MolStudio — 分子建模工作室

用户手册

适用版本	MolStudio 1.0 (Windows / Linux)
文档版本	版本 1.0 · 2026 年 10 月
读者对象	使用 MolStudio 从事基于结构的药物设计的计算化学家、结构生物学家和药物化学家。
发行方	AIDD · aiddhub@outlook.com · www.aiddhub.com

本手册介绍 MolStudio 1.0 的每个面板、工具和选项。程序内也随包提供本手册的 PDF 版本，可从 **帮助 → 用户手册 (PDF)** 打开。同样的内容以精简形式内置于程序的 **帮助 → 帮助与教程...** 中。

目录

1. 简介
- 1.1 功能范围
- 1.2 一个典型项目的流程
- 1.3 版本一览
- 1.4 系统要求
- 1.5 本手册的约定

2. 安装与首次启动
- 2.1 Windows：运行安装包
- 2.2 Windows：静默安装
- 2.3 Linux：tar.gz 包
- 2.4 首次启动
- 2.5 升级与卸载

3. 许可与激活
- 3.1 三种版本
- 3.2 机器码
- 3.3 激活许可证
- 3.4 开始试用
- 3.5 查看状态
- 3.6 到期与续期
- 3.7 许可证保存在哪里

4. 工作区
- 4.1 窗口一览
- 4.2 菜单
- 4.3 可停靠面板
- 4.4 窗口菜单
- 4.5 面板清单
- 4.6 状态栏
- 4.7 把数据放进工作区

4.8 布局会被记住

5. 设置

5.1 打开设置
5.2 可调整项
5.3 设置保存在哪里
5.4 恢复默认

6. 数据、文件与会话

6.1 分子、蛋白与分组
6.2 导入
6.3 选择范围：全部 / 已勾选 / 所选
6.4 导出
6.5 会话
6.6 自动保存
6.7 崩溃恢复

7. 分子表格

7.1 列
7.2 分组与分组行
7.3 复选框与行选择
7.4 星标与颜色标签
7.5 排序
7.6 搜索与过滤
7.7 列统计
7.8 颜色规则
7.9 查找重复项
7.10 查找结构问题
7.11 列菜单与表达式列
7.12 工具栏
7.13 键盘
7.14 右键菜单
7.15 示例：导入、筛选并导出子集

8. 分子视图

8.1 卡片
8.2 布局
8.3 雷达图与卡片边框
8.4 选择
8.5 缩放、排列与缩略图
8.6 与表格、3D 视图的联动
8.7 卡片菜单
8.8 键盘

9. 2D 结构编辑器

9.1 顶部操作栏
9.2 工具箱与调色板
9.3 SMILES 栏
9.4 绘制与编辑
9.5 送入工作区
9.6 示例：绘制一个小分子

9.7 示例：修改导入的结构

10. 绘图编辑器

10.1 控制面板
10.2 图表类型
10.3 数据变换与表达式列
10.4 统计叠加
10.5 与图表交互
10.6 导出
10.7 键盘与鼠标

11. 3D 视图

11.1 显示内容
11.2 移动视图
11.3 工具栏
11.4 工具条
11.5 着色方式
11.6 颜色、雾效、背景与坐标轴
11.7 拾取层级
11.8 测量
11.9 标签
11.10 右键菜单
11.11 视图书签
11.12 保存图片
11.13 示例：查看蛋白–配体复合物
11.14 大体系的性能

12. 分子表面

12.1 表面菜单
12.2 生成表面
12.3 面积与体积
12.4 表面管理
12.5 导出表面
12.6 实用建议

13. 对接格点盒

13.1 放置与调整
13.2 与对接应用共享
13.3 尺寸建议

14. 分析视图

14.1 序列查看器
14.2 拉氏图
14.3 蛋白–配体相互作用

15. 应用中心

15.1 打开与排列
15.2 工具列表
15.3 选择作用对象
15.4 运行任务
15.5 任务队列
15.6 结果写回

15.7 标准流程

16. 分子对接

16.1 对接做什么
16.2 准备受体
16.3 准备配体
16.4 对接参数
16.5 运行对接
16.6 读取结果
16.7 把构象加入工作区
16.8 虚拟筛选
16.9 示例：筛选一个库并挑出最优构象
16.10 如何解读打分
16.11 常见问题

17. 准备与分析应用

17.1 受体准备
17.2 配体准备
17.3 构象
17.4 相互作用
17.5 聚类 / 相似性
17.6 骨架 / 侧链
17.7 MMP
17.8 组合库

