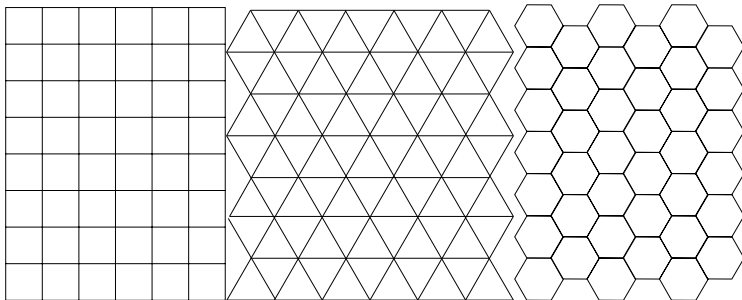


A la surface des cristaux

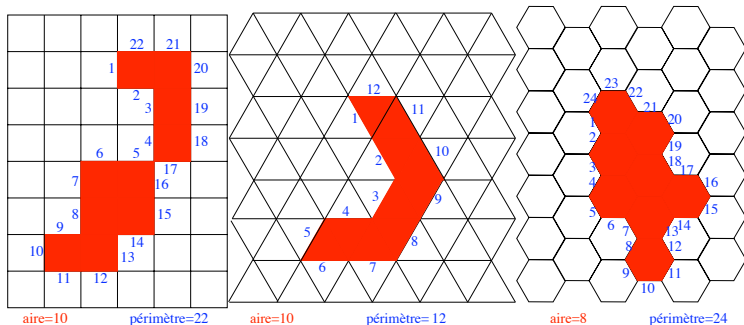
P. Pansu, Université Paris-Sud 11 et Ecole Normale Supérieure

4 novembre 2009

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.



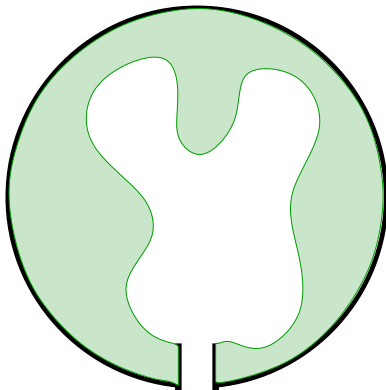
Sur un plateau de jeu, on constitue une forme en disposant A pièces. Le *périmètre* de la forme est le nombre d'arêtes externes, i.e. qui ne sont pas situées entre deux pièces. On appelle A l'aire de la forme.



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

Il s'agit de trois problèmes isopérimétriques *discrets*. On réduit facilement l'ensemble des formes en compétition à un ensemble fini.

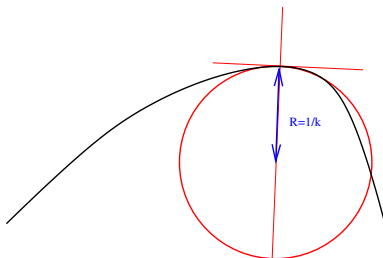
Quelle est la forme que prend une ficelle, aux extrémités fixées, qui limite un film de savon plan ?



Le film de savon cherche à rendre son aire la plus petite possible, donc l'aire à l'intérieur de la ficelle est la plus grande possible. La réponse se trouve dans l'*Enéïde* de Virgile (1er siècle avant notre ère) : la ficelle prend la forme d'un arc de cercle.

Le calcul différentiel permet d'écrire l'équation que doit satisfaire la courbe optimale. La traction exercée par le film de savon est équilibrée par une force élastique proportionnelle à la courbure de la courbe. La *courbure* d'une courbe plane est l'inverse du rayon de courbure.

Le *rayon de courbure* en un point est le rayon du cercle qui épouse le mieux la courbe en ce point, affecté du signe + ou - suivant que la courbe tourne à droite ou à gauche.

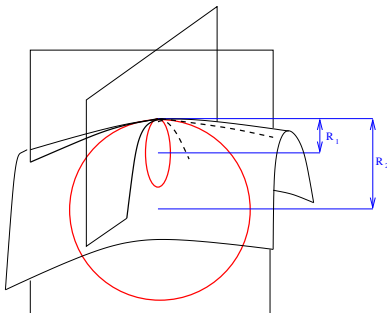


Une courbe plane à courbure constante est un arc de cercle.

Quelle est la forme que prend une bulle de savon ?

Une bulle est un film mince qui enferme une masse d'air fixée (mais un volume variable). Depuis L. Euler (1744), on sait écrire l'équation qui gouverne les bulles. L'air piégé à l'intérieur exerce une force (par unité de surface) qui est compensée par une force élastique proportionnelle à la courbure moyenne de la surface.

La *courbure moyenne* d'une surface en un point est la somme des courbures des sections par deux plans normaux perpendiculaires.



