Facettes des cristaux

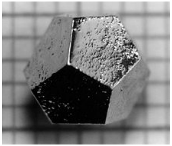
P. Pansu, Université Paris-Sud

18 septembre 2014

2014, c'est l'Année Internationale de la Cristallographie.
La cristallographie, c'est 23 prix Nobel de chimie, dont un mathématicien (H. Hauptmann, Nobel 1985).

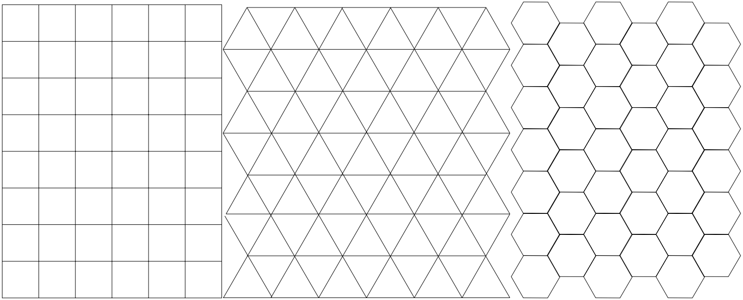
2014, c'est l'Année Internationale de la Cristallographie.
La cristallographie, c'est 23 prix Nobel de chimie, dont un mathématicien (H. Hauptmann, Nobel 1985).

Le Kafemath d'aujourd'hui est relié au prix Nobel 2011, décerné à Daniel Shechtman, chimiste israélien, pour la découverte, en 1982, des *quasicristaux*.

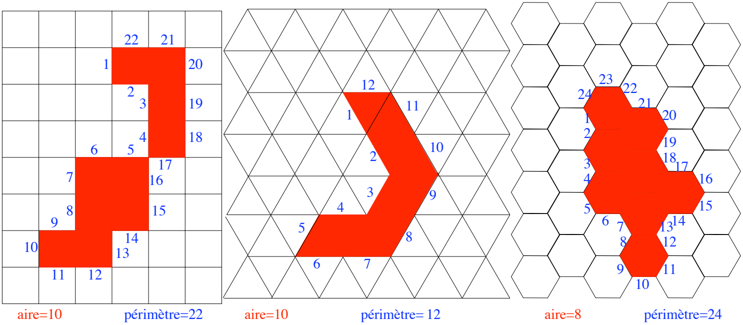


Il s'agit de matériaux (alliages de plusieurs métaux) qui prennent, à l'équilibre, des formes polyédrales, mais qui admettent des symétries interdites aux cristaux. Qu'ont à en dire les maths ?

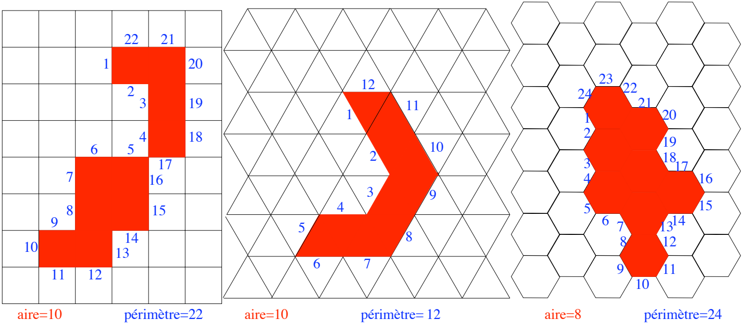
Sur un plateau de jeu, on constitue une forme en disposant A pièces. Le *périmètre* de la forme est le nombre d'arêtes externes, i.e. qui ne sont pas situées entre deux pièces. On appelle A l'*aire* de la forme.



Sur un plateau de jeu, on constitue une forme en disposant A pièces. Le *périmètre* de la forme est le nombre d'arêtes externes, i.e. qui ne sont pas situées entre deux pièces. On appelle A l'*aire* de la forme.

