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, você pode abri-lo digitando Anaconda Prompt no barra de pesquisa, localizada no canto inferior esquerdo. Com o Anaconda Prompt aberto, execute:

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

Em seguida, ative o ambiente pymol:

conda activate pymol

3. Instale os pacotes de Python necessários

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:

5. Instale os arquivos wheel do PyMOL

No ambiente pymol no Anaconda, mude para o diretório de downloads (C:\Users\usuario\Downloads):

cd 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, execute:

pymol

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