

1. PyMOL

1.1. 安装

1. 下载PyMOL 2.6 (LTS)

[PyMOL|.pymol.org](http://pymol.org)

Download PyMOL 2.6 (LTS)

Version 2.6.2-MacOS-py311.dmg - Updated February 5th 2025 ([Installation instructions](#))

For previous versions, [see here](#).

These bundles include Python 3.11.



Windows

EXE Installer



Windows

ZIP Archive



macOS

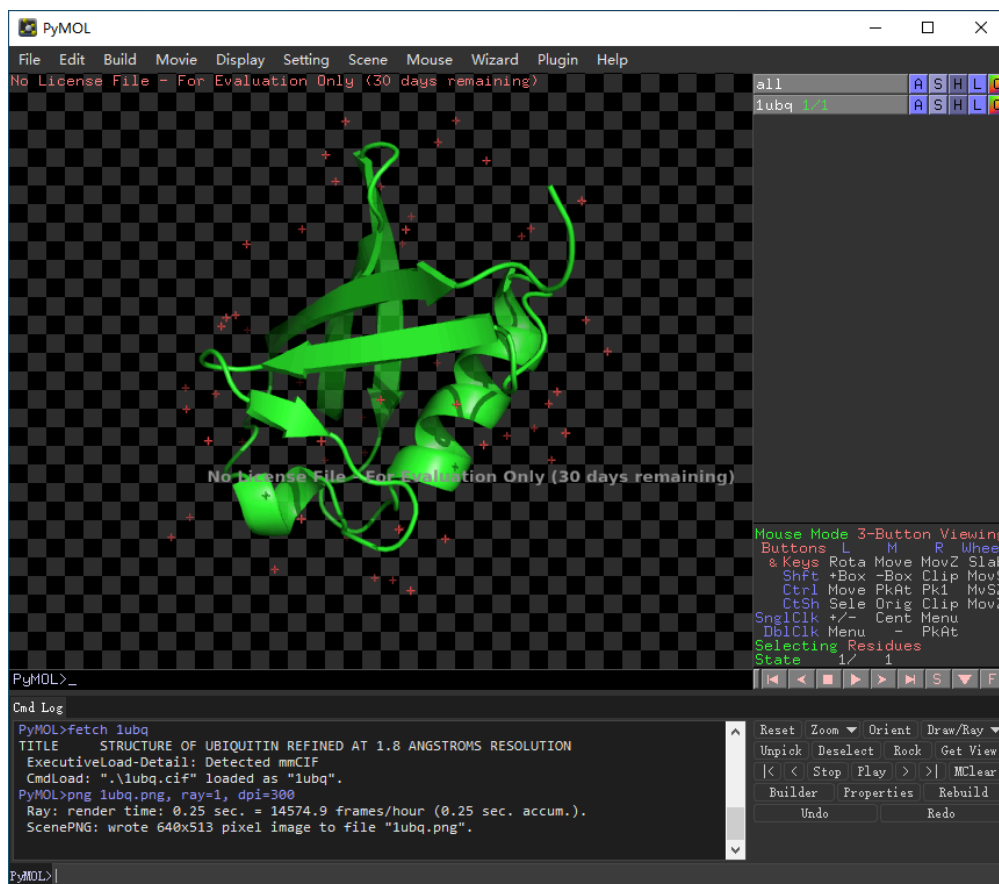
DMG Disk
Image



Linux

TAR.BZ2
Archive

2. 安装完成后即可使用，会有一个三十天的试用期，期间功能正常，只是导出图片会有水印



3. 申请教育许可证（可跳过）

打开网站申请[Registration For Educational-Use Only PyMOL Builds](#)，填写个人信息并提交，之后会收到一个邮件，里面有一组网址、账户和密码，可以用于下载许可证文件

Registration For Educational-Use-Only PyMOL Builds

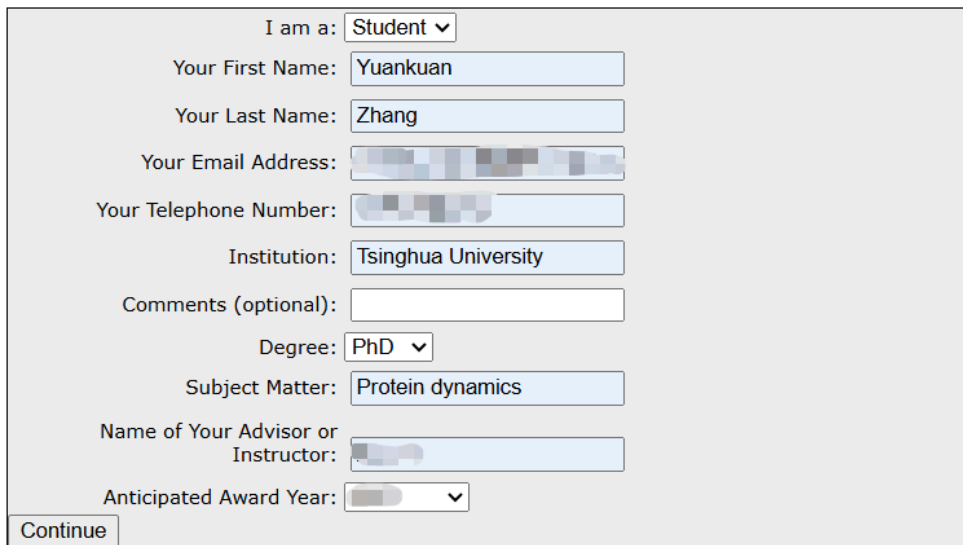
Schrödinger offers **Educational-use-only** PyMOL builds available at no cost to **teachers and high school and college students** (including online courses, homeschooling, etc.) for classroom instruction, homework assignments, and to provide a means for creating high quality figures. Please note that it is not provided for the purposes of academic research or publication.

-> [FAQ \(Frequently Asked Questions\)](#)

The Educational-use-only PyMOL builds are provided "AS IS" with no obligation to grant download access, fix bugs, furnish updates, provide documentation, or meet any other need related to the educational-use PyMOL builds.

If you intend to use PyMOL products for academic research or publication, please purchase an Academic PyMOL subscription, which includes access to technical support, screencasts, and additional resources. See <http://pymol.org/academic>.

Please note that the Education license provided is now generated using the Schrödinger License Manager (SLM). You may need to download an updated version of the software from the homepage to use the new license.



The registration form contains the following fields and values:

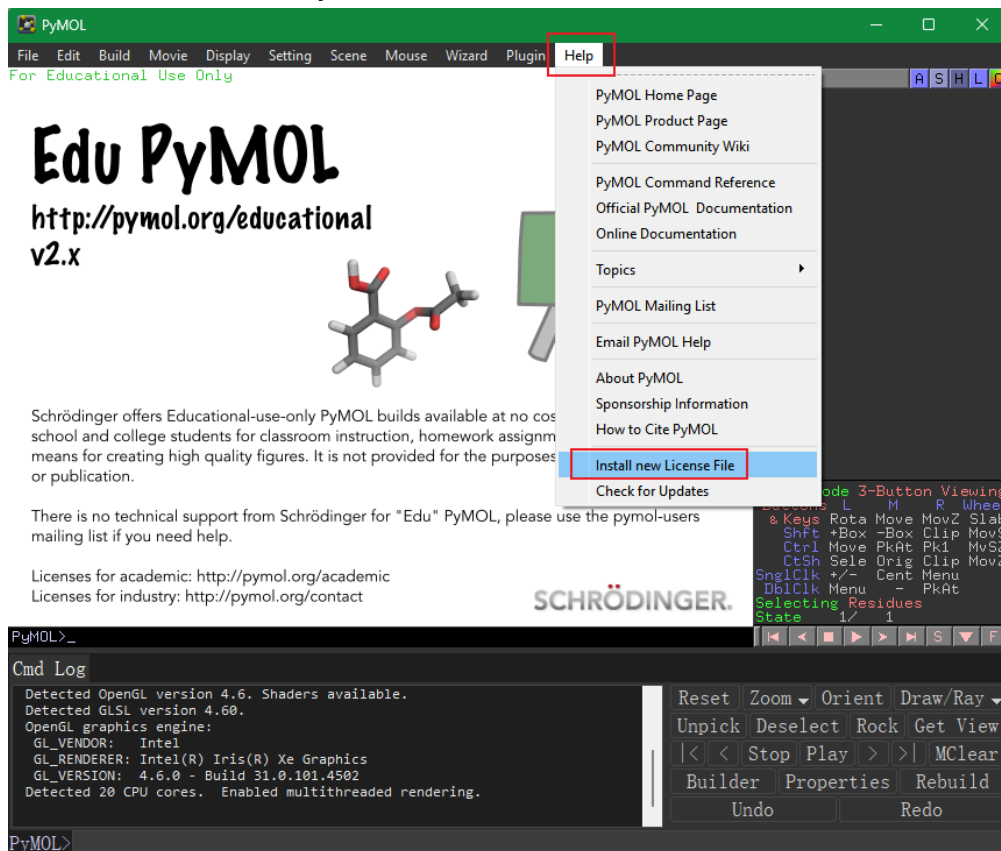
- I am a: Student (dropdown)
- Your First Name: Yuankuan
- Your Last Name: Zhang
- Your Email Address: [Redacted]
- Your Telephone Number: [Redacted]
- Institution: Tsinghua University
- Comments (optional): [Empty]
- Degree: PhD (dropdown)
- Subject Matter: Protein dynamics
- Name of Your Advisor or Instructor: [Redacted]
- Anticipated Award Year: [Redacted]

