

Aide à la création de la maille personnelle :

Si vous êtes arrivé sur cette page c'est que vous avez compris que le bouton Aide **ouvre la page d'aide** (c'est déjà bien) !

Pas d'inquiétude : **rien n'est bien plus compliqué** dans cette fenêtre !

L'autre bouton, le bouton enregistrer, sert **a enregistrer votre fichier *.cif** !

Mais auparavant vous n'avez qu'a **remplir les champs comme dans le modèle** déjà présent par défaut : voir l'image ci dessous.

Veillez toute fois **ne pas laisser de lignes vides dans Atomes** afin d'éviter toutes mauvaises compréhensions de la part du logiciel.

Veillez noter également que **les symétries autorisent toutes les écritures** : +,-,1/2,3/4, etc...

Création personnelle de fichier .cif

Entête

Nom de l'auteur : M. Dupont

Nom du fichier : NaCl.cif

Formule Chimique : Na Cl

Groupe d'espace : F m -3 m

Parametres de Maille

a : 5.4533 b : 5.4533 c : 5.4533

alpha : 90 beta : 90 gamma : 90

Atomes

Na 0.00000 0.00000 0.00000

Cl 0.50000 0.50000 0.50000

Symétries

x,y,z

Enregistrer Aide

Image 1 : Interface de la génération de maille.