

使い方

- 1 用語の定義
- 2 ウィンドウ
- 3 入力ファイルの作成

1 用語の定義

Paics View では、以下に示す 4 つの「概念」を導入している。

1. molecule

ターゲット全体を 1 つの「molecule」とする。例えば、100 残基のタンパク質とリガンド分子がターゲットの場合、これらをまとめて 1 つの molecule と考える。

2. link-group

結合でつながっているものを 1 つの「link-group」とする。例えば、100 残基のタンパク質とリガンド分子がターゲットの場合、2 つの link-group から構成されていると考える（タンパク質の link-group とリガンド分子の link-group）。

3. bio-unit

1 つのアミノ酸残基を 1 つの「bio-unit」とする。例えば、100 残基のタンパク質とリガンド分子がターゲットの場合、タンパク質の link-group は 100 個の bio-unit を含んでおり、リガンド分子の link-group は 0 個の bio-unit を含んでいると考える。

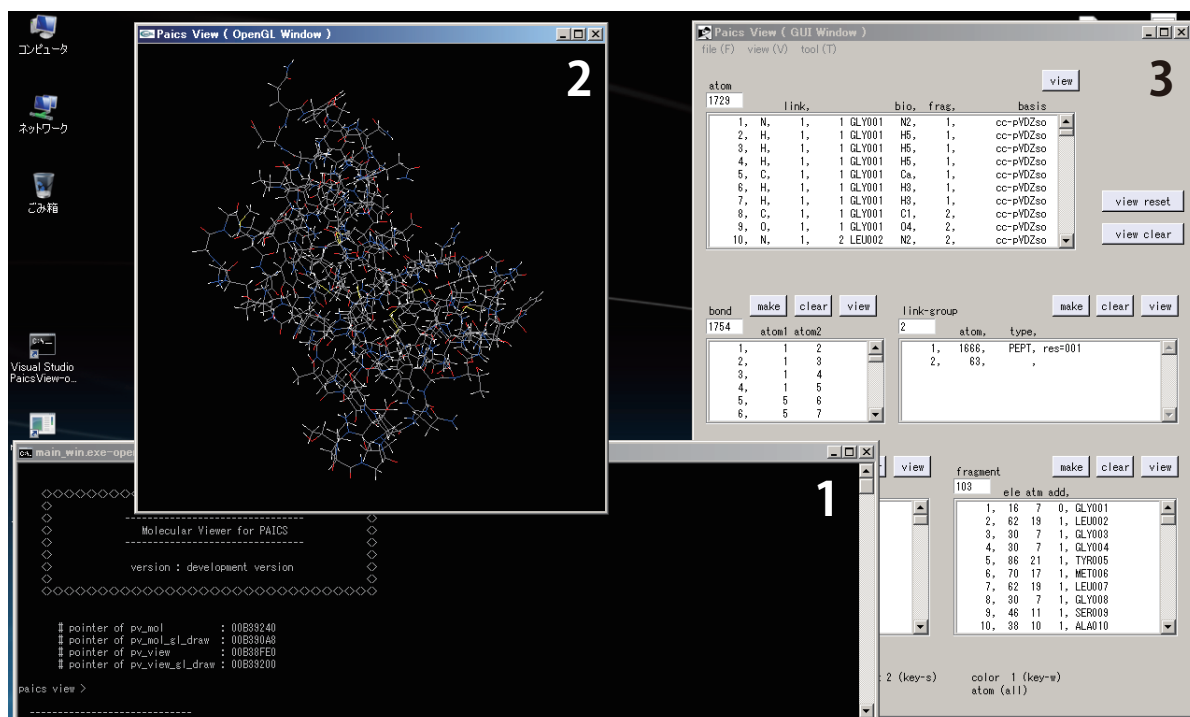
4. fragment

FMO 計算でのフラグメントを「fragment」とする。

2 ウィンドウ

Paics View を起動すると、図 1 に示す 3 つのウィンドウが立ち上がる。これらを含め、*Paics View* には複数のウィンドウが存在する。ここでは、それらの役割を説明する。

図 1: *Paics View* を Windows で起動したときの画面。3 つのウィンドウが立ち上がる。



2.1 コマンドプロンプト

Paics View 起動時に作られる (図 1 の 1) コマンドラインからの入力や、ログの書き出しなどが行われる。

2.2 opengl window

Paics View 起動時に作られる (図 1 の 2) OpenGL を使い立体構造を可視化する。現在はワイヤーモデルのみ。マウスやキーボードで、以下の操作が可能。

- 左クリックでドラッグすると回転する
- f キーで視点が前へ移動する（分子が近づく）
- b キーで視点が後へ移動する（分子が遠ざかる）
- l キーで視点が右へ移動する（分子が左へ動く）
- h キーで視点が左へ移動する（分子が右へ動く）
- p キーで視点が上へ移動する（分子が下へ動く）
- n キーで視点が下へ移動する（分子が上へ動く）
- 前後左右上下の移動は、左クリックしながら行くと速くなる
- c キーで視点が質量中心に移動する（分子が真ん中に移動する）
- a キーで原子の番号が表示される。キーを押すたびに、

何も表示されない 全原子の番号が表示される 主鎖の番号のみ
表示される 側鎖の番号のみ表示される アルファ炭素の番号
のみ表示される 何も表示されない ...

と切り替わる。ただし、bio-unit が定義されていなければ、主鎖、側鎖、アルファ炭素の番号は表示されない。

- s キーで bio-unit や fragment の情報が表示される。キーを押すたびに、

何も表示されない fragment の番号が表示される bio-unit の情
報（1文字表記と残基番号）が表示される 何も表示されない
...