Continue

4. 获取许可证文件

可以自己从第三步申请，也可以私信助教。官方要求是“only share the Builds and their download access credentials with my fellow students and/or teachers, and only via private means”，所以请大家不要在公共平台——比如CSDN、Stackoverflow等——传播。

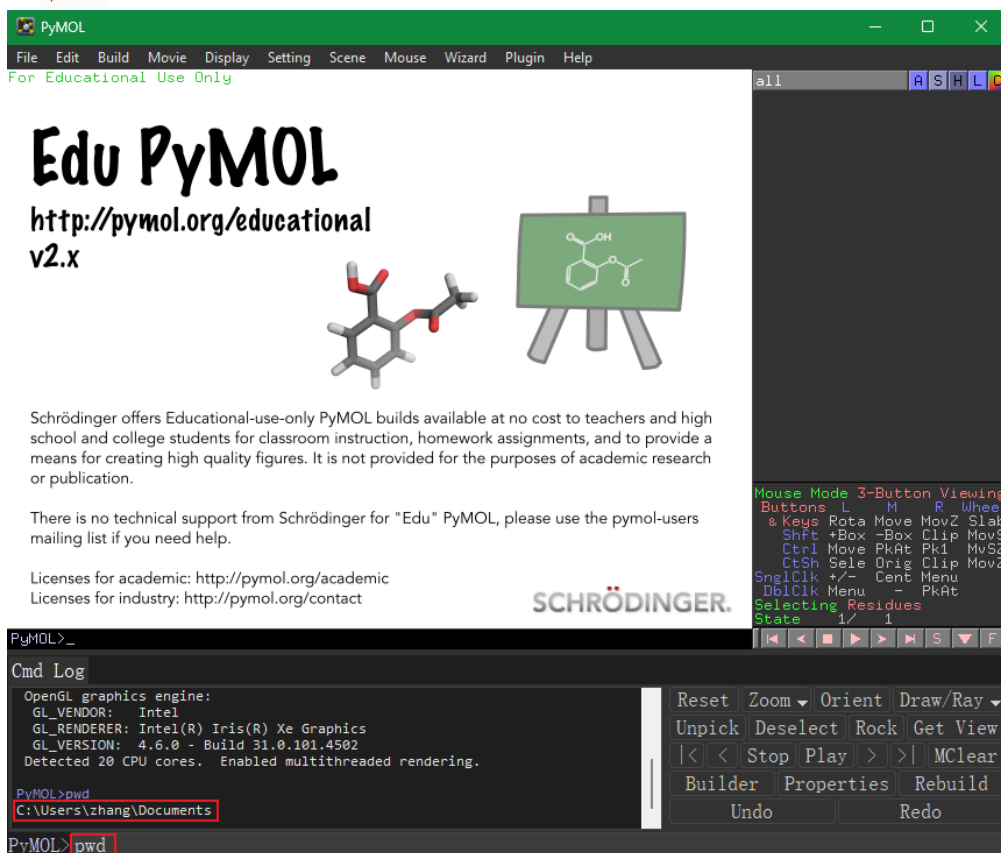
5. 利用许可证文件激活PyMOL



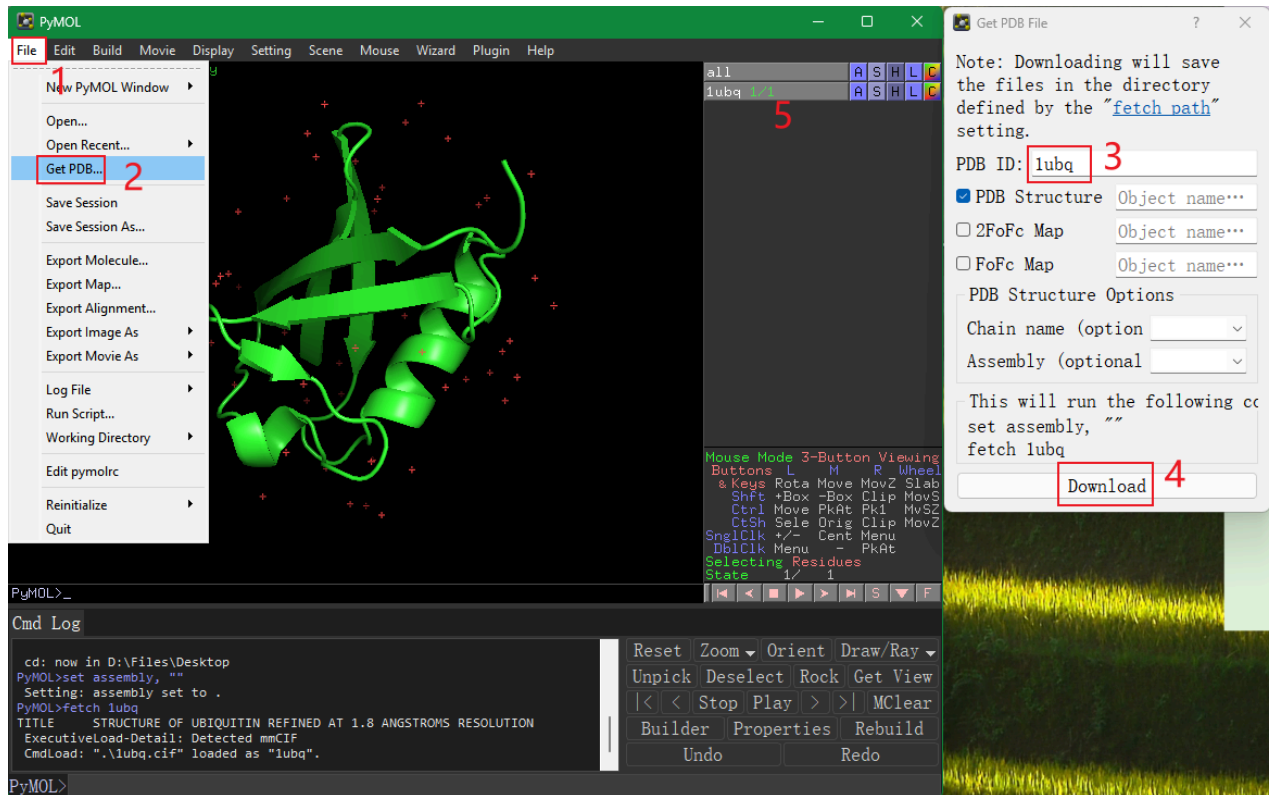
1.2. 使用

1.2.1. 确定自己的工作目录

如果直接打开PyMOL，会在一些特定的目录下，比如软件安装位置或者 Document，可以通过 `pwd` 来确定。



- 如果没有文件，也可以使用PyMOL根据PDBid获取相关文件



1.2.3. 软件界面

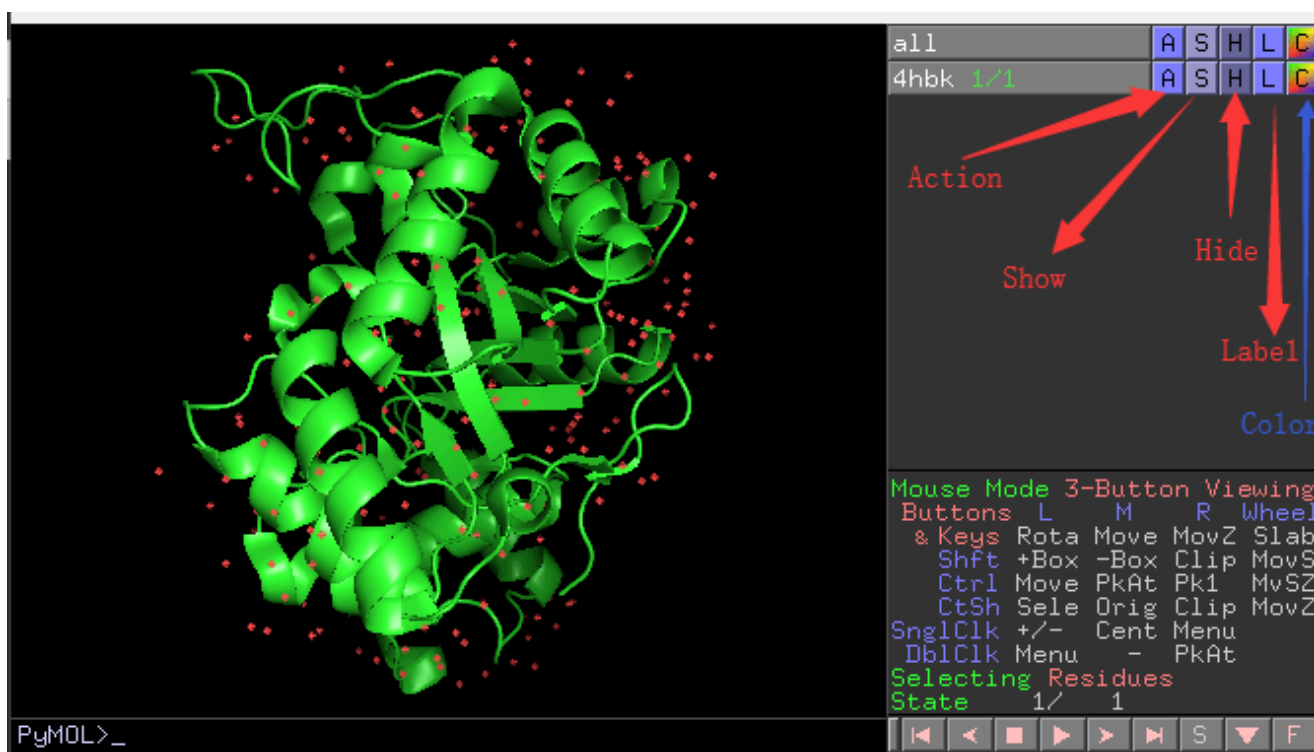


在老版本或者一些没安装完全的PyMOL，软件会分成两个窗口，比较新的版本已经合二为一，但是仍可以将其看作是1和2两部分：

- 1.2/1.3和命令有关，几乎所有的GUI操作都可以通过指令完成，比如上文中根据PDBid下载文件，可以通过 `fetch lubq` 来实现
- 2.1 可视化窗口，用于鼠标控制视角的旋转、平移，缩放等

- 2.3 对象列表窗口上半部分，ASHLC分别是 `action / show / hide / label / color`，分别可以操作（复制、编组等）、展示（控制蛋白质以不同的形式展示，详见下一节）、隐藏（与展示作用相对）、标记（比如对选中的结构单元展示原子名）、上色（整体染色、N端到C端渐变、CA原子上色等等）
- 2.3 对象列表窗口最下面一行，S表示 `sequence`，点击后会出现单字母表示的序列

