

# Brugermanual NanoBattVR

## Indhold

1	Headset & controller .....	2
1.1	Justering af headset .....	2
1.2	Controller .....	2
1.3	Definer spilleområde/ Opsætning af Guardian .....	2
2	Software .....	4
2.1	Startup-skærm .....	4
2.1.1	Navngiv session .....	5
2.1.2	Farveskema .....	5
2.1.3	Start eller load .....	5
2.2	Det virtuelle laboratorie .....	5
2.2.1	Dine virtuelle hænder .....	6
2.2.1.1	Tag fat i atom .....	6
2.2.1.2	Tag fat i molekyle .....	6
2.2.1.3	Tag fat i værktøj .....	6
2.2.1.4	Læg værktøj fra dig .....	6
2.2.1.5	Tryk på en rød knap .....	6
2.2.2	Værktøjer .....	6
2.2.2.1	Tilføj atom .....	6
2.2.2.2	Slet atom .....	7
2.2.2.3	Udskift atom .....	8
2.2.2.4	Molekylebibliotek .....	9
2.2.2.5	Slet molekyle .....	10
2.2.2.6	Tilføj elektrode .....	10
2.2.2.7	Relakser strukturer .....	11
2.2.3	Simuleringer .....	12
2.2.3.1	Energiminimering (relaxation) .....	12
2.2.3.2	Mål konduktans i materialer .....	13
2.2.4	Sessionspanel - Gem/genstart/tilbage til startup-skærm .....	13
2.2.4.1	Gem .....	13
2.2.4.2	Genstart .....	13
2.2.4.3	Gå til startup-skærm .....	14
3	Tak til .....	14

Velkommen til NanoBattVR.

Du skal nu lære, hvordan du skal bruge denne software.

Brugervejledningen er opdelt i to dele. Den første del har til formål at forklare, hvordan du skal bruge headsættet og controlleren til at arbejde i NanoBattVR.

Den anden del omhandler selve brugen af Softwaren, hvor vi bl.a. kommer ind på, hvordan du kommer i gang og hvilke muligheder du har, når du er inde i det virtuelle laboratorium.

## 1 Headset & controller

### 1.1 Justering af headset



Hvis headsettet sidder for højt eller lavt, kan du justere på velcrostroppen(1). Hvis headsettet sidder for løst eller stramt, kan du justere på hjulet(2).

### 1.2 Controller

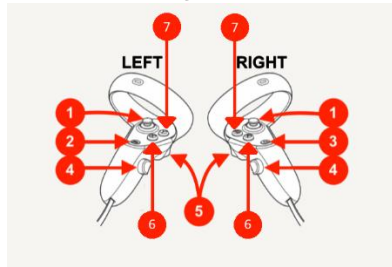


Hold controllerne i dine hænder som vist på billedet.

Din langefinger skal være placeret på knap 4.

Din pegefinger skal være placeret på knap 5.

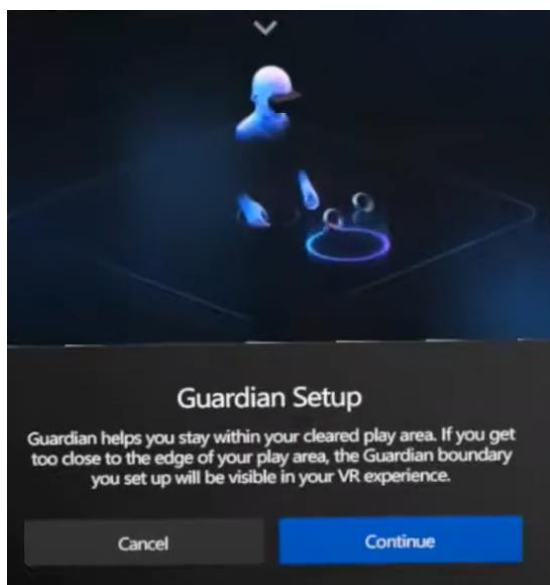
Din tommelfinger skal være placeret på knap 6.