と切り替わる。ただし、bio-unit および fragment が定義されていなければ、これらは表示されない。

- w キーで結合のカラーリングが変化する。キーを押すたびに、

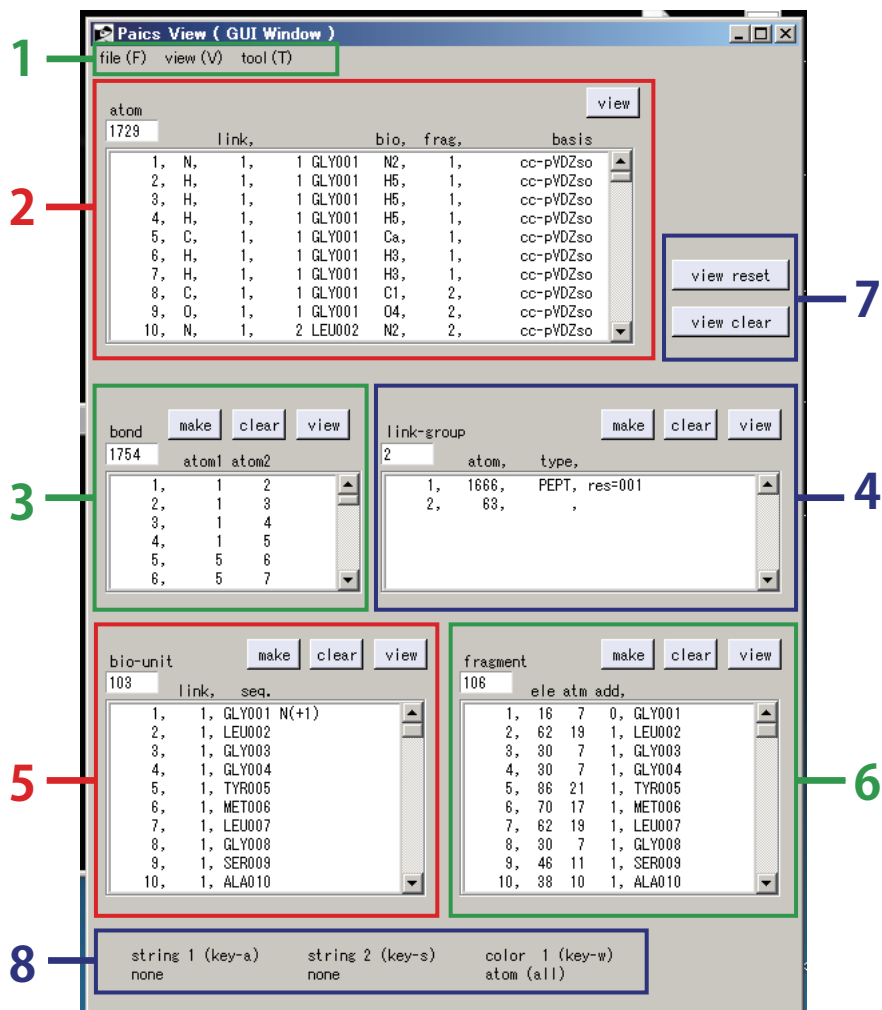
原子ごと fragment ごと 側鎖のみ 主鎖のみ 原子ごと
...

と切り替わる。ただし、bio-unit および fragment が定義されていなければ、これらに対応したカラーリングにはならない。

2.3 gui window

Paics View 起動時に作られる (図 1 の 3)。拡大したものを図 2 に示す。

図 2: gui window



2.3.1 メニュー (図 2 : 1)

以下のメニューが存在する。

- file

ファイルの読み書きに関するメニュー。以下の項目が存在する。

 - read

構造を読むためのウインドウ (read molecule window) を開く。
 - write

PAICS のファイルを書き出すためのウインドウ (write molecule window) を開く。
- view

opengl window の表示に関するメニュー。以下の項目が存在する。

 - control

opengl window に表示する対象をコントロールするためのウインドウ (view control window) を開く。
- tool

パラメーターのセットや計算結果の解析に関するメニュー。以下の項目が存在する。

 - basis set

基底関数の設定を行うウインドウ (set basis window) を起動する。
 - energy

PAICS で得られたエネルギーに関する情報を解析するためのウインドウ (paics energy window) を起動する。

2.3.2 原子の情報 (図 2 : 2)

原子の情報を表示する。

- テキストボックス (atom)

原子の数が表示される。
- リストボックス

原子の情報が表示される (項目は以下の通り) 。

 - 通し番号
 - 元素記号
 - 原子が属している link-group の番号 (link-group が定義されていなければ表示されない)

- － 原子が属している bio-unit の番号、残基種（三文字表記）、残基番号、残基中の原子の位置（bio-unit が定義されていない場合、もしくは bio-unit に属していない場合は表示されない）
 - － 原子が属している fragment の番号（フラグメントが定義されていない場合、もしくは fragment に属していない場合は表示されない）
 - － 基底関数の種類。
- ボタン（ view ）
リストボックスで原子を選択しこのボタンを押すと、選択したものが opengl window の描画対象に追加される。

2.3.3 結合の情報（図 2：3）

結合の情報を表示する。

- テキストボックス（ bond ）
結合の数が表示される。
- リストボックス
結合の情報が表示される（項目は以下の通り）。
 - － 通し番号
 - － 結合を形成している原子の通し番号（1）
 - － 結合を形成している原子の通し番号（2）
- ボタン（ make ）
原子間距離から結合を自動的に生成する。既に結合が定義されている場合は、リセットされ、再定義される。
- ボタン（ clear ）
結合の定義をリセットする。
- ボタン（ view ）
リストボックスで結合を選択しこのボタンを押すと、選択したものが opengl window の描画対象に追加される。

2.3.4 link-group の情報 (図 2 : 4)

link-group の情報を表示する。

- テキストボックス (link-group)
link-group の数。
- リストボックス
link-group の情報が表示される (項目は以下の通り)。
 - 通し番号
 - link-group に属する原子の数。
 - link-group のタイプ。
- ボタン (make)
結合の定義から link-group を自動的に生成する。link-group が既に定義されている場合は、リセットされ、再定義される。(結合が定義されていなければ link-group は定義されない)
- ボタン (clear)
link-group の定義をリセットする。
- ボタン (view)
リストボックスで link-group を選択しこのボタンを押すと、選択したものが opengl window の描画対象に追加される。

2.3.5 bio-unit の情報 (図 2 : 5)

bio-unit の情報を表示する。

- テキストボックス (bio-unit)
bio-unit の数。
- リストボックス
bio-unit の情報が表示される (項目は以下の通り)。
 - 通し番号
 - bio-unit が属する link-group の番号。
 - bio-unit のタイプ (アミノ酸の 3 文字表記と残基番号)。

- ボタン (make)
結合と link-group の定義から、bio-unit を自動的に生成する。bio-unit が既に定義されている場合は、リセットされ、再定義される。(結合と link-group が定義されていなければ bio-unit は定義されない)
- ボタン (clear)
bio-unit の定義をリセットする。
- ボタン (view)
リストボックスで bio-unit を選択しこのボタンを押すと、選択したものが opengl window の描画対象に追加される。