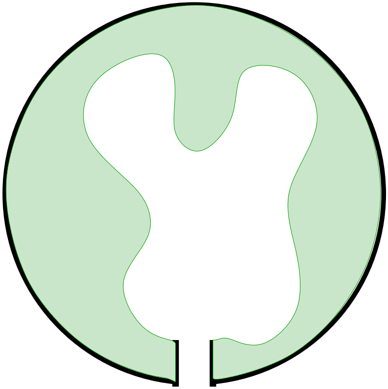


Sur un plateau de jeu, on constitue une forme en disposant A pièces. Le *périmètre* de la forme est le nombre d'arêtes externes, i.e. qui ne sont pas situées entre deux pièces. On appelle A l'*aire* de la forme.

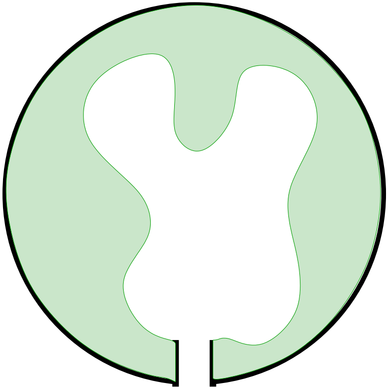


But du jeu : trouver la forme qui, à aire donnée, minimise le périmètre.

Quelle est la forme que prend une ficelle, aux extrémités fixées, qui limite un film de savon plan ?



Quelle est la forme que prend une ficelle, aux extrémités fixées, qui limite un film de savon plan ?



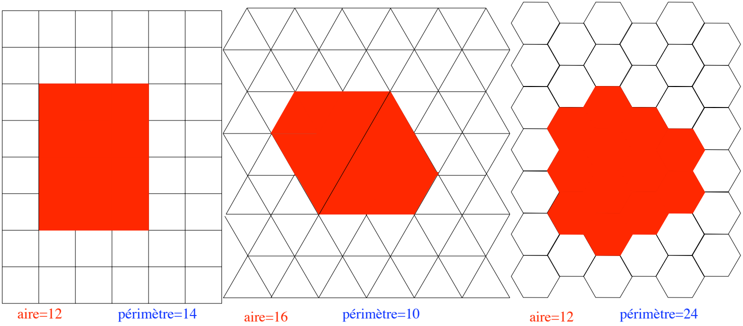
La réponse se trouve dans l'*Enéïde* de Virgile (1er siècle avant notre ère) .

Et les gouttes ? Pour C. F. Gauss (1830), en l'absence de gravité, l'énergie d'une goutte est proportionnelle à l'aire de la surface.

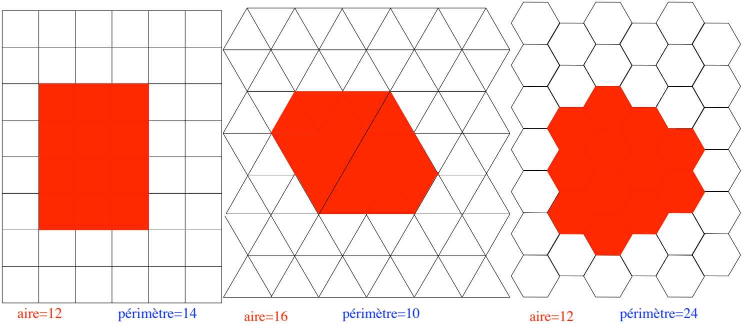
Et les gouttes ? Pour C. F. Gauss (1830), en l'absence de gravité, l'énergie d'une goutte est proportionnelle à l'aire de la surface. D'où la forme sphérique des gouttes en apesanteur :

Pareil pour les bulles de savon.

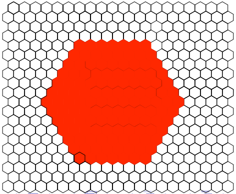
Solutions des jeux isopérimétriques.

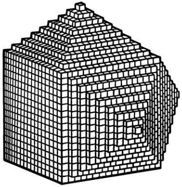


Solutions des jeux isopérimétriques.



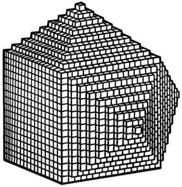
Les solutions pour des aires plus grandes ont le même aspect, les formes deviennent approximativement carrées (dans le cas du damier), et hexagonales (dans les cas des plateaux à triangles et à hexagones).