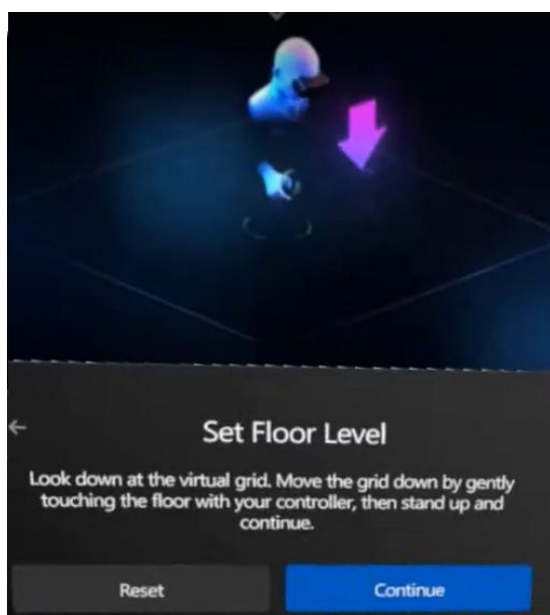
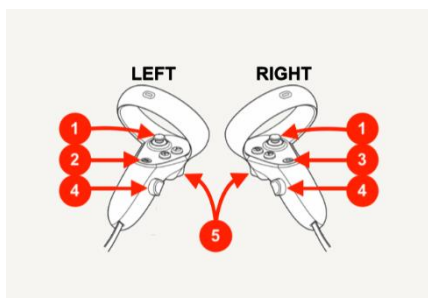
### 1.3 Definer spilleområde/ Opsætning af Guardian

Guardian lader dig sætte grænser for det fysiske område, du kommer til at bevæge dig i, mens du arbejder i VR.

Gør følgende i Guardian opsætning:

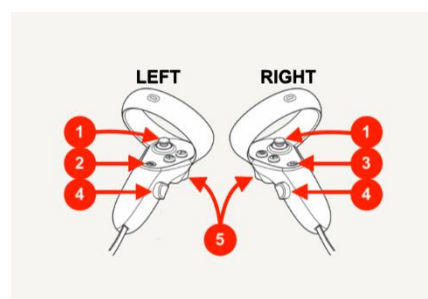


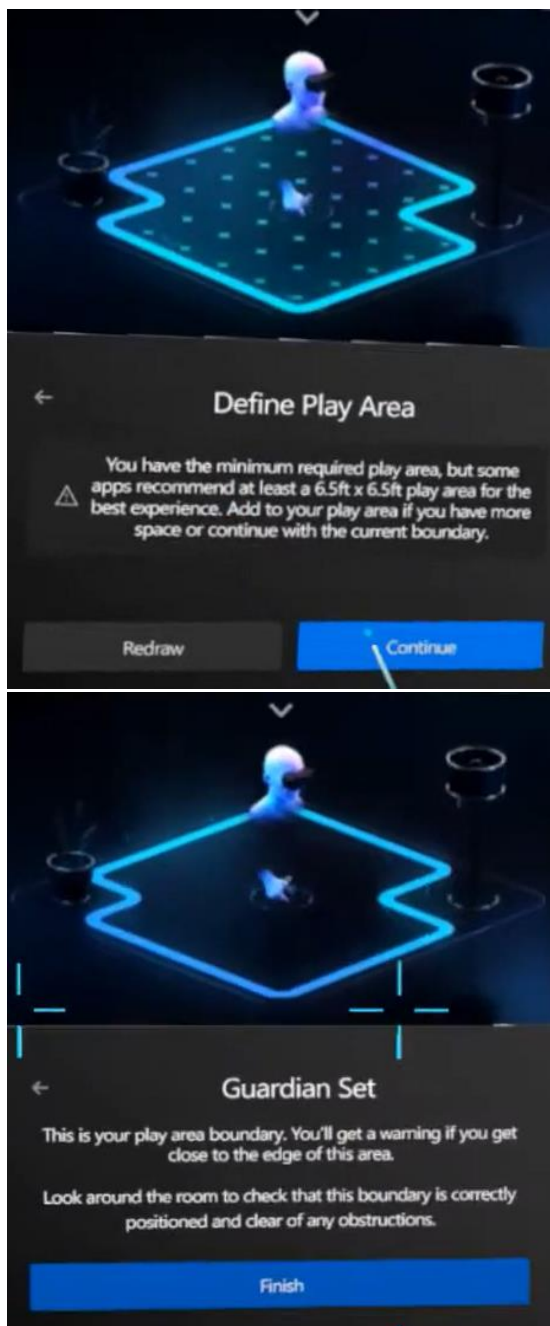
Tryk "Continue" ved brug af højre eller venstre pegefinger(5) - vær opmærksom på, at du ikke behøver at gå helt frem til den virtuelle knap, da der bruges en laserpointer til at interagere med pop-up'en.



Systemet skal nu registrere gulvets højde:

Tag højre eller venstre controller og rør gulvet med den → kom op igen og gå derefter videre ved at trykke "Continue" med din venstre eller højre pegefinger(5).