2.3.6 fragment の情報 (図 2 : 6)

fragment の情報を表示する。

- テキストボックス (fragment)
fragment の数。
- リストボックス
fragment の情報が表示される (項目は以下のとおり)。
 - 通し番号
 - fragment に含まれる電子数。
 - fragment に属する原子数。
 - 結合の切断に伴う追加の原子数。
 - 対応する bio-unit のタイプ (アミノ酸の 3 文字表記と残基番号)。
- ボタン (make)
結合、link-group、bio-unit の定義から、自動的に fragment を定義する。fragment が既に定義されている場合は、リセットされ、再定義される。(結合、link-group、biounit が定義されていなくても、fragment は定義される。)
- ボタン (clear)
fragment の定義をリセットする。
- ボタン (view)
リストボックスで fragment を選択しこのボタンを押すと、選択したものが opengl window の描画対象に追加される。

2.3.7 描画の簡易操作 (図 2 : 7)

opengl window の描画に関する簡易操作を行う。

- ボタン (view reset)
描画をリセットする (最初の状態)。
- ボタン (view clear)
描画をクリアする (何も表示しない状態)。

2.3.8 描画の簡易設定 (図 2 : 8)

opengl window における、原子の通し番号、fragment の番号、bio-unit のタイプ、結合の色に関する描画の状態を表示する。

- string 1 (key-a)
原子の通し番号の描画の状態を表示。
- string 2 (key-s)
fragment の番号、bio-unit のタイプの描画の状態を表示。
- color 1 (key-w)
結合の色に関する描画の状態を表示。

2.4 read molecule window

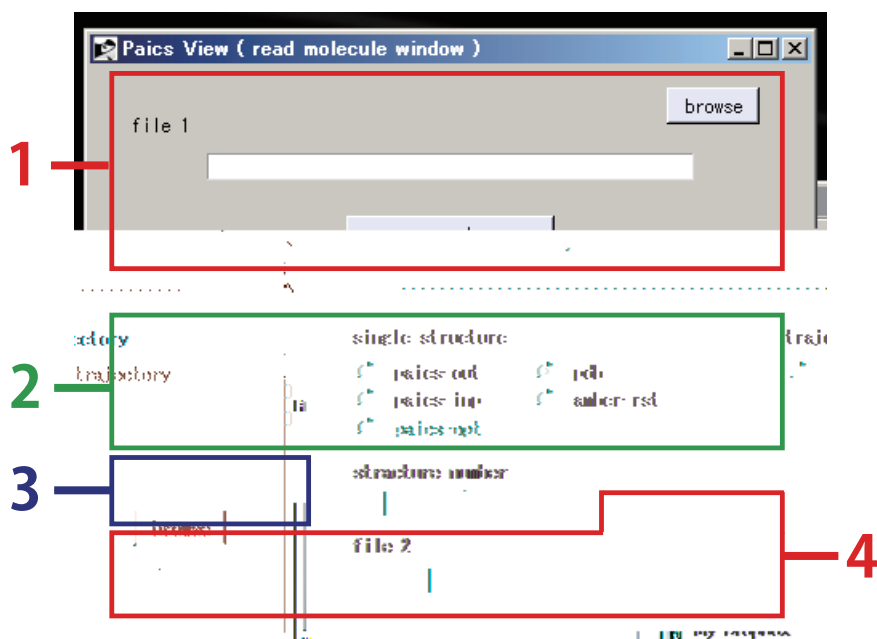
構造を読むためのウインドウ。file メニューの read から開くことが出来る (図 3)。

2.4.1 ファイルの指定 (図 3 : 1)

ファイルを指定する。

- ボタン (browse)
ファイル選択ウインドウを開く。ここで選択されたファイル名が、テキストボックスに表示される。(選択しただけではファイルは読めない。)
- ボタン (read)
このボタンを押すと、テキストボックスに表示されているファイルが読まれる。

図 3: read molecule ウィンドウ



- テキストボックス (file 1)
ファイル名を入力する。直接入力しても良いが、browse ボタンからファイル選択ウィンドウを開き入力することも可能。

2.4.2 ファイルタイプの指定 (図 3 : 2)

ファイルタイプを指定する。

- ラジオボタン (paics-out)
PAICS の出力ファイルを読む場合、ここをオンにする。構造情報、フラグメント情報に加え、計算結果 (エネルギー) が読まれる。(選択したファイル名の拡張子が 「.out」 の場合、自動的にここがオンになる)。
- ラジオボタン (paics-in)
PAICS の入力ファイルを読む場合、ここをオンにする。(選択したファイル名の拡張子が 「.inp」 の場合、自動的にここがオンになる)。
- ラジオボタン (paics-opt)
選択不可。

- ラジオボタン (pdb)
PDB ファイルを読む場合、ここをオンにする。(選択したファイル名の拡張子が「.pdb」の場合、自動的にここがオンになる)
- ラジオボタン (amber-rst)
分子動力学プログラム AMBER のリスタートファイル (構造ファイル) を読む場合、ここをオンにする。この場合、トポロジーファイルも読む必要がある。
- ラジオボタン (trajectory)
選択不可。

2.4.3 構造の番号の指定 (図 3 : 3)

選択不可。

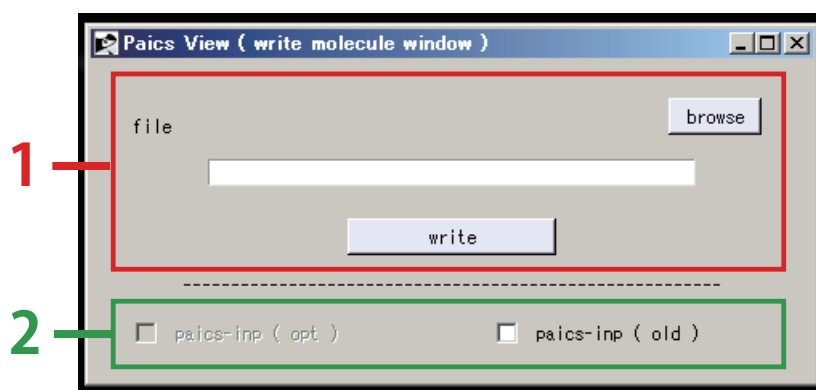
2.4.4 2 番目のファイルの指定 (図 3 : 4)

構造を読むのに 2 つのファイルが必要な場合、ここが選択可能になる (例えば、AMBER の構造ファイルを読む場合、ここでトポロジーファイルを指定する必要がある)