18. 命令行

18.1 调用方式
18.2 选项
18.3 用脚本处理
18.4 示例
18.5 命令行不能做的事
18.6 检查批处理结果

19. 故障排查、日志与文件位置

19.1 日志文件
19.2 崩溃
19.3 报告问题时请附上
19.4 文件位置一览
19.5 常见现象

附录 A. 键盘与鼠标参考

A.1 键盘
A.2 鼠标
A.3 界面中的视觉约定

附录 B. 支持的文件格式

B.1 导入
B.2 导出

附录 C. 第三方组件与许可

1. 简介

MolStudio 是面向**基于结构的药物设计**的分子建模工作台：它把分子表格、2D 绘制、 3D 可视化、绘图统计、分子对接以及一批准备 / 分析工具放进同一个窗口，各面板之间 共享同一份工作区数据。

1.1 功能范围

领域	你能做什么
数据管理	导入 SDF / MOL / MOL2 / PDB / SMILES / CSV / XYZ，按分组管理，计算描述符，导出子集
2D 化学	内置 Ketcher 风格编辑器绘制 / 修改结构，生成 2D 结构图
3D 可视化	蛋白与配体的多种着色方式、拾取、测量、表面、标签、视图书签、序列与拉氏图
分析	2D 相互作用图、相似性聚类、骨架 / 侧链分析、MMP、R 基矩阵、性质统计与作图
设计	构象生成、片段生长、组合库（BRICS）与按得分进化
对接	AutoDock Vina 单分子对接与批量虚拟筛选，结果写回表格
自动化	无界面命令行批处理（`--run` / `--script` / `--export`）

1.2 一个典型项目的流程

1. **导入**结构文件，或直接在 2D 编辑器中绘制分子。
2. 在**分子表格**中清洗数据（去盐、中和、去重、标准化）并计算描述符。
3. 用**勾选**标记要参与后续步骤的分子。
4. 在**分子视图**中查看卡片、比较性质、按相似性聚类。
5. 需要时在 **3D 视图**中检查复合物、测量相互作用、生成表面。
6. 在**应用中心**运行准备 / 对接 / 构象 / 分析工具，结果直接写回工作区。
7. 用**绘图编辑器**作图，导出 PNG / SVG / PDF。
8. 保存为 `.ms` 会话，或导出为 SDF / CSV。

1.3 版本一览

功能	免费版	试用版	商业版
导入 / 查看 / 分析	是	是	是
单会话分子数上限	100	不限	不限
导出（SDF / CSV / 图片）	否	否	是
组合库、MMP、构象、聚类 / 相似性、骨架 / 侧链	否	是	是
虚拟筛选（批量对接）	否（一次一个配体）	是	是

1.4 系统要求

- **Windows** 10 / 11（64 位），或主流 x86_64 Linux 发行版（glibc 2.28 及以上）。
- 建议 8 GB 以上内存；处理上千个分子或大蛋白时 16 GB 更合适。
- 3D 视图需要 OpenGL 3.3 以上的显卡驱动；没有硬件加速时会自动降级。
- 中文界面与图表已内置中文字体，无需系统安装中文字体。

1.5 本手册的约定

- **粗体**表示界面上的按钮、菜单项或面板名，例如 **文件** → **导入**。
- `等宽字体`表示命令、文件名或输入内容，例如 `mol.ms`。
- 键盘组合写作 **Ctrl+Z**；在 macOS 上对应 Command 键。
- "勾选"指分子表格中的复选框，"选中"指行高亮，两者含义不同（见 7.3）。

2. 安装与首次启动

2.1 Windows：运行安装包

1. 运行 `MolStudio-Setup-v1.0.exe`。
2. 选择安装目录（默认在 `%LOCALAPPDATA%\Programs\MolStudio`）。
3. 安装程序会关联 `.ms` 会话文件，并创建开始菜单快捷方式。
4. 完成后从开始菜单启动 **MolStudio**。

安装包未做代码签名，首次运行时 Windows SmartScreen 可能提示"更多信息 → 仍要运行"。

2.2 Windows：静默安装

```
MolStudio-Setup-v1.0.exe /VERYSILENT /SUPPRESSMSGBOXES /NORESTART /DIR="C:\Apps\MolStudio"
```

2.3 Linux：tar.gz 包

```
tar xzf MolStudio-v1.0-linux-x86_64.tar.gz
cd MolStudio
./MolStudio
```

包内已包含 Python 运行时、Qt、RDKit 和 AutoDock Vina，无需另外安装依赖。若提示缺少 系统库，请安装发行版对应的 `libGL`、`libxkbcommon` 与字体基础包。

2.4 首次启动

首次启动会显示启动画面，随后打开包含**分子表格**和 **3D 视图**两个面板的窗口。 在**设置**中可以选择界面语言（跟随系统 / English / 简体中文）和主题。

2.5 升级与卸载

- **升级**：直接运行新版本安装包覆盖安装；设置、许可证与会话布局都会保留。
- **卸载**：Windows 在"应用和功能"中卸载；Linux 直接删除解压目录。
- 用户数据位于 `%APPDATA%\MolStudio`（Linux：`~/.config/MolStudio`）， 卸载不会删除，需要时可手动清理。

