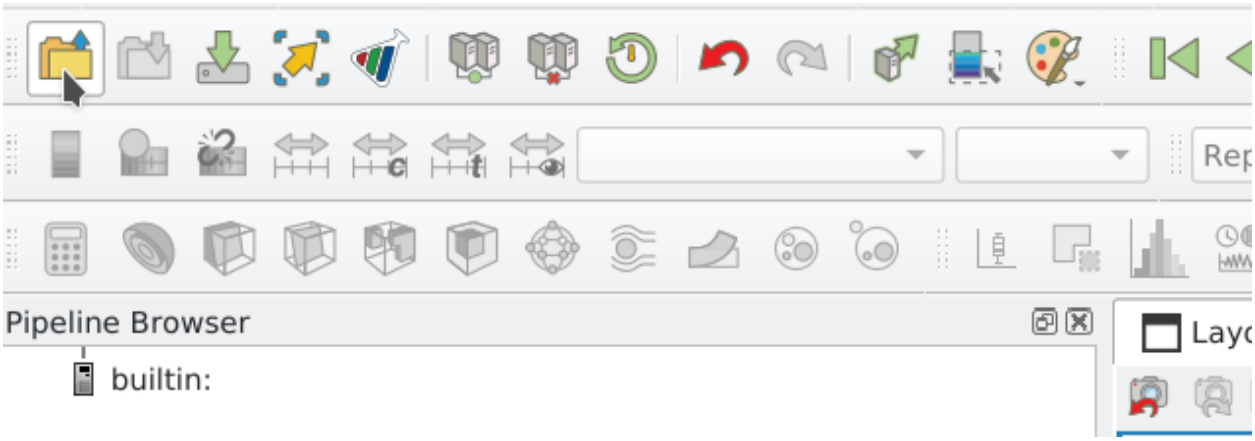
PARAVIEW Isosurface (1)

https://s3-us-west-2.amazonaws.com/secure.notion-static.com/cd73088b-bc91-4078-b62f-e4fa00bbe785/BF3_esp.cub

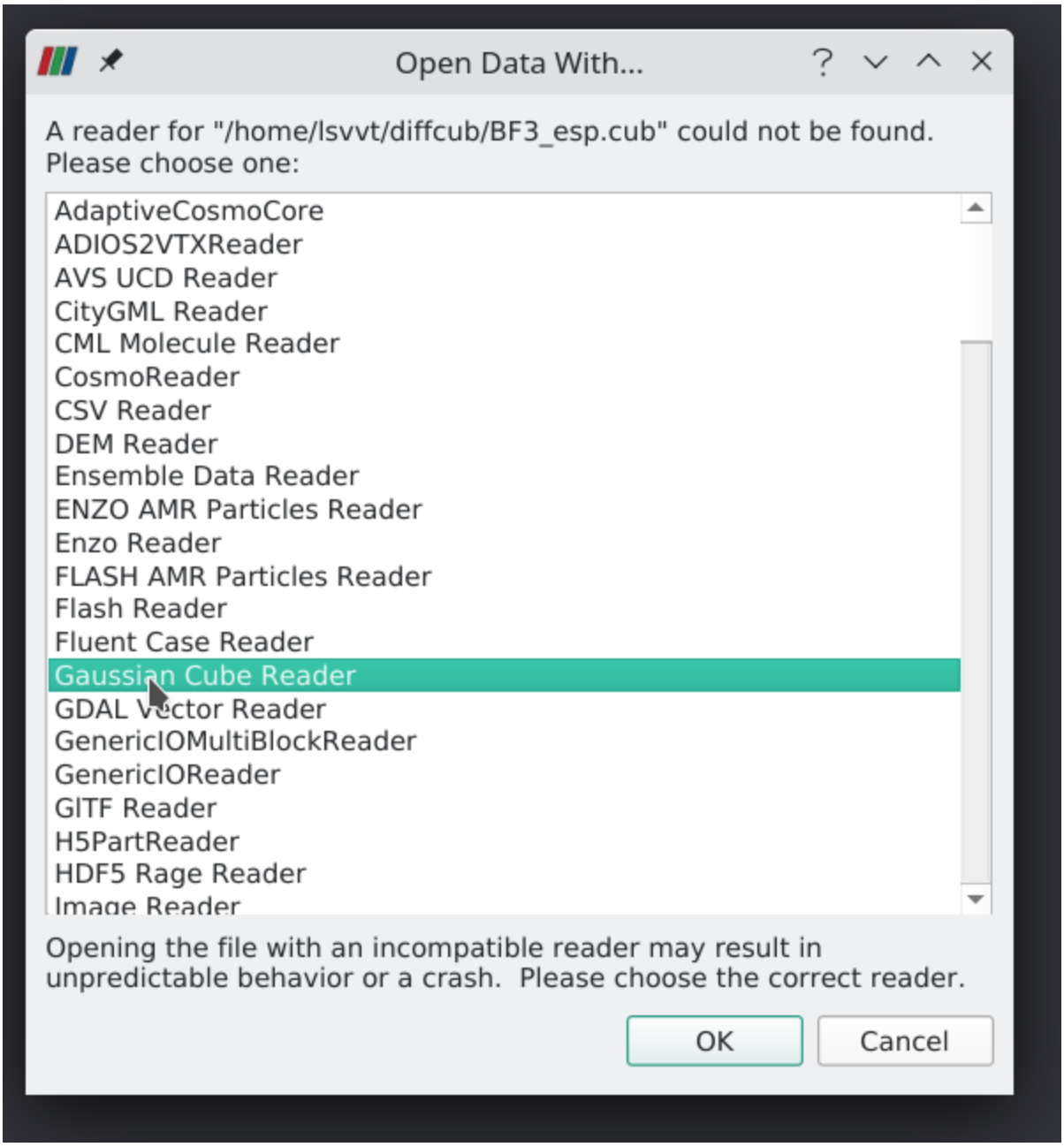
https://s3-us-west-2.amazonaws.com/secure.notion-static.com/a13d06d4-6ffe-42d3-9fdc-4871aa0c746b/BF3_den_tot.cub