2.5 write molecule window

構造を書き出すためのウインドウ。file メニューの write から開くことが出来る (図 4)

図 4: write molecule ウインドウ



2.5.1 ファイルの指定 (図 4 : 1)

ファイルを指定する。

- ボタン (browse)
ファイル選択ウインドウを開く。ここで選択されたファイル名が、テキストボックスに表示される。(選択しただけではファイルは書き出されない。)
- ボタン (write)
このボタンを押すと、テキストボックスに表示されているファイルへ書き出される。
- テキストボックス (file)
ファイル名を入力する。直接入力しても良いが、browse ボタンからファイル選択ウインドウを開き入力することも可能。

2.5.2 オプションの指定 (図 4 : 2)

ファイルに書き出す際のオプションを指定する部分。

- チェックボックス (paics-inp (opt))
選択不可。
- チェックボックス (paics-inp (old))
これをオンにすると、古いフォーマットで入力ファイルが書き出される。

2.6 view control window

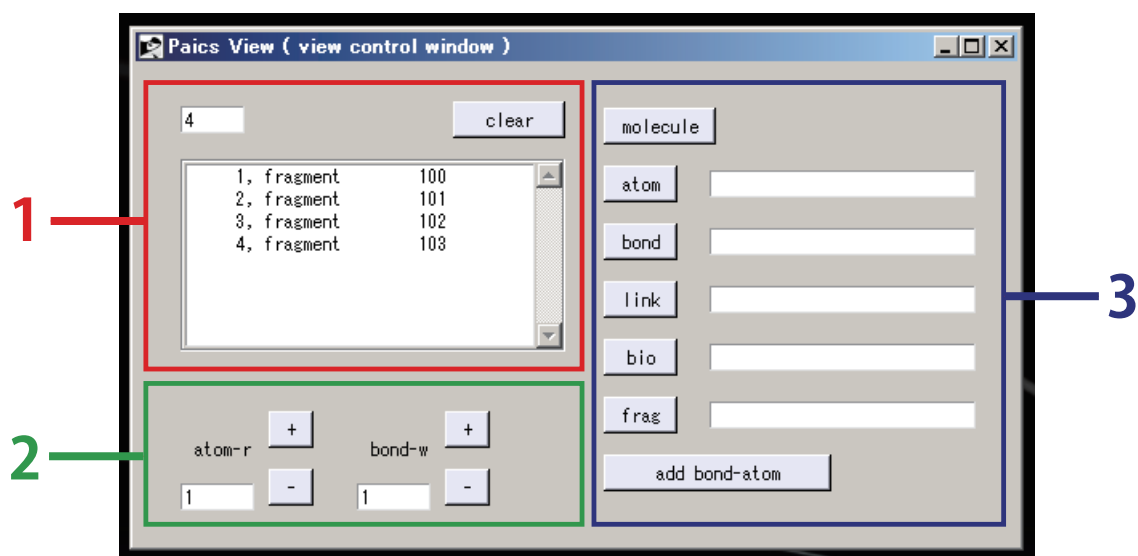
opengl window の描画対象をコントロールするウインドウ。view メニューの control から開くことが出来る (図 5)。

2.6.1 描画対象 (図 5 : 1)

描画対象を表示している。

- テキストボックス
描画対象の数。
- リストボックス
描画対象。

図 5: view control window



- ボタン (clear)
描画対象をリセットする (つまり何も描画しない)。

2.6.2 原子と結合 (図 5 : 2)

原子の大きさ、結合の太さをコントロールする。

- テキストボックス (atom-r)
原子の大きさ (ドット) を表示。
- ボタン (+)
原子のサイズを大きくする。
- ボタン (-)
原子のサイズを小さくする。
- テキストボックス (bond-w)
結合の太さを表示 (ワイヤー) を表示。
- ボタン (+)
結合を太くする。

- ボタン (`-`)
結合を細くする。

2.6.3 描画対象の追加 (図 5 : 3)

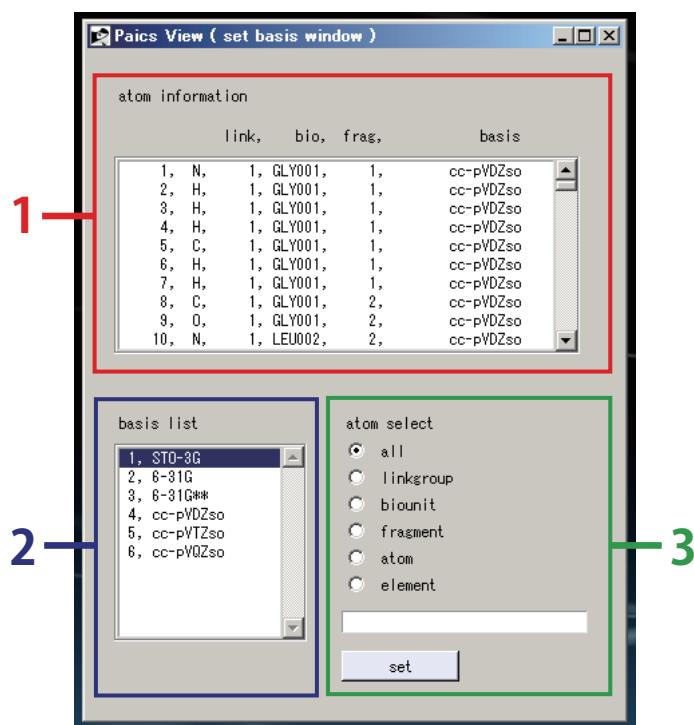
描画対象を追加する。

- ボタン (`molecule`)
`molecule` が描画対象に追加される。(系全体が描画される。)
- ボタン (`atom`) とテキストボックス
テキストボックスに原子の通し番号を入力しボタンを押すと、その原子が描画対象に追加される。
- ボタン (`bond`) とテキストボックス
テキストボックスに結合の通し番号を入力しボタンを押すと、その結合が描画対象に追加される。
- ボタン (`link-group`) とテキストボックス
テキストボックスに `link-group` の通し番号を入力しボタンを押すと、その `link-group` が描画対象に追加される。
- ボタン (`bio-unit`) とテキストボックス
テキストボックスに `bio-unit` の通し番号を入力しボタンを押すと、その `bio-unit` が描画対象に追加される。
- ボタン (`fragment`) とテキストボックス
テキストボックスに `fragment` の通し番号を入力しボタンを押すと、その `fragment` が描画対象に追加される。
- ボタン (`add bond-atom`)
描画対象と結合で繋がっている原子を、描画対象に追加する。