3. 许可与激活

3.1 三种版本

- **免费版**：功能受限（见 1.3），适合评估与小规模使用。
- **试用版**：7 天内开放全部功能，每台机器只能申请一次。
- **商业版**：解除全部限制。

3.2 机器码

帮助 → **许可证** 中显示本机的**机器码**。它由硬件指纹生成，用于把许可证绑定到 这台机器；重装系统通常不会改变，更换主板或硬盘可能会。

3.3 激活许可证

1. 打开 **帮助** → **许可证**，复制机器码。
2. 把机器码发送给发行方，获取许可证密钥。
3. 在对话框中粘贴密钥并确认。激活成功后标题栏与功能限制立即更新。

3.4 开始试用

在许可证对话框中点击 **申请 7 天试用**。试用信息写入本机配置，到期后自动回到免费版。

3.5 查看状态

许可证对话框顶部显示当前状态：剩余试用天数、已激活的商业版，或"未找到许可证"。 **帮助** → **关于** 中也会显示版本与许可信息。

3.6 到期与续期

试用到期后导出与受限应用立即停用，已有数据不受影响。续期只需用新的密钥重新激活。

3.7 许可证保存在哪里

许可证与试用记录保存在 `HKCU\Software\MolStudio\MolStudio`（Windows）或 `~/.config/MolStudio/MolStudio.conf`（Linux），并与机器码绑定。

4. 工作区

4.1 窗口一览

窗口由菜单栏、可停靠面板区和状态栏组成。默认布局是左侧**分子表格**、右侧 **3D 视图**； 其他编辑器按需从**窗口**菜单打开。

4.2 菜单

菜单	内容
文件	打开 / 保存会话、导入、导出、设置、退出
窗口	每种编辑器的开关、锁定面板、重置布局
帮助	帮助与教程、用户手册 (PDF)、许可证、关于

4.3 可停靠面板

- 拖动标题栏可把面板停靠到任意边缘、浮动为独立窗口，或与其他面板合并为标签页。
- 关闭面板不会丢数据，从**窗口**菜单重新勾选即可。
- 面板之间的分隔条可自由拖动，没有人为的最小 / 最大尺寸。

4.4 窗口菜单

每种编辑器是一个**可勾选项**：勾选打开，取消勾选关闭该类型的所有面板。 **锁定面板**禁止移动 / 浮动 / 关闭；**重置布局**恢复默认的两个面板。

4.5 面板清单

面板	用途
分子表格	主数据视图：分组、性质列、过滤、排序、统计
分子视图	卡片式浏览：2D 结构、雷达图、相似性着色
3D 视图	蛋白 / 配体可视化、拾取、测量、表面
分子绘制	2D 结构编辑器
绘图	统计作图与导出
应用	准备、对接、构象、分析、生成工具

4.6 状态栏

状态栏显示当前操作的提示（导入数量、保存路径、选中数量、任务进度等）。 应用中心的任务进度也会汇总到这里。

4.7 把数据放进工作区

- **文件** → **导入**：选择格式并打开文件。
- **拖放**：把结构文件直接拖到分子表格上。
- 在 **2D 编辑器**中绘制并点击"送入工作区"。
- 在**应用中心**中把工具结果"加入工作区"。

4.8 布局会被记住

面板位置、浮动状态、标签组合、窗口大小与列宽都会在退出时保存，下次启动自动恢复。

5. 设置

5.1 打开设置

文件 → 设置。

5.2 可调整项

设置	说明
语言	跟随系统 / English / 简体中文，切换后立即生效
主题	MolStudio 深色 / 系统（浅色）
自动保存间隔	分钟；0 表示关闭
工作目录	文件对话框的起始目录
Vina 可执行文件	自定义 AutoDock Vina 路径（留空使用随包版本）

5.3 设置保存在哪里

Windows 注册表 `HKCU\Software\MolStudio\MolStudio`；Linux 为 `~/.config/MolStudio/MolStudio.conf`。

5.4 恢复默认

把工作目录与 Vina 路径清空、主题改回深色、自动保存改回 5 分钟即可回到出厂状态； 面板布局用**窗口 → 重置布局**恢复。

6. 数据、文件与会话

6.1 分子、蛋白与分组

工作区中的对象分三类：**分子**（小分子）、**蛋白**（受体）和**分组**（表格中的容器）。 分组只是组织方式，不影响计算。

6.2 导入

支持 SDF、MOL、MOL2、PDB、SMILES（`.smi` / `.txt`）、CSV / 表格、XYZ 与 ChemDraw CDXML。 CSV 导入会询问哪一列是 SMILES、哪一列作为名称。导入时自动识别重复与非法结构， 并在状态栏报告跳过数量。

