Les defauts dans les verres

par Sandrine PHARIPOU,
Laurent CALLEN
et Philippe COLLETTE

Classe de Première S projet
du lycée Fustel de Coulanges, Massy

extrait de la brochure “Les géométries non euclidiennes” présentée à leur lycée par les élèves.

Si le travail des élèves de Massy ne relève pas à proprement parler de “MATh.en.JEANS”, la démarche qui leur a été imposée s'apparente à celle de l'Opération 1 000 classes 1 000 chercheurs dont dérive “MATh.en.JEANS” ; les élèves ont en effet fait appel à l'aide de leur professeur de mathématiques, M. Enjalbert, mais aussi de M. Bourguignon, professeur à l'Ecole Polytechnique, Directeur du Centre de Maths de l'X, M. Courtois, chercheur maths CNRS, M. Dupuis, “Tangente”, M. Sadoc, chercheur CNRS en physique des solides. [N.D.L.R.]

A. La structure de la matière

La matière dense est généralement constituée d'atomes ou de molécules assemblées de façon particulière. Pour un solide, on pourra assimiler la forme selon laquelle les atomes sont assemblés à sa structure locale.

Quand la structure locale d'un solide a une forme géométrique telle que sa répétition peut remplir tout l'espace, alors sa structure globale est un cristal. Par exemple, si les atomes d'un solide s'assemblent en cubes, on peut remplir tout l'espace avec un empilement de cubes, alors la structure globale de ce solide est un cristal — cubique dans ce cas.

La notion de cristal implique l'image de la perfection et de la pureté.

Dans le cas où la structure locale ne peut pas s'organiser pour remplir tout l'espace, alors la structure globale présentera souvent un certain désordre. C'est le cas pour les verres qui contiennent des défauts intrinsèques, c'est-à-dire inévitables, car la structure locale ne peut être répétée à l'infini pour remplir l'espace sans se déformer. La structure globale paraît alors désordonnée, mais nous allons le voir, ce désordre peut n'être qu'apparent.

Pour mieux comprendre ces notions de structure locale et globale des solides, revenons au cas simple du pavage d'un plan ou d'un espace.

B. Les pavages

1. Pavage du plan

On peut paver le plan avec :
— des carrés ;
— des triangles équilatéraux ;
— des hexagones réguliers.

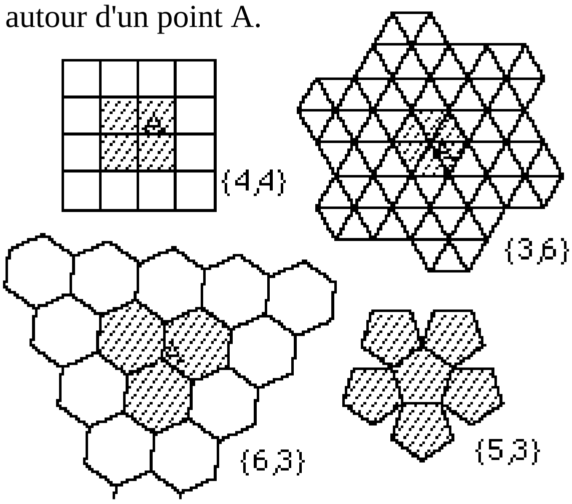
Par contre, le pavage d'un plan est impossible avec des pentagones réguliers car l'angle au sommet d'un pentagone n'est pas un sous-multiple de 2π. En effet, si on dessine trois pentagones réguliers accolés sur un plan, on n'a pas la “place” d'en dessiner un quatrième pour remplir l'espace restant entre deux pentagones.

Les angles d'un pentagone régulier valent 108°, on a donc : 108 x 3 = 324°. Il reste donc :

360 - 324 = 36°.

