به نام خدا

راهنمای جامع نرم افزار

Nano Tube Modeler 1.7

Www.1Paper.Blog.Ir

S_G555@YAHOO.COM

صادق قربان زاده- تابستان ۹۲

معرفی نرم افزار:

نرم افزاری برای تولید مختصات سه بعدی (XYZ) نانوتیوب ها ، نانومخروط ها و باکی بال ها است. مختصات تولید شده در این نرم افزار هم قابل نمایش در نمایشگر گرافیکی خود نرم افزار اند و هم می توان آن ها را به صورت فایل های خروجی ذخیره نمود و در دیگر نرم افزار ها مانند لمپس به عنوان فایل ورودی فراخوانی کرد. این نرم افزار در اساس یک اپلت جاوا با نام JNanotube Applet بوده است که توسط استفان وبر (Steffen Weber) نوشته شده و سپس گسترش داده یافته است . نکته حائز اهمیت در مورد مختصات تولیدی نرم افزار ، خالص بودن فاصله هاست بدین معنی که مختصات صرفا جبری بوده و در محاسبه ی آن ها معادلات انرژی اثر گذار نبوده است .

ویژگی های نرم افزار:

۱- گرافیک پویا (قابلیت چرخش ، جا به جایی و زوم شکل ساختار ها) .

۲- ساخت نانوتیوب ها ، باکی بال ها ، نانومخروط ها .

۳- تولید نانولوله های دارای اعوجاج و انحراف زاویه ای .

۴- تولید نانولوله های تک دیواره و چند دیواره

۵- تولید فایل های خروجی از شکل ، مختصات و مشخصات ساختارهای تولیدی با فرمت های PDF ، JPG ، BMP ، MOL ، XMOL ، MLM ، CIF ، VRML ، POV .

۶- رونوشت گرفتن مختصات سه بعدی ساختار در کلیپ برد .

۷- ابزار XY-Sheet Generator .

۸- استفاده از دیتا فایل های ورودی XMOL .

۹- مدیریت مناسب بر پارامتر های مختلف ساختار ها .

۱۰- تولید دسته های نانولوله به صورت موازی .

۱۱- تولید صفحات گرافن تک لایه و چند لایه با مدیریت بر پارامتر های اثر گذار .

۱۲- ...

معرفی کاربردی نرم افزار:

یکی از موضوعات داغ پژوهشی فناوری نانو مبحث نانو تیوب ها و درکل آلوتروپ های کربن است . این مبحث در زمینه نانومحاسباتی نیز از مباحث پر رونق است . یکی از چالش های موجود در این زمینه تولید فایل ورودی ساختار های کربنی برای انجام محاسبات شبیه سازی است که به دلیل ظرافت و پیچیدگی این ساختار ها به صورت دستی کار دشواری محسوب می شود ، که خوشبختانه نرم افزار این مشکلات را مرتفع ساخته و در کنار آن فراغ بال بیشتری در تعیین پارامترهای اثر گذار در این ساختار ها را برای محقق فراهم نموده است . و همچنین در بخش آموزش های پایه در این زمینه قابل استفاده است .

مقایسه ی نسخه رایگان و نسخه ریجسترشده:

نسخه رایگان نرم افزار تمام ویژگی های ذکر شده را دارا می باشد به غیر از توابع تولید فایل های خروجی مانند ذخیره فایل و رونوشت گیری از مختصات سه بعدی ، تولید فایل های عکس و ساختار مولکولی ؛ که این قابلیت ها نیز با خریداری و فعال سازی لایسنس و کد فعال سازی و تبدیل نسخه رایگان به نسخه ریجستر شده فعال خواهند شد .

البته به دلیل مشکلات موجود برای خرید لایسنس نرم افزار در کنار لینک دانلود همین نوشتار ، لینک دانلود نسخه کرک شده نرم افزار هم وجود دارد .برای خرید کد فعال سازی نرم افزار می توانید به لینک زیر مراجعه کنید .البته برای خرید این کد و لایسنس نرم افزار نیاز به ۵۰ دلار نا قابل دارید !!!