6.3 选择范围：全部 / 已勾选 / 所选

- **全部**：工作区中的所有分子。
- **已勾选**：分子表格中复选框被勾选的分子（推荐用于流程）。
- **所选**：表格中高亮的行，会随点击变化。

大多数应用和绘图编辑器都有这个范围下拉框。

6.4 导出

文件 → **导出** 支持 SDF、MOL、MOL2、PDB、SMILES、CSV 与 XYZ。导出的是**当前 勾选**的分子；没有勾选时导出全部。导出功能需要商业许可证。

6.5 会话

文件 → **保存会话 / 打开会话** 把整个工作区（分子、蛋白、选择、面板布局） 保存为一个 `.ms` 文件。双击 `.ms` 文件也会用 MolStudio 打开。

6.6 自动保存

默认每 5 分钟把当前工作区写入 `%APPDATA%\MolStudio\autosave.ms`。可在设置中调整或关闭。

6.7 崩溃恢复

如果上次异常退出且存在自动保存文件，下次启动会询问是否恢复。选择"是"即载入， 选择"否"则丢弃。

7. 分子表格

7.1 列

表格列包括名称、SMILES、分子式、分子量、LogP、TPSA、HBD / HBA、可旋转键、 环数、重原子数、QED、SA、PAINS 以及你导入或计算出的自定义性质。 **显示性质**（工具栏）可以显示 / 隐藏性质列与星标列。

7.2 分组与分组行

分子可以放进分组。分组行显示该组的勾选数量，以及每个数值列在当前组内的迷你直方图。 拖动行可以调整顺序或把分子移到别的分组。

7.3 复选框与行选择

- **复选框**决定分子是否参与后续步骤（3D 视图、卡片视图、应用、导出）。
- **行高亮**只是当前选择，用于编辑、右键操作和"所选"范围。

单击切换单个分子，**Shift**+单击切换连续区间，**Ctrl**+单击添加 / 移除，**空格**切换当前行。

7.4 星标与颜色标签

星标列保存 0–3 星评级（单击设置 / 清除），在卡片视图中显示为徽标。 右键菜单还可以给分子打标签、按标签过滤。

7.5 排序

单击列头升序，再次单击降序；**Ctrl**+单击列头可叠加多级排序。**清除排序**恢复导入顺序。

7.6 搜索与过滤

- 工具栏的搜索框按名称 / SMILES 过滤。
- 列头菜单提供**按文本过滤**与**按范围过滤**，可叠加多个条件。
- **清除所有过滤** 一次复位。

7.7 列统计

列头菜单 → **列统计…** 显示该列的计数、均值、标准差、最小 / 最大值与分位数。

7.8 颜色规则

列头菜单 → **按列着色** 用热力渐变给单元格上色；**清除着色** 取消。

7.9 查找重复项

列头菜单 → **重复项** 可按 InChIKey 高亮重复结构，或"删除重复项（保留第一个）"。

7.10 查找结构问题

质量 菜单标记 PAINS / Brenk 警示结构、空结构、超重分子等常见问题，并可一键标准化。

7.11 列菜单与表达式列

列头菜单还可以：隐藏列、自动调整列宽、设置数字格式（小数位 / 科学计数 / 千分位）、 调整行高与字号、固定列到左侧，以及添加**计算列**与**表达式列**。 表达式列支持四则运算、括号与常用函数，结果随数据变化实时更新。

7.12 工具栏

从左到右依次是：搜索、导入 / 导出、显示性质、显示 2D 结构、分组操作、过滤、 删除与撤销 / 重做。

7.13 键盘

按键	作用
Ctrl+Z / Ctrl+Y	撤销 / 重做表格编辑
Ctrl+C	复制所选单元格
Ctrl+A	全选
空格	切换当前行的勾选
Delete	删除所选分子
F2	重命名

7.14 右键菜单

行上右键：重命名、标签、标准化、复制、克隆、拆分、合并、删除、移到分组。 **列头右键**：排序、过滤、着色、统计、数字格式、隐藏列、固定列、表达式列。 **分组行右键**：重命名 / 删除分组、新建分组、把所选分子移到这里。

7.15 示例：导入、筛选并导出子集

1. **文件** → **导入** 打开一个 SDF，确认导入数量。
2. 列头菜单 → **质量** → **清理**：去盐、中和、去氢。
3. 按分子量列排序，用**按范围过滤**只保留 200–500。
4. 在过滤结果中勾选需要的分子（或 **Ctrl+A** 后取消个别）。
5. **文件** → **导出** → **SDF**，得到只含勾选分子的文件。

8. 分子视图

8.1 卡片

每张卡片显示名称、勾选状态、2D 结构、所选性质；数值性质达到三个以上时还会显示雷达图。 未勾选的卡片背景变暗，便于一眼分辨。

8.2 布局

- **网格**：按行列平铺，适合浏览大量分子。
- **树**：按父 / 子关系排列（片段生长或骨架系列）。
- **图**：力导向布局，边表示关系，边长随相似度变化。

