

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**
0,50 0,41

Rotation φ
autour de Oz

Rotation θ
autour de Oy₁

Rotation ψ
autour de Oz₂

x	y	z
0,00	0,00	-0,41
0,00	0,50	-0,41
-0,43	0,25	-0,41
-0,43	-0,25	-0,41
0,00	-0,50	-0,41
0,43	-0,25	-0,41
0,43	0,25	-0,41
0,00	0,50	-0,41
-0,14	0,25	0,00
-0,14	-0,25	0,00
0,29	0,00	0,00
-0,14	0,25	0,00
0,00	0,00	0,41
0,00	0,50	0,41
-0,43	0,25	0,41
-0,43	-0,25	0,41
0,00	-0,50	0,41
0,43	-0,25	0,41
0,43	0,25	0,41
0,00	0,50	0,41

x ₁	y ₁	z ₁
0,00	0,00	-0,41
-0,10	0,49	-0,41
-0,48	0,15	-0,41
-0,37	-0,33	-0,41
0,10	-0,49	-0,41
0,48	-0,15	-0,41
0,37	0,33	-0,41
-0,10	0,49	-0,41
-0,19	0,21	0,00
-0,09	-0,27	0,00
0,28	0,06	0,00
-0,19	0,21	0,00
0,00	0,00	0,41
-0,10	0,49	0,41
-0,48	0,15	0,41
-0,37	-0,33	0,41
0,10	-0,49	0,41
0,48	-0,15	0,41
0,37	0,33	0,41
-0,10	0,49	0,41

x ₂	y ₂	z ₂
-0,15	0,00	-0,38
-0,25	0,49	-0,34
-0,59	0,15	-0,20
-0,50	-0,33	-0,24
-0,06	-0,49	-0,42
0,29	-0,15	-0,56
0,19	0,33	-0,52
-0,25	0,49	-0,34
-0,18	0,21	0,07
-0,08	-0,27	0,03
0,26	0,06	-0,11
-0,18	0,21	0,07
0,15	0,00	0,38
0,06	0,49	0,42
-0,29	0,15	0,56
-0,19	-0,33	0,52
0,25	-0,49	0,34
0,59	-0,15	0,20
0,50	0,33	0,24
0,06	0,49	0,42

x ₃	y ₃	z ₃
-0,14	-0,06	-0,38
-0,42	0,35	-0,34
-0,61	-0,09	-0,20
-0,33	-0,50	-0,24
0,14	-0,47	-0,42
0,33	-0,03	-0,56
0,05	0,38	-0,52
-0,42	0,35	-0,34
-0,25	0,13	0,07
0,03	-0,29	0,03
0,22	0,16	-0,11
-0,25	0,13	0,07
0,14	0,06	0,38
-0,14	0,47	0,42
-0,33	0,03	0,56
-0,05	-0,38	0,52
0,42	-0,35	0,34
0,61	0,09	0,20
0,33	0,50	0,24
-0,14	0,47	0,42

x	y	z
0,00	0,00	-0,41
0,29	0,00	-0,31
0,43	-0,25	-0,41
0,43	0,25	-0,41
0,00	-0,50	0,41
-0,14	0,25	-0,41
0,29	0,00	-0,31
0,29	0,00	0,00

x ₁	y ₁	z ₁
0,00	0,00	-0,41
0,28	0,06	-0,31
0,48	-0,15	-0,41
0,37	0,33	-0,41
0,28	0,06	-0,31
0,28	0,06	0,00

x ₂	y ₂	z ₂
-0,15	0,00	-0,38
0,15	0,06	-0,39
0,29	-0,15	-0,56
0,19	0,33	-0,52
0,15	0,06	-0,39
0,26	0,06	-0,11

x ₃	y ₃	z ₃
-0,14	-0,06	-0,38
0,11	0,11	-0,39
0,33	-0,03	-0,56
0,05	0,38	-0,52
0,11	0,11	-0,39
0,22	0,16	-0,11

