## VISUALISATION DE STRUCTURES CRISTALLINES AVEC MINUSC

Accéder à MinUSc : http://www.librairiedemolecules.education.fr/outils/minusc/

Affichage du minéral sélectionné		Changer de cristal ou modifier le mode d'affichage	Déterminer la composition chimique d'un minéral : la formule cristalline et le pourcentage d'hydratation						
Informations sur la maille cristalline (s'efface avec la commande « Axes ») : HM: P 32 2 1 a=4.912Å b=4.912Å c=5.404Å $\alpha=90.000°$ $\beta=90.000°$ $\gamma=120.000°$ Nom du fichier affiché : Quartz		Choisir le minéral à afficher : Onglet « Fichier » Commandes Fichier Formule Afficher atomes Sphères Sphères 20% Effacer Afficher liaisons Difficher liaisons D	Ces fonctions sont accessibles après avoir cliqué sur l'onglet « Formule » Afin de remplir le tableau, c'est-à-dire d'indiquer le nombre d'atome observé dans la maille cristalline à l'Intérieur (colonne I), sur les Faces (F), les Arêtes (A) ou les Sommets (S) : Cliquer sur chaque case vide dans le tableau I, F, A, S. pour afficher les atomes correspondants. Chaque clic sur un atome, dans la fenêtre de visualisation, permet de sélectionner et de compter un atome. Affichage des données sous le tableau : Compléter le tableau suivant :						
Sélectionner des atomes sur lesquels les traitements sont effectués (par défaut Tous) : cliquer sur un atome choisi, plusieurs atomes ou tous les atomes. Mailles : a: 1 v b: 1 v C: 1 v Sélectionner Atomes : Q <sup>2-</sup> Si <sup>4+</sup> - Tous Aucun		Modifier le mode d'affichage des atomes ou des liaisons entre atomes : Onglet « Commandes » <b>Modifier</b> le fond en blanc	O2: Si4*   Masse volumique calculée : 0 g/cm³   Compacité calculée : 0 % (volume)   Pourcentage d'hydratation : 0 % (masse)   Le nombre total d'atome est actualisé en   prenant en compte la localisation des atomes   et leur proportion par site lorsque deux   atomes occupent la même position.   La formule cristalline peut être déduite de la   colonne « Total »   Le pourcentage d'hydratation apparaît à la fin   du comptage.					e) en atomes x e de la t à la fin	