1.2.4. 结构的表现形式 `show / show as`



- `show as` 分别点击S->as->cartoon 和S->as->stick
我们可以观察到AS模式是把原有的渲染模式抹除后再重新渲染，经过上述操作后仅仅显示stick形式
- `show` 点击S->as->cartoon 再点击S->stick;
我们可以观察到SHOW方法，是保留原有的渲染，再添加新的渲染。

1.2.5. 视角控制

首先将鼠标移动到2.1可视化窗口

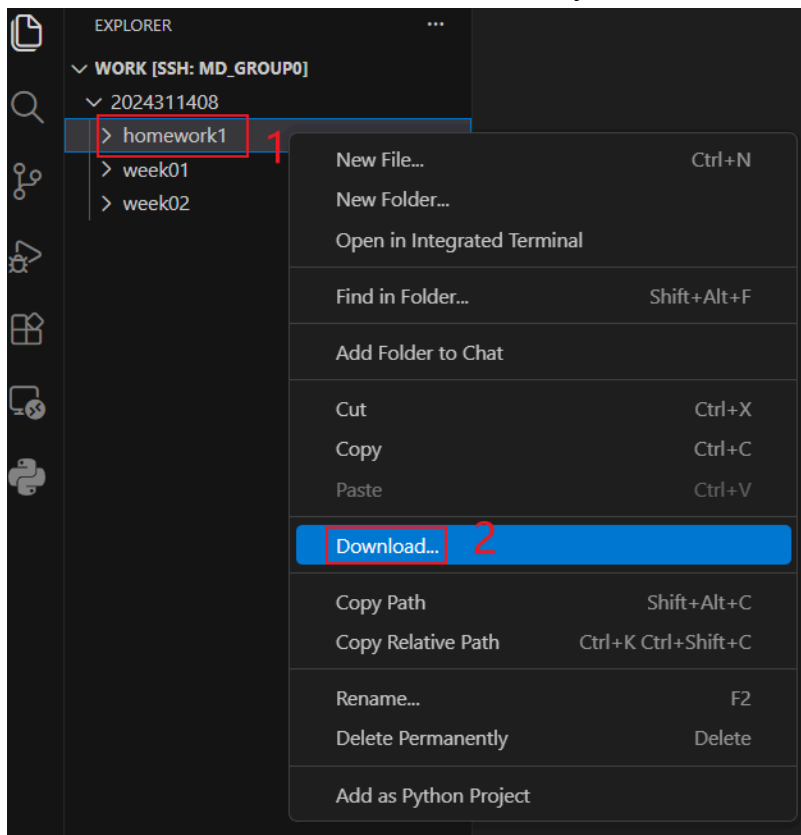
- 平移，按住鼠标中键不放，然后上下左右移动，进行体会，蛋白会随着鼠标而移动
- 旋转，按住鼠标左键不放，然后上下左右移动鼠标，蛋白会进行旋转
- 缩放，按住鼠标右键不放，然后上下移动，蛋白会进行缩放
- 初始化，鼠标右键在空白处单击，然后点击 `zoom(vis)`，视角会初始化至一个能看清分子整体的状态
- 居中，鼠标中键单击某个原子，视角会居中该原子，且旋转操作会以该原子为中心
- 选择，鼠标左键单击结构，会选择结构中的某一部分，左键或右键单击2.4模式窗口中 `Selecting Residues` 处，可以切换点击一次选中的范围，`Residues` 表示单击一次，选中一个残基，以此类推。

1.3. 举两个具体的例子

通过以下指令可以将作业1同步到个人目录下

```
rsync2 /home/data/public/homework1/ /home/{组别}/work/{学号}/homework1
```

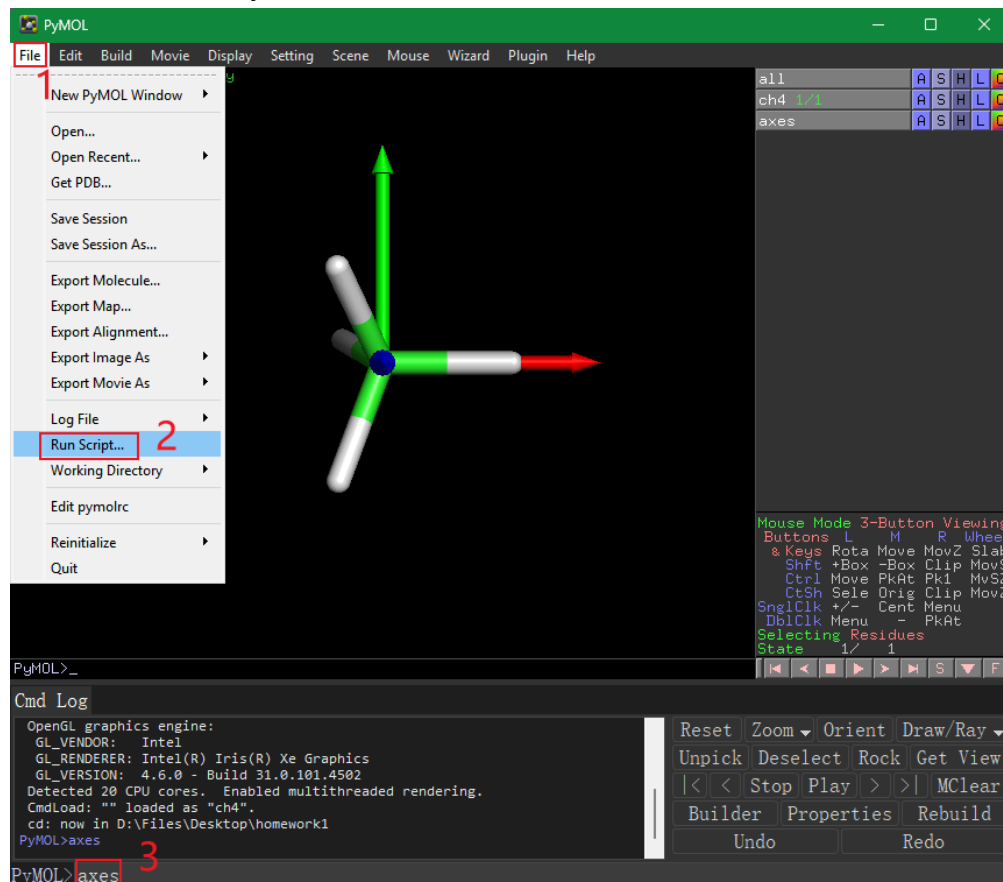
然后将作业下载到本地，方便使用PyMOL可视化



1.3.1. 可视化作业1的第一个例子

1. 双击打开 `ch4.pdb`
2. 运行脚本 `axes.py`
`File -> Run script.. -> 选择文件。示意图见下，步骤三`
3. 运行指令 `axes`，调出坐标轴。
在命令行窗口输入 `axes`，并回车