1) Открыть файл

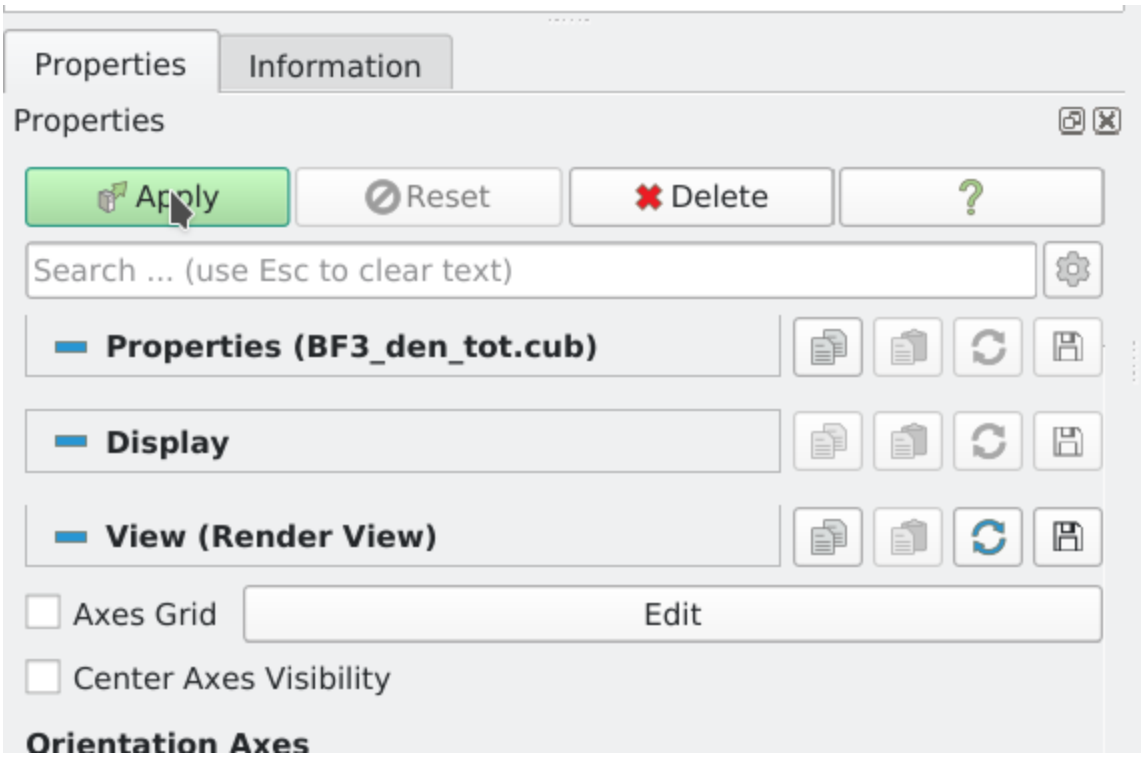


2) Выбрать All Files

3) Открыть с помощью Gaussian Cube Read