Ca marche aussi pour des jeux similaires en 3 dimensions.

(Abbé R.J. Haüy, 1784)

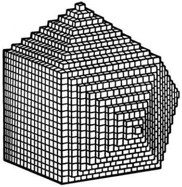


Ca marche aussi pour des jeux similaires en 3 dimensions.

(Abbé R.J. Haüy, 1784)

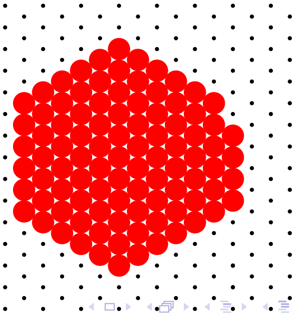
Objection : avec des pièces rondes, la forme optimale serait un rond ?

Ca marche aussi pour des jeux similaires en 3 dimensions.

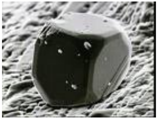


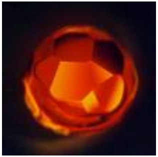
(Abbé R.J. Haüy, 1784)

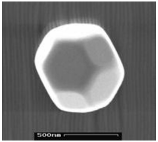
Objection : avec des pièces rondes, la forme optimale serait un rond ?
Non ! C'est la position des centres des pièces qui compte.



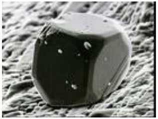
Cela fait penser aux cristaux qu'on trouve dans la nature.

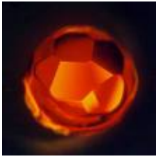
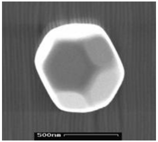






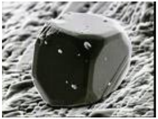
Cela fait penser aux cristaux qu'on trouve dans la nature.

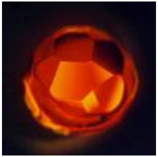
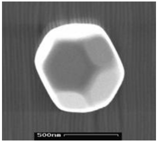


Abbé R.J. Haüy (1784) : cristal = polyèdres identiques juxtaposés ?

Cela fait penser aux cristaux qu'on trouve dans la nature.

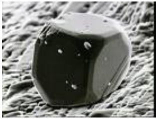


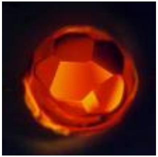
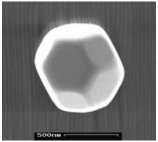



Abbé R.J. Haüy (1784) : cristal =
polyèdres identiques juxtaposés ? NON.

Périodicité à l'échelle microscopique ?

Cela fait penser aux cristaux qu'on trouve dans la nature.

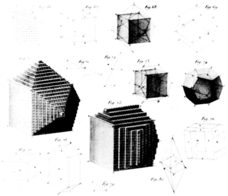


Abbé R.J. Haüy (1784) : cristal = polyèdres identiques juxtaposés ? NON.

Périodicité à l'échelle microscopique ? OUI.

Naissance de la cristallographie mathématique.



En 1885, Pierre Curie énonce un principe qui unifie gouttes et cristaux.

En 1885, Pierre Curie énonce un principe qui unifie gouttes et cristaux.

Dans un cristal, toutes les directions n'ont pas le même coût en énergie : la **tension superficielle** dépend de la direction.

En 1885, Pierre Curie énonce un principe qui unifie gouttes et cristaux.

Dans un cristal, toutes les directions n'ont pas le même coût en énergie : la **tension superficielle** dépend de la direction.

Cela suffit pour favoriser l'apparition de facettes.

Exemple (Curie, 1885)

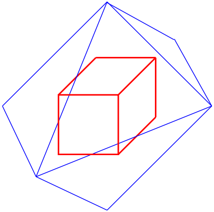
Supposons que le matériau favorise deux types de facettes, parallèles à celles d'un cube (resp. à celles d'un octaèdre), avec tensions superficielles A et B. Alors la forme d'équilibre dépend du rapport A/B.

- si $A/B \leq 1/\sqrt{3}$, le polyèdre optimal est un cube ;
- si $1/\sqrt{3} < A/B < \sqrt{3}$, le polyèdre optimal est un cuboctaèdre ;
- si $A/B \geq \sqrt{3}$, le polyèdre optimal est un octaèdre.

