

Guía de Instalación

Antes de empezar, es necesario actualizar su sistema,

```
sudo apt update && sudo apt upgrade
```

Requisitos

packmol

Este proceso solo aplica para Linux.

1. Cree un directorio de trabajo, con el nombre que guste, por ejemplo, `mkdir mosdef cd mosdef`
2. Se descargan los archivos comprimidos [aquí](#) (sugerimos la v20.14.4), ya sea en formato `.tar.gz` or en `.zip`.
3. Se descomprimen usando:

```
tar xvfz packmol-20.14.4.tar.gz
```

o

```
unzip packmol-20.14.4.zip
```

1. Nos aseguramos de tener gfortran instalado:

```
sudo apt install gfortran
```

(O con el administrador de paquetes del sistema)

1. Entra al directorio de packmol y lo instalamos usando make:

```
cd packmol-20.14.4
./configure
make
```

1. Regrese a su directorio de trabajo.

Instalación de MoSDeF

Esta instalación es hecha con conda, por lo que es altamente recomendado que actualize antes de iniciar con la instalación: `conda update --all`

Se pueden instalar los demás requisitos a través de:

```
git clone https://github.com/Pablo-Pomares/tutorial_mosdef
cd tutorial_mosdef
conda install -n base conda-libmamba-solver
conda env create -f enviroment.yml --solver=libmamba
conda activate tutorial_mosdef
```

Cualquier duda puede ser dirigida al correo: pablo.pomaresv@alumno.buap.mx.