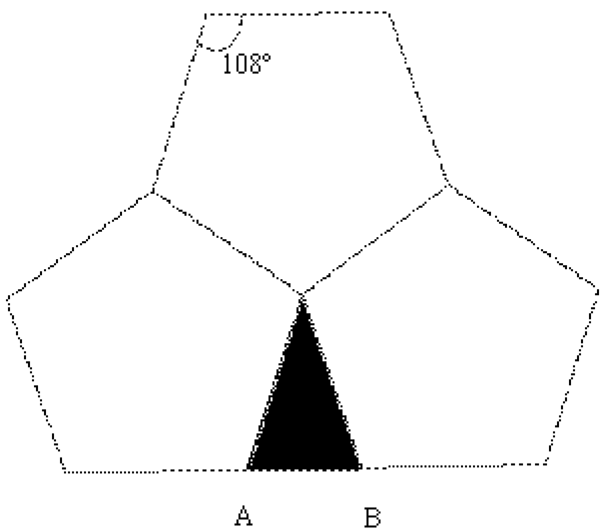
En revanche, on peut faire correspondre les points A et B, on courbe alors l'espace. Avec douze pentagones ainsi assemblés, on forme un dodécaèdre pentagonal qui peut être assimilé à une sphère car c'est une surface à courbure constante positive.

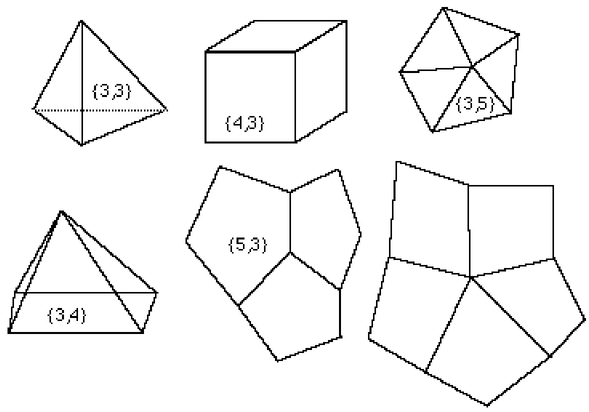
Il existe une notation simple permettant de caractériser un pavage d'un espace à 2D par des polygones réguliers : on le note {p, q}, où p est le nombre de côtés du polygone et q le nombre de polygones nécessaires pour paver l'espace autour d'un point A.



Il existe trois solutions de pavage d'une surface plane : {4, 4} ↔ on place quatre carrés autour du point A ; {3, 6} ↔ pavage de l'espace autour de A par six triangles ; {6, 3} ↔ pavage par trois hexagones de l'espace autour de A. Par contre, nous avons vu que le pavage d'un plan par trois pentagones {5, 3} n'est pas possible.

Il existe de même cinq pavages d'une surface à courbure positive : {3, 3} ↔ en pavant l'espace avec trois triangles, on obtient trois faces d'un tétraèdre ; {3, 4} ↔ quatre triangles assemblés forment les quatre faces d'une





pyramide à base carrée dont le point A est le sommet ; {4, 3} ↔ trois carrés s'assemblent selon les trois faces d'un cube. De même le pavage {5, 3} et le pavage {3,5} recouvrent un espace courbé positivement.

Si on essaie de paver une surface avec cinq carrés, par exemple, on obtient alors une surface à courbure négative. De même avec six triangles, quatre hexagones, ... Un calcul simple permet de savoir d'après la notation d'un pavage quelle est la courbure de l'espace : α est la mesure de l'angle du polygone. Le pavage est noté {p, q} où p = nombre de côtés et q = nombre d'objets.

Si $\alpha \times q < 2\pi$: surface sphérique ;

Si $\alpha \times q = 2\pi$: plan euclidien ;

Si $\alpha \times q > 2\pi$: surface elliptique ; il existe alors une infinité de cas possibles.

Par exemple, si on effectue le pavage {3, 4} $q = 4$ et $\alpha = \pi/3$. On a donc $(\pi/3)x4 < 2\pi$. Le pavage {3, 4} définit une surface sphérique. Pour le pavage {4, 4}, $q = 4$ et $\alpha = \pi/2$; $4 \times \pi/2 = 2\pi$. Le pavage défini est donc un plan.

