

Esercitazione 2 - parte guidata

1. Quante sono le sottodirectory di `/users/b/chimica`? Suggerimento:
 - (a) usare il carattere di reindirizzamento (`>`) per scrivere 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*.
2. 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`
3. 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`, 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 in ciascuna delle molecole descritte nei seguenti file:

- `1a5e.pdb`
 - `1qu5.pdb`
 - `3rpb.pdb`
4. Copiare il file `~infochim/wrk/pdb/butane-a.pdb` nella vostra home directory con il nome `butano.pdb`. Portarsi nella propria home directory e lanciare il comando `jmol` in *background*.
 - (a) aprire `butano.pdb` tramite il menu `Open/File`
 - (b) dal menu `Display/Atom Labels` selezionare `Atom Numbers`
 - (c) 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?
 - (d) 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.
 5. Copiare il file `~infochim/wrk/ga.dat` sulla propria *home directory* con il nome `ga.dat`. Dalla propria *home directory*, lanciare il programma `gnuplot`

- (a) Per diagrammare i punti sperimentali contenuti nel file `ga.dat` si dà il comando
- ```
plot 'ga.dat'
```
- (notare le virgolette che delimitano il nome del file)
- (b) per diagrammare il logaritmo della seconda colonna in funzione della prima:
- ```
plot 'ga.dat' using 1:(log($2))
```
- (c) fare il fit di una retta su questi dati con il comando
- ```
fit a*x+b 'ga.dat' using 1:(log($2)) via a, b
```
- (d) diagrammare i dati insieme alla funzione di fit con il comando
- ```
plot 'ga.dat' using 1:(log($2)), a*x+b
```
- (e) salvare la sessione di gnuplot con il comando
- ```
save 'ga.gnu'
```
- e uscire da gnuplot dando `exit`