关系方式可选**片段生长**、**Tanimoto 相似度**或**骨架系列**。

8.3 雷达图与卡片边框

视图菜单控制**雷达**、**数值条**、**结构**、**立体标签**、**原子编号**与**边标签**。 **颜色**菜单给卡片边框上色：按性质（热力渐变）或按与参考分子的相似性。

8.4 选择

在空白处拖动是**框选**（默认）或**套索**（选择菜单切换）。按住 **Ctrl** 保留已有选择。 卡片选择与表格的"所选"同步。

8.5 缩放、排列与缩略图

滚轮缩放，中键拖动平移，**Ctrl+滚轮**在卡片上也能缩放。**适应**、**排列**、 **紧凑排列卡片** 调整布局；**缩略图**打开角落的总览小地图，可点击拖动平移。

8.6 与表格、3D 视图的联动

悬停卡片会高亮表格中对应的行，反之亦然。勾选状态在三个视图之间实时同步。

8.7 卡片菜单

右键卡片：复制 SMILES / InChI、在表格中定位、重命名、从选择中移除、固定到前面、 标记（★ / ★★ / ★★★）、标准化。选中多张卡片时先显示批量操作。

8.8 键盘

方向键移动焦点，**Enter** 打开菜单，**Ctrl+A** 全选，**Ctrl+I** 反向选择， **Ctrl+滚轮** 缩放。

9. 2D 结构编辑器

9.1 顶部操作栏

顶部提供 SMILES 输入框、撤销 / 重做、复制 / 粘贴、整理（重新布局）、元素配色、 原子编号、立体标签、镜像翻转、网格背景与缩放，以及"送入工作区"。

9.2 工具箱与调色板

左侧是工具列：平移、选择、擦除、各类键（单 / 双 / 三 / 虚线 / 粗键 / 楔形 / 虚楔形）、 电荷、形状与文本。右侧是元素按钮与环模板，底部是常用砌块。

9.3 SMILES 栏

输入 SMILES 后回车即把结构载入画布；也可以把表格中选中的分子载入画布再修改。

9.4 绘制与编辑

- 单击元素按钮后在画布上单击放置原子，从一个原子拖到另一个原子即生成键。
- 选中键后可从工具列改变键级与立体类型。
- 橡皮工具删除原子或键；整理按钮重新计算 2D 坐标。

9.5 送入工作区

点击"送入工作区"把画布上的结构加入分子表格。若画布上的结构与表中某个分子来自同一 对象，可以选择覆盖更新。

9.6 示例：绘制一个小分子

1. 选择苯环模板，在画布中央单击放置。
2. 切换到单键工具，从环上某个原子拖出三个键。
3. 用元素按钮把末端原子改为 N 与 O。
4. 点击**整理**，再点击**送入工作区**。

9.7 示例：修改导入的结构

1. 在分子表格中选中一个分子。
2. 在 2D 编辑器点击"载入所选分子"。
3. 增删原子或改变键级。
4. 点击"送入工作区"覆盖原分子，3D 视图会同步更新。

10. 绘图编辑器

10.1 控制面板

左侧控制面板分三组：**数据**（图表类型、布局、X / Y / 大小 / 分组列、范围）、 **坐标轴**（标题、范围、对数轴、刻度）、**样式与显示**（配色、点形状、标签、图例、 图幅尺寸、主题）。

10.2 图表类型

直方图、密度图（KDE）、箱线图、小提琴图、小提琴 + 箱线图、经验累积分布、山脊图、 散点图、散点 + 回归、折线图、误差棒、六边形分箱、气泡图、饼图、柱状图、雷达图、 平行坐标、配对图、热图、词云、蜡烛图、三元图等。