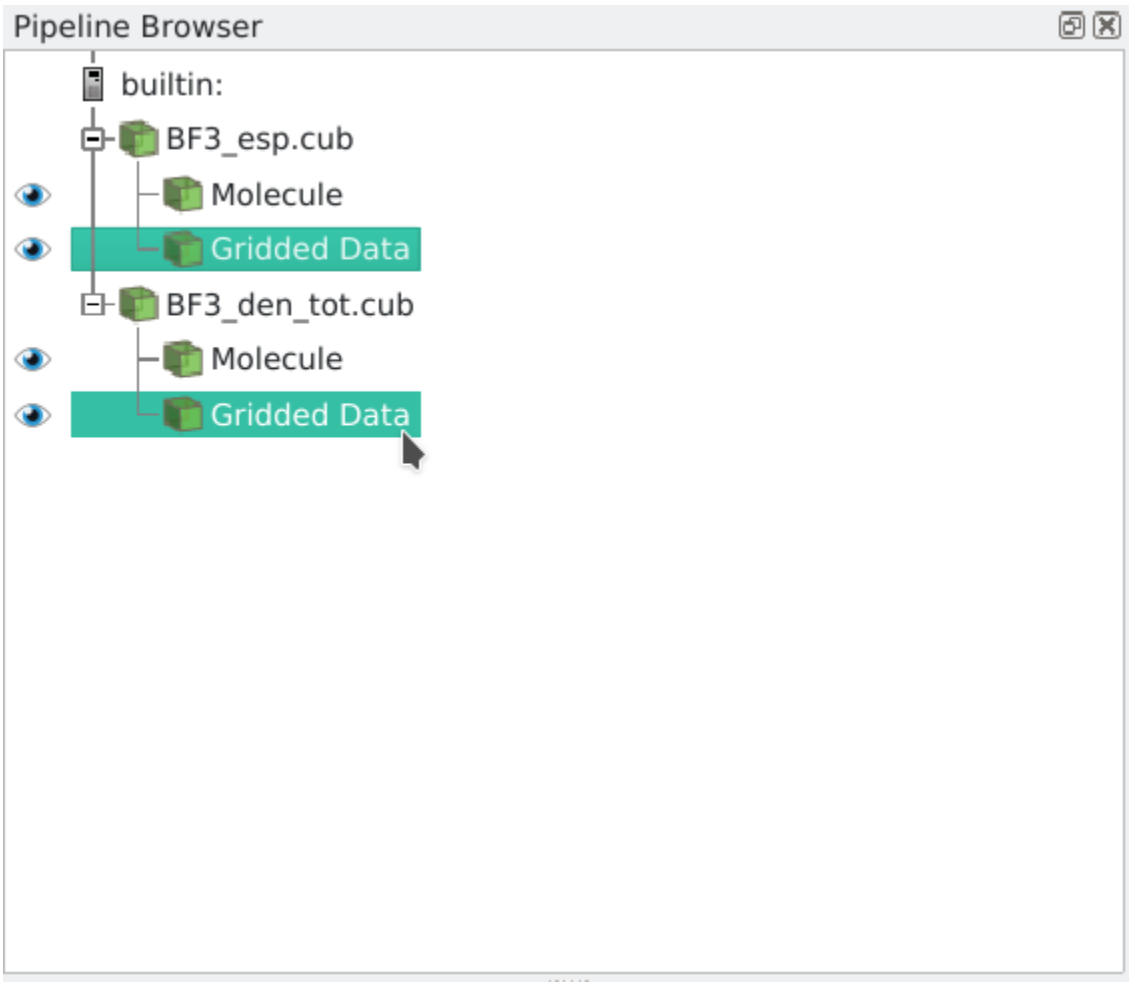


4) Нажать Apply

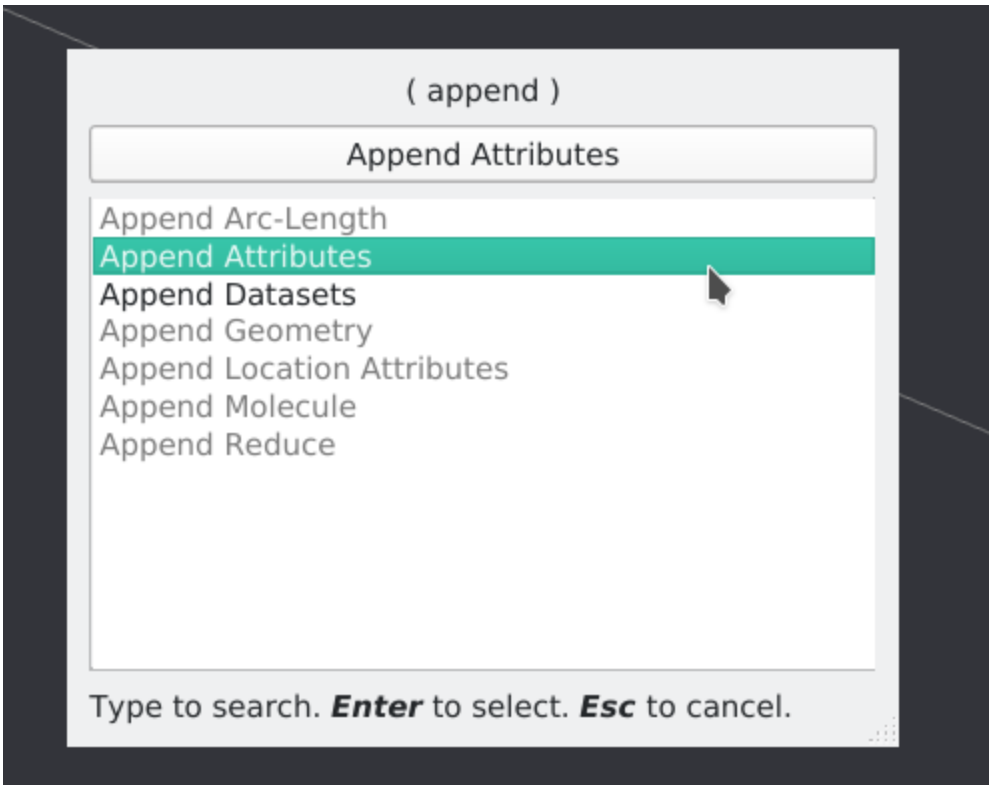


5) Повторить 1-4 для второго файла

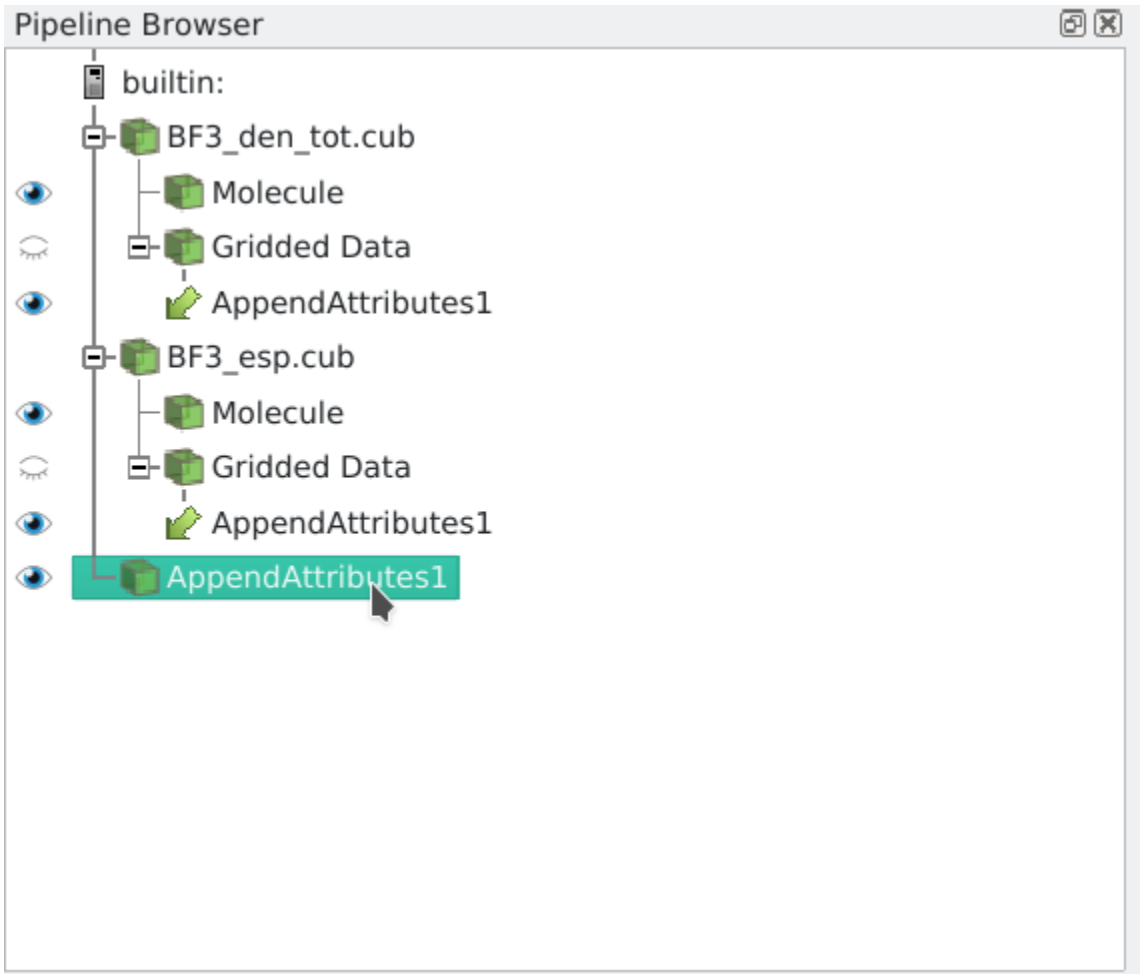
