

使用 MolAICal 将分子切割成片段

作者：Qifeng Bai (update 2020-08-04)

更多教程（含英文教程）请见如下：

MolAICal 官方主页：<https://molaical.github.io>

MolAICal 官方主页中国镜像：<https://molaical.gitee.io>

MolAICal 中文博客：<https://molaical.gitee.io/cntutorial.html>

1. 简介

在有些情况下需要将配体分子切割成小片段，进而研究其片段特性。MolAICal 提供了一种根据可旋转键将配体切割成小片段的方法。在本教程中，介绍了 MolAICal 中片段切割的操作方法。

2. 工具

2.1. 所需软件下载地址

1) MolAICal: <https://molaical.github.io> 或 <https://molaical.gitee.io>

2.2. 操作示例文件

所有用到的操作教程文件均可在下面的网站下载：

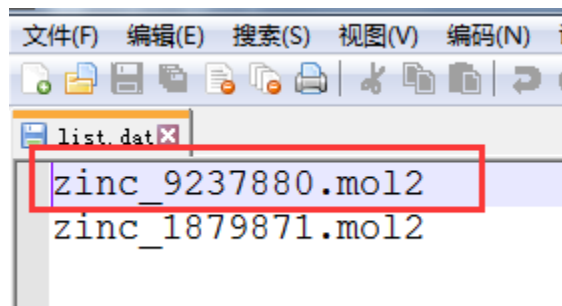
<https://gitee.com/molaical/tutorials/tree/master/013-fragmentSplit>

3. 操作流程

转至“013-fragmentSplit”文件目录下：

```
#> cd 013-fragmentSplit
```

准备输入文件“list.dat”，“list.dat”文件中包含了配体文件名：



1. 在不进行加氢或去氢操作的情况下将配体分裂成小片段：

```
#> molaical.exe -tool fragSplit -i list.dat -o inital -oa results
```

或

```
#> molaical.exe -tool fragSplit -i list.dat -o inital -oa results -w off
```

2. 将配体分解为小片段并加氢

```
#> molaical.exe -tool fragSplit -i list.dat -o initial -oa results -w add
```

3. 将配体分解为小片段并去氢

```
#> molaical.exe -tool fragSplit -i list.dat -o initial -oa results -w del
```

注意：文件“initial”包含了没有进行加氢或去氢操作的分子片段。文件“results”包含运行过“-w”特定命令的文件，其中参数“-w”表明 MolAICal 是否进行氢原子的删除和添加操作。

另外如果想要将切割的片段或配体合并到一个文件中，可使用下面的命令：

```
#> molaical.exe -tool merge -m mol2 -i results -o all_frag.mol2
```