{ http://www.jcrystal.com/order.html }

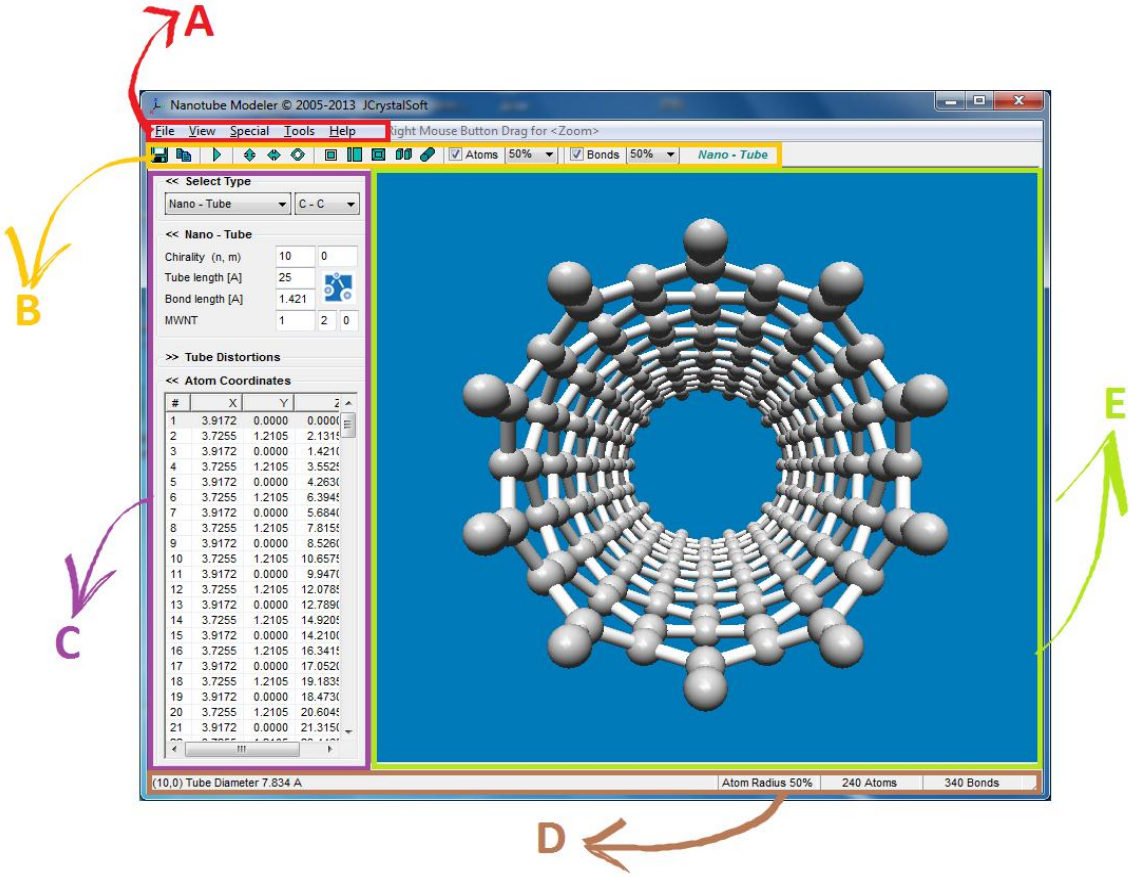
آموزش دانلود:

برای دانلود نسخه رایگان نرم افزار می توان به صفحه اینترتی رسمی نرم افزار ، به آدرس زیر مراجعه کنید.

{ http://www.jcrystal.com/products/wincnt/ }

البته در کنار لینک دانلود همین فایل نیز لینک دانلود نرم افزار با کرک آن قرار داده شده است .

معرفی محیط نرم افزار:

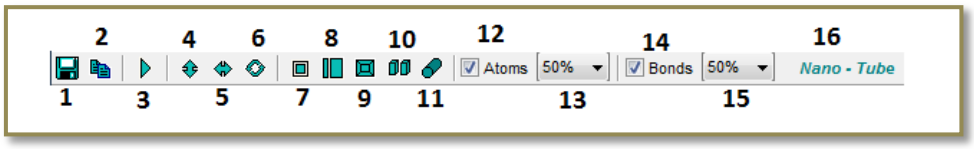


ناحیه	توضیحات
A	نوار منوها
B	نوار ابزار
C	پنل تنظیمات اساسی ساختار
D	نوار وضعیت و مشخصات ساختار
E	ناحیه ی نمایش

کلیدهای میان بر (Key-Shortcuts) :

دکمه های میانبر	عملیات اجرایی
دکمه ی اینتر (Enter)	محاسبه ی دوباره مختصات
دکمه های جهت نمای بالا و پایین	چرخش ساختار حول محور افقی
دکمه های جهت نمای چپ و راست	چرخش ساختار حول محور عمودی
Shift + دکمه های جهت نما	چرخش عادی ساختار
Ctrl + دکمه های جهت نما	چرخش ۹۰ درجه ای ساختار
دکمه های +/−	زوم مثبت / زوم منفی
دکمه ی فاصله (Space)	ریست کردن تمام چرخش ها و زوم ها

معرفی نوار ابزار:



۱- ذخیره مختصات ساختار در یک فایل متنی.

۲- ذخیره مختصات ساختار در کلیپ برد.

۳- تازه سازی محاسبات پیوندی ساختار و شکل آن.

۴- چرخش خودکار ساختار در راستای محور عمودی.

۵- چرخش خودکار ساختار در راستای محور افقی.

۶- چرخش خودکار ساختار در راستای محور اصلی ساختار.

۷- ریست کردن تمام چرخش ها و بزرگنمایی ها (حالت اولیه).

۸- مخفی/آشکار کردن پنل تنظیمات اساسی ساختار.

۹- نشان دادن ساختار در دو حالت تخت و پرسپکتیو.

۱۰- نشان دادن ساختار در دو حالت استریو و آناگلیف.

۱۱- ایجاد سایه برای سلندر های داخل ساختار.

۱۲- تنظیم حالت نمایش اتم ها (خاموش/روشن).

۱۳- تنظیم فاکتور شعاع اتم ها در ساختار.

