Python 的创始人为吉多·范罗苏姆, 当时他在阿姆斯特丹的 CWI 工作。1989 年的圣诞节期间, 吉多·范罗苏姆为了在打发时间, 决心开发一个新的脚本解释编程, 作为 ABC 语言的一种继承, 担负同 Amoeba 操作系统的交互和异常处理。之所以选中 Python 作为编程的名字, 是因为他是 BBC 电视剧——蒙提·派森的飞行马戏团的爱好者。Python 是为了替代使用 Unix shell 和 C 语言进行系统管理而从 ABC 语言发展起来[5], 而它的模块系统主要受到了 Modula-3 的影响, 它还结合了 C 语言的最少争议特征。就范罗苏姆本人看来, ABC 这种语言非常优美和强大, 是专门为非专业程序员设计的。但是 ABC 语言并没有成功, 究其原因, 他认为是非开放造成的。范罗苏姆决心在 Python 中避免这一错误, 并获取了非常好的效果。

目前范罗苏姆仍然是 Python 的主要开发者,决定整个 Python 语言的发展方向。Python 社群经常称呼他是终身仁慈独裁者(BDFL)。

Python 2.0 于 2000 年 10 月 16 日发布,增加了实现完整的垃圾回收,并且支持 Unicode。同时,整个开发过程更加透明,社群对开发进度的影响逐渐扩大。

Python 3.0 于 2008 年 12 月 3 日发布,此版不完全兼容之前的 Python 源代码。不过,很多新特性后来也被移植到旧的 Python 2.6/2.7 版本。