

# VISUALISER LES MAILLES DES CRISTAUX AVEC MINUSC

<http://www.librairiedemolecules.education.fr/outils/minusc/app/minusc.htm>



**ESPACE DE TRAVAIL**

L'onglet **Commandes** permet de choisir le mode d'affichage de la maille.

Mode de représentation des atomes dans la maille

Mode de représentation des liaisons dans la maille

Type de polyèdres formés dans la maille (choisir effacer)

Affichage ou non :  
-des axes y, x et z  
-des charges des atomes  
Affichage d'un fond noir ou blanc

**Commandes** | Fichier | Formule

**Afficher atomes**

 Sphères
  Sphères 20%
  Effacer

**Afficher liaisons**

 Bâtonnets
  Fil de fer
  Effacer

**Afficher polyèdres**

 Plein
  Translucide
  Creux
  Effacer

**Activer/Désactiver**

 Axes
  Charges
  Entrer Scripts
  Fond
  Réglages

Commandes | **Fichier** | Formule

Rechercher

- Anhydrite
- Antigorite
- Apatite
- Aragonite
- Argent
- Augite
- Biotite
- Calcite
- Chlorite

L'onglet **Fichier** permet de sélectionner le cristal à étudier

**FENETRE DE VISUALISATION DETERMINATION DU SYSTEME CRISTALLIN**

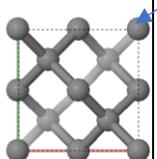
Déterminer le système cristallin :

Mesure des dimensions a, b et c de la maille  
Pour la maille cubique :  $a = b = c$

Mesure des dimensions des angles  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$  de la maille  
Pour la maille cubique :  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

{

NiCl<sub>2</sub> P<sub>4</sub> d<sub>3</sub> n #227  
 a=3.567Å  
 b=3.567Å  
 c=3.567Å  
 α=90.000°  
 β=90.000°  
 γ=90.000°



Diamant  
 Mailles : a: [input type="text"] b: [input type="text"] c: [input type="text"]  
 Sélectionner  
 Atomes : [input type="text"] - Tous Aucun

Visualisation dans l'espace de la maille à l'aide de la souris (clic droit)

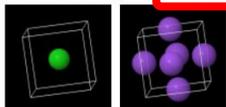
Possibilité d'ajouter les mailles dans les trois dimensions

Information sur la nature des atomes composant la maille

## CALCULER LE POURCENTAGE D'HYDRATATION / LA MASSE VOLUMIQUE ET LA COMPACITE

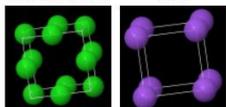
L'onglet Formule permet de calculer le nombre d'atomes de chaque type présent dans une maille et son pourcentage d'abondance en masse.

Commandes Fichier **Formule**



Intérieur de la maille

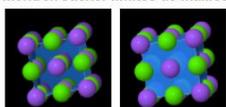
Faces



Arêtes

Sommet

Montrer/Cacher limites de mailles



Maille ouverte

Maille fermée

Compléter le tableau suivant :

Atome	I	F	A	S	Total	Masse	%
C							

Sélectionner l'onglet Formule.

Double-cliquer sur chaque case du tableau afin de la remplir. Pour chaque case, la fenêtre de visualisation n'affiche que les éléments à compter.

La colonne « total » est actualisée au fur et à mesure de la saisie.

Compléter le tableau suivant :

Atome	I	F	A	S	Total	Masse	%
Ca <sup>2+</sup>							
C <sup>4+</sup>							
O <sup>2-</sup>							

Masse volumique calculée : 0 g/cm<sup>3</sup>  
 Compacité calculée : 0 % (volume)  
 Pourcentage d'hydratation : 0 % (masse)

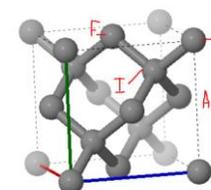
Signification des lettres de chaque colonne :

I : éléments situés à l'intérieur de la maille

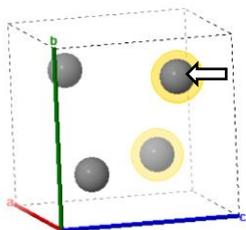
F : éléments situés sur les faces de la maille

A : éléments situés sur les arêtes de la maille

S : éléments situés sur les sommets de la maille



## COMPTER LES ATOMES DANS UNE MAILLE



Compteur : 2

Dans la fenêtre de visualisation :

Réaliser un clic droit sur chaque atome,

L'atome est alors mis en surbrillance,

Et le compteur en bas à droite de la fenêtre le comptabilise et l'additionne.

Recliquer sur l'atome pour le soustraire du total