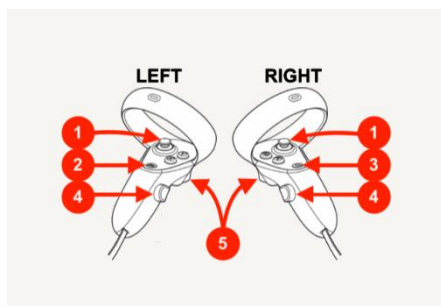




Systemet skal nu vide, hvilket fysiske område, det virtuelle laboratorie skal defineres ud fra:

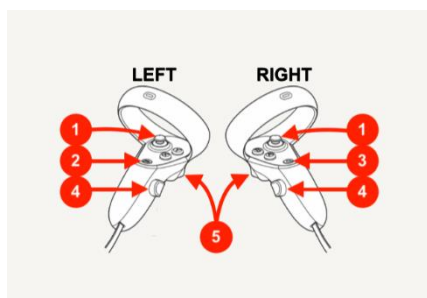
Hold pegefingren(5) på højre eller venstre controller inde og afgræns det område, som du vil bevæge dig indenfor, med ca. 2 x 2 meter. Bemærk, at du skal pege med laserpointeren for at afgrænse området.

Tryk derefter på "Continue" med højre eller venstre pegefinger(5) for at komme videre.



Du er nu færdig med opsætningen af Guardian og kan gå videre ved at trykke "Finish" med din højre eller venstre pegefinger(5).

Du vil derefter komme videre til startup-skærmen.



## 2 Software

### 2.1 Startup-skærm

For at tilgå det virtuelle laboratorie skal du igennem følgende trin:



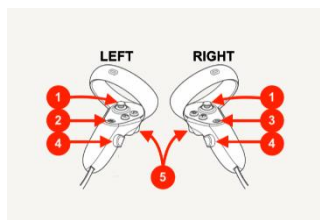
### 2.1.1 Navngiv session



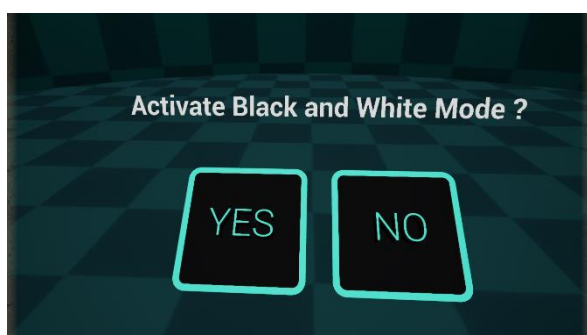
Her skal du navngive din session.

Vælg bogstaverne ved at føre hånden over og tryk med pegefingern (5).

Når du har navngivet sessionen, tryk "ok" med pegefingern(5).

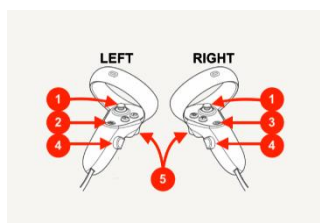


### 2.1.2 Farveskema



Her skal du vælge, om du vil arbejde i sort & hvid eller om det skal være i farver. Det anbefales at arbejde med farver.

Hvis du vil arbejde med farver, skal du trykke "No" ved at føre hånden over knappen og trykke med pegefingern(5).



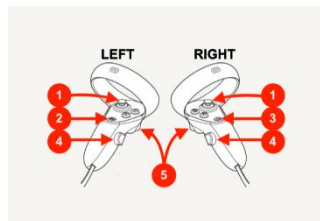
### 2.1.3 Start eller load



Her skal du vælge, om du vil starte en ny session eller om du vil load en tidligere session, som du har arbejdet med før og gemt.

Hvis det er første gang, du starter en session, skal du blot trykke "start".

Brug igen pegefingern (5) til at vælge.



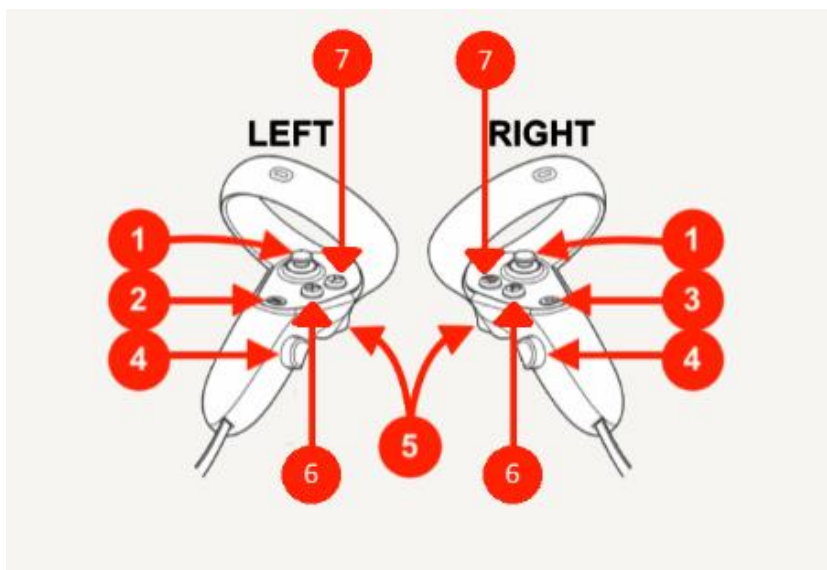
## 2.2 Det virtuelle laboratorium

I det virtuelle laboratorium har du dine virtuelle hænder, som du kan bruge til at interagere med det virtuelle laboratorium.

