**Orca. gbw -> ESP (Electro Static Potential) 시각화 - UCSF Chimera program**

2025.04.02 안용상

**1. ESP란?**

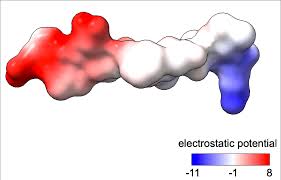
ESP(Electrostatic Potential, 전기 퍼텐셜)란 분자 내 전자 밀도와 핵 전하의 분포에 의해 형성되는 공간상의 정전기 퍼텐셜을 의미한다. 이는 분자가 주변 전하(예: 양성자)와 어떻게 상호작용할지를 예측할 수 있는 중요한 물리량이다.

따라서 ESP 분포를 직관적으로 이해하기 위해서는 시각화가 필수적이다.

**2. UCSF Chimera 프로그램이란?**

UCSF Chimera는 생화학 및 계산화학 분야에서 널리 사용되는 분자 구조 시각화 및 분석 프로그램이다. 다양한 구조 파일 형식을 지원하며, 전자 밀도 및 전기 퍼텐셜 등과 같은 3차원 데이터를 시각화할 수 있는 기능도 내장되어 있다.

따라서 본 연구에서는 Chimera의 ESP 시각화 도구를 활용하여 분자의 전기적 특성을 분석하고자 한다.

**2. UCSF Chimera program이란?**

**~~이다. 여기서 ESP 시각화를 할 수 있는 도구도 존재해서 이를 이용할 것이다**

**3. USCF Chimera 설치방법**

1. Chimera다운로드

<https://preview.cgl.ucsf.edu/chimera/download.html>

리눅스 버전(운영체제 리눅스라면) 다운

2. 설치

Sudo ./chimera-1.19-linux\_x86\_64.bin

3. 실행파일 경로 환경변수에 등록 및 실행 확인

.local/UCSF-Chimera64-1.19/bin/chimera 실행파일

Vi ~/.bashrc에서 환경변수에 export PATH=$PATH:.local/UCSF-Chimera64-1.19/bin/ 추가

Source ~/.bashrc

Chimera 실행 확인

**4. 사전 필요 파일**

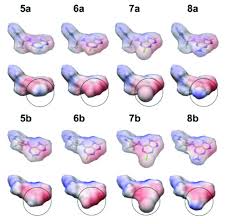
Orca의 .gbw파일

.gbw 파일이란?

**5. 전처리**

**Step 1. .eldens 파일제작**

Eldens 파일이란?

**방법1 : Orca\_plot**

**Orca\_plot {molecule}.gbw -i**

1. **Press 1**
2. **Press 2 & y :** (scf) electron density plot 선택
3. **Press 4 & 120 :** grid interval 120으로 설정
4. **Press 5 :** output file format 정하기
5. **Press 7 :** 3D Gaussian cube
6. **Press 11 :** Generate the plot
7. **Press 12** **:** exit program

**Step 2. .mep.cube파일 제작**

**방법 1 : orca\_vpot filename.gbw filename.scfp filename.vpot.xyz filename.vpot.out**

**방법 2 : python script 이용**

Reference 1) Henriquecastro의 <https://www.henriquecastro.info/2022/03/17/plotting-molecular-electrostatic-potential-surfaces-meps-with-orca/>

Reference 2) python 파일 깃허브 <https://gist.github.com/mretegan/5501553>

**python make\_mep.py 120**

**6. Chimera 프로그램으로 시각화**

1. xyz파일열기
2. Tools > Volume Data > Volume Viewer > File > Openmap > eldens.cube > step, level 등 조절
3. Tools > Surface Color > by > Electrostatic Potential > Browse > mep.cube 선택
4. Options > color 누르기 > color 조절
5. Opacity 조절 (0.667이 적절)
6. Surface offset (1.4A가 적절)

참고 자료 : <https://www.cgl.ucsf.edu/chimera/docs/ContributedSoftware/surfcolor/surfcolor.html>

**컬러스킴 추천 １：**

스크린샷, 텍스트, 만화 영화, 도표이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

# 1 : level 0.03

# 2 : surface offset 0.55

# 3 : COLORS

{

-0.03 : #DF6F6B

-0.015 : #EBB5B4

0 : #ffffff (투명도 0.8)

0.015 : #C9F9B8

0.03 : #9AF877

파워포인트 설정

# 1 : 아보가드로 시각화 분자 앞뒤로 투명도를 다르게한 동일 MESP이미지 배치

뒤에는 투명도 X 이미지, 앞에는 투명도 5단 이미지