

# Notice d'utilisation de Cristallographie en 3d

**Projet de Groupe – Grenoble INP – Phelma 2010-2012**

2010 - 2011 : Anthony BUCQUET - Guillaume GRIPPARI - Gwénaëlle HAMON - Quentin LATAUD - Arnaud TURIN

2011 – 2012 : Antoine LEJOSNE - Antoine JOAN - Maxime GRASSA – Jérémy COLLIGNON

## 1\_ Pour commencer

Cristallographie en 3d est un logiciel qui exploite les données des fichier.cif (fichier regroupant toute les informations concernant la structure cristalline d'un composé) afin d'afficher des mailles cristallographiques.

Par défaut, le logiciel dispose déjà de certains fichier.cif. Pour afficher une de ses structures cliquez sur le bouton **Parcourir** pour accéder aux fichier.cif. Ouvrez la structure que vous souhaitez affiché puis appuyer sur **OK**. Le logiciel affiche alors la maille primitive du composé.

## 2\_ Modifier l'affichage

Le fait de générer une nouvelle maille affiche cette maille avec les paramètres par défaut. Ces paramètres peuvent être modifiés sur la partie droite de la fenêtre.

- Les menus déroulants **Nombre de maille : x, y, z...** permettent de dupliqué la maille cristallographiques selon chacun des 3 axes Ox, Oy, Oz.
- Pour paramétrer l'affichage des atomes sélectionnez à l'aide du menu **Atome** le type des atomes que vous souhaitez modifiés. Vous pouvez ensuite modifier leur **couleur**, leur taille, et leur espacement en utilisant les curseurs **Taille des atomes** et **Espace entre atomes**.

## 3\_Commande de la caméra

Le mode de caméra utilisé par défaut est le mode **Trackball**. Dans cette configuration, après avoir cliqué une première fois sur une zone du dessin, la caméra peut être déplacée librement autour de ce point en utilisant la souris ou le clavier. L'utilisateur dispose également de la possibilité de basculer en mode **Freefly**. Dans ce mode, la caméra n'est plus asservie à un point et peut donc être déplacée librement dans l'espace 3D.

➤ Commandes Freefly

Clic Gauche	Active/Desactive le mouvement de la caméra
Mouvement Souris	Rotation de la caméra
PageUp / Down ou molette souris	Zoom / Dézoom
↑ ou <b>Z</b>	Avance la caméra
↓ ou <b>S</b>	Recule la caméra
← ou <b>Q</b>	Tourne la caméra dans le sens anti-horaire
→ ou <b>D</b>	Tourne la caméra dans le sens horaire
<b>CTRL</b> + Mvt souris ou Clic sur la molette	Glisse la vue

➤ Commandes TrackBall

Clic Gauche	Active/Desactive le mouvement de la caméra
Mouvement Souris	Rotation autout du point centre de la maille
PageUp / Down ou molette souris	Zoom / Dézoom
← ou <b>Q</b>	Rotation dans le sens anti horaire
→ ou <b>D</b>	Rotation dans le sens horaire

## 4\_ Mode Anaglyphe

Pour activer l'anaglyphe, cocher la case **Anaglyphe**. Il suffit alors de mettre des lunettes de vision 3D pour voir les structures en relief.

Selon la position des utilisateurs, le logiciel permet de basculer selon certains réglages prédéfinis (**Ordinateur, Salle, Amphi**) ou d'ajuster directement les paramètres des anaglyphes avec le slider **distance avec l'écran**. Celui-ci règle l'espacement des deux caméras et permet ainsi d'optimiser la vision 3D quelque soit la distance entre l'utilisateur et l'écran.

## 5\_ Importer des fichier.cif

Certains site internet, tel que [www.crystallography.net](http://www.crystallography.net), propose en libre accès un grand nombre de fichier.cif. Pour importer un fichier téléchargé, l'enregistrer dans le dossier Fichiers CIF du répertoire logiciel. [CONSEIL] : Renommer le fichier lors de l'enregistrement afin de le retrouver plus facilement, les fichiers de la base de données étant répertoriés par un numéro plutôt compliqué...