6) С зажатым Ctrl выделить 2 грида



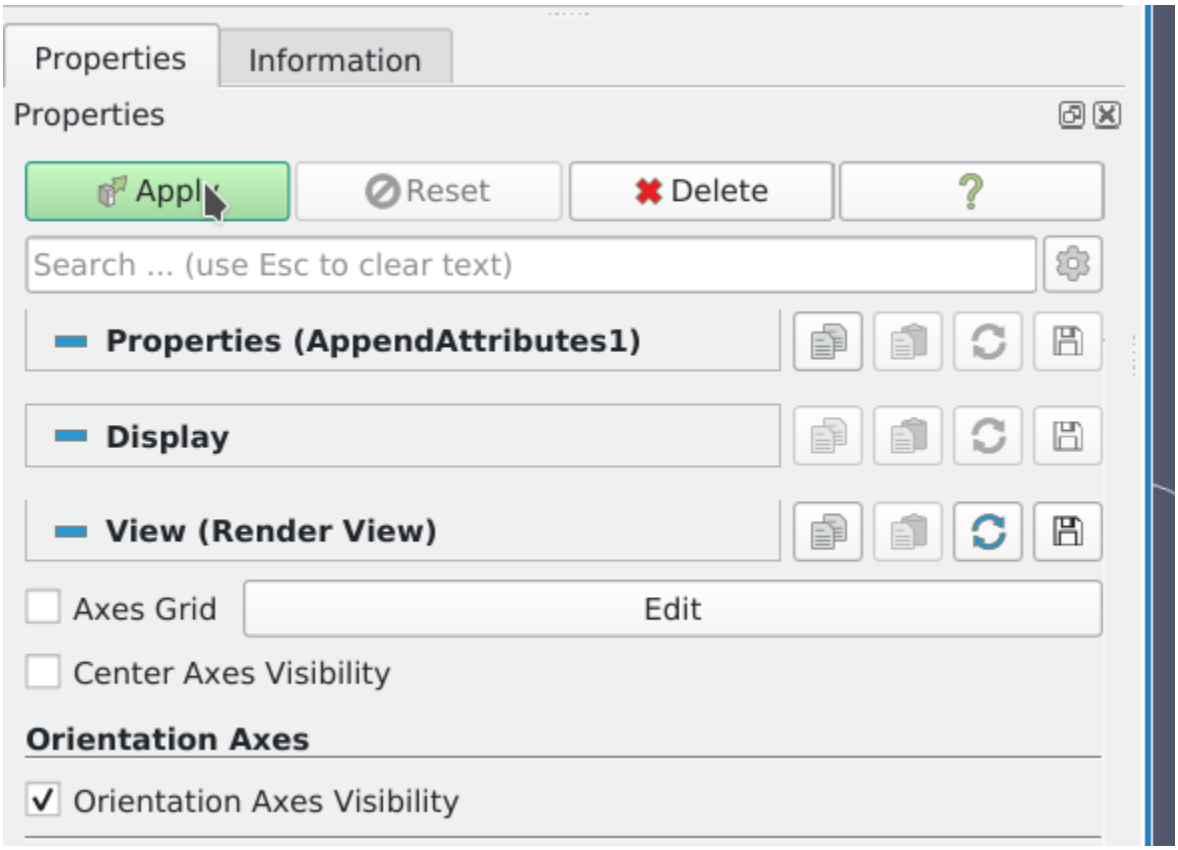
7) Ctrl+Space и ввести Append Attrubutes



