

Visualisation des structures cristallines et rotations selon les angles d'Euler

ψ [°]

23



θ [°]

22



φ [°]

12



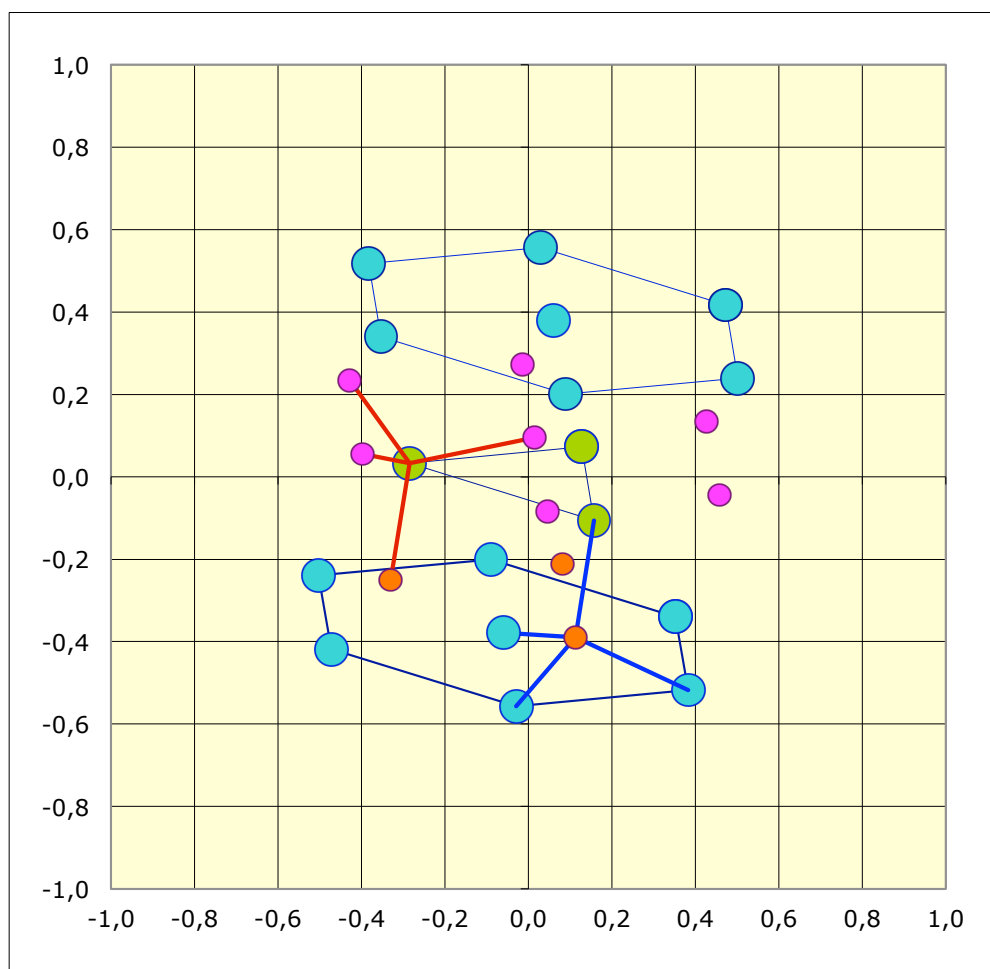
• L'orientation d'une base quelconque peut se faire par une rotation. Pour une base orthonormée, une méthode consiste à utiliser deux angles θ (nutation) et ψ (précession) pour orienter l'axe Oz , puis un angle φ (rotation propre) pour orienter l'axe Ox (et forcément en même temps l'axe Oy). Ces angles sont appelés "angles d'Euler".

• Pour une visualisation plus pratique, dans le cas envisagé ici, il est préférable de dessiner la maille dans une position centrée sur l'origine.

• Ici on choisit le repère initial (avant rotation) avec Ox vers l'avant et Oy vers la droite.