2.7 set basis window

基底関数をセットするウインドウ。tool メニューの `basis set` から開くことが出来る (図 6)

図 6: set basis window



2.7.1 原子の情報 (図 6 : 1)

基底関数の設定を含む原子情報を表示する。

- リストボックス

原子の情報が表示される (項目は以下の通り)。

- 通し番号
- 元素記号
- 原子が属する link-group の番号
- 原子が属する bio-unit のタイプ (アミノ酸の 3 文字表記と残基番号)
- 原子が属する fragment の番号
- 設定されている基底関数の名前

2.7.2 基底関数の選択 (図 6 : 2)

基底関数を選択する。

- リストボックス
選択可能な基底関数 (あらかじめ *PAICS* に基底関数の定義が準備されているもの) のリストが表示され、それを選択する。

2.7.3 原子の選択と基底関数のセット (図 6 : 3)

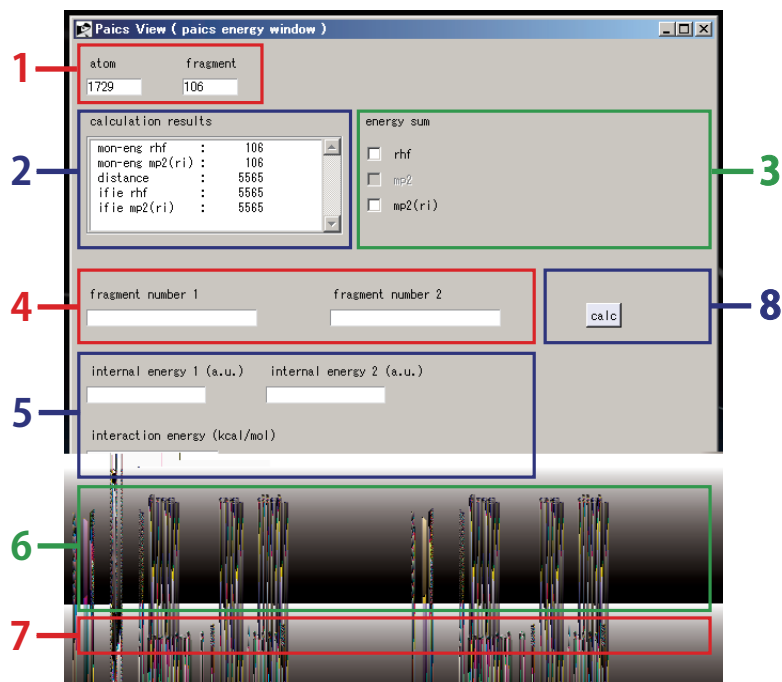
基底関数をセットする。

- ラジオボタン (all)
ここをオンにして set ボタンを押すと、全ての原子に対し、基底関数のセットが適用される。
- ラジオボタン (link-group)
ここをオンにして set ボタンを押すと、テキストボックスで指定された link-group に属する原子に対し、基底関数のセットが適用される。
- ラジオボタン (bio-unit)
ここをオンにして set ボタンを押すと、テキストボックスで指定された bio-unit に属する原子に対し、基底関数のセットが適用される。
- ラジオボタン (fragment)
ここをオンにして set ボタンを押すと、テキストボックスで指定された fragment に属する原子に対し、基底関数のセットが適用される。
- ラジオボタン (atom)
ここをオンにして set ボタンを押すと、テキストボックスで指定された原子に対し、基底関数のセットが適用される。
- ラジオボタン (element)
ここをオンにして、set ボタンを押すと、テキストボックスで指定された原子番号の原子に対し、基底関数のセットが適用される。
- ボタン (set)
基底関数がセットされる。

2.8 paics energy window

計算されたエネルギーを表示するウインドウ。tool メニューの energy から開くことができる (図 7)。

図 7: paics energy window



2.8.1 原子数と fragment 数 (図 7 : 1)

原子数および fragment 数が表示される。

- テキストボックス (atom)
原子数が表示される。
- テキストボックス (fragment)
fragment 数が表示される。

2.8.2 ファイルから読んだ計算結果 (図 7 : 2)

ファイルから読んだ計算結果を表示する。

- リストボックス (calculation result)
読み込んだ計算結果を表示する (項目は以下の通り)
 - － モノマーエネルギーの数
 - － フラグメント間距離の数
 - － IFIE の数。

2.8.3 解析に加えるエネルギーの選択 (図 7 : 3)

ファイルから読んだ計算結果のうち、どのエネルギーを解析するかを選択する。複数選択した場合は、その和が解析対象となる。

- リストボックス (calculation result)
読み込んだ計算結果を表示する (項目は以下の通り)
 - － モノマーエネルギーの数
 - － フラグメント間距離の数
 - － IFIE の数。

2.8.4 fragment の選択 (図 7 : 4)

fragment を 2 つのグループに分ける。

- テキストボックス (fragment number 1)
一方のグループに含める fragment の番号を指定する。
- テキストボックス (fragment number 2)
一方のグループに含める fragment の番号を指定する。

2.8.5 内部エネルギーと相互作用エネルギー (図 7 : 5)

グループの内部エネルギーとのグループ間の相互作用エネルギーが表示される。

- テキストボックス (internal energy 1)
1 つ目のグループの内部エネルギー
- テキストボックス (internal energy 2)
2 つ目のグループの内部エネルギー
- テキストボックス (interaction energy)
グループ間の相互作用エネルギー

2.8.6 相互作用エネルギーの詳細 (図 7 : 6)

グループ間の相互作用エネルギーの詳細 (グループ内の fragment がもう一方のグループと及ぼし合う相互作用エネルギー) が表示される。

- リストボックス (左)
グループ 1 の fragment がグループ 2 と及ぼし合う相互作用エネルギー。
- リストボックス (右)
グループ 2 の fragment がグループ 1 と及ぼし合う相互作用エネルギー。

2.8.7 gnuplot を用いた相互作用エネルギーの可視化 (図 7 : 7)