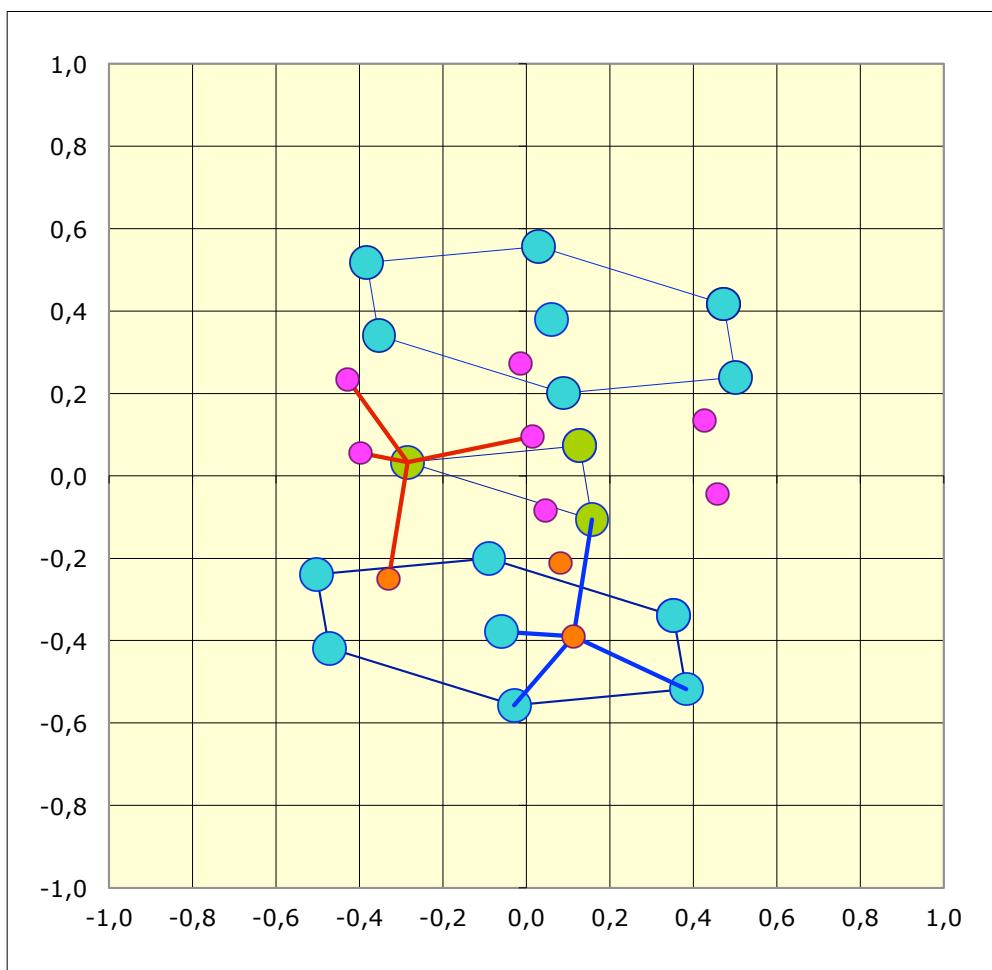
x	y	z
-0,14	0,25	-0,31
-0,14	-0,25	-0,31
0,29	0,00	-0,31
0,00	0,00	0,10
0,00	0,50	0,10
-0,43	0,25	0,10
-0,43	-0,25	0,10
0,00	-0,50	0,10
0,43	-0,25	0,10
0,43	0,25	0,10

x ₁	y ₁	z ₁
-0,19	0,21	-0,31
-0,09	-0,27	-0,31
0,28	0,06	-0,31
0,00	0,00	0,10
-0,10	0,49	0,10
-0,48	0,15	0,10
-0,37	-0,33	0,10
0,10	-0,49	0,10
0,48	-0,15	0,10
0,37	0,33	0,10

x ₂	y ₂	z ₂
-0,29	0,21	-0,21
-0,20	-0,27	-0,25
0,15	0,06	-0,39
0,04	0,00	0,09
-0,06	0,49	0,13
-0,40	0,15	0,27
-0,31	-0,33	0,23
0,13	-0,49	0,06
0,48	-0,15	-0,08
0,38	0,33	-0,04

x ₃	y ₃	z ₃
-0,35	0,08	-0,21
-0,07	-0,33	-0,25
0,11	0,11	-0,39
0,04	0,01	0,09
-0,24	0,43	0,13
-0,43	-0,02	0,27
-0,15	-0,43	0,23
0,32	-0,40	0,06
0,50	0,04	-0,08
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.