Travaux dirigés - Autour des quasi-cristaux

Alexis Poncet - GICS - 12 novembre 2014

1 Empilement compact de sphères

Dans cet exercice, on considèrera un cristal composé d'atomes assimilés à des sphères dures (c'est à dire qui ne se pénètrent pas). On cherche à organiser les atomes de la manière la plus compacte possible : la fraction de l'espace occupée par les sphères doit être la plus grande possible. On étudiera trois structures cristallines classiques : cubique simple, cubique centrée et cubique faces centrées.

1. Considérons la structure la plus simple : la structure cubique simple où les atomes sont simplement placés aux sommets d'un réseau cubique.
   (a) Considérons un cube de côté a avec un atome à chaque sommet. Quelle est la proportion d'atomes à l'intérieur du cube ? On fera attention au fait que les atomes sont partagés entre plusieurs cubes.
   (b) Les atomes, assimilés à des sphères de rayon R se touchent. Quelle est la relation entre a et R ?
   (c) Calculer la compacité C de l'assemblage.
   $$C = \frac{\text{Volume occupé par les atomes}}{\text{Volume du cube}} = \frac{\text{Proportion d'atomes} \times \text{Volume d'une sphère}}{\text{Volume du cube}}$$
2. Répéter les mêmes questions pour une structure cubique centrée : c'est à dire un atome sur chaque sommet et un atome au mileu du cube. Dans ce cas, les atomes se touchent selon une diagonale du cube.
3. De même pour le réseau cubique faces centrées : un atome sur chaque sommet et un atome au milieu de chaque face. Les atomes se touchent selon les diagonales des faces.

La structure cubique face centrée est, avec la structure hexagonale compacte, la structure de compacité maximale. Ce résultat, longtemps connu sous le nom de conjecture de Kepler, a été formellement démontré ... en 2014 ! La preuve a été réalisée avec l'assistance d'ordinateurs.

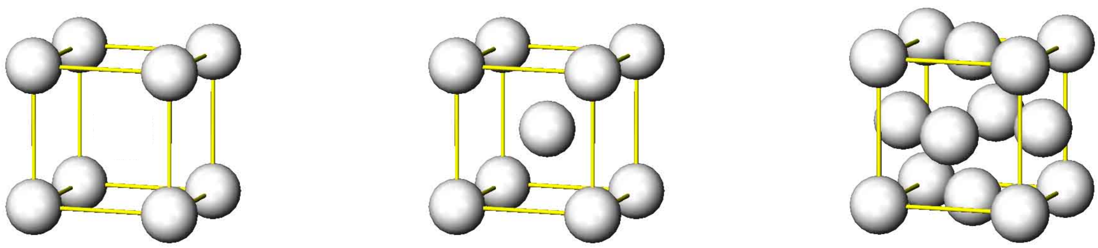

Figure 1 – De gauche à droite : structure cubique simple, cubique centrée, cubique faces centrées

2 Démonstration d'un théorème important

On se place dans le plan muni du repère orthonormé $(O, \vec{i}, \vec{j})$ habituel.

On considère un ensemble de points E (« un dessin ») invariant par translation selon $\vec{u}$ et $\vec{v}$ où $\vec{u}$ et $\vec{v}$ sont deux vecteurs non colinéaires. On considère de plus une rotation R de centre O et d'angle θ qui laisse E invariant. On admet que cela équivaut au fait que R envoie $\vec{u}$ et $\vec{v}$ sur une combinaison linéaire à coefficients entiers d'eux-mêmes :

$$R(\vec{u}) = a\vec{u} + b\vec{v} \qquad R(\vec{v}) = c\vec{u} + d\vec{v} \qquad \text{avec } a, b, c, d \in \mathbb{Z}$$

On cherche les conditions sur θ pour qu'une telle situation soit possible.

