

# PyMOL 2.4 Open Source para Windows

Este repositório fornece um método para instalar o PyMOL v2.4 pelo [Anaconda](#) no Windows.

## Instalação

Siga estas etapas para instalar o PyMOL v2.4:

### 1. Instale o Anaconda

Baixe o [Anaconda](#) e instale-o.

### 2. Crie um ambiente no Anaconda

Abra o Anaconda Prompt (digite-o no menu Iniciar) e execute:

```
conda create -n pymol python=3.7
```

Em seguida, ative o ambiente `pymol`:

```
conda activate pymol
```

### 3. Instale os pacotes de Python necessários ao PyMOL

Ainda no Anaconda Prompt, execute:

- `pip 3`:

```
conda install -c anaconda pip
```

- Numpy:

```
pip install numpy
```

- PMW:

```
pip install pmw
```

- pyqt5:

```
pip install pyqt5
```

### 4. Baixe os arquivos *wheel* do PyMOL

Baixe os arquivos *wheel* do PyMOL de código aberto pré-compilados, compatíveis com Python 3.7.x e Windows de 64 bits, nos links abaixo:

- [pymol-launcher](#)
- [pymol](#)

*Nota:* Você pode verificar a versão do Python no anaconda digitando `python --version`.

Se você estiver usando uma versão diferente do Python ou do Windows de 32 bits, há outras versões pré-compiladas [aqui](#).

A estrutura do nome do arquivo é a seguinte:

```

1  pymol-2.4.0a0-cp37-cp37m-win_amd64.whl
2
3      \_ \_ \_ for 64 bit Windows
4
5      \_ \_ \_ for Python 3.7.x
6
7      \_ \_ \_ PyMOL version 2.4.0a0

```

## 5. Instale os arquivos *wheel* do PyMOL

No ambiente `pymol` do conda, mude para o diretório de downloads (`C:\Downloads`):

```
cd C:\Downloads
```

Em seguida, instale `pymol_launcher-2.1-cp37-cp37m-win_amd64.whl`, digitando:

```
pip install --no-index --find-links="%CD% pymol_launcher-2.1-cp37-cp37m-win_amd64.whl
```

Finalmente, para instalar `pymol-2.4.0-cp37-cp37m-win_amd64.whl`, execute:

```
pip install --upgrade --no-deps pymol-2.4.0-cp37-cp37m-win_amd64.whl
```

*Nota:* Se você baixou arquivos diferentes no **Passo 4**, substitua `pymol_launcher-2.1-cp37-cp37m-win_amd64.whl` e `pymol-2.4.0-cp37-cp37m-win_amd64.whl` pelos arquivos *wheel* baixados.

## 6. Inicie o PyMOL v2.4

No ambiente `pymol` no Anaconda Prompt, execute:

```
pymol
```

Então, o PyMOL v2.4 será iniciado e estará pronto para usar.