上で表示されたグループ間の相互作用エネルギーの詳細を、gnuplot を用いて可視化する (この機能を利用するためには、gnuplot のインストールが必要)。

- ボタン (gnuplot 1)
グループ 1 の fragment がグループ 2 と及ぼし合う相互作用エネルギーを、可視化する。
- ボタン (gnuplot 2)
グループ 2 の fragment がグループ 1 と及ぼし合う相互作用エネルギーを、可視化する。
- ボタン (kill)
gnuplot を閉じる。

2.8.8 内部エネルギーと相互作用エネルギーの計算 (図 7 : 8)

内部エネルギーおよび相互作用エネルギーを計算する。

- ボタン (calc1)
このボタンを押すと、内部エネルギーと相互作用エネルギーが計算される。

2.9 link-group window

link-group に関する情報の表示と操作を行う。gui window の link-group の情報を表示する部分 (図 2 : 4) のリストボックス内をダブルクリックすることでこのウインドウを開くことができる。

図 8: link-group window

link group
1

atom num.
1668

	link,	bio, frag
1, N,	1, 1 GLY001	N2, 1
2, H,	1, 1 GLY001	H5, 1
3, H,	1, 1 GLY001	H5, 1
4, H,	1, 1 GLY001	H5, 1
5, C,	1, 1 GLY001	Ca, 1
6, H,	1, 1 GLY001	H3, 1
7, H,	1, 1 GLY001	H3, 1
8, C,	1, 1 GLY001	C1, 2
9, O,	1, 1 GLY001	O4, 2
10, N,	1, 2 LEU002	N2, 2

bio-unit num. 103 **bio-seq.** 001

link, seq.

1,	1, GLY001	N(+1)
2,	1, LEU002	
3,	1, GLY003	
4,	1, GLY004	
5,	1, TYR005	
6,	1, MET006	

fragment num. 0

ele atm add,

1,	16	7	0,	GLY001
2,	82	19	1,	LEU002
3,	30	7	1,	GLY003
4,	30	7	1,	GLY004
5,	86	21	1,	TYR005
6,	70	17	1,	MET006

☐ make fragment (auto)
☒ make fragment (link group)

2.9.1 link-group の番号 (図 8 : 1)

link-group の番号を表示する。

- テキストボックス (link-group)
link-group の番号を表示する。

2.9.2 link-group に属する原子の情報 (図 8 : 2)

link-group に属する原子の情報を表示する。

- テキストボックス (atom num.)
link-group に含まれる原子の数を表示する (項目は以下の通り)。
- リストボックス
原子の情報を表示する。

- 原子の番号
- 元素記号
- 原子が属する link-group の番号
- 原子が属する bio-unit の番号、残基種（三文字表記）、残基番号、残基中の原子の位置（bio-unit が定義されていない場合、もしくは bio-unit に属して無い場合は表示されない）。
- 原子が所属する fragment の番号（fragment が定義されていない場合、もしくは fragment に属して無い場合は表示されない）。

2.9.3 link-group に属する bio-unit の情報（図 8：3）

link-group に属する bio-unit の情報の表示と操作を行う。

- テキストボックス（bio-unit num.）
link-group に属する bio-unit の数を表示する。
- リストボックス
bio-unit の情報を表示する（項目は以下の通り）。
 - bio-unit の番号
 - bio-unit が属する link-group の番号
 - bio-unit の情報
- テキストボックス（bio-seq.）
link-group に属する bio-unit の最初の残基番号を表示している。ここを書き換えて、set ボタンを押すと、残基番号の最初の値を変えることが出来る。
- ボタン（set）
link-group に属する bio-unit の最初の残基番号を、bio-seq. に表示されている値にセットする
- ボタン（make）
link-group に属する bio-unit を定義する（既に定義されている場合は、定義をクリアし再定義する）
- ボタン（clear）
link-group に属する bio-unit の定義をクリアする

2.9.4 link-group の番号 (図 8 : 4)

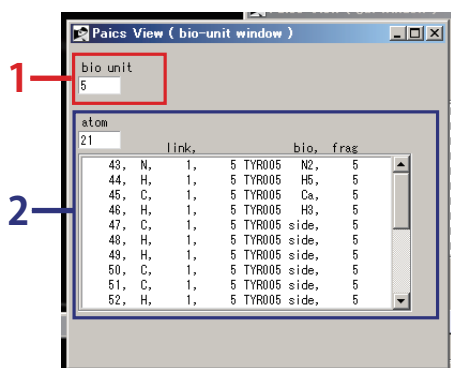
link-group に属する fragment の情報の表示と操作を行う。

- テキストボックス (fragment num.)
link-group に属する fragment の数を表示する。
- リストボックス
fragment の情報を表示する (項目は以下の通り)。
 - fragment の番号
 - fragment に含まれる電子数
 - fragment に属する原子数
 - 結合の切断に伴う追加の原子の数
 - 対応する bio-unit のタイプ (アミノ酸の 3 文字表記と残基番号)
- ボタン (clear)
link-group に属する fragment の定義をクリアする
- ラジオボタン (make fragment (auto))
これを選択し make ボタンを押すと、bio-unit の定義に従って link-group に属する fragment を定義する (既に定義されている場合は、定義をクリアし再定義する)
- ラジオボタン (make fragment (link-group))
これを選択し make ボタンを押すと、link-group 全体を 1 つの fragment と定義する (既に定義されている場合は、定義をクリアし再定義する)
- ボタン (make)
フラグメントの定義を行う。

2.10 bio-unit window

bio-unit に関する情報の表示と操作を行う。gui window の bio-unit の情報を表示する部分 (図 2 : 5) の、リストボックス内をダブルクリックすることでこのウインドウを開くことが出来る。

図 9: bio-unit window



2.10.1 bio-unit の番号 (図 9 : 1)

bio-unit の番号を表示する。

- テキストボックス (bio-unit)
bio-unit の番号を表示する。

2.10.2 bio-unit に属する原子の情報 (図 9 : 2)

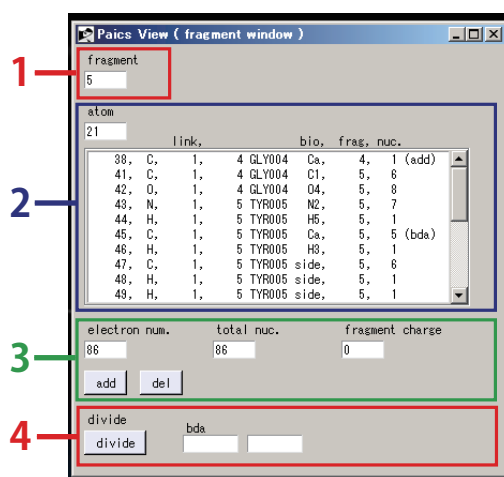
bio-unit に属する原子の情報を表示する。

- テキストボックス (atom num.)
bio-unit に属する原子の数を表示する。
- リストボックス
bio-unit に属する原子の情報を表示する。
 - 原子の番号
 - 元素記号
 - 原子が属する link-group の番号
 - 原子が属する bio-unit の番号、残基種 (三文字表記)、残基番号、残基中の原子の位置
 - 原子が所属する fragment の番号 (fragment が定義されていない場合、もしくは fragment に属して無い場合は表示されない)。