Exemple (Curie, 1885)

Supposons que le matériau favorise deux types de facettes, parallèles à celles d'un cube (resp. à celles d'un octaèdre), avec tensions superficielles A et B. Alors la forme d'équilibre dépend du rapport A/B.

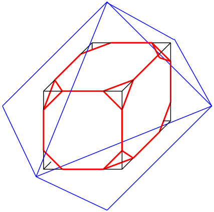
- si $A/B \leq 1/\sqrt{3}$, le polyèdre optimal est un cube ;
- si $1/\sqrt{3} < A/B < \sqrt{3}$, le polyèdre optimal est un cuboctaèdre ;
- si $A/B \geq \sqrt{3}$, le polyèdre optimal est un octaèdre.



Exemple (Curie, 1885)

Supposons que le matériau favorise deux types de facettes, parallèles à celles d'un cube (resp. à celles d'un octaèdre), avec tensions superficielles A et B. Alors la forme d'équilibre dépend du rapport A/B.

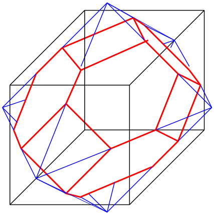
- si $A/B \leq 1/\sqrt{3}$, le polyèdre optimal est un cube ;
- si $1/\sqrt{3} < A/B < \sqrt{3}$, le polyèdre optimal est un cuboctaèdre ;
- si $A/B \geq \sqrt{3}$, le polyèdre optimal est un octaèdre.



Exemple (Curie, 1885)

Supposons que le matériau favorise deux types de facettes, parallèles à celles d'un cube (resp. à celles d'un octaèdre), avec tensions superficielles A et B. Alors la forme d'équilibre dépend du rapport A/B.

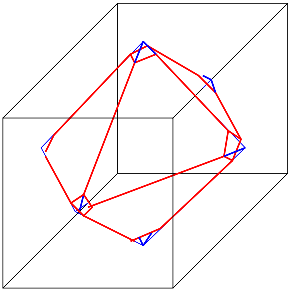
- si $A/B \leq 1/\sqrt{3}$, le polyèdre optimal est un cube ;
- si $1/\sqrt{3} < A/B < \sqrt{3}$, le polyèdre optimal est un cuboctaèdre ;
- si $A/B \geq \sqrt{3}$, le polyèdre optimal est un octaèdre.



Exemple (Curie, 1885)

Supposons que le matériau favorise deux types de facettes, parallèles à celles d'un cube (resp. à celles d'un octaèdre), avec tensions superficielles A et B. Alors la forme d'équilibre dépend du rapport A/B.

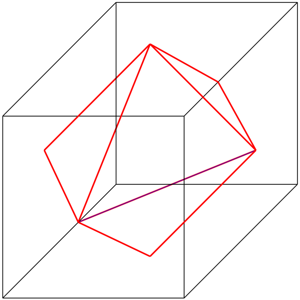
- si $A/B \leq 1/\sqrt{3}$, le polyèdre optimal est un cube ;
- si $1/\sqrt{3} < A/B < \sqrt{3}$, le polyèdre optimal est un cuboctaèdre ;
- si $A/B \geq \sqrt{3}$, le polyèdre optimal est un octaèdre.



Exemple (Curie, 1885)

Supposons que le matériau favorise deux types de facettes, parallèles à celles d'un cube (resp. à celles d'un octaèdre), avec tensions superficielles A et B. Alors la forme d'équilibre dépend du rapport A/B.

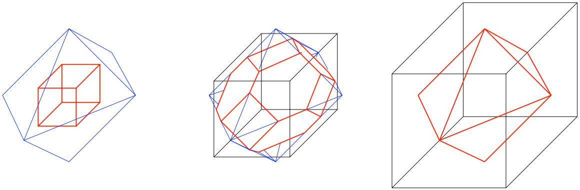
- si $A/B \leq 1/\sqrt{3}$, le polyèdre optimal est un cube ;
- si $1/\sqrt{3} < A/B < \sqrt{3}$, le polyèdre optimal est un cuboctaèdre ;
- si $A/B \geq \sqrt{3}$, le polyèdre optimal est un octaèdre.