1. On suppose que $\vec{u}$ est selon $\vec{i}$: $\vec{u} = \|\vec{u}\|\vec{i}$ et que $\vec{v}$ fait un angle ϕ avec $\vec{i}$. Donner les coordonnées de $\vec{v}$ dans le repère $(O, \vec{i}, \vec{j})$ (en fonction de $\|\vec{v}\|$ et ϕ).
2. Écrire maintenant $\vec{i}$ en fonction de $\vec{u}$, puis $\vec{j}$ en fonction de $\vec{u}$ et $\vec{v}$.
3. Comment s'écrit $R(\vec{u})$ en fonction de $\vec{i}$, $\vec{j}$ et θ ? De même pour $R(\vec{v})$ (en fonction aussi de ϕ) ? Se servir du fait que $R(\vec{u})$ fait un angle θ avec $\vec{i}$ et $R(\vec{v})$ un angle $(\theta + \phi)$.
4. Exprimer les coefficients a, b, c, d en fonction de θ et ϕ. Pour cela injecter les expressions trouvées à la question 2 dans celles de la question 3.
5. Rappeler la formule de $\sin(\theta + \phi)$.
6. $(a+d)$ devant être un entier, trouver une condition simple sur $\cos\theta$. En déduire les angles θ possibles.

On montre ainsi qu'un cristal périodique bidimensionnel ne peut présenter que des symétries d'ordre 1, 2, 3, 4 et 6. (Une symétrie d'ordre k correspond à l'invariance sous une rotation d'angle $2\pi/k$.) En particulier, une symétrie d'ordre 5 est impossible.

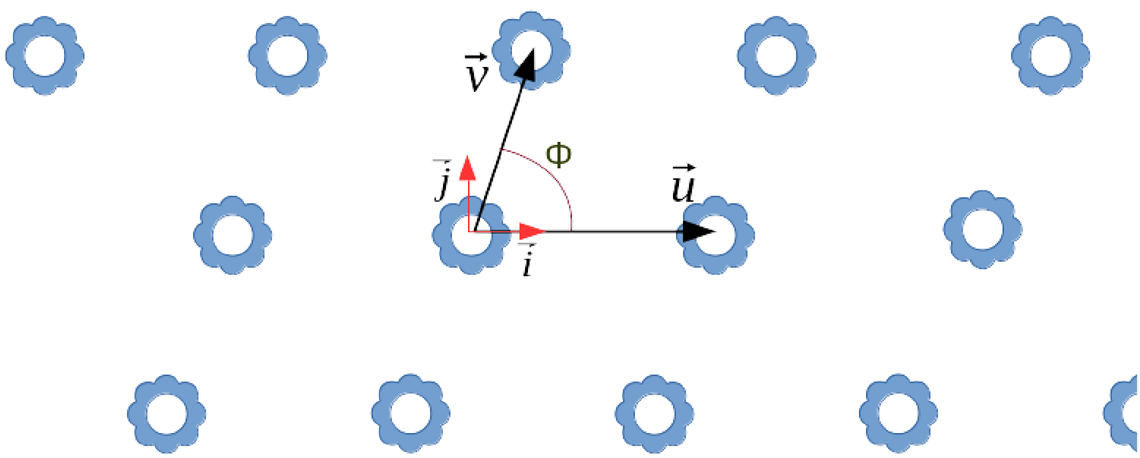

FIGURE 2 – Exemple de cristal en deux dimensions

3 Autour du mot de Fibonacci

On cherche à écrire une suite de mots : M_0, M_1, M_2, ... constitués de deux lettres "A" et "B". On pose $M_0 =$ "A" et pour $n \in \mathbb{N}$, on obtient M_{n+1} en appliquant les substitutions suivantes sur M_n : "B" $\mapsto$ "A" et "A" $\mapsto$ "AB". Par exemple, $M_1 =$ "AB" et $M_2 =$ "ABA".