۱۴- تنظیم حالت نمایش پیوندها (خاموش/روشن).

۱۵- تنظیم فاکتور پهنای پیوندها.

۱۶- نمایش نام ساختار فعلی.

بررسی منوهای نرم افزار:

منوی فایل (File Menu) :

۱- Export Structure: تولید فایل خروجی از ساختار و مشخصات آن در فرمت های مختلف.

۲- Input Structure: وارد کردن فایل دیتاهای ورودی.

۳- Save Image: تصویری که از ساختار در ناحیه نمایش می بینیم را در یک فایل ذخیره می کند.

۴- Save XYZ Image: مختصات ساختار را که در پنل تنظیمات می بینیم در یک فایل متنی ذخیره می کند.

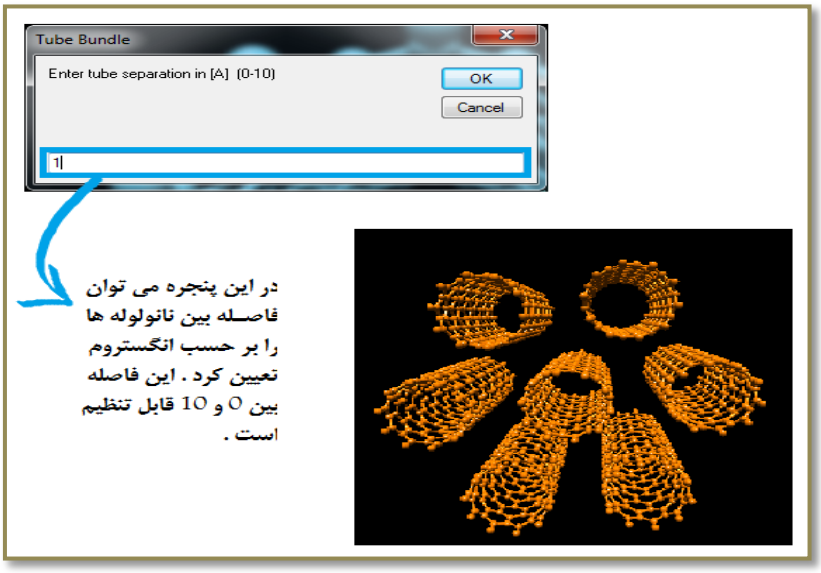
۵- Copy Image: تصویری از ساختار موجود در ناحیه نمایش را در کلیپ برد کپی می کند.
۶- Copy XYZ Image: یک نسخه از جدول مختصات ساختار را در کلیپ برد کپی می کند.
۷- View…: پوشه های پیش فرض نرم افزار برای ذخیره و ورود فایل را باز می کنند.
۸- Exit: خروج از نرم افزار.

منوی نمایش (View Menu) :

۱- Toggle Atoms: نمایش با مخفی کردن اتم ها.
۲- Toggle Bonds: نمایش با مخفی کردن پیوندها.
۳- Toggle Control: نمایش ساختار در فضای بزرگتر با حذف پنل تنظیمات.
۴- Toggle Fog: نمایش ساختار به صورت کم رنگ شده.
۵- Toggle Rainbow: نمایش ساختار به صورت رنگین کمانی (تغییر رنگ در طول ساختار).
۶- Toggle Projection: نمایش ساختار از نقطه مقابل حالت فعلی.
۷- Wire – Frame Model: نمایش ساختار به حالت شبکه سیمی.
۸- Ball – Stick Model: نمایش ساختار به حالت گلوله و میله.
۹- Space – Filling Model: نمایش ساختار به حالت فضا پرکن.

منوی ویژه (Special Menu) :

۱- Tube Bundle: تولید نانولوله های دسته ای یعنی چند نانولوله در کنار هم (یک نانولوله در وسط و شش نانولوله در اطراف). تصویر نمونه و شیوه تنظیم پارامتر در تصویر زیر نمایش داده شده است .