Du kan ligeledes bevæge dig rundt i laboratoriet ved fysisk bevægelse, fx for at komme frem til et værktøj.

### 2.2.1 Dine virtuelle hænder

For at interagere med det virtuelle laboratorie er der 3 knapper, som du skal benytte dig af på controllerne.



knap 4 (langefinger)

knap 5 (pegefinger)

knap 6 (tommelfinger)

Til nedenstående funktioner skal du bruge følgende knap

#### 2.2.1.1 Tag fat i atom

- For at tage fat i et atom skal du bringe en af dine virtuelle hænder tæt på atomet og når atomet lyser op, kan du tage fat i det ved at trykke på knap 5/pegefinger

#### 2.2.1.2 Tag fat i molekyle

- For at tage fat i et molekyle skal du bevæge en af dine virtuelle hænder tæt på molekylet og tage fat i det ved at trykke på knap 4/langefinger. Hold knappen inde, indtil du har bevæget molekylet, som du ønsker det, og giv derefter slip på knap 4/langefinger.

#### 2.2.1.3 Tag fat i værktøj

- For at tage fat i et værktøj skal du række en af dine hænder frem til værktøjet og trykke på knap 5/pegefinger.

#### 2.2.1.4 Læg værktøj fra dig

- For at lægge et værktøj fra dig skal du bevæge dine hænder frem til det sted, du ønsker at lægge værktøjet og trykke på knap 6/tommelfinger

#### 2.2.1.5 Tryk på en rød knap

- For at trykke på en rød knap skal du placere en af dine virtuelle hænder på knappen og fjerne den igen.

### 2.2.2 Værktøjer

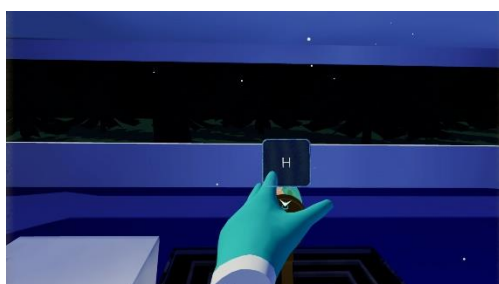
Nedenfor finder du de værktøjer, som du kan anvende i NanoBattVR, samt en beskrivelse af, hvordan disse anvendes.

#### 2.2.2.1 Tilføj atom

Dette værktøj anvender du, når du skal tilføje et atom, fx når du skal bygge et molekyle eller tilføje et atom på et eksisterende molekyle.



Trin 1: Find "tilføj atom" værktøjet → før en af dine virtuelle hænder frem til værktøjet, til det lyser op → tag fat i værktøjet ved brug af pegefingren(5).



Trin 2: For at skifte grundstof, placér din anden hånd på grundstofsymbolet på værktøjet, til det lyser op → tryk på det med din pegefinger(5)

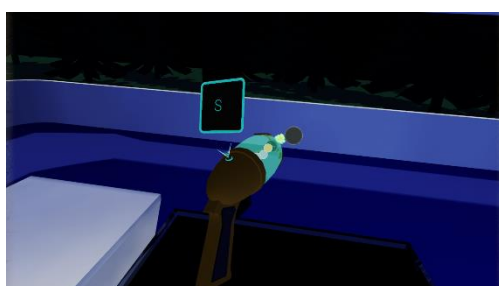


Trin 3: Her ser du en liste over alle grundstoffer i det periodiske system, som du kan vælge imellem. Placer din anden hånd på en af pilene for at scrolle gennem listen af grundstoffer.

Bemærk: grundstofferne er sorteret ift. grundstofnummer.



Trin 4: Når du har fundet det grundstof, du vil anvende, trykker du på det med din anden hånds pegefinger(5) for at vælge det.



Trin 5: Du kan nu tilføje et atom ved at bruge din pegefinger(5), med den hånd, du har værktøjet i.

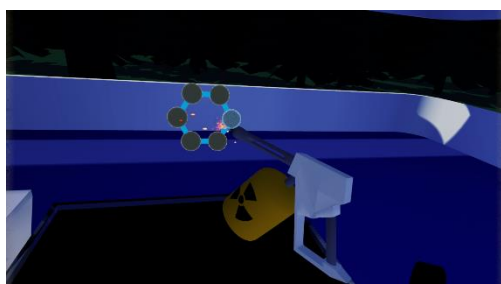
#### 2.2.2.2 Slet atom

Dette værktøj anvender du, når du skal slette et atom, fx fra et molekyle.



