

PyMOL のインストール ([PyMOL conda installation](https://docs.conda.io/en/latest/user-guide/install/index.html#regular-installation) を参照してください)

1. conda のインストール (<https://docs.conda.io/projects/conda/en/latest/user-guide/install/index.html#regular-installation> を参照してください. Windows の場合の説明は下記にまとめました)

- A) <https://docs.conda.io/en/latest/miniconda.html> から Miniconda3 Windows 64-bit インストーラをダウンロード.
- B) Miniconda3-latest-Windows-x86_64.exe をインストール
- C) スタートメニューに Anaconda Powershell Prompt (miniconda3)が追加されるので, Anaconda Powershell Prompt (miniconda3)を開く
- D) コマンドラインが表示されるので, 下記コマンドを入力する

```
conda create --name pymol python=3.8
```

これで PyMOL 専用の conda 環境を作りました.

```
done
#
# To activate this environment, use
#
#     $ conda activate pymol
#
# To deactivate an active environment, use
#
#     $ conda deactivate
```

- E) 上記の画面が表示されるので, 下記コマンドで PyMOL 専用の環境に入ります.
- ```
conda activate pymol
```

2. PyMOL のインストール ([PyMOL conda installation](https://docs.conda.io/en/latest/user-guide/install/index.html#regular-installation) を参照してください)

- A) 先ほどに続いて, 下記コマンドで PyMOL をインストール.

```
conda install -c conda-forge -c schrodinger pymol-bundle
```

(macOS の場合 PyQt のインストールが必要: (コマンドラインに) `pip install PyQt5` )

- B) インストールが終わりましたら, コマンドラインに下記コマンドを入力して PyMOL を立ち上げます.

```
pymol
```

3. 結果の解析

- A) PyMOL が立ち上がったら, ranked\_0.pdb ファイルを PyMOL の画面にドラッグアンドドロップします. 構造が表示されます.

- B) メニューバーの Display をクリックし, Sequence を選択すれば配列が見れます.

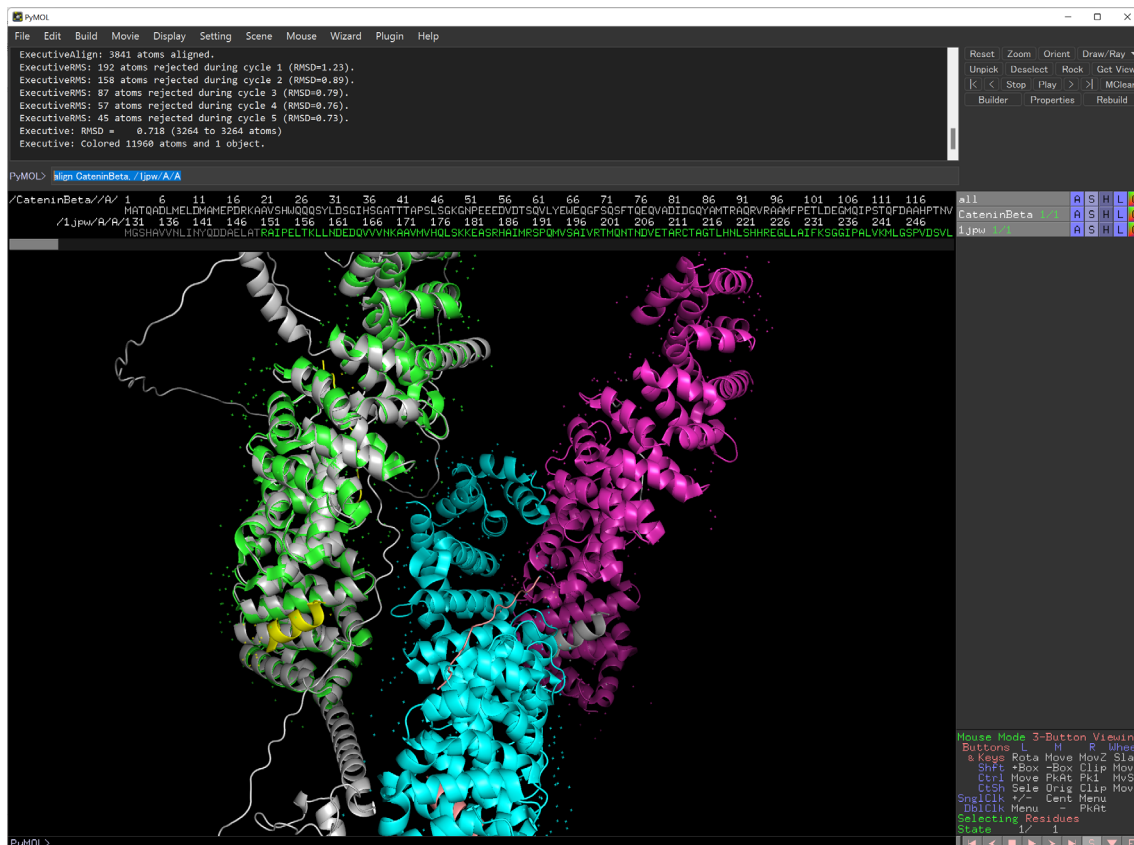
- ~~C) 表示される配列の上に「PyMOL>」があります. これは PyMOL のコマンドライ~~

~~このプロンプトです。ここで下記コマンドを入力します。~~

~~fetch 1jpw (データベースから構造を取得する)~~

~~align CateninBeta, /1jpw/A/A (アライメントを行う)~~

~~D) AlphaFold の予測と PDB に登録されている Catenin beta-1 の構造が重ね合わせられるので、ご確認ください。~~



注 1)

PyMOL のほかの機能に関して下記サイトがわかりやすいと思いますので、ご参照ください。

<https://yoshitakamo.github.io/pymol-book/ch01/index.html>

注 2) インストールを完了した後、二回目以降の利用について

「1. conda のインストール」の Step C, Step E を実行し、conda の PyMOL 環境に入ります。

「2. PyMOL のインストール」の Step B を実行し、PyMOL を立ち上げます。

注 3) PyMOL のアクティベーションについて

<https://pymol.org/2/buy.html> を参照してください。本講座で使用する Educational license のインストールについて下記にまとめました。

A) <https://pymol.org/edu/> にアクセスし、登録します。

- B) メールが届くので、一番下に Download URL, Username, Password が書かれており、Download URL にアクセスします.
- C) PyMOL 2.0 (September 2017)の下にある  
License File: pymol-edu-license.lic  
をダウンロードします.
- D) PyMOL を立ち上げて、Activation 画面が表示されます. Browse for License File をクリックし、先ほどダウンロードした License File を選択してインストールすれば、Activation 完了します.