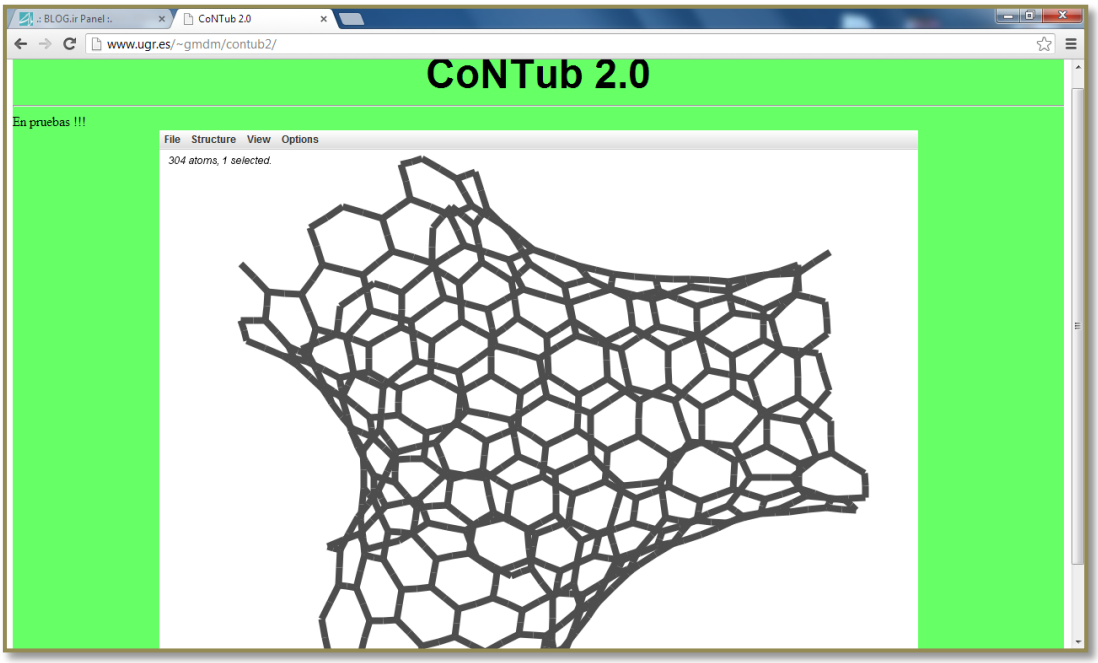


۲- Caped Tube: پوشاندن دو سر نانولوله ها به وسیله ی باکی بال های مختلف (تولید نانوکپسول ها).
۳- Bucky Ball: تولید کردن ساختار یک C60.
۴- Insert/Remove Cylinder/Ball: پرکردن / خالی کردن فضای داخلی باکی بال ها و نانوتیوب ها با سیلندرها و توپ ها (مواد متراکم).

۵- Hetero – Junction: اتصالات نانو لوله ای و ترکیب سه نانولوله از انتها. برای استفاده از این بخش نرم افزار بهتر است از شیوه زیر عمل نمایید چون مشکلاتی در راه اندازی این بخش داخلی نرم افزار وجود دارد .

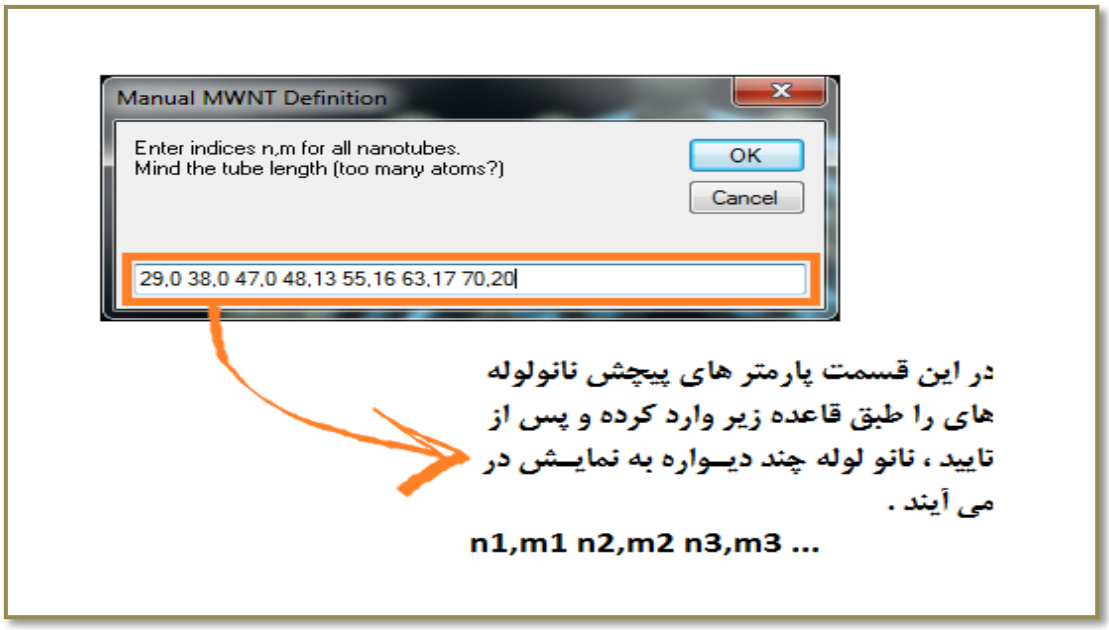
در ابتدا با مراجعه به منوی Help و انتخاب گزینه Links و همچنین در این لیست نیز انتخاب گزینه CoNTub Website به صفحه ای مانند زیر هدایت می شوید (اتصال اینترنت فراموش نشود).

در این صفحه نیز با انتخاب گزینه CoNTub V2.0 به صفحه زیر منتقل می شود (به ماشین مجازی جاوا نیاز دارید البته اگر با اینترنت اکسپلورر این صفحه را باز کنید به راحتی باز می شود).



حال می توانید اتصالات نانولوله ای مدنظر خود را تولید کنید و از آن فایل خروجی تهیه کنید .

