

Travaux dirigés - Autour des quasi-cristaux - Correction

Alexis PONCET - GICS - 12 novembre 2014

1 Empilement compact de sphères

1. (a) Sur chacun des huit sommets du cube, il y a un atome. En considérant des cubes identiques qui se touchent, chaque atome est partagé par 8 cubes. La proportion d'atomes dans le cube est donc $N = 8 \times \frac{1}{8} = 1$.
 - (b) Deux atomes voisins (rayon R) se touchent par une arête du cube (longueur a), on a immédiatement $a = 2R$.
 - (c) Le volume d'une sphère est $V_{sphère} = \frac{4}{3}\pi R^3 = \frac{4}{3}\pi \left(\frac{a}{2}\right)^3 = \frac{\pi}{6}a^3$. Le volume du cube est $V_{cube} = a^3$. On a donc $C = \frac{NV_{sphère}}{V_{cube}} = \frac{\pi}{6} \approx 0,52$.
2. (a) On a un atome de plus dans le cube par rapport au cas précédent : $N = 2$.
 - (b) La diagonale du cube a pour longueur $a\sqrt{3}$. Deux atomes sur des sommets opposés (rayon R) touchent l'atome central (diamètre $2R$). On a donc $a\sqrt{3} = 4R$.
 - (c) $V_{sphère} = \frac{4}{3}\pi R^3 = \frac{4}{3}\pi \left(\frac{a\sqrt{3}}{4}\right)^3 = \frac{\sqrt{3}}{16}\pi a^3$ donc $C = \frac{NV_{sphère}}{V_{cube}} = \frac{\sqrt{3}}{8}\pi \approx 0,68$.
C'est déjà un peu mieux que la structure cubique simple
3. (a) Il y a 8 atomes dans les coins, qui sont partagés par 8 cubes ; et 6 atomes sur les faces, qui sont partagés par 2 cubes. On a donc $N = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$.
 - (b) La diagonale d'une face a pour longueur $a\sqrt{2}$. Deux atomes en diagonale sur une face (rayon R) touchent l'atome au centre de la face (diamètre $2R$). On a donc $a\sqrt{2} = 4R$.
 - (c) $V_{sphère} = \frac{4}{3}\pi R^3 = \frac{4}{3}\pi \left(\frac{a\sqrt{2}}{4}\right)^3 = \frac{\pi}{12\sqrt{2}}a^3$ donc $C = \frac{NV_{sphère}}{V_{cube}} = \frac{\sqrt{2}}{6}\pi \approx 0,74$.
La structure cubique faces centrées est donc plus compacte que les deux précédentes. Il a été démontré que c'est la plus compacte des structures possibles.
Vérifier que parmi les trois structures proposées, la structure cubique faces centrées est aussi celle pour laquelle le nombre de voisins de chaque atome est le plus grand (12 au lieu de 6 et 8).

2 Démonstration d'un théorème important

Pour avoir une meilleure intuition de ce que l'on fait, on peut considérer le pavage du plan par des triangles équilatéraux. On prend pour \vec{u} et \vec{v} des vecteurs correspondant à deux côtés d'un triangle équilatéral. On s'aperçoit qu'une rotation R d'angle $\theta = 60^\circ$ laisse le pavage inchangé. Et on a $R(\vec{u}) = \vec{v}$ et $R(\vec{v}) = -\vec{u} + \vec{v}$. C'est-à-dire $a = 0, b = 1, c = -1, d = 1$.

1. $\vec{u} = \|\vec{u}\| \vec{i}$
 $\vec{v} = \|\vec{v}\| (\cos \phi \vec{i} + \sin \phi \vec{j})$ en considérant un triangle rectangle d'hypothénuse $\|\vec{v}\|$ ayant un angle égal à ϕ .

2. $\vec{u} = \|\vec{u}\| \vec{i}$ donne immédiatement $\vec{i} = \frac{\vec{u}}{\|\vec{u}\|}$

$$\vec{v} = \|\vec{v}\| (\cos \phi \vec{i} + \sin \phi \vec{j}) = \|\vec{v}\| \left(\cos \phi \frac{\vec{u}}{\|\vec{u}\|} + \sin \phi \vec{j} \right) \quad \text{et après calcul : } \vec{j} = \frac{1}{\sin \phi} \left(-\frac{\cos \phi \vec{u}}{\|\vec{u}\|} + \frac{\vec{v}}{\|\vec{v}\|} \right)$$

3. Comme à la question 1 : $R(\vec{u}) = \|\vec{u}\| (\cos \theta \vec{i} + \sin \theta \vec{j})$ et $R(\vec{v}) = \|\vec{v}\| (\cos(\theta + \phi) \vec{i} + \sin(\theta + \phi) \vec{j})$

4. On injecte violement les résultats de la question 2 dans ceux de la question 3 en se rappelant que $\tan \phi = \frac{\sin \phi}{\cos \phi}$.

$$R(\vec{u}) = \|\vec{u}\| \left(\cos \theta \frac{\vec{u}}{\|\vec{u}\|} + \frac{\sin \theta}{\sin \phi} \left(-\frac{\cos \phi \vec{u}}{\|\vec{u}\|} + \frac{\vec{v}}{\|\vec{v}\|} \right) \right) = \underbrace{\left(\cos \theta - \frac{\sin \theta}{\tan \phi} \right)}_a \vec{u} + \underbrace{\left(\frac{\|\vec{u}\| \sin \theta}{\|\vec{v}\| \sin \phi} \right)}_b \vec{v}$$

$$\begin{aligned} R(\vec{v}) &= \|\vec{v}\| \left(\cos(\theta + \phi) \frac{\vec{u}}{\|\vec{u}\|} + \frac{\sin(\theta + \phi)}{\sin \phi} \left(-\frac{\cos \phi \vec{u}}{\|\vec{u}\|} + \frac{\vec{v}}{\|\vec{v}\|} \right) \right) \\ &= \underbrace{\frac{\|\vec{v}\|}{\|\vec{u}\|} \left(\cos(\theta + \phi) - \frac{\sin(\theta + \phi) \sin \theta}{\sin \phi} \right)}_c \vec{u} + \underbrace{\left(\frac{\sin(\theta + \phi)}{\sin \phi} \right)}_d \vec{v} \end{aligned}$$

5. $\sin(\theta + \phi) = \sin \theta \cos \phi + \sin \phi \cos \theta$

6. $a + d = \cos \theta - \frac{\sin \theta}{\tan \phi} + \frac{\sin(\theta + \phi)}{\sin \phi} = \cos \theta - \frac{\sin \theta \cos \phi}{\sin \phi} + \frac{\sin \theta \cos \phi + \sin \phi \cos \theta}{\sin \phi} = 2 \cos \theta$

$a + d$ doit être un entier, donc $2 \cos \theta$ est un entier, c'est à dire $\cos \theta = 0$ ou $\pm \frac{1}{2}$ ou ± 1 .

En traçant le cercle trigonométrique par exemple, on a donc $\theta = 0^\circ, \pm 60^\circ, \pm 90^\circ, \pm 120^\circ$ ou 180° . Ce sont les seuls angles de rotation possibles, on vérifie qu'ils le sont effectivement sur les exemples du pavage du plan par des carrés et du pavage du plan par des triangles équilatéraux.