a h			Rotation φ autour de Oz			Rotation θ autour de Oy_1			Rotation ψ autour de Oz_2		
0,50	0,41		x₁	y₁	z₁	x₂	y₂	z₂	x₃	y₃	z₃
		x y z									
		0,00 0,00 -0,41	0,00	0,00	-0,41	-0,15	0,00	-0,38	-0,14	-0,06	-0,38
		0,00 0,50 -0,41	-0,10	0,49	-0,41	-0,25	0,49	-0,34	-0,42	0,35	-0,34
		-0,43 0,25 -0,41	-0,48	0,15	-0,41	-0,59	0,15	-0,20	-0,61	-0,09	-0,20
		-0,43 -0,25 -0,41	-0,37	-0,33	-0,41	-0,50	-0,33	-0,24	-0,33	-0,50	-0,24
		0,00 -0,50 -0,41	0,10	-0,49	-0,41	-0,06	-0,49	-0,42	0,14	-0,47	-0,42
		0,43 -0,25 -0,41	0,48	-0,15	-0,41	0,29	-0,15	-0,56	0,33	-0,03	-0,56
		0,43 0,25 -0,41	0,37	0,33	-0,41	0,19	0,33	-0,52	0,05	0,38	-0,52
		0,00 0,50 -0,41	-0,10	0,49	-0,41	-0,25	0,49	-0,34	-0,42	0,35	-0,34
		-0,14 0,25 0,00	-0,19	0,21	0,00	-0,18	0,21	0,07	-0,25	0,13	0,07
		-0,14 -0,25 0,00	-0,09	-0,27	0,00	-0,08	-0,27	0,03	0,03	-0,29	0,03
		0,29 0,00 0,00	0,28	0,06	0,00	0,26	0,06	-0,11	0,22	0,16	-0,11
		-0,14 0,25 0,00	-0,19	0,21	0,00	-0,18	0,21	0,07	-0,25	0,13	0,07
		0,00 0,00 0,41	0,00	0,00	0,41	0,15	0,00	0,38	0,14	0,06	0,38
		0,00 0,50 0,41	-0,10	0,49	0,41	0,06	0,49	0,42	-0,14	0,47	0,42
		-0,43 0,25 0,41	-0,48	0,15	0,41	-0,29	0,15	0,56	-0,33	0,03	0,56
		-0,43 -0,25 0,41	-0,37	-0,33	0,41	-0,19	-0,33	0,52	-0,05	-0,38	0,52
		0,00 -0,50 0,41	0,10	-0,49	0,41	0,25	-0,49	0,34	0,42	-0,35	0,34
		0,43 -0,25 0,41	0,48	-0,15	0,41	0,59	-0,15	0,20	0,61	0,09	0,20
		0,43 0,25 0,41	0,37	0,33	0,41	0,50	0,33	0,24	0,33	0,50	0,24
		0,00 0,50 0,41	-0,10	0,49	0,41	0,06	0,49	0,42	-0,14	0,47	0,42
		0,00 0,00 -0,41	0,00	0,00	-0,41	-0,15	0,00	-0,38	-0,14	-0,06	-0,38
		0,29 0,00 -0,31	0,28	0,06	-0,31	0,15	0,06	-0,39	0,11	0,11	-0,39
		0,43 -0,25 -0,41	0,48	-0,15	-0,41	0,29	-0,15	-0,56	0,33	-0,03	-0,56
		0,43 0,25 -0,41	0,37	0,33	-0,41	0,19	0,33	-0,52	0,05	0,38	-0,52
		0,29 0,00 -0,31	0,28	0,06	-0,31	0,15	0,06	-0,39	0,11	0,11	-0,39
		0,29 0,00 0,00	0,28	0,06	0,00	0,26	0,06	-0,11	0,22	0,16	-0,11
		-0,14 0,25 -0,31	-0,19	0,21	-0,31	-0,29	0,21	-0,21	-0,35	0,08	-0,21
		-0,14 -0,25 -0,31	-0,09	-0,27	-0,31	-0,20	-0,27	-0,25	-0,07	-0,33	-0,25
		0,29 0,00 -0,31	0,28	0,06	-0,31	0,15	0,06	-0,39	0,11	0,11	-0,39
		0,00 0,00 0,10	0,00	0,00	0,10	0,04	0,00	0,09	0,04	0,01	0,09
		0,00 0,50 0,10	-0,10	0,49	0,10	-0,06	0,49	0,13	-0,24	0,43	0,13
		-0,43 0,25 0,10	-0,48	0,15	0,10	-0,40	0,15	0,27	-0,43	-0,02	0,27
		-0,43 -0,25 0,10	-0,37	-0,33	0,10	-0,31	-0,33	0,23	-0,15	-0,43	0,23
		0,00 -0,50 0,10	0,10	-0,49	0,10	0,13	-0,49	0,06	0,32	-0,40	0,06
		0,43 -0,25 0,10	0,48	-0,15	0,10	0,48	-0,15	-0,08	0,50	0,04	-0,08
		0,43 0,25 0,10	0,37	0,33	0,10	0,38	0,33	-0,04	0,22	0,46	-0,04

0,00 -0,50 0,10	0,10 -0,49 0,10	0,13 -0,49 0,06	0,32 -0,40 0,06
-0,14 -0,25 0,00	-0,09 -0,27 0,00	-0,08 -0,27 0,03	0,03 -0,29 0,03
-0,14 -0,25 -0,31	-0,09 -0,27 -0,31	-0,20 -0,27 -0,25	-0,07 -0,33 -0,25
-0,43 -0,25 0,10	-0,37 -0,33 0,10	-0,31 -0,33 0,23	-0,15 -0,43 0,23
-0,14 -0,25 0,00	-0,09 -0,27 0,00	-0,08 -0,27 0,03	0,03 -0,29 0,03
0,00 0,00 0,10	0,00 0,00 0,10	0,04 0,00 0,09	0,04 0,01 0,09



• Dans la wurtzite, les Fe^{2+} occupent la moitié des interstices tétraédriques d'un réseau h.c. d'ions S^{2-} , mais réciproquement ceux-ci sont disposés en un réseau h.c. dont les ions Fe^{2+} occupent la moitié des sites tétraédriques.

• Exercices possibles :

- ◊ la fausse perspective utilisée ne donne pas d'effet de profondeur ; ajouter un réglage de profondeur ;
- ◊ pour éviter la programmation "encombrante" des trois rotations successives dans des cellules du tableau, définir pour cela trois fonctions dans un module Visual-Basic ;
- ◊ les angles d'Euler ne correspondent pas forcément à la méthode la plus pratique de rotation ; programmer avec une décomposition en rotations selon les axes Ox , Oy et Oz .