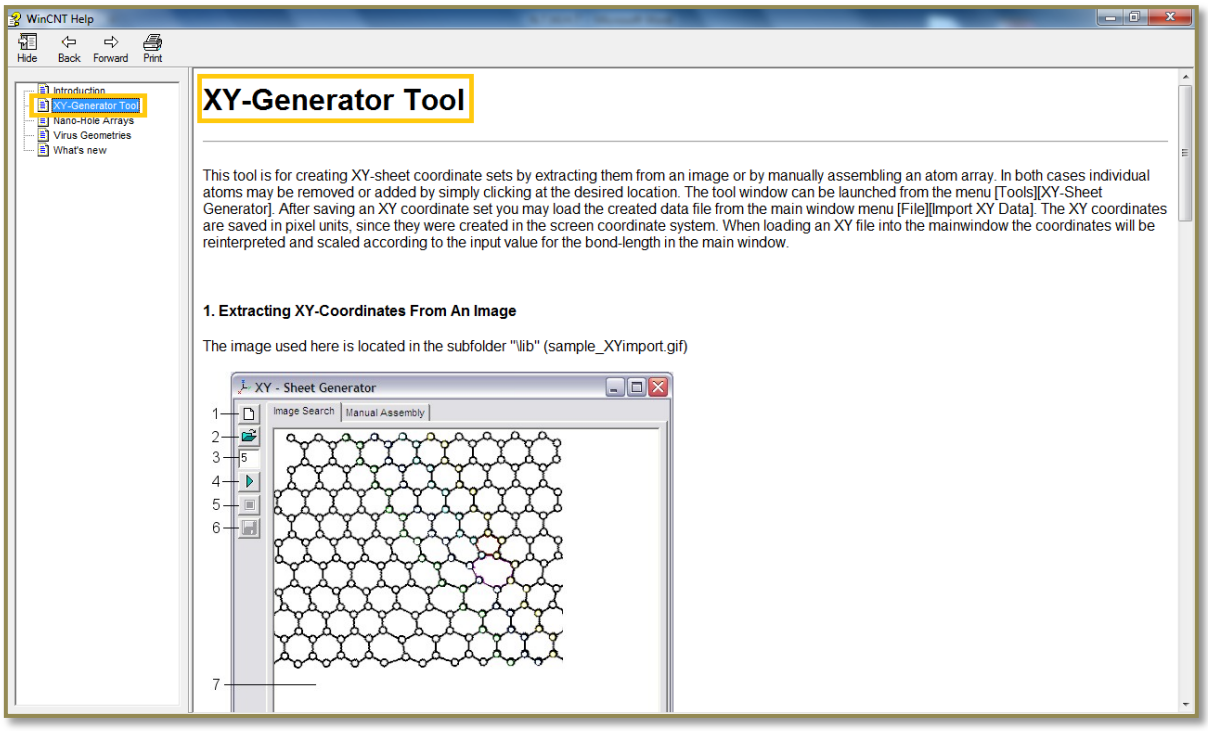
۶- Custom MWNT: تنظیمات جزیی و سفارشی نانوتیوب های چند دیواره از لحاظ پیچش ها های نانو لوله ها و تعیین فاصله بین دیواره ها با استفاده از پارامترهای پیچش نانولوله ها.



منوی ابزارها (Tools Menu) :

۱- Lunch…: پنج گزینه اول منوی ابزارها وظیفه اجرا و فعال سازی نرم افزارهای نمایش دهنده ی فایل هایی با فرمت های مختلف را دارند.

۲- XY – Sheet Generator: ابزاری جالب برای تولید و استخراج پیوندهای کربن – کربن از فایل های تصویری. بهترین آموزش و آشنایی برای این ابزار ، مثال تصویری موجود در راهنمای رسمی نرم افزار در منوی Help است .

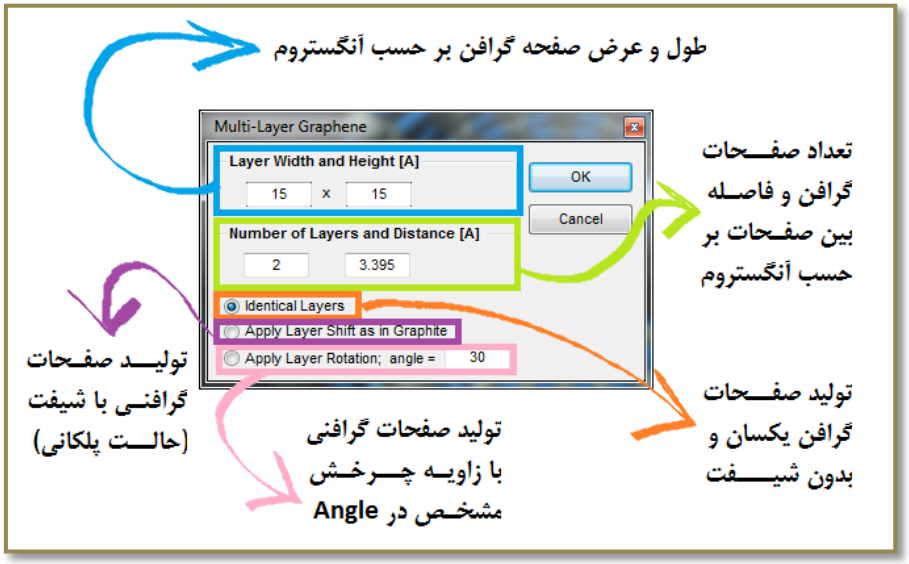


۳- Radius – Calculator: محسبات شعاعی نانوتیوب ها در حالت های مختلف و دنباله های نانولوله های چند دیواره ، که مشخصات پنجره آن به صورت زیر است.

