

PyMOL 3

Table of contents

Mac:

1. Opret en mappe på din computer dedikeret til BMSF-kurset. Lad os sige, at du kalder den **BMSF** og lægger den i din mappe **Dokumenter**.
2. Åbn din Terminal-applikation, og naviger til den mappe ved hjælp af `cd` (noget i retning af `cd Dokumenter` og derefter `cd BMSF`).
3. Når du er i mappen 'BMSF', skal du indsætte kommandoen i Terminalvinduet og trykke på Enter. Du vil blive bedt om at angive enten din brugeradgangskode eller tilladelser til de installerede apps flere gange.

```
pixi init --platform osx-64 -c conda-forge -c anaconda -c schrodinger && pixi config set --local run-post-link-scripts insecure && pixi add pyqt "pymol-bundle=3.1" "vtk-m=1.8"
```

Windows:

1. Opret en mappe på din computer dedikeret til BMSF-kurset. Lad os sige, at du kalder den **BMSF** og lægger den i din mappe **Dokumenter**.
2. Åbn din PowerShell-applikation, og naviger til den mappe ved hjælp af `cd` (noget i retning af `cd Dokumenter` og derefter `cd BMSF`).
3. Når du er i mappen 'BMSF', skal du indsætte kommandoen i PowerShell-vinduet og trykke på Enter. Du vil blive bedt flere gange om at tillade appen at foretage ændringer på din computer.

```
pixi init -c conda-forge -c anaconda -c schrodinger ; pixi config set --local run-post-link-scripts insecure ; pixi add pyqt "pymol-bundle=3.1" "vtk-m=1.8"
```

For at køre PyMOL i din BMSF-mappe skal du bruge denne kommando:

```
pixi run pymol
```

PyMOL 3 burde nu åbne og præsentere dig for en dialogboks, der beder dig om at aktivere det ved hjælp af en licens.

Du kan hente licensen til PyMOL under Materialer/PyMOL på Brightspace.

Gem licensen på din computer.

Åben den fra PyMOL dialogboks.

Hurra, du er igang.