1. (a) Écrire M_3, M_4, M_5 et M_6. Remarquer que le début du mot reste toujours le même. On peut donc définir « la limite » de cette suite de mots. C'est le mot infini de Fibonacci M_∞.
   (b) Remarquer une étrange propriété reliant M_{n+2} à M_{n+1} et M_n. On aurait aussi pû définir la suite à l'aide de M_0, M_1 et de cette propriété. Dans la suite, on ne se servira pas de ce résultat.
2. Notons a_n (respectivement b_n) le nombre de lettres "A" (respectivement "B") dans M_n. Notons aussi $l_n = a_n + b_n$ la longueur de M_n.
   (a) Relier a_{n+1} à a_n et b_n. De même pour b_{n+1}.
   (b) En déduire l'expression de a_{n+2} en fonction de a_{n+1} et de a_n ($n \geq 2$). De même pour la suite (b_n).
   (c) On définit la suite de Fibonacci (f_n) par $f_0 = 0$, $f_1 = 1$ et pour $n \in \mathbb{N}$, $f_{n+2} = f_{n+1} + f_n$. Montrer que $b_n = f_n$, $a_n = f_{n+1}$ et $l_n = f_{n+2}$.
3. Le mot infini de Fibonacci possède de nombreuses propriétés. Mais est-il périodique ? C'est-à-dire se répète-t-il au bout d'un nombre fini de lettres ?
   (a) Considérons un mot infini N c'est à dire une suite de lettres (N_i) où N_i est la i-ème lettre de N ($i \geq 1$). On suppose que le mot ne comporte que deux lettres : $N_i =$ "X" ou "Y", et qu'il est périodique : il existe $k \geq 1$ tel que $N_{i+k} = N_i \ \forall i \geq 1$. Appelons x_n (resp. y_n) le nombre d'occurences de "X" (resp. "Y") dans $(N_1, N_2, \ldots, N_n)$. Expliquer pourquoi $lim_{n\to\infty} \frac{x_n}{y_n} \in \mathbb{Q}$ (sauf si N ne contient pas de "Y" !).
   (b) Montrons que $\frac{a_n}{b_n} \notin \mathbb{Q}$ et que donc, par contraposée, le mot infini de Fibonacci M_∞ n'est pas périodique. Intéressons-nous donc à la limite de la suite $u_n = \frac{f_{n+1}}{f_n} = \frac{a_n}{b_n}$ (pour $n \geq 1$!).
      i. Trouver une relation de récurrence entre u_{n+1} et u_n.
      ii. On peut montrer que pour $u_1 = 1$, $u_n \to \varphi$ où φ est la solution positive de l'équation $x = 1 + \frac{1}{x}$. Donner l'expression de φ. φ est le nombre d'or.
   (c) Pour achever la preuve, montrons maintenant que φ est irrationnel.
      i. À partir de l'expression de φ trouvée précedemment, montrer que si φ est irrationnel alors $\sqrt{5}$ l'est aussi.
      ii. Supposons que $\sqrt{5}$ soit rationnel : on écrit $\sqrt{5} = \frac{p}{q}$ avec $p \in \mathbb{N}$, $q \in \mathbb{N}^*$. On peut prendre p et q premiers entre eux (c'est à dire que leur seul diviseur commun est 1). On a $5q^2 = p^2$. Montrer alors que p est divisible par 5 (penser au fait que 5 est un nombre premier).
      iii. En utilisant de nouveau que $5q^2 = p^2$, montrer que q est divisible par 5. Montrer que cela est absurde.

   $\sqrt{5}$ ne peut donc pas s'écrire comme un nombre rationnel : il est irrationnel. Le nombre d'or φ est donc lui aussi irrationnel. Ainsi le rapport entre la proportion de "A" et la proportion de "B" dans le mot infini de Fibonacci n'est pas rationnel : le mot de Fibonacci ne peut pas être périodique.

Le mot de Fibonacci n'est pas périodique, pourtant il possède « un certain ordre » : il peut être considéré comme un quasi-cristal de dimension 1.