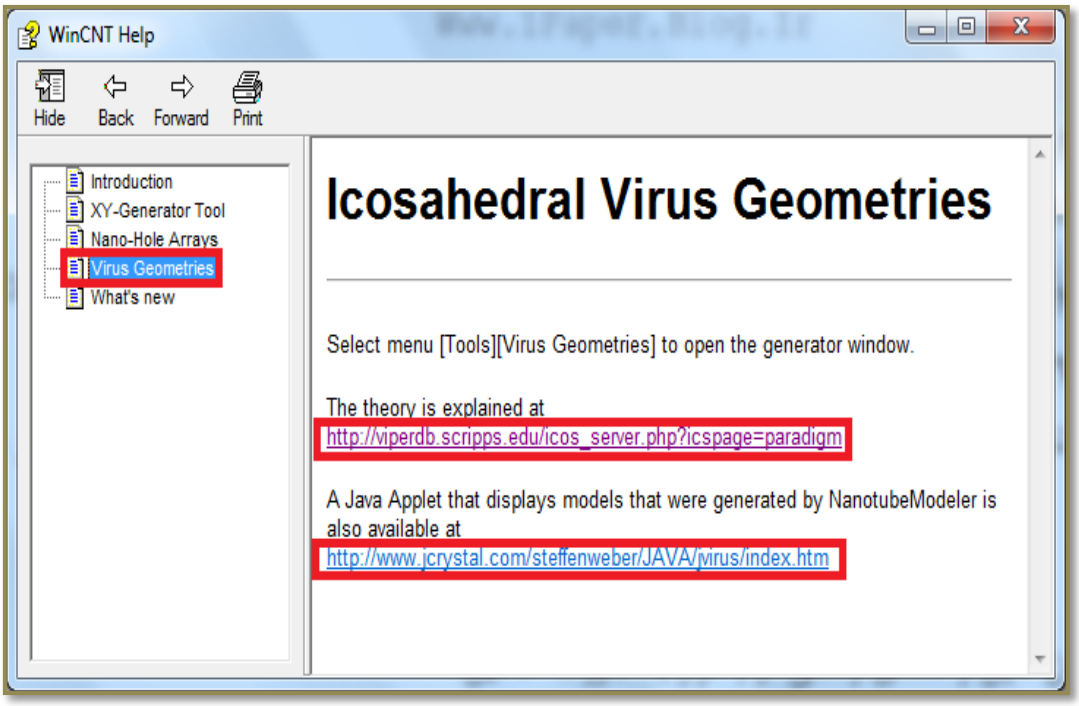
۴- Recalculate Bonds: تازه سازی محاسبات پیوندها با توجه به تغییرات اعمال شده.

۵- Nano – Hole Array: تولید نانوحفره های آرایه ای در فلزها برای تولید نانولنزهای نوری.

۶- Multi – Layer Graphene: تولید صفحات تک لایه و چند لایه گرافن. با انتخاب این گزینه پنجره ای مانند تصویر ذیل باز شده که توضیحات آن به شرح زیر است .



۷- Virus Geometry: تولید ساختار ویروس ها (رجوع شود به فایل راهنمای رسمی نرم افزار در بخش Contents... یا آدرس اینترنتی (http://viperdb.scripps.edu/icos_server.php?icspage=paradigm).



۸- Preference: تنظیمات داخلی نرم افزار (تنظیم رنگ ها ، بخشی از خروجی ها ، تنظیم نرم افزار های نمایشگر و ...).

منوی راهنما (Help Menu) :

۱- Contents...: باز کردن فایل راهنمای رسمی نرم افزار به صورت آفلاین.

۲- Link: لینک به صفحات اینترنتی مرتبط با نرم افزار (مانند صفحه شرکت سازنده نرم افزار و دیگر نرم افزارهای هم خانواده ، صفحه اختصاصی نرم افزار نانوتیوب مدلر ، صفحه گزارش مشکلات های نرم افزاری ، صفحه اپلت نرم افزار ، صفحه ی دکتر میتسو یوشیدا و ...).