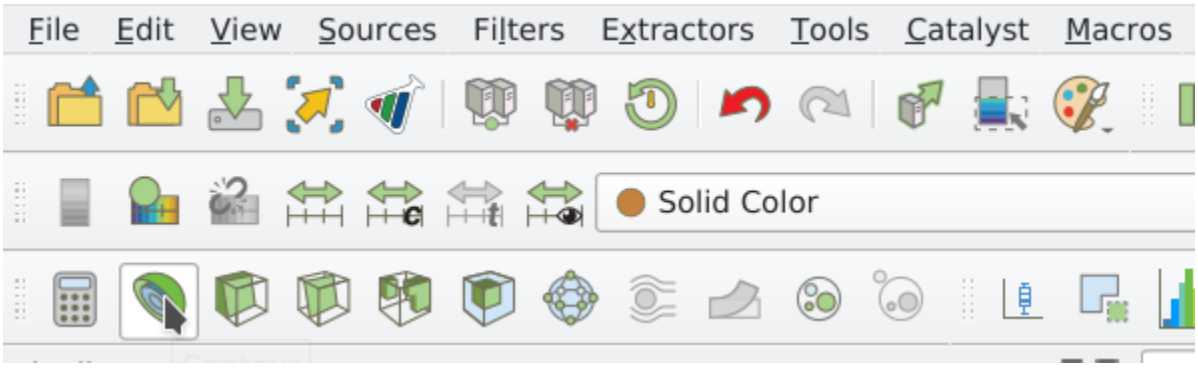
7.5) Выбрать AppendAttributes1



8) Нажать Apply

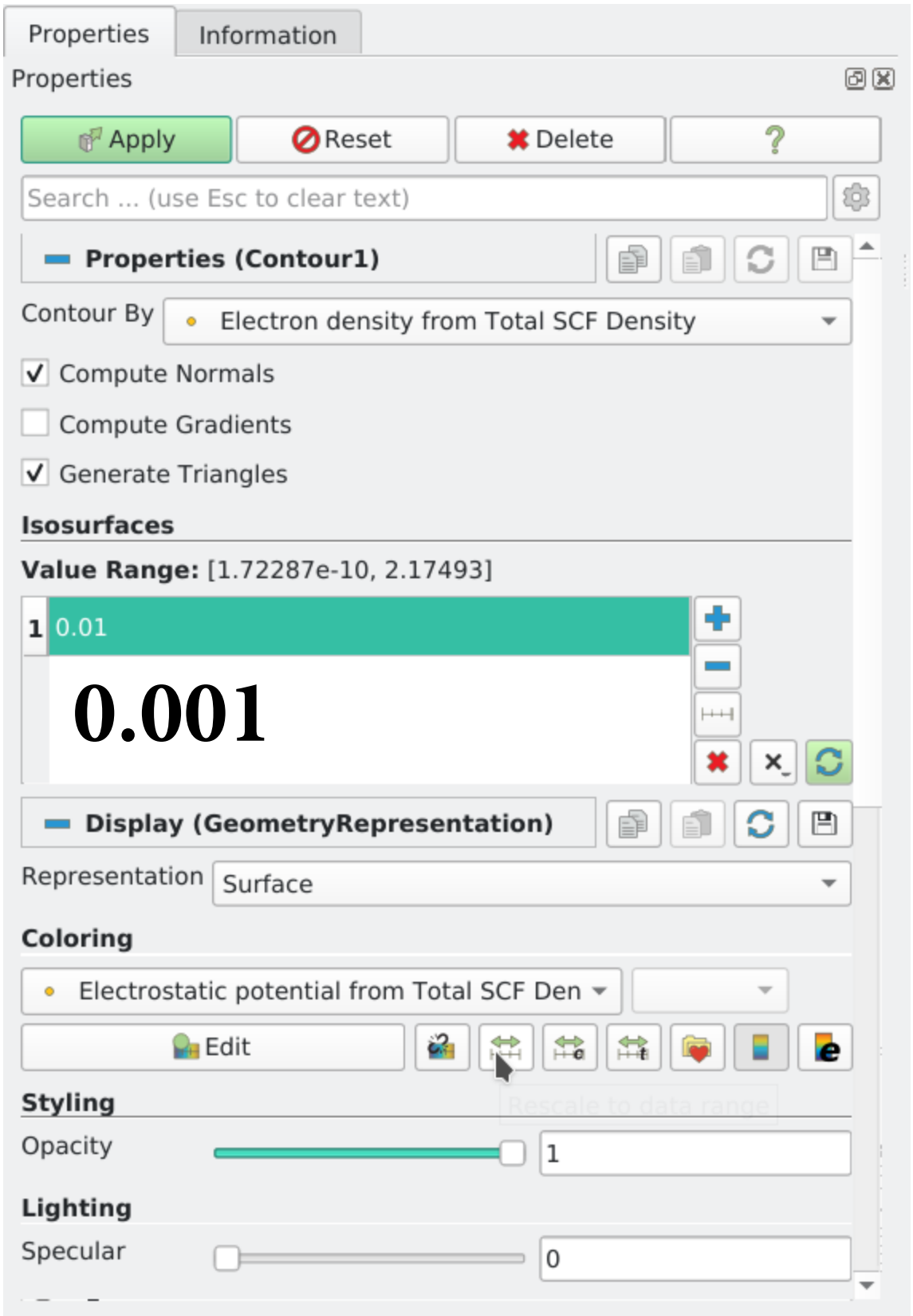


9) Выбрать контуры

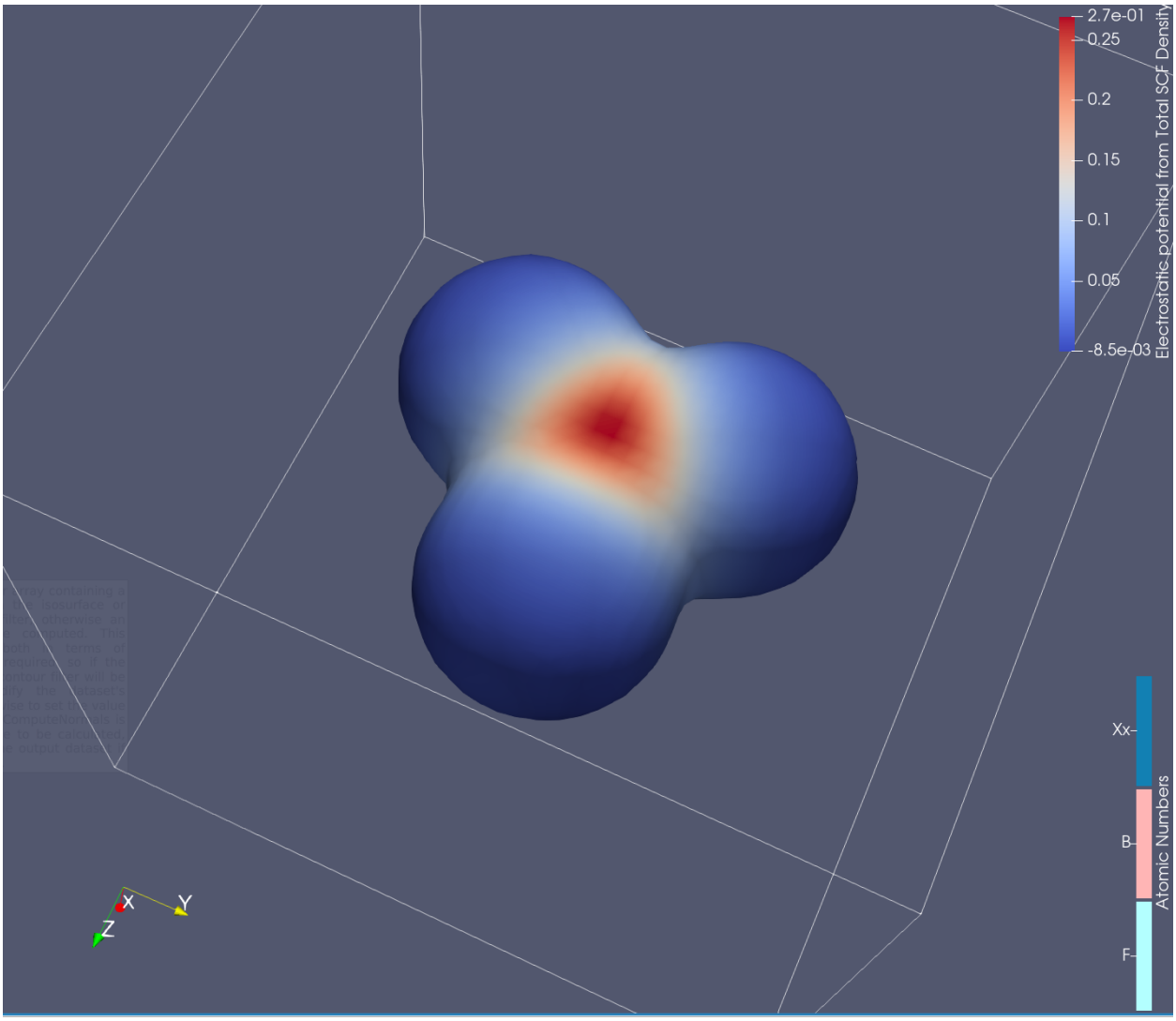