10.3 数据变换与表达式列

X / Y 可以选择原始列，也可以先做变换（Log10、平方根、Z 分数、归一化等）。 文本列作为 X 时，会自动按类别分组并绘制数值 Y 的分布。

10.4 统计叠加

散点类图表可叠加回归线、置信带、相关系数与 P 值；分布类图表可叠加均值 / 中位线。

10.5 与图表交互

滚轮缩放、拖动平移、框选放大；悬停数据点显示数值；右键数据点可复制 SMILES、 在表格中定位、添加标签。

10.6 导出

导出 支持 PNG / SVG / PDF，可设置 DPI 与透明背景。导出的图与屏幕一致。

10.7 键盘与鼠标

操作	作用
滚轮	缩放
拖动	平移
Ctrl+Z / Ctrl+Y	撤销 / 重做参数修改
双击空白	重置坐标范围

11. 3D 视图

11.1 显示内容

3D 视图绘制当前**勾选**的分子与蛋白。蛋白支持飘带 / 卡通、球棍、线框、CPK 等表示， 并可叠加表面、标签、相互作用与测量标注。

11.2 移动视图

操作	作用
左键拖动	旋转
中键拖动	平移
右键拖动	平移（不弹菜单）
滚轮	缩放
Shift+滚轮	视场角（30–90 度）

11.3 工具栏

工具栏提供适应视图、视图预设、正交投影、着色方式、颜色方案、雾效、背景、坐标轴、 拾取层级、测量与保存图片。

11.4 工具条

左右两侧的竖条用于快速切换显示（原子、氢、飘带、表面）与选择层级。

11.5 着色方式

标准、卡通、平面、描边（Toon + Outline）等；颜色方案支持按元素、链、残基类型、 二级结构、B 因子、疏水性或分子着色。

11.6 颜色、雾效、背景与坐标轴

颜色 菜单切换配色；**雾效** 提供关闭 / 轻微 / 中等 / 浓密四档； **背景颜色** 可自定义；**显示坐标轴** 打开角落的 XYZ 指示器。

11.7 拾取层级

可选原子、残基、链或分子。拾取结果决定测量、标签、显示 / 隐藏等操作的作用对象。

11.8 测量

测量 菜单选择距离（2 次点击）、键角（3 次）、二面角（4 次）。右键撤销上一次点击， **Esc** 退出测量模式，**清除测量** 删除全部标注。

11.9 标签

右键标签可修改文字、字体、字号与颜色，或删除。标签可以附着在原子、残基或分子上。

11.10 右键菜单

视口右键：视图菜单（重置、正交、坐标轴、背景、预设、书签、保存图片）； 原子上右键：原子 / 残基菜单（显示、隐藏、着色、标签、测量、选择）。

11.11 视图书签

Ctrl+Shift+1..9 保存当前视图，**Ctrl+1..9** 恢复。书签菜单里也可以重命名或删除。

11.12 保存图片

保存当前视图为图片 可按 1× / 2× / 4× 输出 PNG，分辨率随缩放倍数提高。

11.13 示例：查看蛋白–配体复合物

1. 导入含配体的 PDB 文件。
2. 在 3D 视图用**按链**着色，右键配体选择"聚焦"。
3. 打开**相互作用**叠加，检查氢键与疏水接触。
4. 用**测量**确认关键氢键距离。
5. 保存一张 2× 图片用于汇报。