Comme la pression à l'intérieur (resp. à l'extérieur) est constante, la courbure moyenne doit être constante.

Quelle est la forme que prend une goutte liquide en l'absence de gravité ?

Une goutte liquide est un corps déformable mais incompressible. C. F. Gauss (1830) a montré que l'énergie d'une goutte comporte un terme proportionnel à l'aire de la surface. Comme il s'agit de minimiser l'aire à volume constant, la surface doit à nouveau avoir une courbure moyenne constante.

Gauss en déduit que la forme est sphérique.

Question

Une surface fermée à courbure moyenne constante est-elle toujours une sphère ?

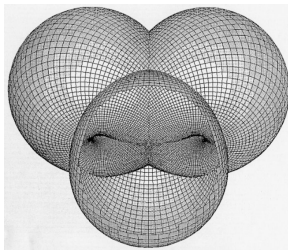
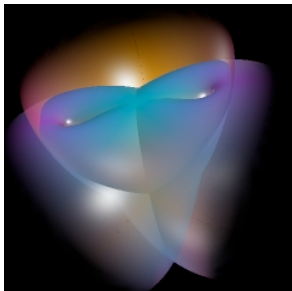
Théorème

H. Hopf (1951). *Une surface fermée à courbure moyenne constante, **qui peut être paramétrée par une sphère**, est une sphère.*

Théorème

A.D. Alexandrov (1958). *Une surface fermée à courbure moyenne constante, **sans auto-intersections**, est une sphère.*

Voilà deux vues d'une surface fermée à courbure moyenne constante, **avec auto-intersections**, découverte par H. Wente en 1984.



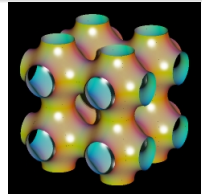
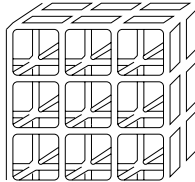
Cette surface est paramétrée par un *tore*.



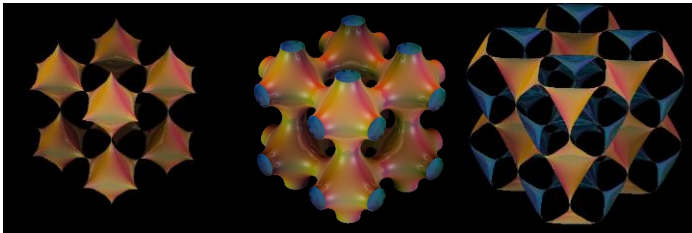
Question

A quoi les surfaces à courbure moyenne constante peuvent elle bien servir ?

Dans certains être vivants (vers marins), on observe à l'échelle microscopique des réseaux de tubulures ayant l'aspect de cages à grimper. Les biologistes ont été intéressés par la surface à courbure moyenne nulle ayant cet aspect découverte par H.A. Schwartz en 1890.



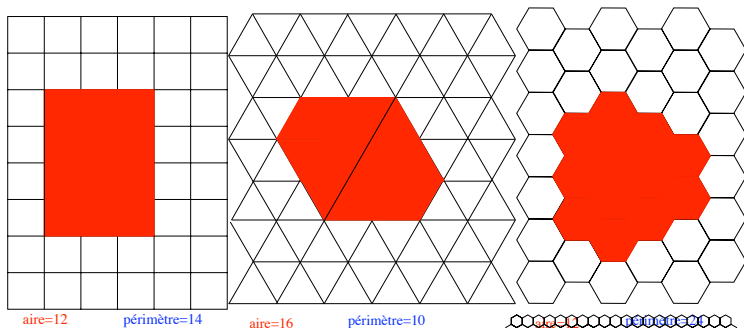
Au XXème siècle, il est apparu que cette surface appartenait à une famille à courbure moyenne constante, qui dégénère vers une collection périodique de sphères.



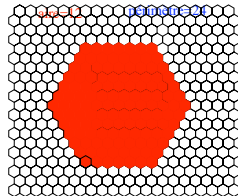
C'est un modèle pour la création ou la disparition d'un réseau de tubulures.



Voici des exemples de solutions des jeux isopérimétriques.



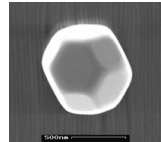
Les solutions pour des aires plus grandes ont le même aspect, les formes deviennent approximativement carrées (dans le cas du damier), et hexagonales (dans les cas des plateaux à triangles et à hexagones).



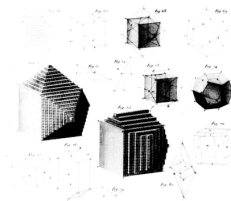
Théorème

(1999). *Les variantes tridimensionnelles de ces jeux donnent des résultats similaires : les solutions de grand volume prennent approximativement la forme de polyèdres.*

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



L'hypothèse que la matière cristallisée puisse être constituée de polyèdres identiques juxtaposés a été avancée par l'abbé R.J. Haüy (1784). Elle a été contestée, à juste titre. Mais l'idée d'une périodicité à l'échelle microscopique a été retenue. C'est le point de départ de la cristallographie mathématique.