10) Нажать Apply

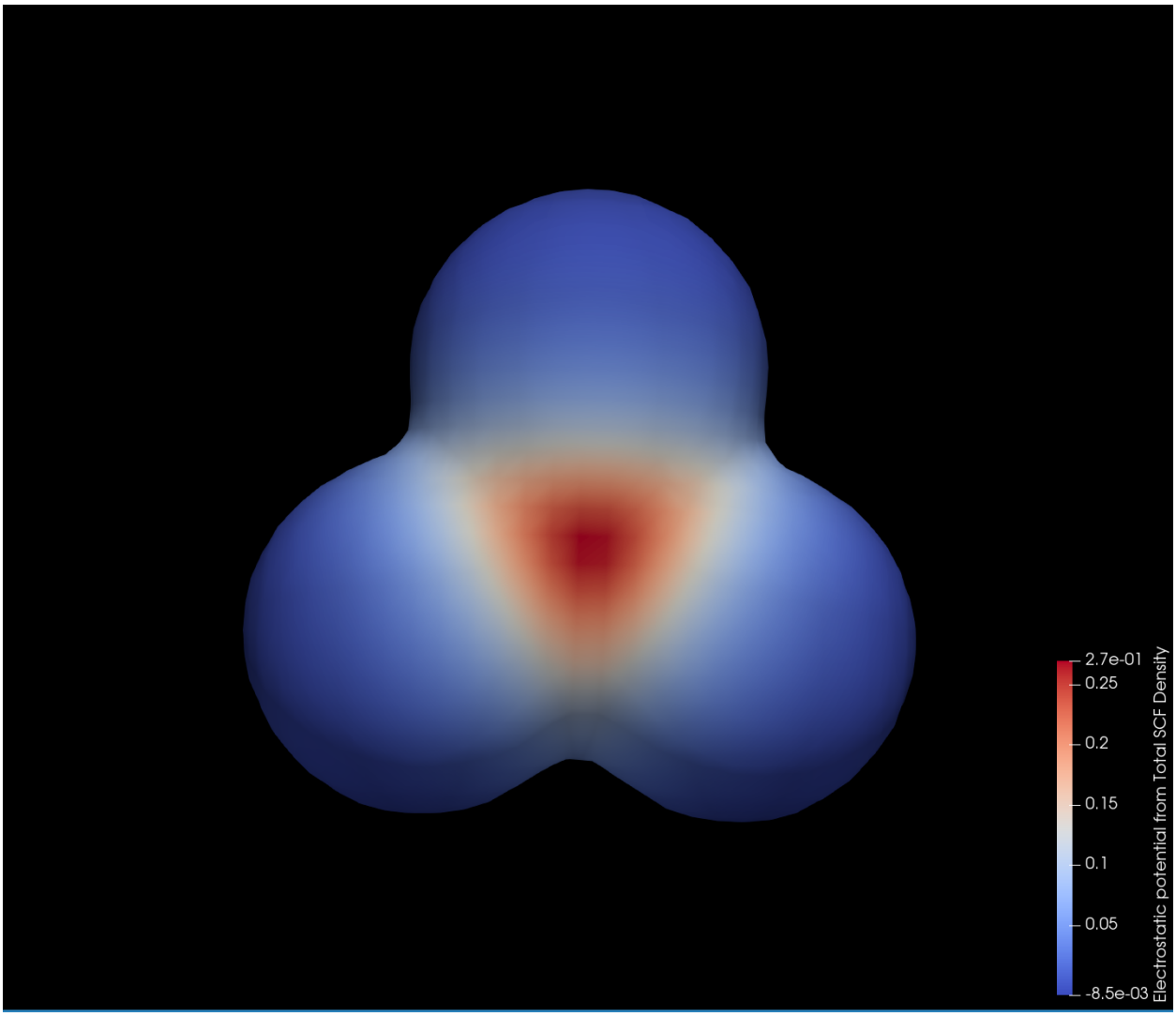
11) Выбрать данные для Contour и Coloring, нажать Apply и потом Rescale to data range(на картинке)