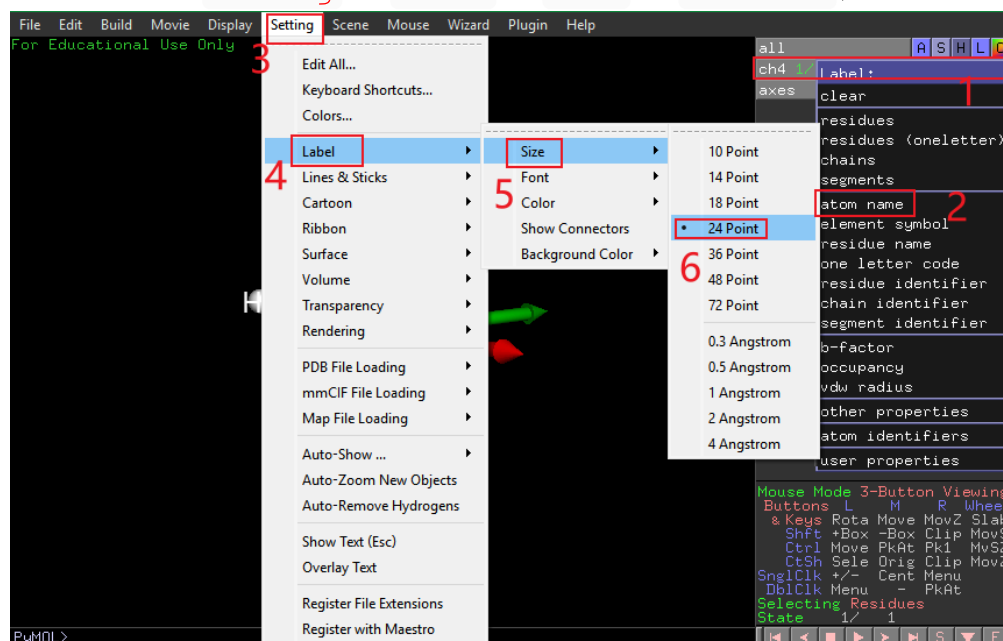
红色为x, 绿色为y, 蓝色为z



4. 标记四个原子，并调整标记字号的大小

点击ch4这个对象的 L 按钮，点击 Atom name 以显示原子名称

然后一次点击 Setting -> Label -> Size -> 24 Point，设置标记的字号



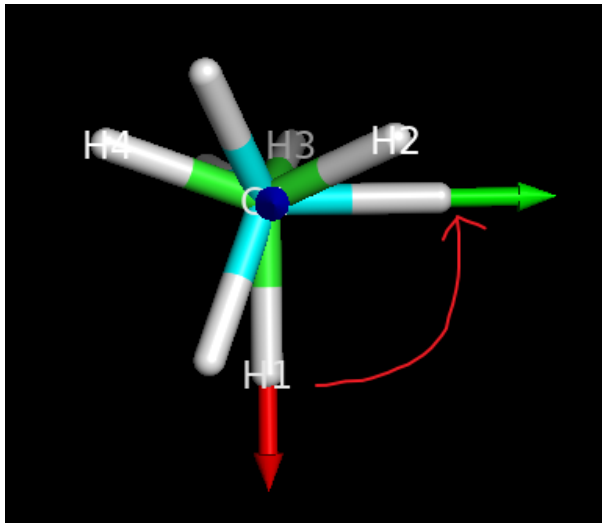
5. 观察

鼠标左键在可视化窗口中拖动，观察各个C-H键的空间位置

6. 生成并加载该结构旋转后的结构文件

在远程服务器运行脚本 `ch4_x2y.py`，并下载 `ch4_x2y.pdb`，将该文件拖到已存在的

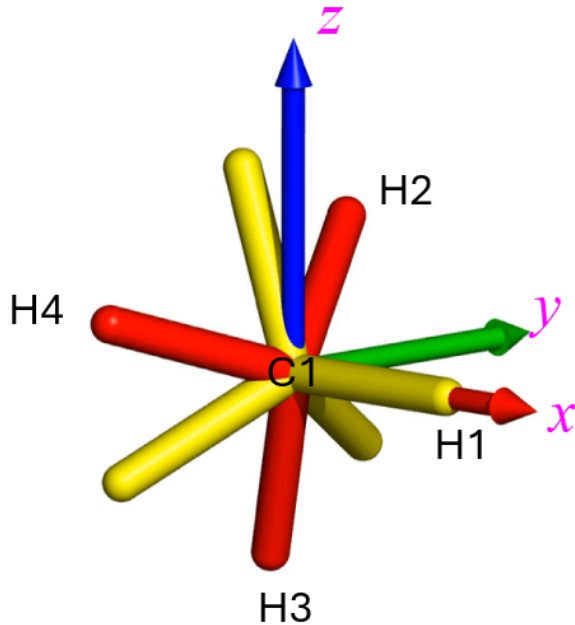
PyMOL窗口中以进行加载



7. 观察

可以发现，C-H1键从沿x轴旋转到沿y轴，也可以说是，以z轴正方向 $(0, 0, 0) \rightarrow (0, 0, 1)$ 为轴，并将该向量朝向纸外，逆时针旋转 $\pi/2$

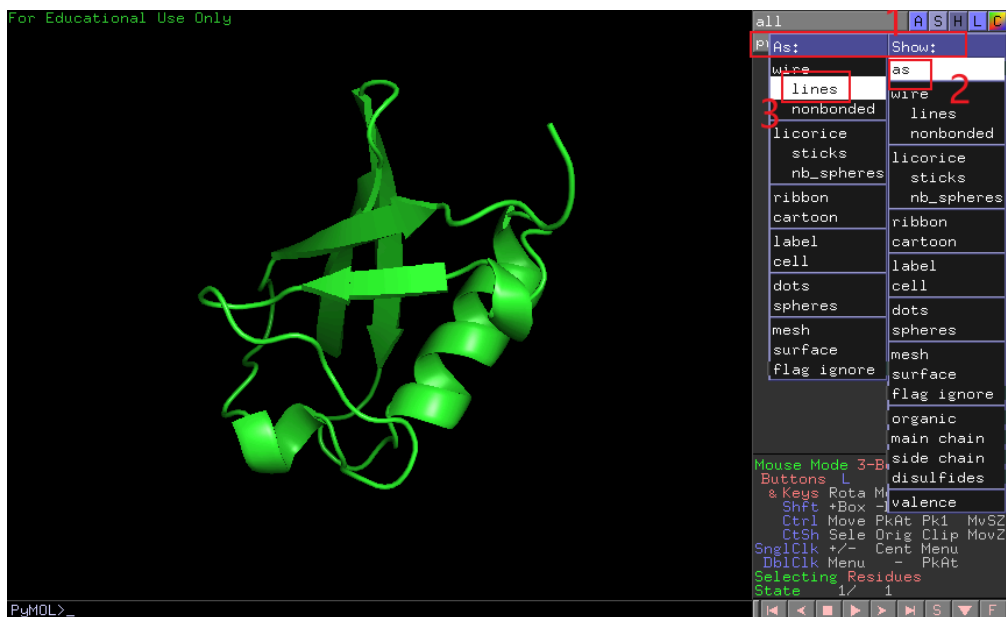
8. 参考 `ch4_x2y.py`，使用rotate函数完成第一个子作业



1.3.2. 可视化作业1的第二个例子

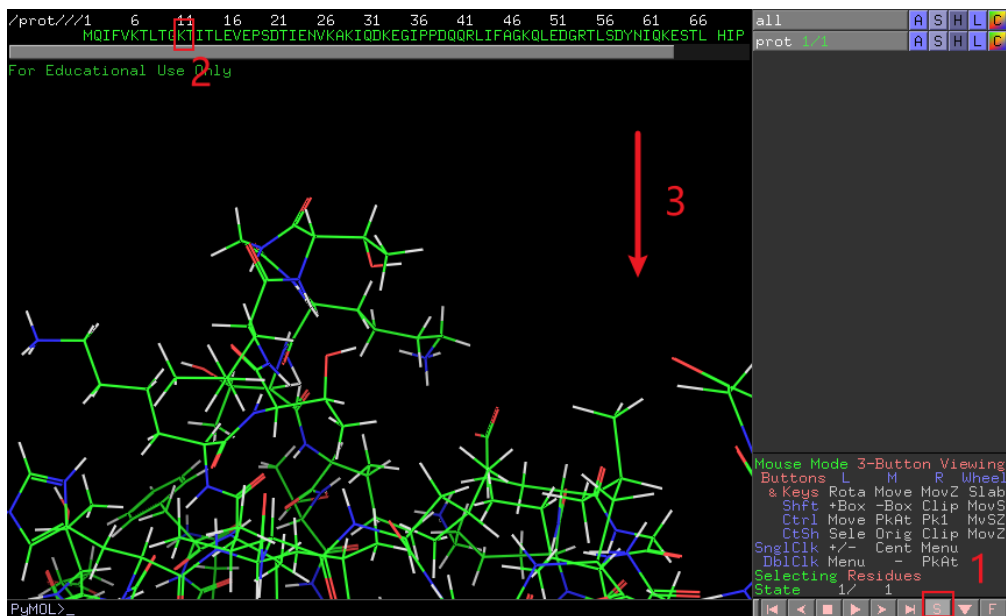
详见视频

1. 双击打开 `prot.pdb`
2. 改变结构的展示模式，从默认的 `cartoon` 改为 `lines`
点击对象prot这一行的 `s` 按钮 \rightarrow `as` \rightarrow `lines`