Exemple (Curie, 1885)

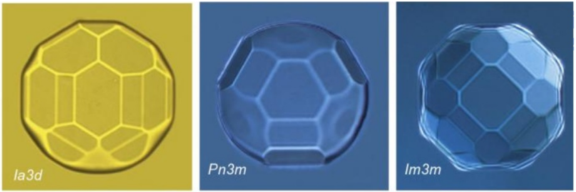
Supposons que le matériau favorise deux types de facettes, parallèles à celles d'un cube (resp. à celles d'un octaèdre), avec tensions superficielles A et B. Alors la forme d'équilibre dépend du rapport A/B.

- si $A/B \leq 1/\sqrt{3}$, le polyèdre optimal est un cube ;
- si $1/\sqrt{3} < A/B < \sqrt{3}$, le polyèdre optimal est un cuboctaèdre ;
- si $A/B \geq \sqrt{3}$, le polyèdre optimal est un octaèdre.

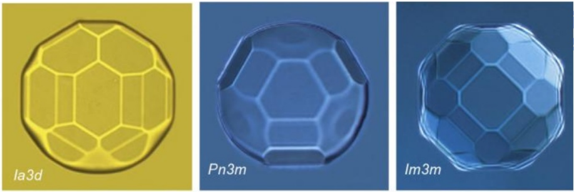


Les facettes, c'est donc seulement pour les solides ?

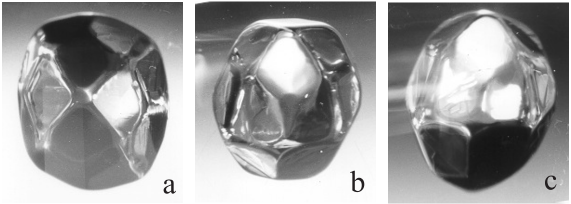
Les facettes, c'est donc seulement pour les solides ?
Non ! Voilà des cristaux liquides *(P. Pieranski)* :



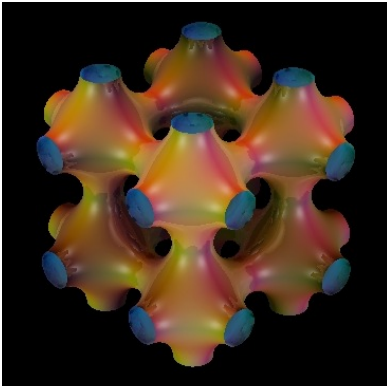
Les facettes, c'est donc seulement pour les solides ?
Non ! Voilà des cristaux liquides *(P. Pieranski)* :



Encore plus fort, des bulles d'air dans de l'eau savonneuse *(P. Sotta)* :



Dans ces liquides, il y aurait des empilements de micelles sphériques, ou des interfaces périodiques plus compliquées, comme celle-là :



La restriction cristallographique *(Haüy, 1822)*. En dimensions 2 et 3, si un arrangement périodique de points est conservé par une rotation ou un vissage, l'angle de rotation est nécessairement un multiple de 60^0 ou de 90^0.

La restriction cristallographique *(Hauÿ, 1822)*. En dimensions 2 et 3, si un arrangement périodique de points est conservé par une rotation ou un vissage, l'angle de rotation est nécessairement un multiple de 60^0 ou de 90^0.

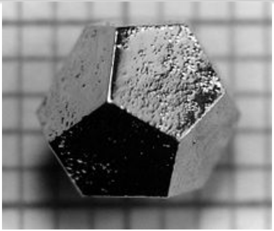
Alors pas de cristaux en forme d'icosaèdre.

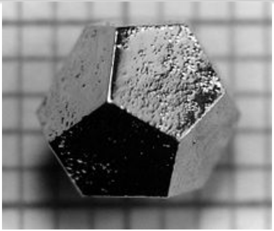
La restriction cristallographique *(Haüy, 1822)*. En dimensions 2 et 3, si un arrangement périodique de points est conservé par une rotation ou un vissage, l'angle de rotation est nécessairement un multiple de 60^0 ou de 90^0.

