

思考者のコミュニティの入り口：量子化学、分子シミュレーション、そして二次元次元

このブログのすべての記事はオリジナルであり、著者Soberevaが著作権を所有しています。いかなる個人または組織にも複製を許可しておらず、いかなる形態の複製も固く禁じられています（ただし、記事へのリンクの転送は大歓迎です）。このブログの画像またはテキストを不正に使用した場合は、法的措置を講じます。北京Keinsci自然科学研究センター (<http://www.keinsci.com>) は、高水準の計算化学フォーラム「計算化学コミュニティ」 (<http://bbs.keinsci.com>) を運営しています。「Thinker Commune QQグループ」は、数万人のメンバーが理論化学と計算化学について議論する場です。紹介と参加方法については、<http://sobereva.com/qqrule.html>をご覧ください。Soberevaのハードウェアデータベース: <http://sobereva.com/datasheet.rar>

北京科印自然科学研究センターでは、量子化学、波動関数解析、分子動力学、第一原理計算など、非常に価値の高いトレーニングコースを定期的に提供しています。これらのコースは、予備知識のない初心者の方や、研究スキルを包括的かつ体系的に向上させたいと考えている方に最適です。詳細は [こちらのリンク](#) をご覧ください。ぜひフォローしてください！（過去のトレーニング教材を購入して自習する方法についてもリンク先に記載されています。）

表紙	すべてのブログ投稿の目次	このブログについて	計算化学ウェブ記事のハイライト
18炭素環および関連システムの研究	計算化学に関連するMultiwfnビデオ	計算化学に推奨されるPC構成	

VMDでGaussViewを使用して要素の色付けを行う方法

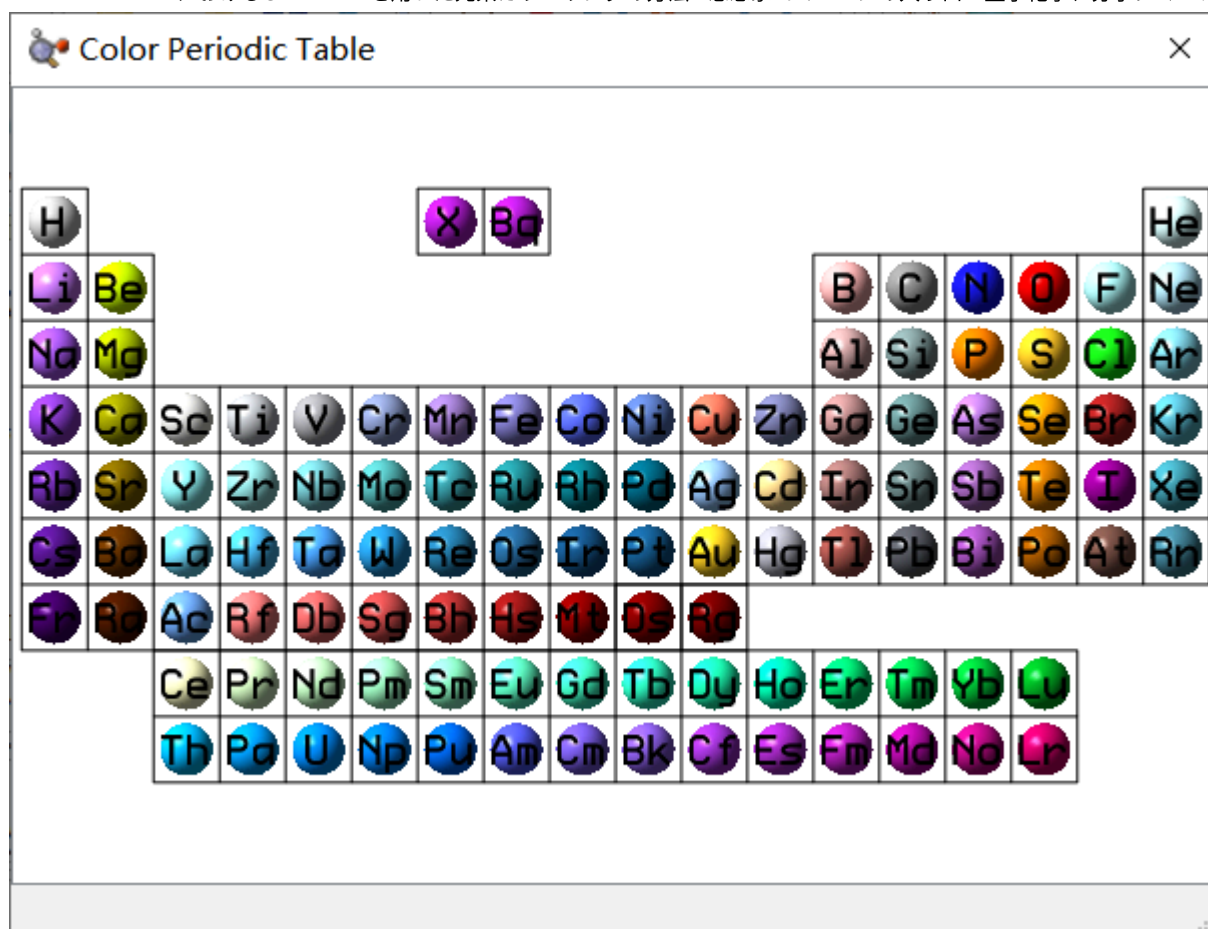
著者: [sobereva](#) | 日付: 2022年9月16日 | カテゴリー: [VMD](#) | 閲覧数: 21,637