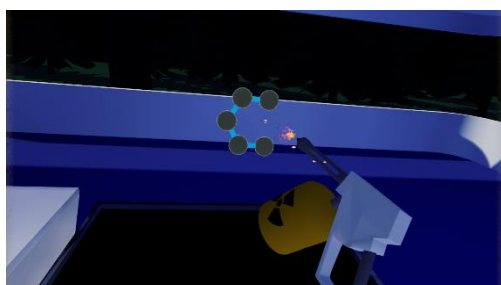


Trin 1: Find "slet atom" værktøjet → før en af dine virtuelle hænder frem til værktøjet, til det lyser op → tag fat i værktøjet ved brug af pegefingern(5).



Trin 2: Når du har værktøjet i hånden, skal du føre spidsen af værktøjet frem til det atom, du ønsker at slette.

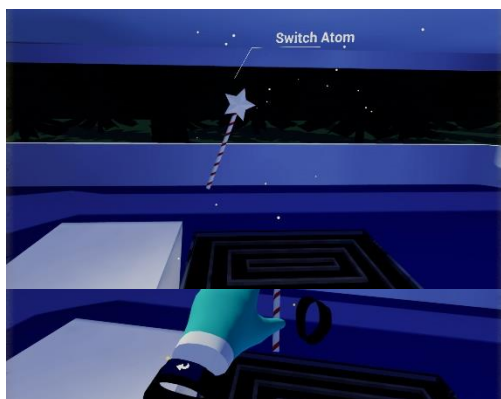
Atomet, som værktøjet peger på, vil lyse op.



Trin 3: Du kan nu slette atomet ved at trykke med din pegefingern(5) med den hånd, du har værktøjet i.

### 2.2.2.3 Udskift atom

Dette værktøj anvender du, når du skal udskifte et atom med et andet atom, fx i et molekyle.



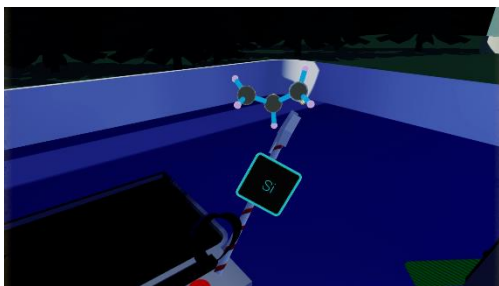
Trin 1: Find "Udskift atom" værktøjet → før en af dine virtuelle hænder frem til værktøjet, til det lyser op → tag fat i værktøjet ved brug af pegefingern(5).

Trin 2: For at skifte grundstof, placér din anden hånd på grundstofsymbolet, til det lyser op → tryk på det med din pegefingern(5).



Trin 3: Her ser du en liste over alle grundstoffer i det periodiske system, som du kan vælge imellem. Placer din anden hånd på en af pilene for at scrolle gennem listen af grundstoffer.

Bemærk: grundstofferne er sorteret ift. grundstofnummer.



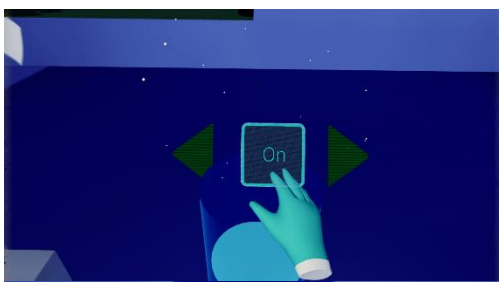
Trin 4: Når du har fundet det grundstof, du vil udskifte med, trykker du på det med din anden hånds pegefinger(5) for at vælge det.



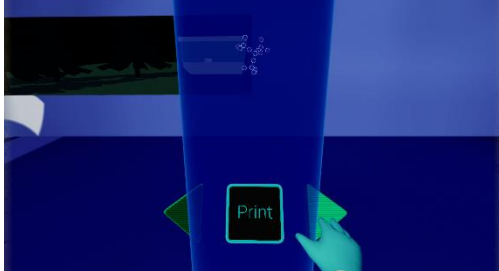
Trin 5: Du kan nu udskifte et atom med et andet ved at bruge din pegefinger(5), med den hånd, du har værktøjet i.

#### 2.2.2.4 Molekylebibliotek

Dette værktøj anvender du, når du skal printe et molekyle eller et system af atomer og molekyler fra biblioteket. Værktøjet kan også bruges til at printe tidligere gemte molekyler.