3. 居中显示11号残基

点击按钮 **S** 以显示结构的序列，鼠标中键单击11号残基K以居中该残基，右键在空白处点击并下滑以放大图像

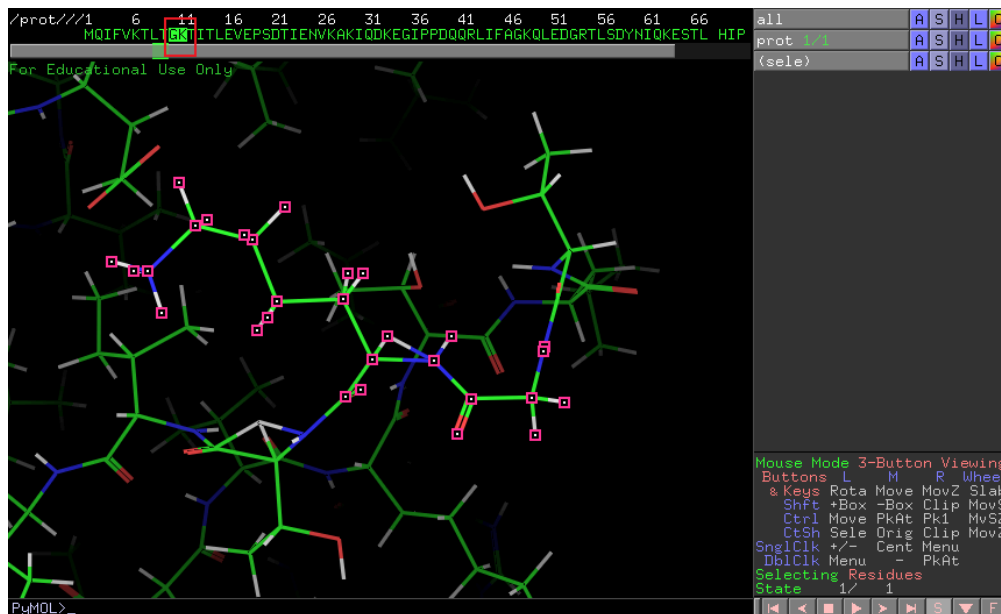


4. 综合利用鼠标的三个键，更好的显示局部

鼠标左键点击10号 **G** 和11号 **K** 残基

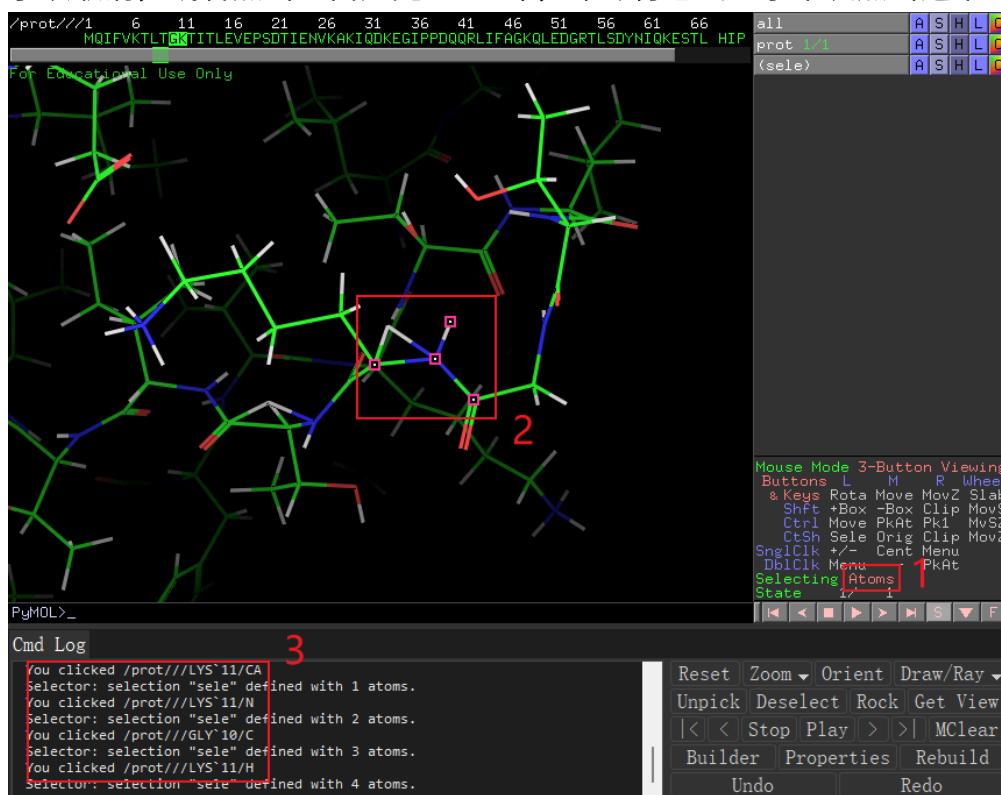
鼠标右键拖动空白处以放大，鼠标左键拖动空白处以旋转，鼠标中键拖动以平移，鼠标中

间适度滚动可以控制景深排除背景干扰



5. 选中感兴趣的原子

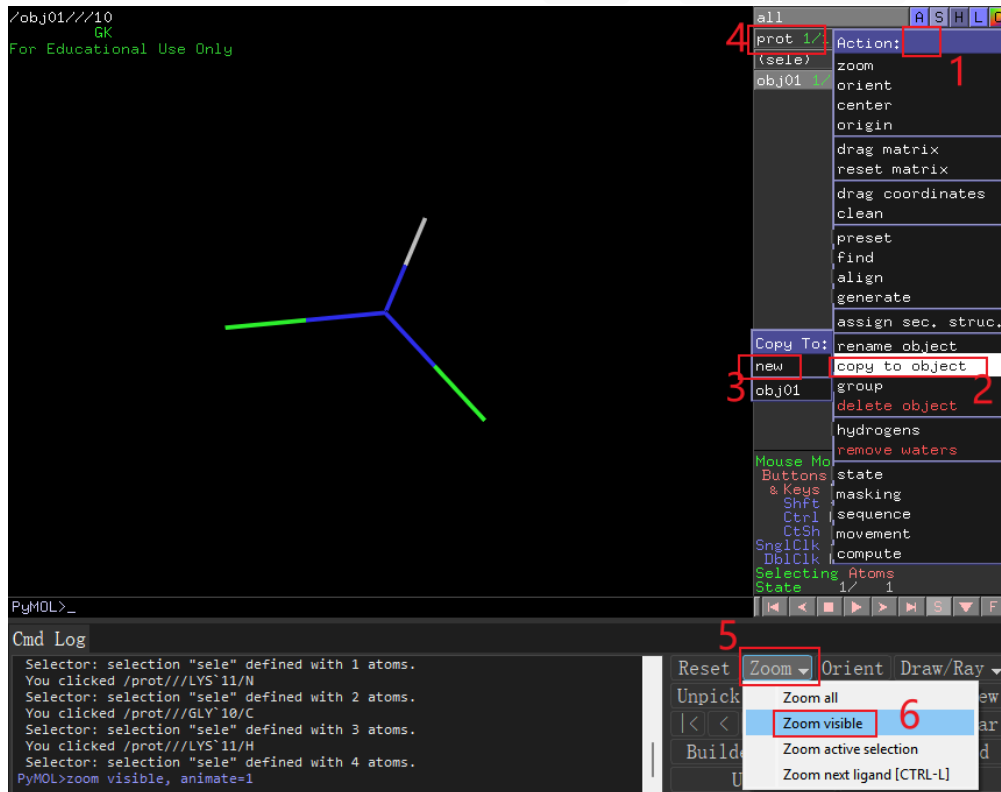
切换鼠标左键单击范围大小至 `Atoms`，鼠标点击空白处以取消选中两个残基的所有原子，并依次点击11号残基的CA、N、H和10号残基的C（如果点错了，可以再次点击点错的原子以取消，或者点击空白处完全重置），命令行也会显示单次点击选中的结构单元的信息