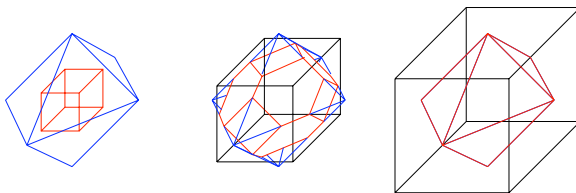


En 1885, P. Curie a énoncé un principe qui unifie gouttes et cristaux. Il suffit pour cela d'admettre une expression suffisamment générale de l'énergie de surface.

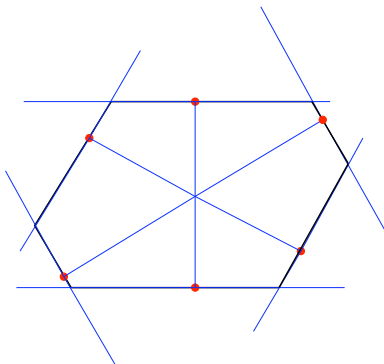
Exemple

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.

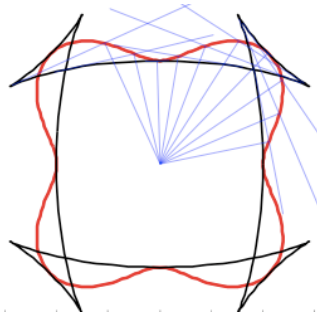


D'après G. Wulff (1901), lorsque la forme d'équilibre est un polyèdre, il existe un point dont la distance à chaque face est proportionnelle à la tension superficielle de la face.



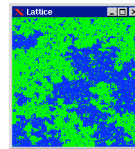
Comme dans les exemples traités par Curie, on suppose les directions des faces du cristal connues à l'avance. Les points rouges indiquent les directions des normales aux faces. On a placé chaque point à une distance de l'origine égale à la tension superficielle de la face. On trace les perpendiculaires.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

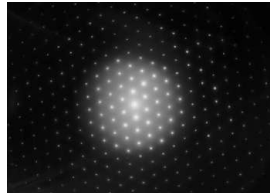
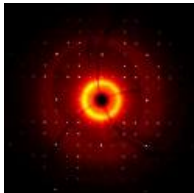
(Nombreux auteurs, années 1990 en dimension 2, années 2000 pour la dimension 3).
Au dessous de la température de fusion, si on impose une concentration forte, on voit se dessiner un îlot de matière dont la forme est donnée par la construction de Wulff, relativement à une fonction tension superficielle qui dépend de la température.

Proposition

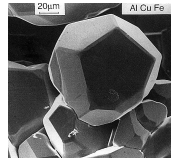
La restriction cristallographique. *En dimensions 2 et 3, si un arrangement périodique de points est conservé par une rotation ou un vissage, l'angle de rotation est nécessairement un multiple de $\pi/3$ ou de $\pi/2$.*

Preuve (Hauy, 1822). Dans une base de vecteurs de translation préservant l'arrangement, la matrice de la rotation est à coefficients entiers. Sa trace est un entier. Or, dans une base quelconque, la trace d'une rotation d'angle θ vaut $1 + 2 \cos(\theta)$. Donc $\cos(\theta) = 1, \frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}, -1$, $\theta = 0, \frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{2}, \frac{2\pi}{3}, \pi$.

Pendant deux siècles, cette règle a fait partie du bréviaire des cristallographes. La symétrie du cristal est reflétée par la *figure de diffraction* obtenue en éclairant le cristal par rayons X.



Alors comment expliquer que la figure de diffraction ci-dessous présente une symétrie d'ordre 5 ? Et le monocristal d'un alliage d'aluminium, de cuivre et de fer, à la forme dodécaédrale ?

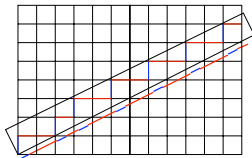


Il faut admettre que l'état cristallin n'est pas caractérisé par la périodicité, mais par d'autres propriétés. En 1992, l'Union Internationale de Cristallographie a retenu la suivante.

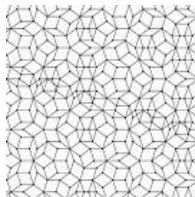
Un cristal est un solide dont la figure de diffraction est formée de taches.

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-contre 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 formées de taches, et qui admettent des rotations d'angle $2\pi/5$. Ce sont de bons candidats pour modéliser un *quasicristal*.