2.11 fragment window

fragment に関する情報の表示と操作を行う。gui window の fragment の情報を表示する部分 (図 2 : 6) の、リストボックス内をダブルクリックすることでこのウインドウを開くことができる。

図 10: fragment window



2.11.1 fragment の番号 (図 10 : 1)

fragment の番号を表示する。

- テキストボックス (fragment)
fragment の番号を表示する。

2.11.2 fragment に属する原子の情報 (図 10 : 2)

fragment に属する原子の情報を表示する。

- テキストボックス (atom num.)
fragment に属する原子の数を表示する。
- リストボックス
fragment に属する原子の情報を表示する。

- 原子の番号
- 元素記号
- 原子が属する link-group の番号
- 原子が属する bio-unit の番号、残基種（三文字表記）、残基番号、残基中の原子の位置（bio-unit が定義されていない場合、もしくは bio-unit に属して無い場合は表示されない）
- 原子が所属する fragment の番号
- 原子の核電荷。別の fragment に属している原子だが、結合の切断に伴い（+1 分だけ）核電荷が追加されたものには「(add)」の印が付く。また、結合の切断に伴い（+1 分だけ）核電荷が減少したものには「(bda)」の印が付く。

2.11.3 fragment 全体の電荷の情報（図 10：3）

fragment 全体の電荷に関する表示と操作を行う。

- テキストボックス（electron num.）
fragment に含まれる電子の数を表示する。
- テキストボックス（total nuc.）
fragment に含まれる原子の核電荷の合計を表示する（結合の切断に伴う核電荷の受け渡しを考慮した核電荷）。
- テキストボックス（fragment charge）
fragment 全体の電荷を表示する。
- ボタン（add）
fragment に含まれる電子の数を 1 つ追加する。
- ボタン（add）
fragment に含まれる電子の数を 1 つ取り除く。

2.11.4 fragment 分割（図 10：4）

fragment を 2 つに分割する。

- テキストボックス（bda.）
切断箇所の結合の一方の原子の番号を入力する。こちらには、結合が奪われるほうの原子（つまり、bda になるほうの原子）を入力する。

- テキストボックス（ 右側 ）
切断箇所の結合の一方の原子の番号を入力する。こちらには、結合を奪うほうの原子を入力する。
- ボタン（ divide ）
このボタンを押すと fragment 分割が行われる。

3 入力ファイルの作成

ここでは、*PAICS* で生体分子の FMO 計算を行う際の、入力ファイルの作成のしかたについて説明する。具体的には、以下の手順で行われる。

1. 原子の情報（原子番号と座標）を読み molecule を定義する
2. 原子番号と原子間距離から結合を定義する
3. 結合から link-group を定義する
4. link-group から bio-unit を定義する
5. 上の情報から fragment を定義する。
6. 基底関数を決める。
7. 入力ファイルを書き出す。

3.1 原子の情報を読む

まず最初に、水素原子を含めた構造を準備しなければならない。通常、ダウンロードした PDB ファイルには、水素原子の情報が含まれていないので、水素原子生成プログラムや、分子動力学計算などを行い、量子化学計算を実行するための構造を準備する。構造が準備できたら、以下の手順で、構造を読む。

1. gui window の file メニューから read を選択し、read molecule window（図 3）を開く
2. browse ボタンを押し、ファイル選択ウインドウを開く
3. 構造が記述されたファイルを選択する
4. ラジオボタンでファイルタイプを選択する。（AMBER の構造ファイルの場合、トポロジーファイルも必要となるので、2 番目のファイルとしてトポロジーファイルを指定する。）
5. read ボタンを押して構造を読む。

以上の手順で構造を読むと、gui window に原子の情報（図 3 の 2）と結合の情報（図 3 の 3）が表示され、opengl window に構造が描画される。

3.2 結合を定義する

結合は、構造を読んだ際に、原子間の距離から自動的に作られる (PDB ファイルの結合情報やトポロジーファイルの結合情報は使わない)。

[注意 1]

PaicsView では、結合の情報から link-group や bio-unit が定義され、その情報から fragment 分割が行われる。従って、結合が正しく定義されなければならない。古典計算などで最適化された構造であれば、正しい位置に結合が生成されるが、構造の準備のしかたによっては、意図しない結合の状況になることもある。

[注意 2]

必要な結合が生成されなかったり、不要な結合が生成された場合、必要な位置に結合を追加したり、不要な結合を取り除くことが出来る。

[注意 3]

生体分子を取り扱う際、水素原子の自動生成や欠損残基を補填する過程で、明らかにおかしな構造が作られる場合がある。分子動力学計算であれば、このような構造からスタートしてもよいが、量子化学計算の場合は無視できない問題となる。*PaicsView* では、水素原子が 2 つ以上の結合に関与したり、1 つも結合に関与しない原子が存在するような場合は、コマンドプロンプトに (図 1 の 1) にワーニングを出力する。また、結合の定義の段階で発見できない問題も、link-group の定義や bio-unit の定義の際に発見できる可能性があるので、構造の問題には常に注意しておく必要がある。

< 結合の手動生成と手動削除 >

結合を自動的に定義した後、結合を削除したり追加することが出来る。コマンドプロンプト (図 1 の 1) に、

```
adbond [ 原子の通し番号 ] [ 原子の通し番号 ]
```

と入力すると、2 つの原子間に結合が追加される。同様に、

```
dlbond [ 原子の通し番号 ] [ 原子の通し番号 ]
```

と入力すると、2 つの原子間の結合が削除される。結合の定義に変更が加えられると、link-group と bio-unit の定義が、自動的にリセットされる。

3.3 link-group を定義する

次に、link-group を定義する。gui window の link-group (図 3 の 4) の make ボタンを押すと自動的に定義される。

[注意 1]

link-group を定義した際、自身が想定した結果になっているかどうかを必ず確認すること。もし、そうになっていなければ、結合の定義の段階で、必要な結合が作られなかったり、不要な結合がつくられたことになり、構造に問題がある可能性が高い。(または、プログラムが採用している結合の生成の閾値に問題がある。)