6. 创建一个新的对象，并初始化视角

点击prot的 `A` 按钮 -> `copy to object` -> `new` 将选中的四个原子复制到一个新的对象

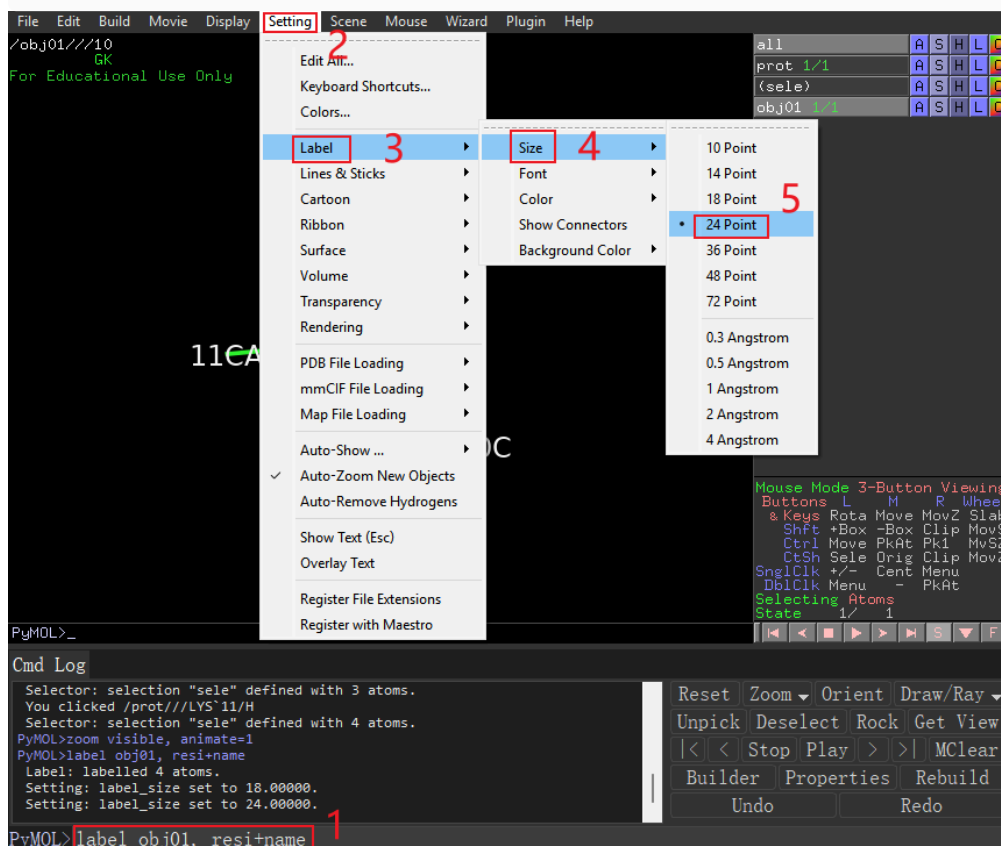
中，点击prot以取消显示该对象，点击 Zoom -> Zoom visible 以初始化视角



7. 标记四个原子

输入下列指令（需要手动敲，复制会出错）后回车，并改变标记大小

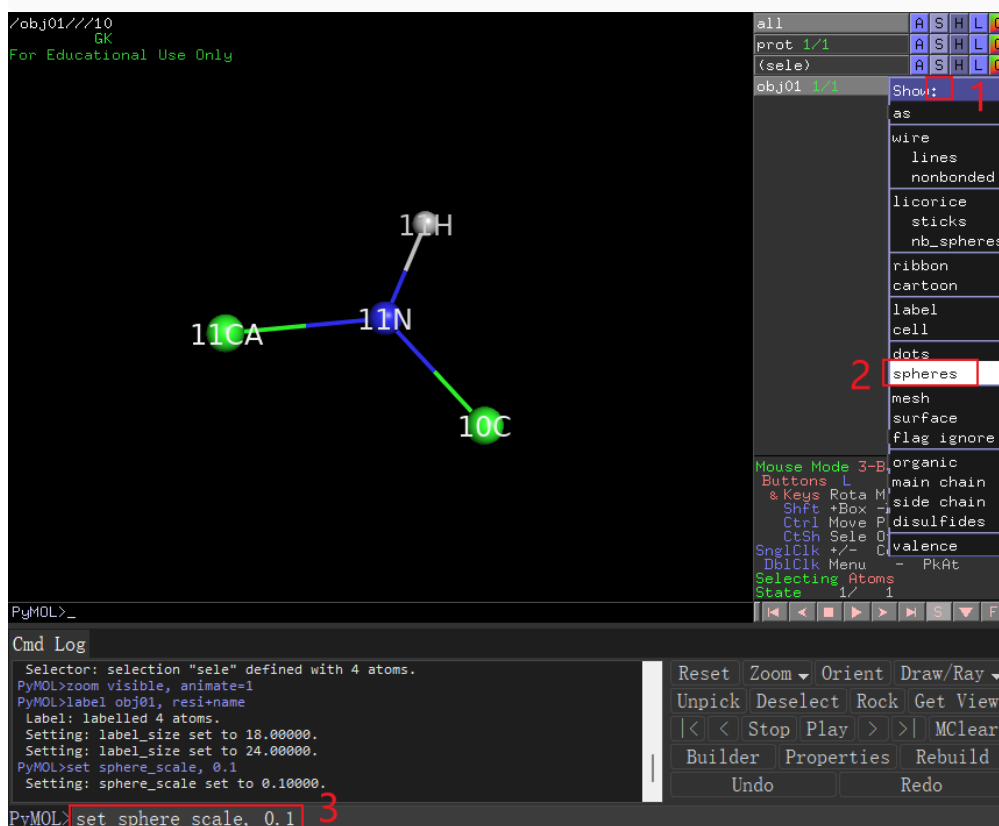
```
label obj01, resi+name
```



8. 新加结构的展示模式 spheres

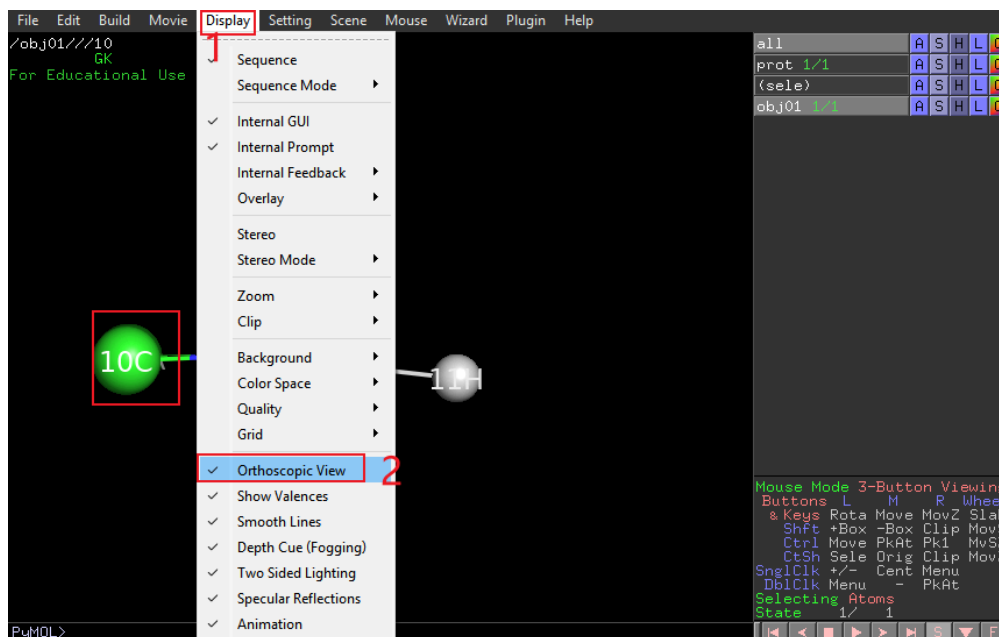
点击obj01的 S 按钮 -> spheres 以展示球状的原子，然后通过下列指令将球的大小缩小至原来的0.1倍

set sphere_scale, 0.1



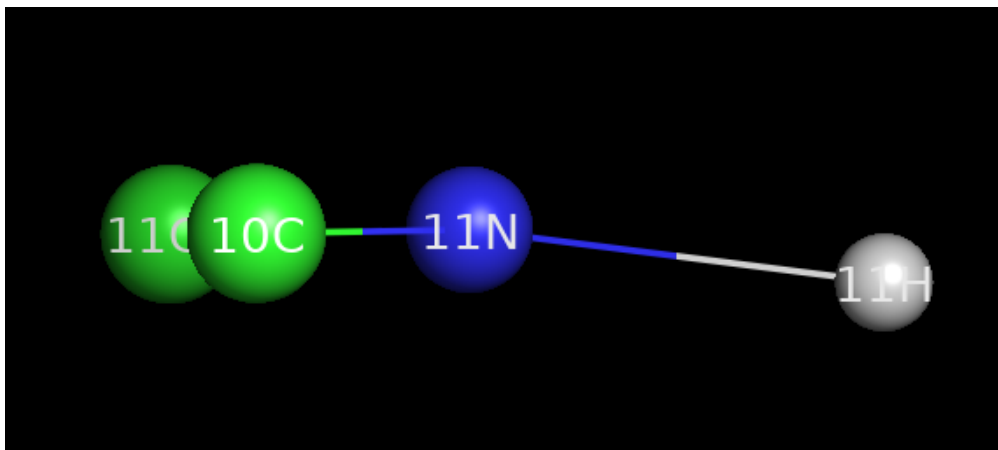
9. 改变透视方式

依次点击 **Display** -> **Orthoscopic View**，将默认的远近透视，改为正视。区别是设置之后，11CA 和 10C 才可以完全重合，方便观察。还可以鼠标中键单击 11N，旋转时更方便



