**DFT 관련 툴 및 분석**

**NBO & NPA분석**

NBO(Natural Bond Orbital)\*\*와 \*\*NPA(Natural Population Analysis)\*\*는 모두 \*\*자연 결합 이론(Natural Bonding Theory)\*\*에 기반한 개념으로, 분자 내 전자 분포를 더 직관적이고 화학적으로 의미 있게 분석하기 위한 양자화학 도구입니다. 서로 깊이 연관되어 있으며, NBO가 "결합" 관점이라면 NPA는 "원자별 전자 분포"에 초점이 있습니다.

텍스트, 스크린샷, 폰트이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

텍스트, 스크린샷, 번호, 폰트이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

**NPA를 독립적으로 수행하는 오픈소스 JANPA소프트웨어**

JANPA (Java-based Natural Population Analysis)\*\*는 \*\*Natural Population Analysis (NPA)\*\*를 독립적으로 수행할 수 있도록 만든 오픈소스, 크로스플랫폼 소프트웨어입니다. 텍스트, 스크린샷, 폰트이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

텍스트, 스크린샷, 폰트, 대수학이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

텍스트, 스크린샷, 폰트, 번호이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

**MEP 맵** **(Molecular Electrostatic Potential Map)**

**텍스트, 스크린샷, 폰트, 번호이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.**

그래픽, 창의성이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.분자 정전기 퍼텐셜(Molecular Electrostatic Potential, MEP)은 ORCA 패키지의 orca\_plot 유틸리티를 통해 계산된 전자밀도 및 퍼텐셜 데이터를 기반으로 생성할 수 있으며, 이렇게 생성된 .cube 파일은 UCSF Chimera(버전 1.10.2)를 활용하여 직관적으로 시각화할 수 있다. ORCA에서 수행한 계산 결과를 orca\_plot으로 후처리함으로써 전기적 퍼텐셜의 공간 분포를 3차원으로 표현할 수 있으며, Chimera에서는 이를 분자의 표면에 컬러맵 형태로 입혀 시각적으로 이해하기 쉽게 보여줄 수 있어 분자의 반응성이나 상호작용 부위를 해석하는 데 유용하게 활용된다.

**원자 전하 (Atomic Charges)**

**텍스트, 스크린샷, 폰트, 소프트웨어이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.**

스크린샷, 도표이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.원자의 부분 전하는 JANPA 소프트웨어 패키지(JAVA 기반의 Natural Population Analysis 도구)[55]를 이용하여 자연 집단 분석(Natural Population Analysis, NPA) 접근법으로 계산할 수 있다. NPA는 분자의 전자밀도 분포를 기반으로 자연 원자 궤도함수(Natural Atomic Orbitals, NAOs)를 생성하고, 이를 통해 각 원자에 귀속된 전자 수를 정량화함으로써 부분 전하를 산출하는 방법이다. JANPA는 Gaussian, ORCA, NWChem 등 다양한 양자화학 계산 프로그램의 출력 파일로부터 데이터를 변환하여 MOLDEN 포맷을 생성한 뒤, 이를 바탕으로 NPA 계산을 수행할 수 있는 기능을 제공하며, 직관적이고 신뢰도 높은 원자 전하 해석을 가능하게 한다.

**텍스트, 스크린샷, 폰트, 번호이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.**

**텍스트, 폰트, 스크린샷, 라인이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.**

텍스트, 만화 영화이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.**FUKUI Maps**

Fukui isosurface map은 분자의 반응성(reactivity) 를 시각적으로 나타내기 위한 3D 지도입니다. 이 지도는 Fukui function이라 불리는 양자화학적 반응 지표를 기반으로 만들어지며, 주로 어디서 전자가 추가되거나 제거될 가능성이 높은지, 즉 친핵성(nucleophilic)·전기성(electrophilic) 공격이 일어날 위치를 보여줍니다.

텍스트, 스크린샷, 폰트, 번호이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

텍스트, 스크린샷, 폰트, 라인이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.