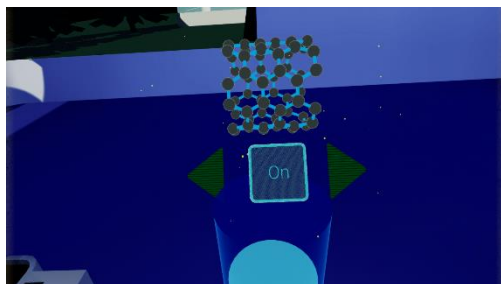
Trin 1: Find molekylebiblioteket og før en af dine hænder frem → hvis knappen viser "On", skal du tænde for molekylebiblioteket ved at trykke på knappen med din pegefinger(5).



Trin 2: For at scrolle mellem de forskellige strukturer i biblioteket, skal du føre din hånd på en af pilene og trykke med din pegefinger(5).



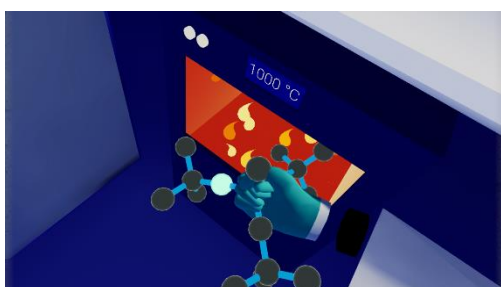
Trin 3: Når du har fundet det molekyle, du vil printe, skal du føre din hånd på "print" knappen og trykke på den med din pegefinger(5).



Trin 4: Når du har printet molekylet, kan du se det foran dig og du kan nu interagere med det.

#### 2.2.2.5 Slet molekyle

Dette værktøj anvender du, når du skal slette et molekyle.



Trin 1: Find det molekyle, du vil slette → hør dine hænder frem til det, til det lyser op → tag fat i det med din langefinger(4) og før det ind i pejsen.

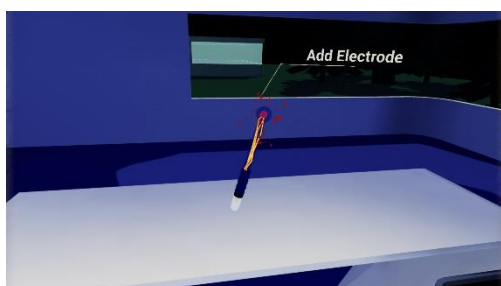
Bemærk: Hele molekylet behøver ikke at være inde i pejsen for at blive slettet.



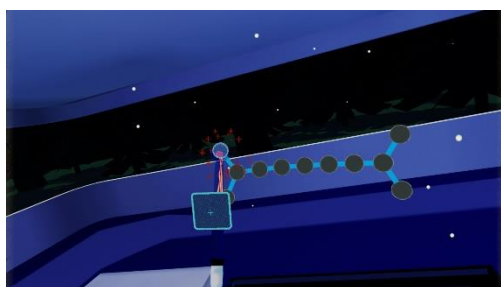
Trin 2: Slip molekylet for at slette det.

#### 2.2.2.6 Tilføj elektrode

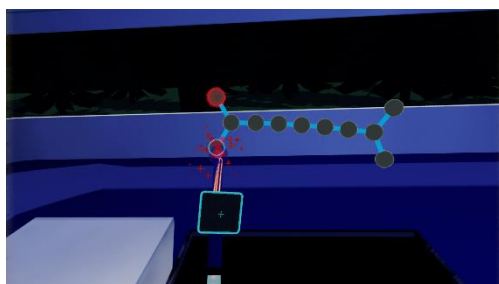
Dette værktøj anvender du, når du skal måle konduktans gennem et molekyle.



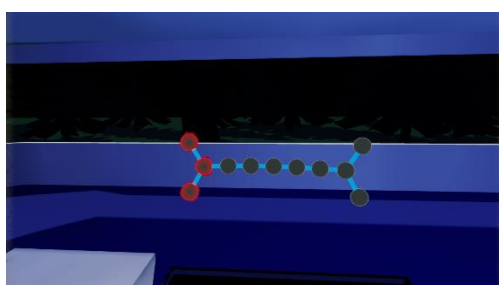
Trin 1: Find "tilføj elektrode" værktøjet → før en af dine virtuelle hænder frem til værktøjet, til det lyser op → tag fat i værktøjet ved brug af pegefingern(5).



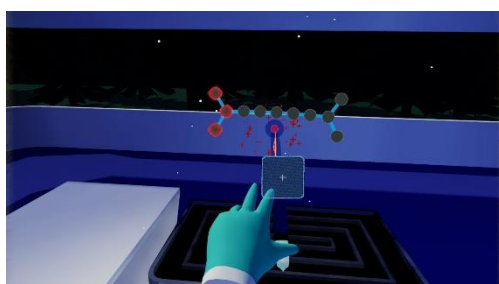
Trin 2: Peg spidsen af værktøjet på det atom, som du vil anvende som elektrode. Elektroden vil lyse op, og du kan trykke på det med din pegefinger(5).



