diverse? Riportare la risposta nel file ~/2.risposte aperto all'inizio.
 - dal terminale, aprire il file butano.pdb con `pico`. Modificare la posizione dell'atomo 2 in modo da rendere la lunghezza di legame 1-2 minore della lunghezza 2-3. Si può visualizzare la struttura molecolare modificata in `jmol`, ricaricando il file butano.pdb (menu `File`► `Recent Files ...`) e ripetendo il punto precedente.
- Salvare, da `pico`, il file ~/2.risposte. Uscire da `pico`. Spostare tutti i file della vostra *home directory* il cui nome comincia per "2." sulla directory ~/Esercizi creata nell'esercitazione precedente.