Properties
Information
Properties
Apply
Reset
Delete
Search ... (use Esc to clear text)
Properties (Contour1)
Contour By
Electron density from Total SCF Density
Compute Normals
Compute Gradients
Generate Triangles
Isosurfaces
Value Range: [1.72287e-10, 2.17493]
1
0.01
0.001
Display (GeometryRepresentation)
Representation
Surface
Coloring
Electrostatic potential from Total SCF Den
Edit
Rescale to data range
Styling
Opacity
1
Lighting
Specular
0

12) Итог:



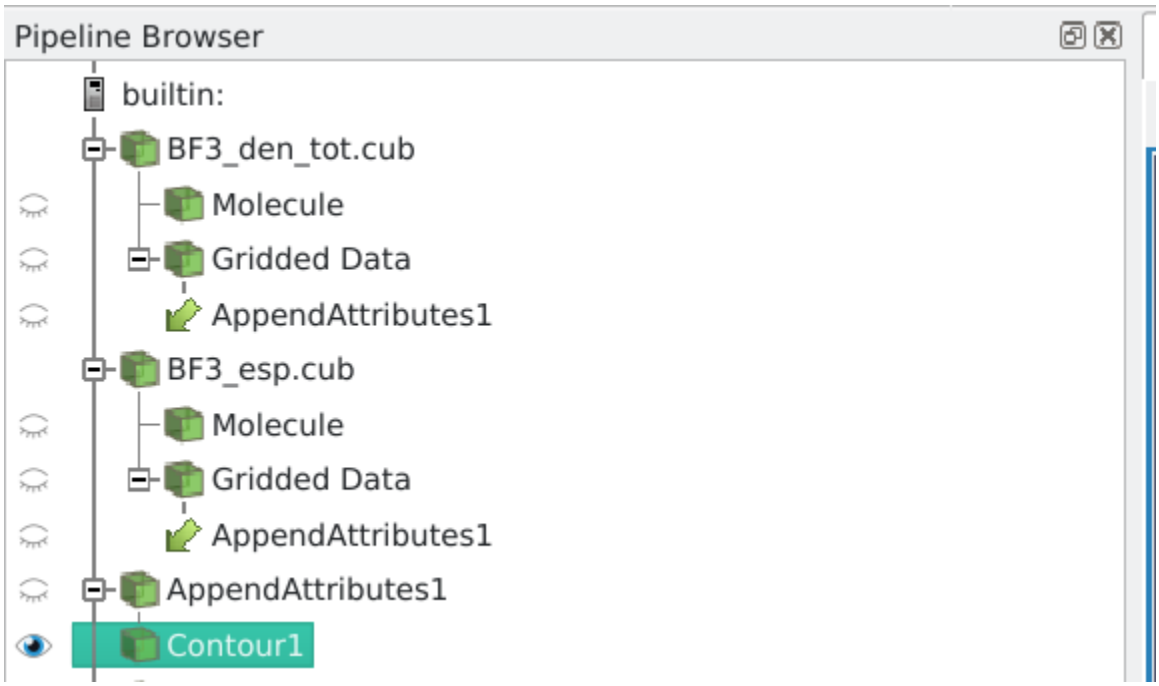
Доп картинки



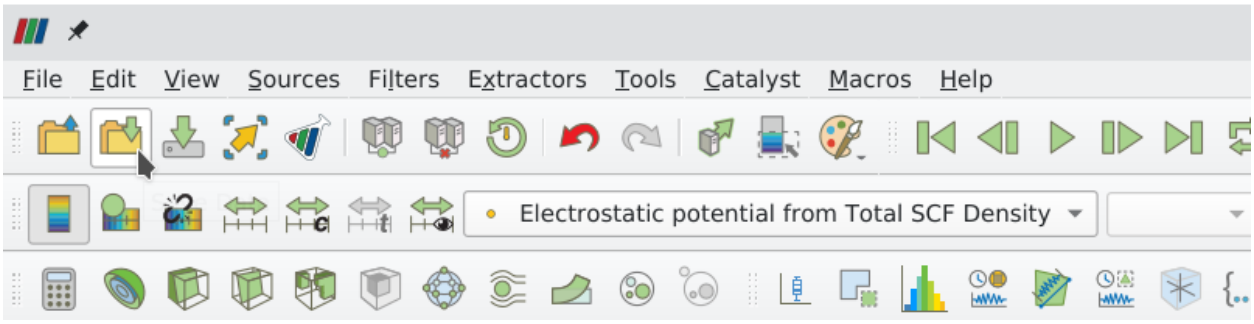