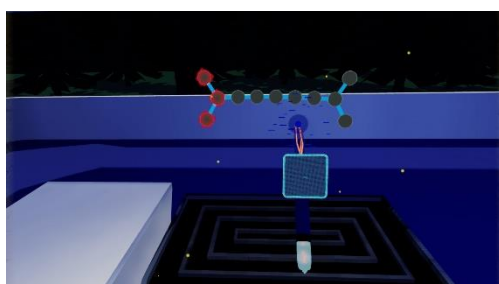
Trin 3: Hvis du vil anvende flere atomer som elektroder, skal atomerne være forbundet med hinanden.



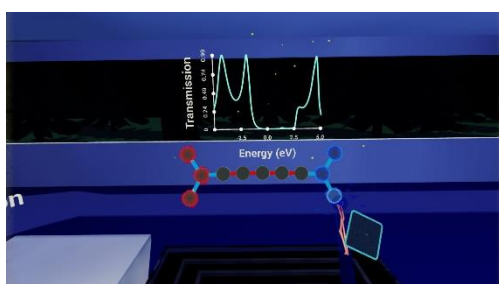
Trin 4: billedet viser her, at de 3 yderste atomer er valgt som plus elektroder.



Trin 5: For at ændre fortegn på elektrodeværktøjet skal du føre din anden hånd på den store knap på værktøjet og trykke med din pegefinger(5).



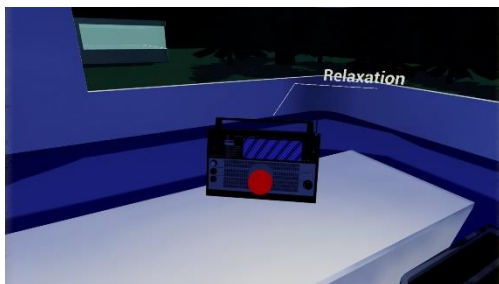
Trin 6: Den store knap viser fortegnet på elektrodeværktøjet som minus og du kan nu vælge, hvilke atomer, der skal være minuselektroder.



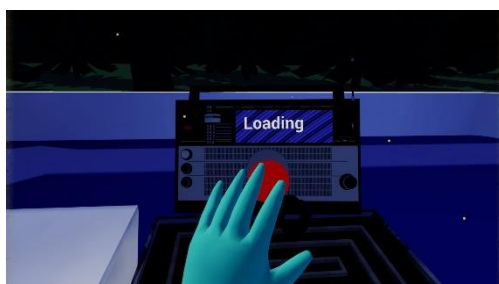
Trin 7: Når du har valgt dine atomer med positive og negative elektroder, vil der vise sig en graf, som beskriver konduktansen i molekylet ved forskellige spændinger.

#### 2.2.2.7 Relakser strukturer

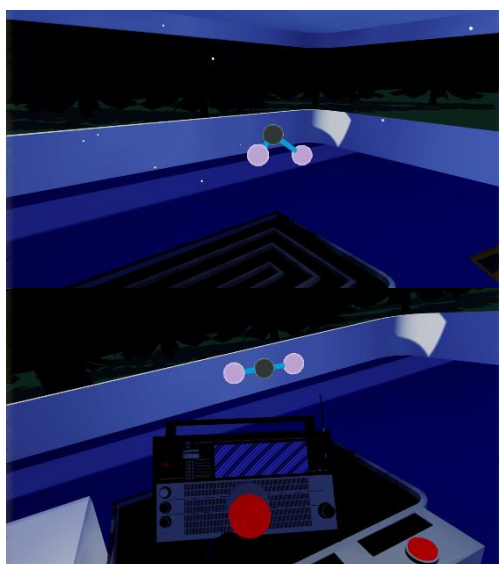
Dette værktøj anvender du, når du skal relaksere dine molekyler til en lavere energi. Relakseringen medfører, at bindingslængder og vinkler justeres til en mere korrekt form.



Trin 1: Find "relaksationsværktøjet" → før en af dine virtuelle hænder frem til værktøjet, til det lyser op → tag fat i værktøjet ved brug af pegefingern(5).



Trin 2: Før din anden hånd over den røde knap på værktøjet for at starte simuleringen.



Billedet viser CO<sub>2</sub> før relaksation.

### 2.2.3 Simuleringer

I følgende afsnit vil vi gennemgå forskellige simuleringer, der er mulighed for i NanoBattVR.

#### 2.2.3.1 Energiminimering (relaxation)

Energiminimering er en simulering, hvor den samlede energi af molekylet/molekylerne minimeres ved at ændre eksisterende bindings længder og vinkler. Dette resulterer i et molekyle, som fremstår mere naturligt.