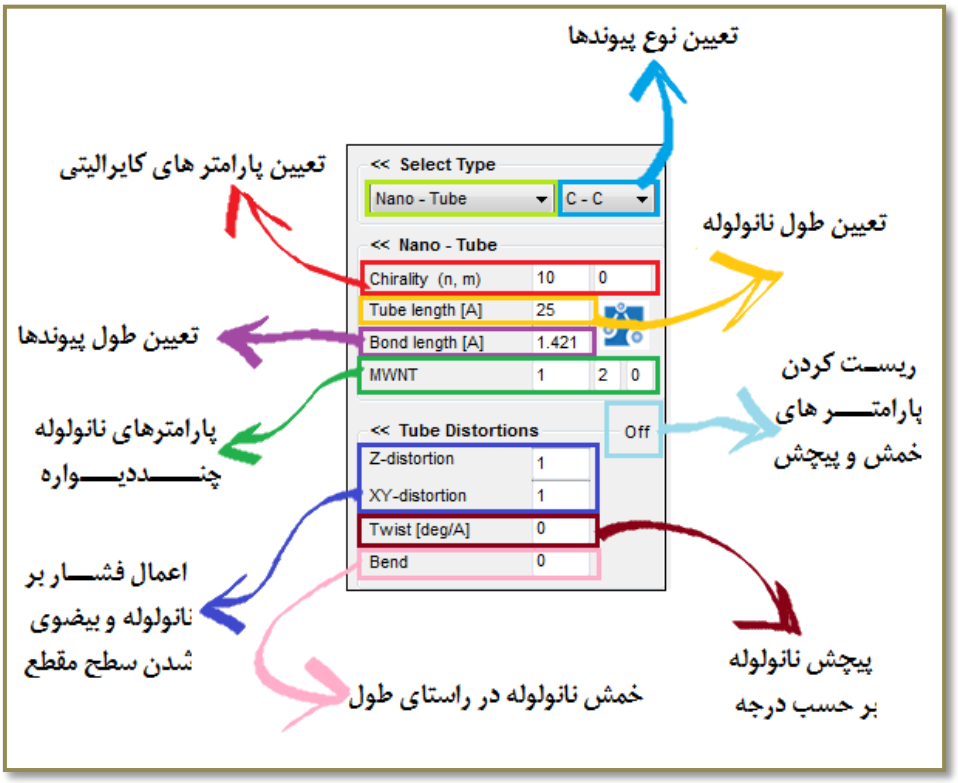
۳- Register: وارد کردن کد فعال سازی نرم افزار (باید خریداری شود).

۴- Clear Register: پاک کردن کد فعال سازی نرم افزار.

۵- About: پنجره ی معرفی مختصر نرم افزار.

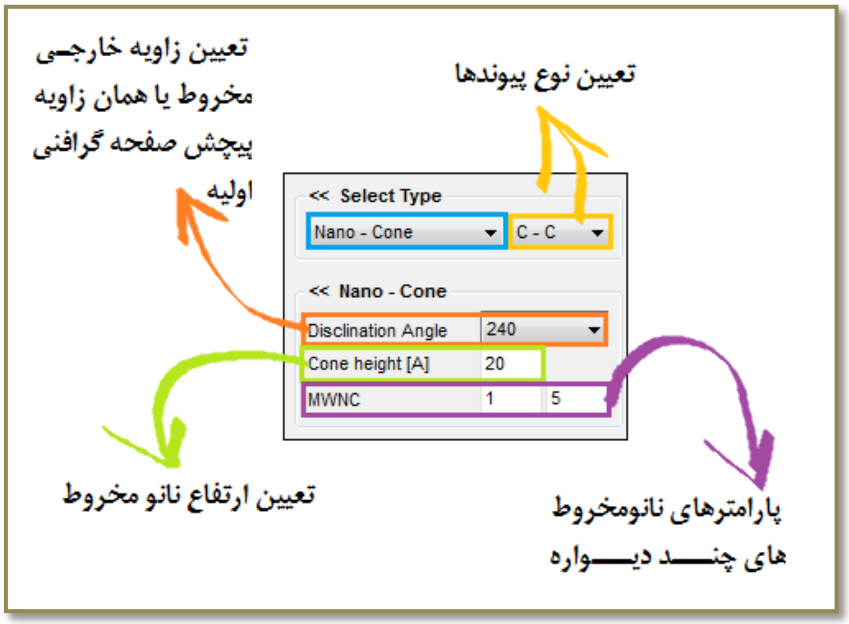
بررسی حالت های مختلف پنل تنظیمات ساختار:

۱- حالت Nano-Tube:



۲- حالت Graphene Sheet: کاملا مشابه حالت قبل است.

۳- حالت Nano-Cone:



۴- حالت Cone-Sheet: مشابه حالت قبل است.

۵- حالت Bucky-Ball: این حالت پارمتر خاصی ندارد ، فقط یک C60 تولید می کند.

۶- حالت Fullerene Library: مراجعه شود به بخش کتابخانه ی فولرین ها.

۷- حالت XYZ-Import: گزینه ای برای لود کردن ساختار قدیمی و خارج از نرم افزار.

۸- حالت Virus Geometry: گزینه ای برای لود کرد ساختار ویروس ها.