VMDでGaussViewを使用して要素の色付けを行う方法

VMDでGaussView要素カラーリングスキームを使用する

ソベレバ @北京 Keying 2022-Sep-16

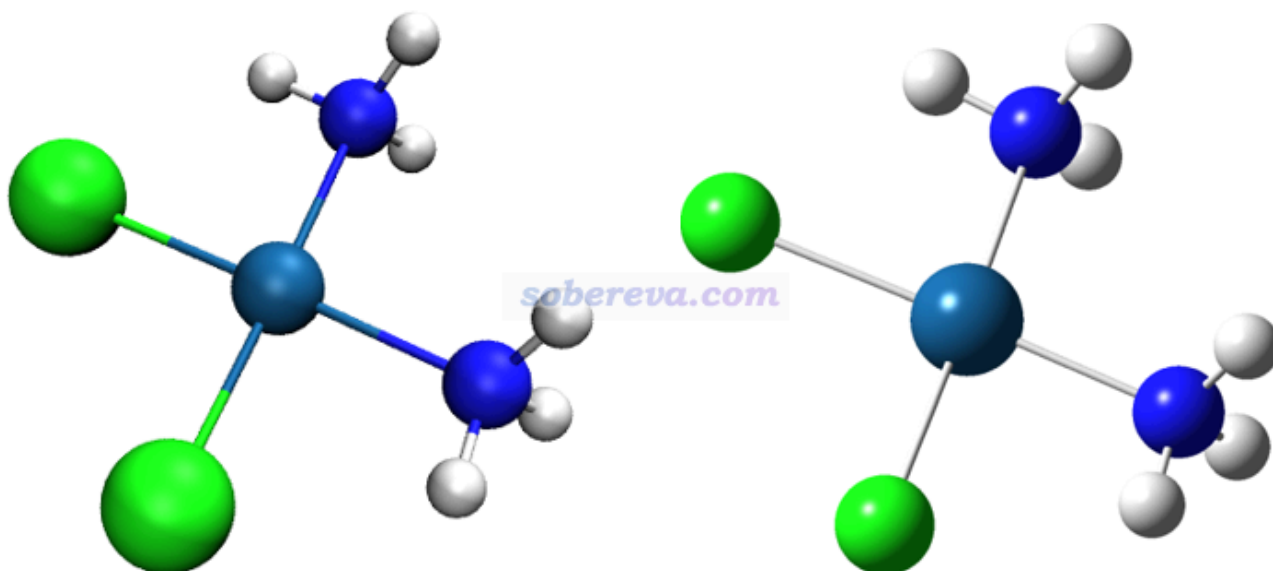
GaussView の要素カラースキームは概ね良好で、各要素に固有の色が定義されています。以下の図のように、「ファイル」 - 「環境設定」 - 「色」 - 「要素の色」で、すべての要素の色を確認できます。