КАК СОХРАНИТЬ ПОЛУЧЕННЫЕ ДАННЫЕ

ВАРИАНТ 1

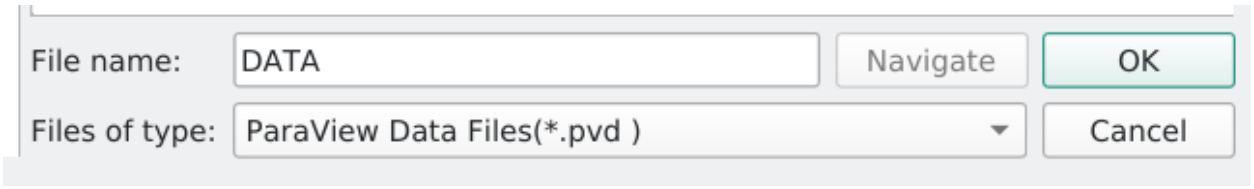
1) Оставить видимым и выбрать что нужно



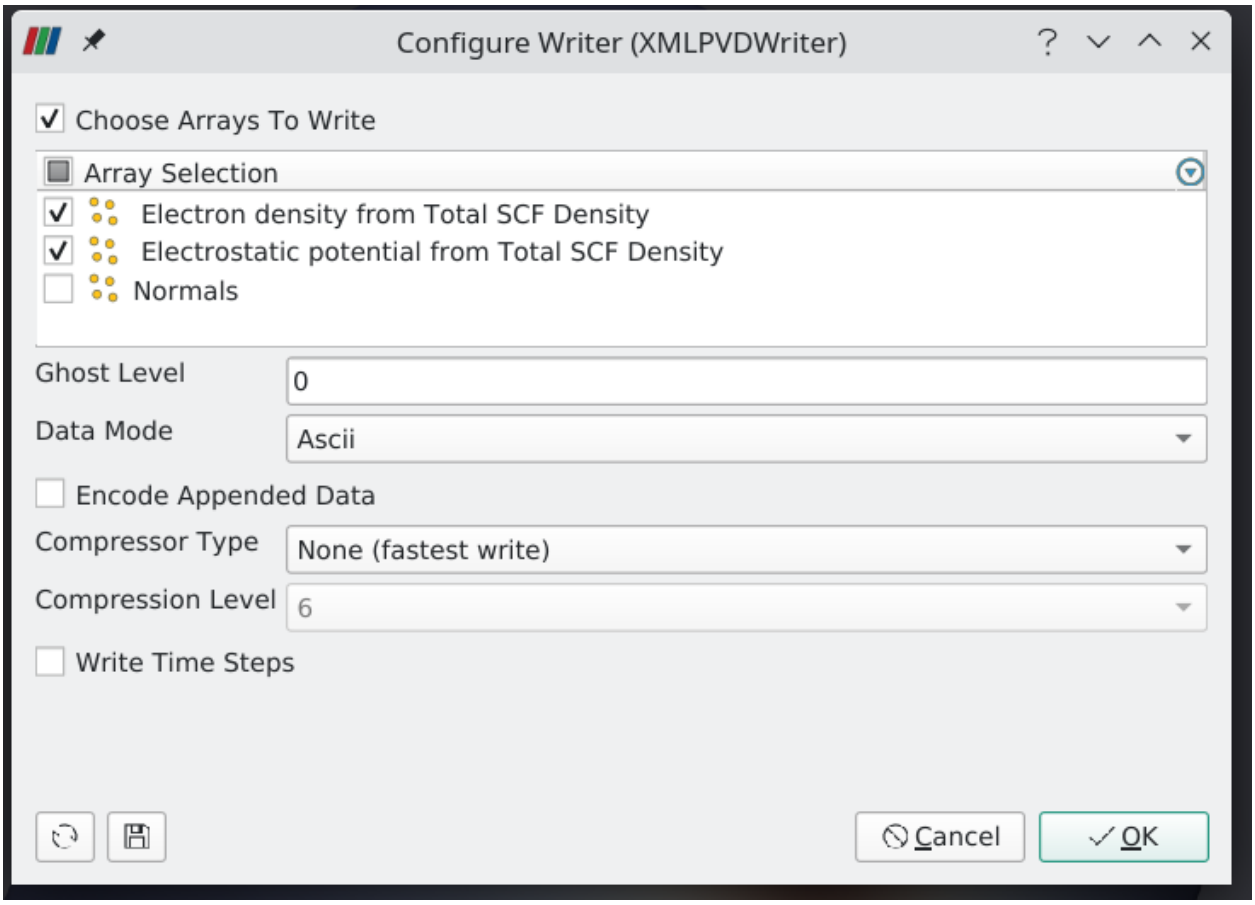
2) Нажать Save Data



3) Выбрать тип и название



4) Выбрать массивы для сохранения и Ascii если нужен текстовый а не бинарный формат

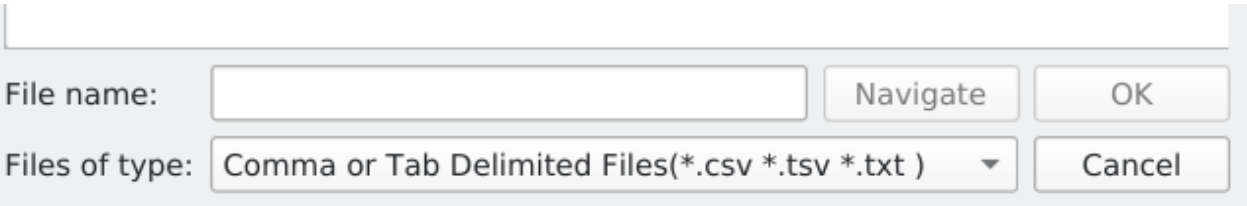


5) Нажать OK

Появится файл и папка с данными

ВАРИАНТ 2

Добавить фильтр (Ctrl + Space) `Convert to Point Cloud` и можно будет сохранить как csv



Но минус в том, что потом сложно прочитать