11.14 大体系的性能

数千原子以上时建议关闭飘带、降低表面精度、隐藏非极性氢；表面按需生成，用完可删除。

12. 分子表面

12.1 表面菜单

表面 菜单提供范德华表面、溶剂可及表面（SAS）与分子表面（SES）。

12.2 生成表面

选择类型与精度后生成。表面附着在当前分子 / 蛋白上，可单独显示或隐藏。

12.3 面积与体积

生成后状态栏会报告表面积与体积，可用于比较不同构象或配体。

12.4 表面管理

表面管理... 列出所有已生成的表面，可切换可见性、修改颜色与透明度或删除。

12.5 导出表面

表面可导出为 PLY / OBJ，便于在外部工具中渲染。

12.6 实用建议

表面计算较慢：先用低精度预览，确认后再提高精度；不需要时及时删除以释放内存。

13. 对接格点盒

13.1 放置与调整

格点盒 用中心 X/Y/Z 与三个方向的尺寸定义搜索空间。可以手动输入， 也可以按 **从 3D 中选择** 以当前所选原子的质心为中心。

13.2 与对接应用共享

在 3D 视图调整好的盒子会同步到**分子对接**应用；反之亦然。

13.3 尺寸建议

盒子应刚好包住配体结合口袋并留出 4–8 Å 余量。盒子越大搜索越慢， 过小则可能漏掉正确构象。

14. 分析视图

14.1 序列查看器

显示蛋白序列与二级结构，可跳转到残基、按链过滤、与 3D 视图联动选中。

14.2 拉氏图

按主链二面角绘制 Ramachandran 图，标出允许区、有利区与离群残基，可点击定位到 3D。

14.3 蛋白–配体相互作用

2D 相互作用图显示氢键、疏水接触、π-π 堆积、阳离子-π、盐桥、卤键与碰撞， 可旋转、缩放、折叠为结构图，或导出图片。

15. 应用中心

15.1 打开与排列

从**窗口**菜单打开**应用**面板。左侧是按类别分组的工具列表，右侧是当前工具的界面。 切换工具时页面保持状态，长任务继续运行。

15.2 工具列表

类别	工具
准备	受体准备、配体准备
模拟	分子对接、构象
生成	组合库（BRICS）、片段生长
分析	相互作用、聚类 / 相似性、骨架 / 侧链、MMP

15.3 选择作用对象

每个工具顶部都有**范围**下拉框：全部 / 已勾选 / 所选。部分工具还支持额外的过滤条件。

15.4 运行任务

填写参数后点击运行。任务在后台线程执行，界面显示进度条与**取消**按钮； 任务队列会显示运行中与排队的任务数。

15.5 任务队列

任务队列历史 记录本次会话提交的任务、耗时与状态，可取消排队中的任务。

15.6 结果写回

大多数工具提供"加入工作区"或"写入列"：结果会作为新分子或新列出现在分子表格中， 并自动出现在卡片与 3D 视图。

15.7 标准流程

准备受体 → 准备配体 → 对接 → 分析相互作用 → 按得分筛选 → 导出。

16. 分子对接

16.1 对接做什么

AutoDock Vina 在给定的格点盒内搜索配体的结合构象，并用经验打分函数给出亲和力 （kcal/mol，越负越好）。

16.2 准备受体

受体准备 会保留最大的蛋白片段、去除水与小分子、补全缺失侧链、按 pH 质子化、 重命名非标准残基并加端基。

16.3 准备配体

配体准备 会中和电荷、加氢、生成 3D 构象（可指定构象数与力场）， 并可选去盐、枚举互变异构体或立体异构体。

16.4 对接参数

参数	说明
格点盒	中心与尺寸，可从 3D 选择
搜索强度	1–32，越大越慢越充分（默认 8）
构象数	输出并保存的构象数量
CPU 线程	并行使用的核心数
随机种子	0 表示随机，固定值可复现

16.5 运行对接

点击**运行 Vina**。任务在后台执行，可随时取消；完成后结果表按亲和力排序。

16.6 读取结果

结果表显示每个配体的最佳亲和力与各构象得分。选中一行可在 3D 视图中查看该构象， 并与受体相互作用图联动。

16.7 把构象加入工作区

加入最优构象 只添加每个配体的最佳构象；**加入全部构象** 添加所有结果。

16.8 虚拟筛选

勾选"虚拟筛选（仅最佳得分，不保存构象）"后，一次运行可批量筛选大量配体： 每个配体只保留最佳亲和力，并写回表格列，速度快、占用内存少。

16.9 示例：筛选一个库并挑出最优构象

1. 准备受体与配体库。
2. 在 3D 视图中把格点盒对准结合口袋。
3. 勾选"虚拟筛选"，运行对接。
4. 在表格中按亲和力列升序排序，勾选前 20 个分子。
5. 关闭虚拟筛选，对这 20 个分子重新对接并加入全部构象。

16.10 如何解读打分

Vina 亲和力可用于同一靶点内的相对排序，但不宜跨靶点比较。相差 0.5 kcal/mol 以内 通常不具区分度；结合相互作用图与视觉检查判断构象是否合理。

16.11 常见问题

现象	处理
找不到 Vina	在设置中指定可执行文件路径，或确认随包版本存在
全部得分很差	检查格点盒是否覆盖口袋、受体是否准备、配体是否带电荷
运行很慢	降低搜索强度、减少构象数、缩小格点盒
结果为空	检查配体是否有效、盒内是否有空间

17. 准备与分析应用

17.1 受体准备

输入蛋白，输出可直接对接的受体：保留最大片段、去水去离子、补全侧链、按 pH 质子化、 重命名非标准残基、加端基。结果可加入工作区。

17.2 配体准备

中和电荷、加氢、生成 3D 构象，可选去盐、枚举互变异构体 / 立体异构体。 可把结果直接送入分子对接。

17.3 构象

生成多构象（ETKDG 等），可选 RMSD 去重、按能量排序、对齐到共同骨架。 可只加入最低能量构象，或加入全部 / 对齐后的构象。

17.4 相互作用

检测受体与配体之间的非共价相互作用，输出 2D 相互作用图与统计列。

17.5 聚类 / 相似性

按 Morgan 指纹的 Tanimoto 相似度做 Butina 聚类，可设置相似度阈值、最小簇大小， 并把簇编号写回表格列；也可按与参考分子的相似度排序并挑选多样性代表。

17.6 骨架 / 侧链

- **骨架分析**：提取 Bemis-Murcko 骨架或通用环模板，统计每个骨架的分子数与活性， 绘制骨架-活性箱线图。
- **侧链分析**：按 R 基矩阵展示同一骨架上的取代基与活性差异。

17.7 MMP

匹配分子对分析：找出仅有一个片段不同的分子对，计算性质差（Δ）、显著性 （P 值、FDR q 值、Cohen's d 与置信区间），并可导出规则表与分子对。

17.8 组合库

用 BRICS 对种子砌块重组生成新分子，可设置重组深度、最大产物数、性质过滤 （MW、LogP、TPSA、QED、SA 上下限）、去重与 PAINS 过滤；也可按得分做精英进化， 并查看进化曲线与打分热图。

18. 命令行

18.1 调用方式

```
MolStudio.exe --run session.ms --export out.sdf
```

Linux 下为 `./MolStudio --run ...`。

18.2 选项

选项	说明
`--run <file>`	载入 `.ms` 会话或结构文件
`--script <file>`	执行一段 Python 脚本（可访问 `core.store.store`）
`--export <file>`	把结果导出为 SDF / CSV 等

