Exercices Alternatifs

Symétries des cristaux.

Sources et figures: `cristaux/`.

Version imprimable: `cristaux.pdf`

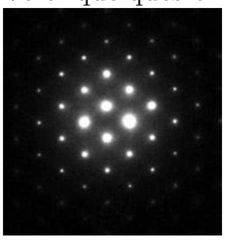
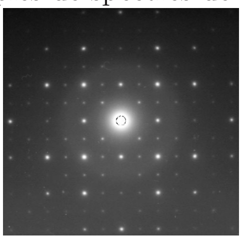
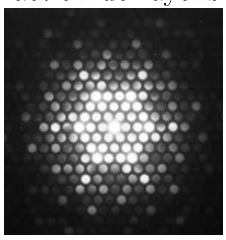
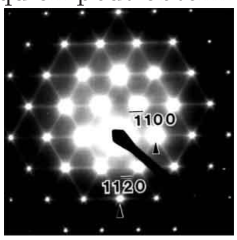
Algèbre linéaire. DEUG deuxième année. Angle pédagogique : *À quoi ça sert.*

Objectifs et commentaires. *Cet exercice permet de comprendre un joli résultat de cristallographie. Il fait appel aux changements de bases (les étudiants sont souvent gênés par le fait que deux bases puissent donner le même réseau).*

Un des résultats majeurs de la cristallographie est que ¡¡ l'ordre de symétrie ¿¿ d'un cristal ne peut être égal qu'à $1, 2, 3, 4$ ou 6. Qu'est-ce que c'est que ¡¡ l'ordre de symétrie ¿¿ d'un cristal ? L'ordre d'une rotation f est le plus petit entier $n > 0$ tel que $f^n = Id$. L'ordre de symétrie d'un cristal est l'ordre maximal d'une rotation qui préserve le cristal.

L'ordre de symétrie du cristal est une donnée importante car pour étudier un cristal, on regarde le spectre de diffraction d'un faisceau de rayons X qui traverse le cristal (ce spectre ressemble en général à un ensemble de points lumineux situés sur un réseau et dont l'intensité lumineuse décroit avec la distance à l'origine, voir figures), et l'ordre de symétrie du cristal peut se lire dans l'ordre de symétrie du spectre de diffraction.

Voici quelques exemples de spectres de diffraction de rayons X qu'on peut obtenir :

Le but de l'exercice est de démontrer le résultat de cristallographie ci-dessus pour des cristaux bidimensionnels (le résultat se démontre de la même façon pour les cristaux tridimensionels, mais il faut quelques connaissances sur les rotations de $\mathbb{R}^3$. Par contre l'ordre de symétrie peut aussi prendre les valeurs $5, 8$ et 12 en dimension 4 ou 5, et d'autres valeurs au fur et à mesure que la dimension augmente...)

On modélise un cristal bidimensionnel par l'ensemble des points de coordonnées entières (positives ou négatives) dans une certaine base $(\vec{u}, \vec{v})$ du plan.

a. Soit $(\vec{\imath}, \vec{\jmath})$ une base orthonormée. Faire des dessins des cristaux correspondant aux bases suivantes :

$$(\vec{u} = \vec{\imath}, \vec{v} = \vec{\jmath}), (\vec{u} = \vec{\imath}, \vec{v} = \frac{1}{2}\vec{\jmath}), (\vec{u} = \vec{\imath}, \vec{v} = \frac{1}{2}\vec{\imath} + \frac{\sqrt{3}}{2}\vec{\jmath}), (\vec{u} = \vec{\imath}, \vec{v} = \vec{\imath} + \vec{\jmath})$$

Trouver sur le dessin les rotations qui laissent invariants ces cristaux et donner l'ordre symétrie de ces cristaux.

b. Soit f une application linéaire qui préserve un cristal C. Montrer qu'il existe une base dans laquelle la matrice de f est à coefficients entiers.

c. Sachant qu'une rotation d'angle $\theta \in]-\pi, \pi]$ admet pour matrice $\begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$ dans une base orthonormée directe, montrer, en utilisant la trace que l'angle d'une rotation qui préserve un cristal apparaît forcément dans la liste $\theta \in \{0, \pi, \pm\pi/2, \pm 2\pi/3, \pm\pi/2, \pm\pi/3\}$. En déduire le résultat de cristallographie.

En particulier, un cristal bidimensionel ne peut pas être invariant par une rotation d'ordre 5. En dimension 4 et 5, la liste des ordres de symétries possibles s'agrandit et contient $5, 8, 12$. Dans les les années 80, on a trouvé certains matériaux ayant un ordre de symétrie égal à 5, qu'on appelle dorénavant des quasi-cristaux. Un des modèles de quasi-cristaux est la projection d'une tranche d'un *réseau* (i. e. l'ensemble des points à coordonnées entières dans une base) de dimension 4 ou plus dans l'espace de dimension 3.