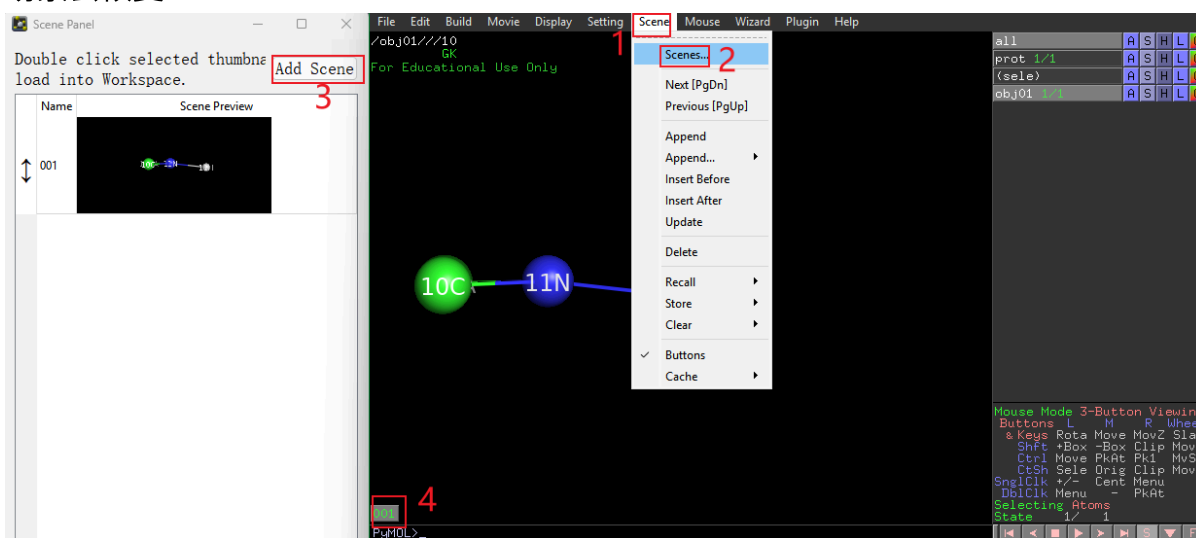
10. 控制视角以观察 δ 角

使 11CA、11N、10C 组成的平面垂直于纸面，尝试找到作业中的 δ 角。



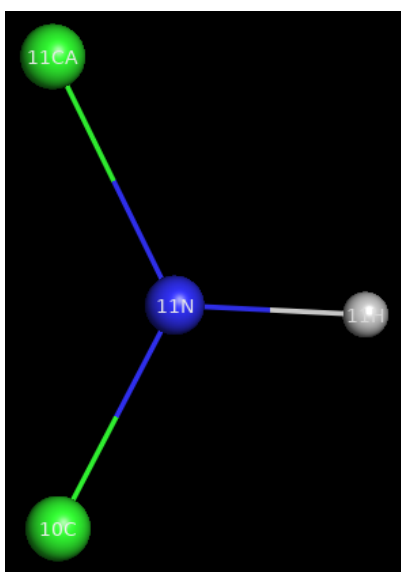
11. 将该场景储存

依次点击 **Scene** -> **Scenes...** -> **Add Scene**，可以新建一个场景（信但不达不雅的翻译）。尝试旋转、平移、放大缩小可视化界面，再点击左下角的 **001** 按钮，可以发现这个场景会恢复