کتابخانه ی فولرین ها:

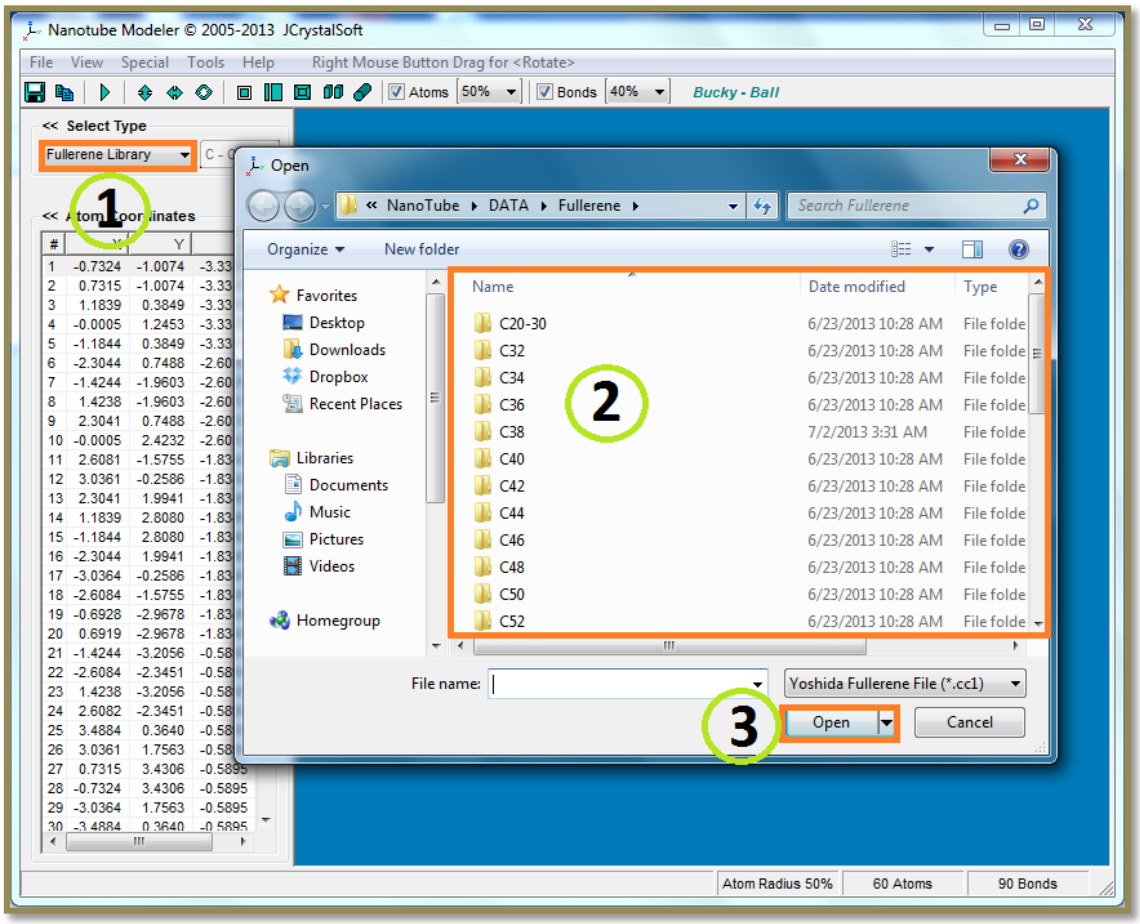
چندین سال پیش در ژاپن ، دکتر میتسو یوشیدا (Mitsuho Yoshida) کتابخانه ای گسترده از فولرین ها تولید کرد که بیش از ۲۴۰۰ فایل در آن طبقه بندی شده بود که این کتاب خانه به صورت رایگان در دسترس عموم قرار گرفت . اما این فایل ها به فرمت سیستم عامل یونیکس تولید شده بودند که به طور مستقیم در PC های معمولی و سیستم عامل ویندوز قابل استفاده نبودند . در این شرایط استفان وبر (Steffen Weber) در سال ۱۹۹۹ با تغییر فرمت فایل های این کتابخانه آن ها را در دسترس کاربران ویندوز قرار داد . نرم افزار نانوتیوب مدلر قادر به خواندن این کتابخانه فولرین هاست اما این کتابخانه به صورت پیشفرض با خود نرم افزار نصب نمی شود و باید آن را به صورت جداگانه دانلود و نصب نمود .

برای استفاده از این کتابخانه باید فایلی به نام FullereneLib.exe و به حجم ۴ مگابایت رو از آدرس زیر دانلود کنید .

{ http://www.jcrystal.com/products/wincnt/FullereneLib.exe }

پس دانلود کردن ، فایل را به آدرس \NanoTube\DATA\Fullerene ... منتقل می کنیم که به جای ... محل دقیق نصب نرم افزار قرار دارد مانند C:\Program Files\NanoTube\DATA\Fullerene . پس انتقال فایل آن را اجرا می کنیم ، در این مرحله باید صبر کنیم تا تمام فایل های کتابخانه از حالت فشرده شده خارج شده و آماده استفاده در نرم افزار گردند . پس از اتمام این مرحله به شیوه زیر می توان از ساختار های موجود در این کتابخانه استفاده نمود .

مرحله ۱ : در ابتدا نرم افزار را اجرا کرده و در بخش Select Type گزینه ی Fullerene Library را انتخاب می کنیم که پنجره ای مانند تصویر زیر باز می شود .



مرحله ۲ : در پنجره باز شده و در پوشه های موجود ، فولرین مورد نظر خود را انتخاب می کنیم .

مرحله ۳ : با زدن دکمه Open ، فولرین در ناحیه ی نمایش ظاهر می شود .

موفق باشید

صادق قربان زاده

پایان نگارش : ۱۳۹۲/۴/۱۸