Energiminimeringen er optimeret til at fungere for organiske og bioorganiske molekyler, samt visse metaller. Derfor er det molekyler med følgende grundstoffer og ioner, der kan simuleres med energiminimeringen:

- Grundstoffer: C, H, N, O, F, Si, P, S, Cl, Br & I.
- Ioner: Fe<sup>+2</sup>, Fe<sup>+3</sup>, F<sup>-</sup>, Cl<sup>-</sup>, Br<sup>-</sup>, Li<sup>+</sup>, Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>, Zn<sup>+2</sup>, Ca<sup>+2</sup>, Cu<sup>+1</sup>, Cu<sup>+2</sup>, and Mg<sup>+2</sup>.

For at minimere energien af dit molekyle(r) skal du anvende værktøjet "relakser strukturer" (se afsnit 2.2.2.7).



Bemærk: for at opnå den optimale relaxering af dit molekyle(r), skal der ikke være atomer uden bindinger i laboratoriet, da dette vil forhindre værktøjet i at udføre simuleringen.

### 2.2.3.2 Mål konduktans i materialer

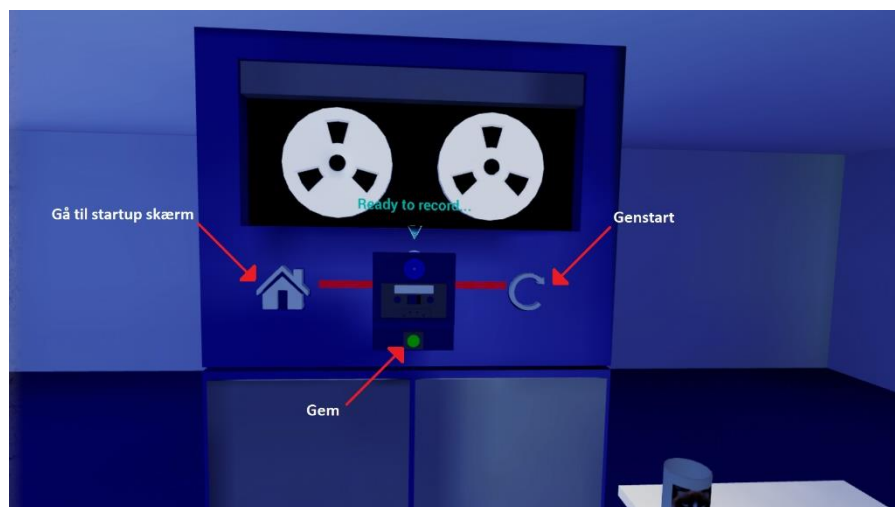
Konduktans er en fysisk egenskab, som beskriver materials evne til at lede strøm. For at måle konduktans er der brug for en positiv og en negativ elektrode. Ved at markere de atomer i et molekyle, der skal fungere som elektroder, kan der simuleres strøm gennem molekylet. En graf fremkommer for at vise konduktansen (transmission) ved forskellige spændinger (Energy), og bindingerne skifter farve for at visualisere amplituden af strøm, som løber mellem de enkelte atomer.

For at måle konduktansen skal du anvende værktøjet "Tilføj elektrode" (se afsnit 2.2.2.6).

Bemærk: Konduktans kan kun måles i et enkelt molekyle af gangen.

### 2.2.4 Sessionspanel - Gem/genstart/tilbage til startup-skærm

I det virtuelle laboratorie finder du et sessionspanel med tre knapper, se nedenstående billede.



#### 2.2.4.1 Gem

For at gemme din session, placer en af dine virtuelle hænder på den grønne knap (se ovenstående billede). Din session vil nu blive gemt og du kan arbejde videre, næste gang, du skal bruge NanoBattVR.

Bemærk: Når du gemmer din session, kan du finde dine gemte molekyler i molekylebiblioteket med samme navn som din session.

#### 2.2.4.2 Genstart

For at genstarte din session, placer en af dine virtuelle hænder på genstart knappen (se billedet ovenfor) to gange. Din session vil nu blive genstartet. Alle atomer og molekyler vil slettes og alle værktøjer vil blive placeret på deres oprindelige plads.

#### 2.2.4.3 Gå til startup-skærm

For at vende tilbage til startup-skærmen, placer en af dine virtuelle hænder på hjem-knappen (se billedet ovenfor) to gange. Du vil nu blive ført tilbage til startup-skærmen (se afsnit 2.1).

### 3 Tak til

**Mads Brandbyge**

Professor, Department of Physics  
Nanomaterials and Devices  
Center for Nanostructured Graphene

**Peter Bøggild**

Professor, Department of Physics  
Nanomaterials and Devices  
Center for Nanostructured Graphene

**Ivano Eligio Castelli**

Associate Professor,  
Department of Energy Conversion and Storage