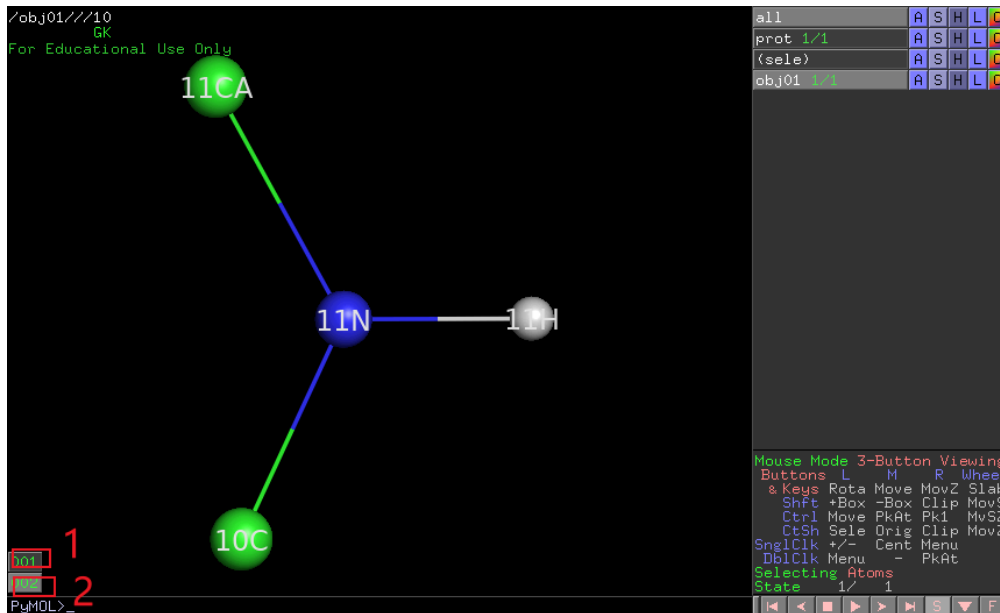


12. 重复步骤10和11，观察 γ 角并储存场景

将 **11CA**、**11N**、**10C** 组成的平面几乎完全平行于纸面，可以看到作业中的 γ 角，并储存视角为002

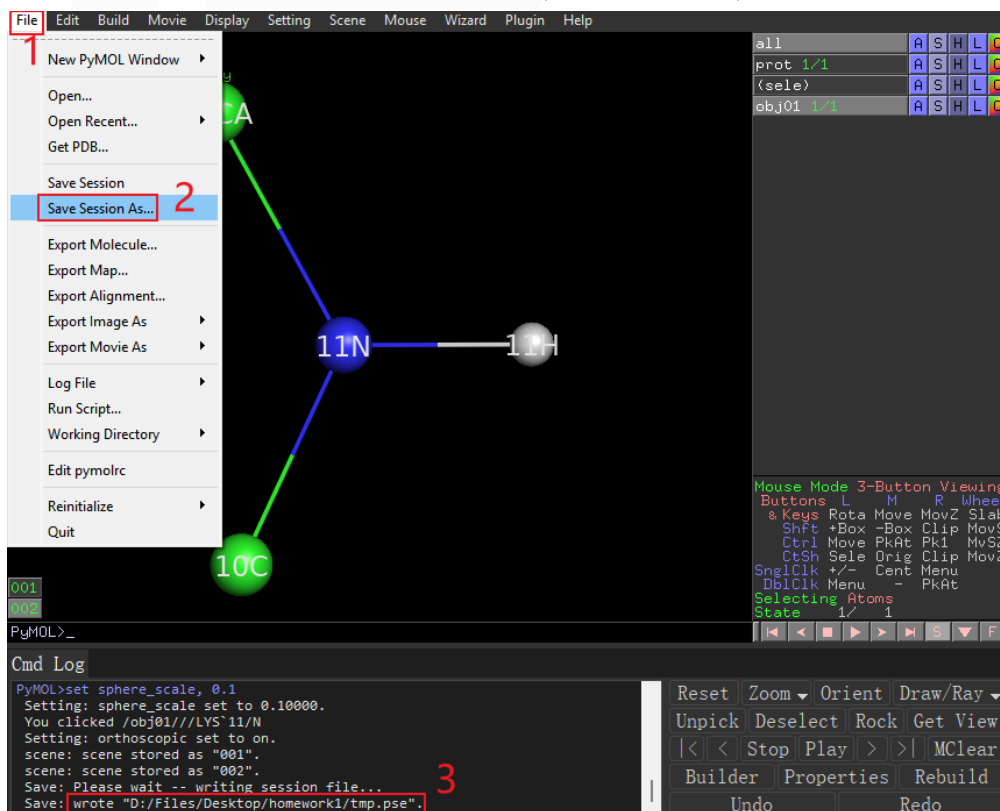


13. 点击001和002两个场景，观察两个角度



14. 保存目前所有操作得到的场景为 .pse 文件

点击 **File** -> **Save Session As...**，填写文件名，确定命令行窗口显示正常



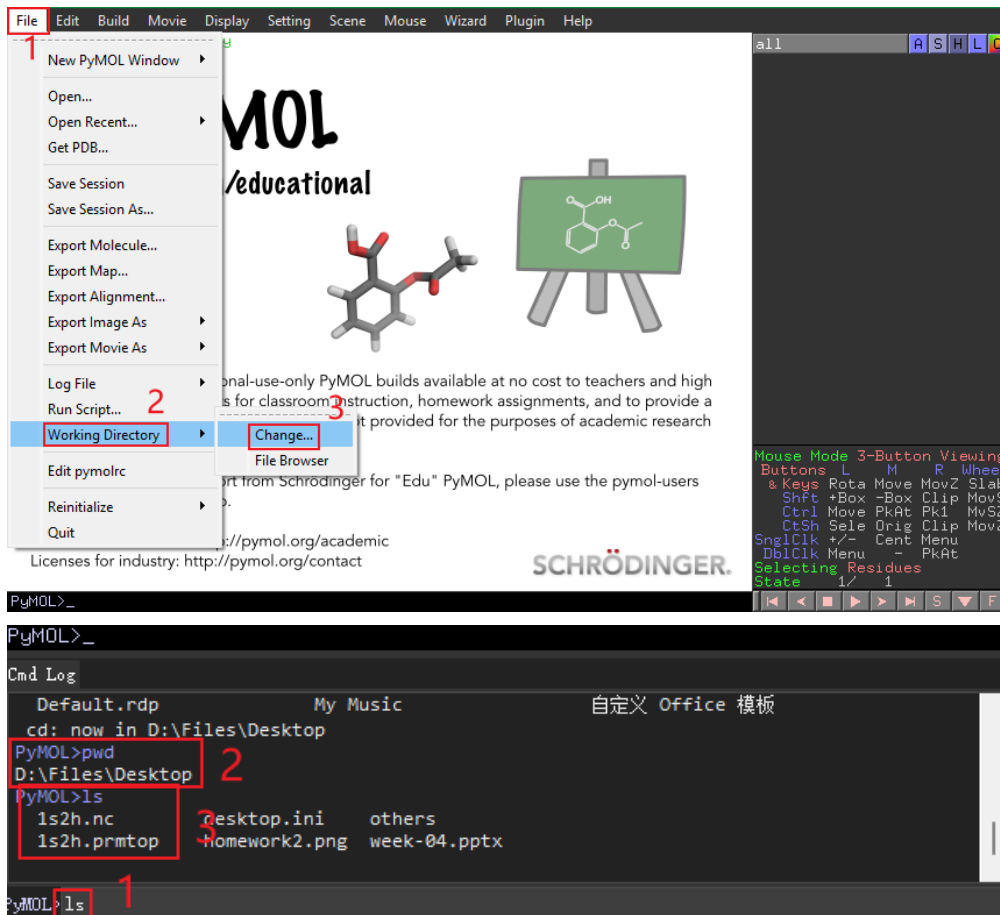
15. 重新打开 .pse 文件，以恢复场景

如果没有按照1.2.1中示例，设置默认打开软件为PyMOL，可能需要设置一下

16. 尝试在PyMOL的帮助下理解第二个子作业

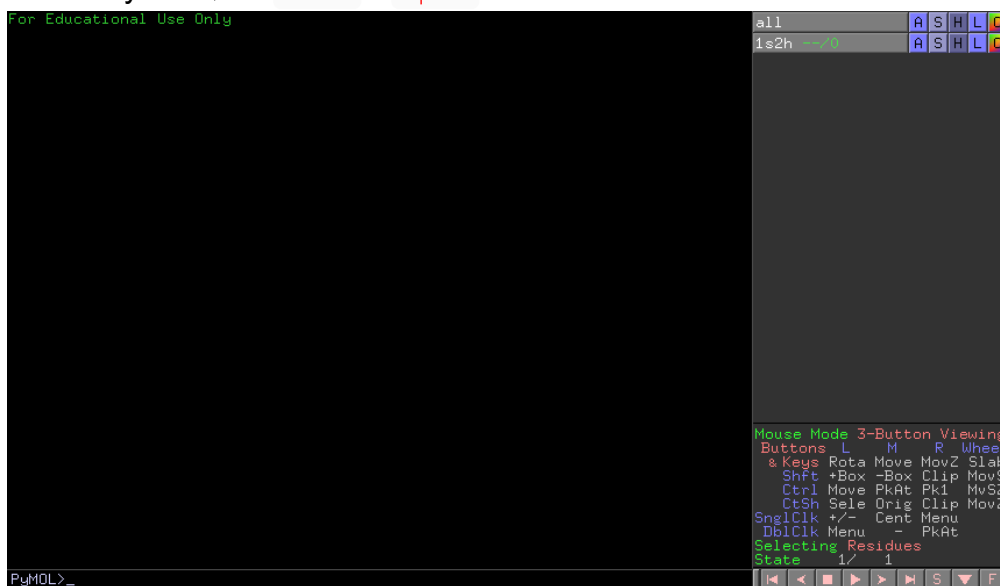
1.4. 可视化MD轨迹

1. 把一组 **.prmtop** 和 **.nc** 文件下载到本地电脑上
2. 打开本地电脑的PyMOL并将工作目录改到第一步中文件所在的位置
ls 和 **pwd** 两个指令可以辅助判断工作目录是否正确



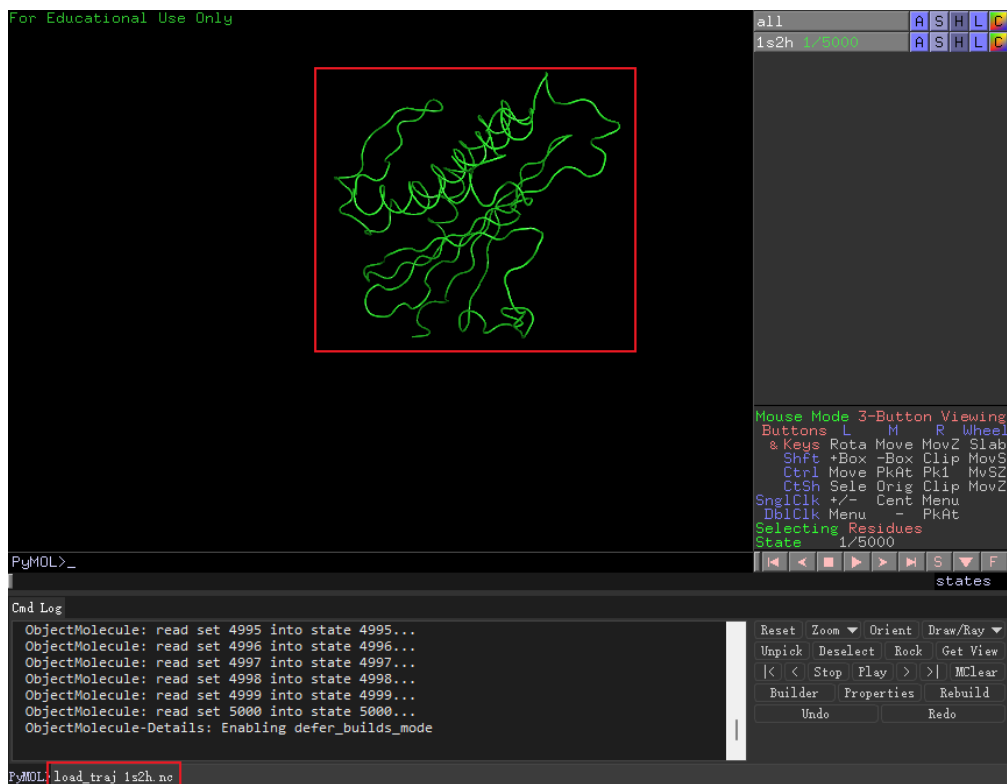
3. 打开 .prmtop 文件

拖动至PyMOL, 或 File -> Open



4. 打开 .nc 文件

利用指令 `load_trj XXX.nc` 打开



5. 播放轨迹

标号1处，可以看到一共有5000帧

标号2处，是视频播放器按钮，分别对应 至第一帧 / 向左跳一帧 / 暂停 / 播放 / 向右一帧 / 至最后一帧

标号3处，是获取当前视角的指令。如果想制作视频，需要充分利用本地电脑GUI界面的便利性和远程服务器的电脑性能，所以总是可以将文件下载到本地，调整好可视化的状态并记录相关指令（比如上色，位置变换等等），然后在服务器上编写相应的脚本，进行渲染。其中 `get_view` 这个指令，可以将文件导入之后我们用鼠标进行的所有的旋转/平移/

缩放的操作得到的视角打印到屏幕上，在脚本里利用 `cmd.set_view` 即可复现该视角

```
For Educational Use Only
```

```
all A S H L C  
1s2h 103/5000 A S H L C
```

```
PyMOL>_
```

```
Cmd Log
```

```
ObjectMolecule: read set 5000 into state 5000...  
ObjectMolecule-Details: Enabling defer_builds_mode  
Undo has been disabled. Reason: Object is too large
```

```
PyMOL>get_view 3  
### cut below here and paste into script ###  
set_view (\n  0.904218256, 0.270255327, 0.330679327,\n  0.070052370, 0.669954598, -0.739088893,\n  -0.421283185, 0.691464067, 0.586854517,\n  -0.000000298, -0.000000775, -261.779174805,\n  29.727739334, 46.673793793, 34.558406830,\n  206.388702393, 317.169647217, -20.000000000 )  
### cut above here and paste into script ###
```

```
Mouse Mode 3-Button Viewing  
Buttons L M R Wheel  
& Keys Rota Move MovZ Slab  
Shft +Box -Box Clip MovS  
Ctrl Move PkAt Pk1 MvSZ  
CtSh Sele Orig Clip MovZ  
SnglClk +/- Cent Menu  
DblClk Menu - PkAt
```

```
1 Selecting Residues  
2 State 103/5000
```

```
Reset Zoom Orient Draw/Ray  
Unpick Deselect Rock Get View  
< < Stop Play > >| MClear  
Builder Properties Rebuild  
Undo Redo
```

更复杂的用法，可以参考[PyMOL中文教程](#)，跟着做一遍就有感觉了

想学习指令/PyMOL的Python API可以参考老师分享的 [Exploring protein structure: principles and practice](#) 这本书