1. 调用pymol包：from pymol import cmd

2. 参考网站：<https://pymol.org/pymol-command-ref.html>

3. 若不知如何使用命令的时候，可采用在pymol中手动操作，在

3. 加载分子：cmd.load( )



4. 选择分子：cmd.select(‘name’,’object’)



5. 移除分子：cmd.remove( )



6. 保存文件：cmd.save(‘name’,’object’)



注：cif格式可储存多个object的形式

pdb可将所有分子存为一个object

mol2将文件存为state格式

7. 清空内容：cmd.delete (‘all’)



8. 叠合：cmd.align(‘ ‘, ‘ ‘)



9. 删除分子中的金属：cmd.select(‘metal’,’name ca+zn+mn+mg’)

cmd.select('metal','name ca+zn+mn+mg')

10. 将链的名字由A转为B

alter chainA, chain=’B’