Alors pas de cristaux en forme d'icosaèdre.

Ni de dodécaèdre.

Si *(P. Canfield)* !

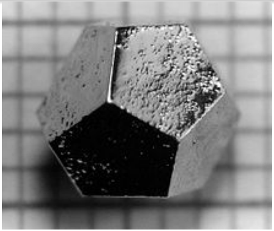




Si *(P. Canfield)* !

Il s'agit d'un **quasicristal**.

Et en forme d'icosaèdre ?



Si *(P. Canfield)* !

Il s'agit d'un **quasicristal**.

Et en forme d'icosaèdre ?

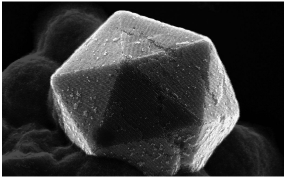
Aussi *(Bishop, Small 2009)* !

reviews B. A. Grzybowski et al.

Nanoscale interactions

Nanoscale Forces and Their Uses in Self-Assembly

*Kyle J. M. Bishop, Christopher E. Wilmer, Siowling Soh, and Bartosz A. Grzybowski**



From the Contents

The ability to assemble nanoscopic components into larger

La restriction cristallographique. En dimensions 2 et 3, si un arrangement périodique de points est conservé par une rotation ou un vissage, l'angle de rotation est nécessairement un multiple de $\pi/3$ ou de $\pi/2$.

La restriction cristallographique. En dimensions 2 et 3, si un arrangement périodique de points est conservé par une rotation ou un vissage, l'angle de rotation est nécessairement un multiple de $\pi/3$ ou de $\pi/2$.

Il faut admettre que l'état cristallin n'est pas caractérisé par la périodicité, mais par d'autres propriétés. En 1992, l'Union Internationale de Cristallographie a retenu la suivante.

Un cristal est un solide dont la figure de diffraction est formée de taches.

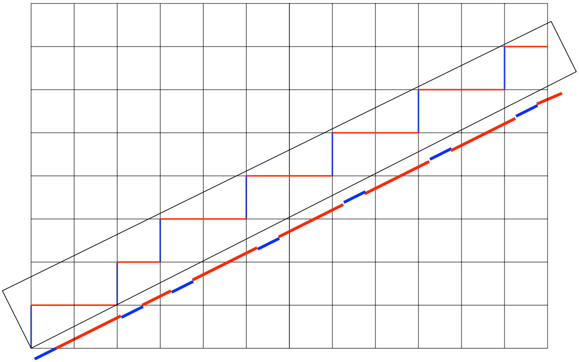
La restriction cristallographique. En dimensions 2 et 3, si un arrangement périodique de points est conservé par une rotation ou un vissage, l'angle de rotation est nécessairement un multiple de $\pi/3$ ou de $\pi/2$.

Il faut admettre que l'état cristallin n'est pas caractérisé par la périodicité, mais par d'autres propriétés. En 1992, l'Union Internationale de Cristallographie a retenu la suivante.

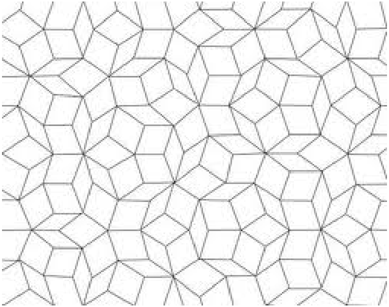
Un cristal est un solide dont la figure de diffraction est formée de taches.

La quasipériodicité aussi peut produire des cristaux. Un phénomène dans l'espace de dimension 3 est *quasipériodique* si c'est la trace, sur un sous-espace de dimension 3, d'un phénomène périodique se déroulant dans une dimension supérieure.

Pour obtenir un pavage non périodique de la droite, on peut prendre une tranche oblique dans le plan pavé par des carrés, et projeter sur un plan les sommets contenus dans la tranche.