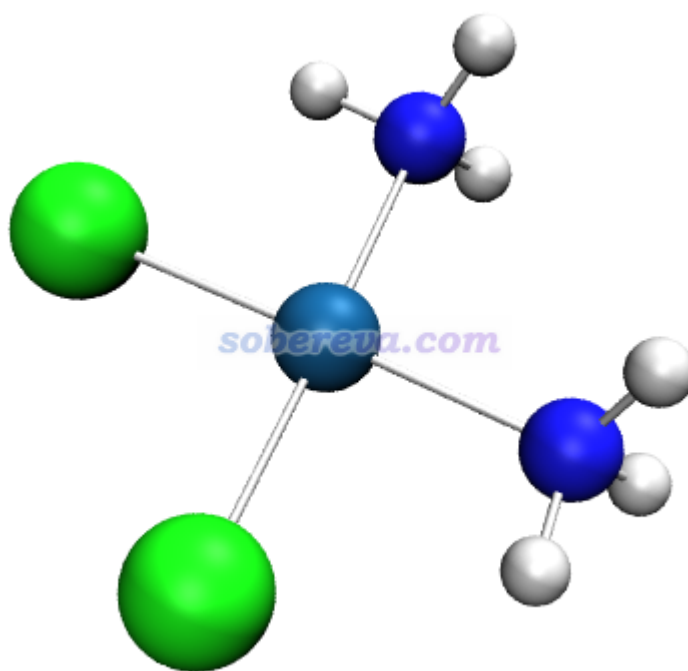
VMDは、化学システムを視覚化するための無料かつ柔軟で強力なツールであり、非常に人気があります。VMDでは元素の色分けも可能です。詳細は「VMDで異なる元素の原子を異なる色で表示する方法」(<http://sobereva.com/624>)をご覧ください。しかし、少なくとも執筆時点での最新の公式バージョン1.9.3では、VMDに組み込まれている元素の色分け定義は限られており、ほとんどの元素が均一な茶色で表示されています。そのため、多くの場合、異なる元素の区別が難しく、色も美しくありません。この記事では、GaussViewの元素の色分け定義をVMD内で使用する方法を紹介します。

http://sobereva.com/attach/652/gview_color.tcl から`gview_color.tcl` ファイルをダウンロードし、VMD ディレクトリ (VMD 起動後にテキストウィンドウに`pwd` コマンドを入力した後に表示されるディレクトリ) に配置します。次に、VMD の`vmd.rc` ファイルの末尾に`proc gview {} {source gview_color.tcl}` という行を追加します。`vmd.rc` ファイルについて詳しくは、「VMD 初期化ファイル (vmd.rc) の推奨設定」(<http://sobereva.com/545>) を参照してください。

VMDを起動後、テキストウィンドウに`gview` と入力すると、デフォルトの元素カラーリングスキームがGaussViewと同じものに置き換えられます。次に、元素情報 (pdb、xyzなど) を含む構造ファイルを読み込み、「グラフィックス」→「表現」で「カラーリング方法」を「元素」に設定して、元素ベースのカラーリング効果を確認します。画像の特徴をGaussViewで表示されるものとできるだけ近づけるには、「描画方法」を「CPK」に、「結合半径」を「0.2」に、「材質」を「AOShiny」に設定します。シスプラチン系の表示効果を以下に示します。左側がVMD、右側がGaussViewです。



上の画像は結合の色分けの違いも示しています。VMDでは結合の両側の色は2つの原子の色に対応していますが、GaussViewではすべて白です。この点でVMDとGaussViewを統一するには、現在の表現の結合半径を0に設定して結合を非表示にします。次に、CPKを使用して新しい表現を作成し、球スケールを0、結合半径を0.15に設定し、色分け方法としてColorIDを選択し、白を指定します。結果は以下に示すように、GaussViewの表示と非常によく似ています。



原子半径、光源方向、材料特性をさらに調整することで、GaussViewの効果にさらに近づきます。しかし、GaussViewにおける多重結合の表示効果は、VMDでは到底再現できません。

次へ: CP2K を使用して Multiwfn 用のモルデン形式の波動関数ファイルを生成する方法について詳しく説明します。

前の記事: [タオバオで購入したデュアルソケットEPYC 7R32 96コアサーバーの使用経験と感想](#)

北京ICP登録番号15027470