3.4 bio-unit を定義する

次に、bio-unit を定義する。gui window の bio-unit (図 3 の 5) の make ボタンを押すと自動的に定義される。

[注意 1]

bio-unit を定義した際、自身が想定した結果になっているかどうかを必ず確認すること。そうになっていなければ、何らかの問題が発生している可能性が高い。

[注意 2]

bio-unit を定義する際、まず最初に、アルファ炭素の識別が行われる。しかし、構造や結合の定義に問題がある場合、正しく識別出来なくなる。アルファ炭素の識別の結果は、コマンドプロンプト (図 1 の 1) にも書き出されるので、どの残基のアルファ炭素の識別に失敗しているかを調べ、その周辺の構造をチェックする。

[注意 3]

次に、アルファ炭素の情報から、残基の種類を識別する。具体的には、側鎖の方向へ結合を辿っていき、側鎖を形成している原子を抜き出し、残基の種類を識別する。*Paics View* には、典型的な 20 種類のアミノ酸残基のみ定義されているので、修飾された残基などは判別出来ず、残基の種類が「***」となる。(残基の種類が「***」となっても、フラグメントの定義や *PAICS* の入力ファイルの作成には影響しない。) 普通のアミノ酸残基であるにもかかわらず、残基の種類が「***」となる場合、その周辺の構造に問題がある可能性が高いので、チェックする。

[注意 4]

アミノ酸残基のシーケンスが途中でとぎれる場合、とぎれた周辺の構造に問題がある可能性が高いので、チェックする。

[注意 5]

特定の部分の構造をチェックする場合、view control window (図 5) を利用するのが便利。

3.5 fragment を定義する

最後、fragment を定義する。gui window の fragment (図 3 の 6) の make ボタンを押すと自動的に定義される。この際、以下の基準で、fragment の定義が行われる。

- bio-unit は 1 つの fragment となる。
- SS 結合を作っている 2 つの bio-unit は 1 つの fragment にまとめられる。
- bio-unit を含まない link-group (例えばリガンド分子) は 1 つの fragment になる。
- fragment の電荷がゼロとなるように電子が自動的に割り振られる
- プロトン化した LYS、ARG の fragment は電子が 1 つ減らされ、全体の電荷が +1 になる。
- 脱プロトン化した ASP、GLU の fragment は電子が 1 つ追加され、全体の電荷が -1 になる。
- $-\text{NH}_3^+$ の N 末残基に対応する fragment は電子が 1 つ減らされ、全体の電荷が +1 になる。
- $-\text{COO}^-$ の C 末残基に対応する fragment は電子が 1 つ追加され、全体の電荷が -1 になる。

[注意 1]

作成された fragment の定義を必ず確認すること。特に、電子数が奇数になっていないかを必ず確認する。(電子数が奇数ということは、電子状態が開殻であり、スピン状態が一重項でないことを意味する。現在、PAICS は、閉殻の電子状態のみ計算可能であり、開殻の場合は計算出来ない。) 閉殻の電子状態を想定しているにもかかわらず、電子数が奇数になっている場合は、電子を自動的に割り振ったときに、何らかの問題が発生した可能性がある。その fragment の構造を確認し、電子数が本当にそれで良いかを確認すること。また、fragment の電子数は、手動で追加したり減らしたりすることが出来る。

< フラグメントの手動分割 >

自動的に定義された fragment を、さらに小さく分割することが出来る。例えば、大きなリガンド分子が含まれる場合、これを複数のフラグメントに分割することで、計算時間を減らすことができる。手順は以下の通り。

1. gui window の fragment (図 3 の 6) のリストボックスで、分割したいフラグメントをダブルクリックし、fragment window (図 10) を開く。
2. 図 10 : 4 のテキストボックスに分割部位の 2 つの原子を入力し、divide ボタンを押す。この際、bda のリストボックスに結合が奪われる方の原子を入力する。
3. 分割の操作が、gui window に反映されていることを確認する。
4. また、opengl window の描画を、fragment の定義ごとにカラーリングすると確認しやすい。

< フラグメントの電荷 >

自動的に割り振られた fragment の電子数を、後で変更することが出来る。例えば、fragment の自動定義では、リガンド分子は必ずニュートラルに設定されるが、電荷をもっている場合は、電子を 1 つ追加したり減らしたりする必要がある。手順は以下の通り。

1. gui window の fragment (図 3 の 6) のリストボックスで、電子数を変えたいフラグメントをダブルクリックし、fragment window (図 10) を開く。
2. 図 10 : 3 の add および del ボタンを押して、電子数を変える。
3. 電子数を変更する操作が、gui window に反映されていることを確認する。

3.6 基底関数を決める

原子上に設置する基底関数を決める (最初は cc-pVDZ になっている)。手順は以下の通り。

1. gui window の tool メニューから basis set を選択し、set basis window (図 5) を開く
2. リストボックス (basis set) の中から、基底関数を選択する。
3. ラジオボタンで基底関数を設置する原子の範囲を指定して、set ボタンを押す。通常、すべての原子上に同じ基底関数を設置するので、all が選択されていればよい。

4. 操作が、リストボックス (atom information) に反映されたことを確認する (同時に、gui window にも反映される)。

3.7 入力ファイルを書き出す

PAICS の入力ファイルを書き出す。手順は以下の通り。

1. gui window の file メニューから write を選択し、write molecule window (図 4) を開く。
2. browse ボタンを押し、ファイル選択ウインドウを開き、ファイル名を入力する。
3. write ボタンを押してファイルを書き出す。

[注意 1]

ここで作られる入力ファイルには、原子の座標および基底関数とフラグメント分割の定義以外には、以下のキーワードのみが記述されている。

```
mpi_np 1
mem_mbyte 1792
```

実行する計算を詳細に指定するには、これ以外に、いくつかのキーワードを追加する必要がある。詳しくは、*PAICS* のマニュアルを参照すること。

[注意 2]

書き出される原子の座標の単位は bohr である。*PAICS* では、入力ファイルの座標は、coord_unit キーワードで指定された単位で記述することになっており、デフォルト値は 0 (bohr) である。従って、bohr で書き出す。