18.3 用脚本处理

```
from core.store import store
from core.molecules import Molecule
from rdkit import Chem

mols = [Molecule(Chem.MolFromSmiles(s)) for s in ('CCO', 'c1ccccc1')]
store.add_mols(mols)
```

18.4 示例

```
MolStudio --run library.sdf --script filter_mw.py --export filtered.sdf
```

18.5 命令行不能做的事

命令行模式不打开窗口，因此不能使用需要 3D 交互、绘制或对话框的功能； 需要这些步骤时请在图形界面中操作。

18.6 检查批处理结果

批处理会写日志（见 19.1）。导出后可用分子表格打开结果核对数量与性质列。

19. 故障排查、日志与文件位置

19.1 日志文件

`%APPDATA%\MolStudio\logs\molstudio.log`（Linux：`~/.config/MolStudio/logs/`）。 日志按大小轮转，记录了启动、导入、任务与异常信息。

19.2 崩溃

程序捕获未处理异常并写入日志，同时尝试保留自动保存文件。下次启动会提示恢复。

19.3 报告问题时请附上

- 版本号（**帮助** → **关于**）与操作系统。
- 复现步骤与期望结果。
- 日志文件的相关片段。
- 能复现问题的最小结构文件。

19.4 文件位置一览

内容	Windows	Linux
设置 / 许可证	注册表 `HKCU\Software\MolStudio`	`~/.config/MolStudio/`
自动保存	`%APPDATA%\MolStudio\autosave.ms`	`~/.config/MolStudio/autosave.ms`
日志	`%APPDATA%\MolStudio\logs\`	`~/.config/MolStudio/logs/`
程序与手册	安装目录	解压目录

19.5 常见现象

现象	可能原因与处理
启动即退出	显卡驱动过旧：更新驱动，或设置环境变量 `MOLSTUDIO_SKIP_GL=1` 后重试
3D 视图黑屏	OpenGL 不可用；同上
中文显示为方块	使用官方安装包（已内置中文字体）；自建环境请安装中文字体
导入后分子数不对	查看状态栏的跳过数量；检查 SMILES 列是否选对
导出按钮不可用	导出需要商业许可证
对接失败	检查 Vina 路径、格点盒与配体准备结果

附录 A. 键盘与鼠标参考

A.1 键盘

快捷键	作用
Ctrl+O / Ctrl+S	打开 / 保存会话
Ctrl+Z / Ctrl+Y	撤销 / 重做
Ctrl+C / Ctrl+V	复制 / 粘贴
Ctrl+A	全选
F1	帮助
Delete	删除所选
Esc	取消当前操作（测量、框选等）

3D 视图另有：`R` 重置视图、`O` 正交投影、`+/−` 缩放、方向键平移、`1/2/3` 前 / 右 / 顶视图、`F` 聚焦所选、`Home` 重置取景、`Ctrl+1..9` 恢复书签、`Ctrl+Shift+1..9` 保存书签。

A.2 鼠标

操作	作用
左键单击	选中 / 拾取
左键拖动	旋转（3D）/ 框选（2D 视图、卡片）
中键拖动	平移
右键单击	上下文菜单
右键拖动	平移（3D，不弹菜单）
双击	聚焦 / 展开
滚轮	缩放
Shift+滚轮	视场角（3D）或横向平移

A.3 界面中的视觉约定

- **加粗**文字是按钮或菜单项；灰色文字表示当前不可用。
- 复选框 = 参与后续步骤；行高亮 = 当前选择。
- 带锁图标的工具表示当前版本不可用，悬停可看到原因。

附录 B. 支持的文件格式

B.1 导入

格式	扩展名	说明
SDF	`.sdf`	可含多个分子与性质字段
MDL Molfile	`.mol`	单个分子
MOL2	`.mol2`	含原子类型与电荷
PDB	`.pdb`	蛋白、配体与复合物
SMILES	`.smi` / `.txt`	每行一个 SMILES，可带名称
CSV / 表格	`.csv`	需指定 SMILES 列
XYZ	`.xyz`	仅坐标
ChemDraw	`.cdxml`	结构式

B.2 导出

SDF、MOL、MOL2、PDB、SMILES、CSV、XYZ；图片支持 PNG / SVG / PDF。

附录 C. 第三方组件与许可

MolStudio 使用了 Qt for Python（PySide6）、RDKit、NumPy、matplotlib、AutoDock Vina、 Open Babel 组件、fontTools 等开源组件，并随包提供 **Noto Sans SC** 子集字体 （SIL Open Font License 1.1）用于中文显示。

完整的组件清单与许可证全文随程序提供：安装目录下的 `third-party-licenses.txt`。