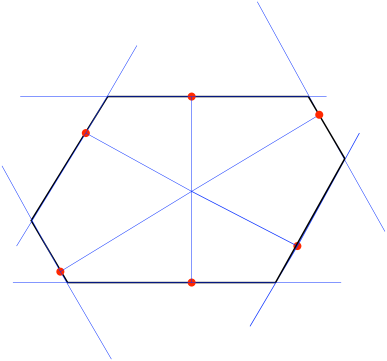


Le pavage non périodique ci-dessous a été obtenu comme suit. On a pris une tranche oblique dans l'espace de dimension 4 pavé par des cubes, et projeté sur un plan les sommets contenus dans la tranche.



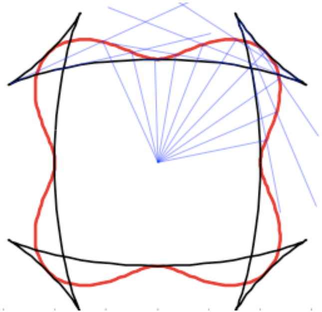
Le même procédé appliqué en dimension 6 fournit des pavages non périodiques de l'espace de dimension 3 dont les figures de diffraction sont formés de taches, et qui admettent des rotations d'angle $2\pi/5$. Ce sont de bons candidats pour modéliser un *quasicristal*.

D'après G. Wulff (1901), lorsque la forme d'équilibre est un polyèdre, il existe un point dont la distance à chaque face est proportionnelle à la tension superficielle de la face.



Comme dans les exemples traités par Curie, on suppose les directions des faces du cristal connues à l'avance. Les points rouges indiquent les directions des normales aux faces. On a placé chaque point à une distance de l'origine égale à la tension superficielle de la face. On trace les perpendiculaires. Elles délimitent un polygone, c'est la forme d'équilibre.

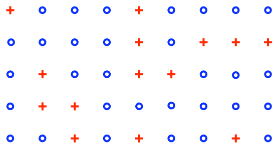
Plus généralement, G. Wulff a décrit comment déterminer la forme du cristal quand la tension superficielle est connue dans toutes les directions.

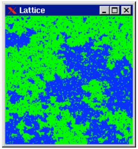


Chaque direction coupe la courbe rouge au point situé à distance de l'origine égale à la tension superficielle de la direction. On trace les perpendiculaires. Elles délimitent un polygone curviligne, c'est la forme d'équilibre.

Au XXème siècle apparaît l'idée qu'un cristal fond progressivement. Quand la température s'élève jusqu'à la température de fusion, la tension superficielle varie, jusqu'à devenir celle de la phase liquide. La justification à partir d'un modèle microscopique est du ressort de la physique statistique et des probabilités.

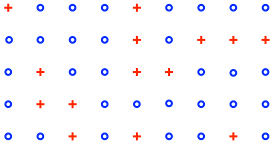
Au XXème siècle apparaît l'idée qu'un cristal fond progressivement. Quand la température s'élève jusqu'à la température de fusion, la tension superficielle varie, jusqu'à devenir celle de la phase liquide. La justification à partir d'un modèle microscopique est du ressort de la physique statistique et des probabilités.
Le *modèle d'Ising* sur un réseau périodique consiste à tirer au hasard des configurations qui spécifient, pour chaque site du réseau, si un atome y est présent ou non. Le choix de probabilité (Boltzmann) modélise une force répulsive entre atomes, qui augmente avec la température.

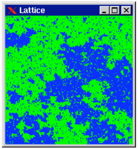




Au XXème siècle apparaît l'idée qu'un cristal fond progressivement. Quand la température s'élève jusqu'à la température de fusion, la tension superficielle varie, jusqu'à devenir celle de la phase liquide. La justification à partir d'un modèle microscopique est du ressort de la physique statistique et des probabilités.

Le *modèle d'Ising* sur un réseau périodique consiste à tirer au hasard des configurations qui spécifient, pour chaque site du réseau, si un atome y est présent ou non. Le choix de probabilité (Boltzmann) modélise une force répulsive entre atomes, qui augmente avec la température.





Théorème

(Nombreux auteurs, années 1990 en dimension 2, années 2000 pour la dimension 3). *Au dessous de la température de fusion, si on impose une concentration forte, on voit se dessiner un îlot de matière dont la forme*