2. Pavage de l'espace à trois dimensions

En partant du même principe que pour le pavage d'un plan, la notation {p, q, r} caractérise le pavage d'un espace à trois dimensions ; r représente le nombre de polyèdres que l'on assemble autour d'une arête. Le seul pavage de l'espace euclidien possible est le pavage par des cubes ; on le note {4,4,4}.

Revenons au cas de la structure d'un solide : les atomes vont avoir tendance à s'assembler selon des formes géométriques particulières et qui devront en fait "paver" l'espace. Nous allons maintenant essayer de comprendre d'où viennent les irrégularités observées dans les verres.

C. Les défauts dans les verres

1. Pourquoi des défauts ?

Observons une structure formée de molécules à 2D. Si la structure locale est un pentagone régulier, nous savons qu'il est alors impossible de paver le plan, donc la structure globale ne pourra être cristalline, c'est-à-dire formée de pentagones réguliers collés par leurs côtés. La structure globale sera alors irrégulière, composée, par exemple, de pentagones irréguliers mélangés à d'autres polygones.

De même si on prend une molécule à trois dimensions, on ne pourra pas paver l'espace euclidien avec des tétraèdres. Ainsi dans les verres où les molécules auront tendance à vouloir prendre une structure de tétraèdres, on observera des défauts dans la structure globale.

2. L'état parfait du cristal

Pour atténuer les irrégularités d'une structure et ainsi définir un état parfait du cristal, les cristallographes cherchent des configurations géométriques et définissent des états parfaits qui n'ont pas de réalité physique.

On sait qu'on ne peut pas paver le plan avec des pentagones réguliers, mais par contre, on peut établir un pavage de pentagones sur une sphère : on peut disposer douze pentagones réguliers à la surface de la sphère.

Ainsi on va chercher à courber l'espace de façon à ce que les molécules puissent s'assembler régulièrement et laissent apparaître une structure parfaite, cristalline. Pour voir l'arrangement des pentagones sur la sphère, on plonge cette surface à 2D dans un espace à 3D. Les structures du monde physique sont, en général, à 3D et pour observer leur courbure, il faut les plonger dans un espace à 4D qui est difficile à visualiser.

Tout comme l'espace courbe à 2D est une sphère de courbure constante, l'espace courbe à 3D est une hypersphère. Ainsi dans l'espace à 3D euclidien, on ne peut effectuer un pavage avec des tétraèdres, mais il est possible d'ajuster la courbure de l'espace pour qu'il soit pavable et ainsi rétablir une certaine régularité.

Nous avons, ce faisant, idéalisé la structure en éliminant le désordre, mais l'espace dans lequel elle est décrite n'est pas notre espace physique.

3. Retour à l'espace euclidien

En partant de l'état parfait du cristal, on revient à l'espace euclidien par plusieurs déformations qui font apparaître des défauts et donnent une structure irrégulière. Autrement dit, la structure physique possible est obtenue à partir de la structure parfaite dans l'espace courbe, en appliquant des opérations géométriques qui annulent la courbure de ce dernier et le transforment en un espace plat.

Ces transformations engendrent quelques problèmes ; en effet, par exemple, on ne peut pas changer la courbure d'une feuille de papier. Elle peut reposer sur une table en contact parfait avec cette surface plane, en la roulant on peut aussi l'appliquer sur un cylindre, mais il est impossible de recouvrir une sphère ou une selle avec elle.

> Pour changer la courbure il faut ajouter ou soustraire de la matière selon que l'on veut diminuer ou augmenter la courbure.

Autre exemple, la représentation de la Terre sur la surface plane d'une carte géographique ne peut se faire sans découpage ou distorsion ; mais en géographie c'est la réalité qui est courbe et la représentation qui est plane, alors que dans les verres c'est la représentation qui est courbée, et l'objet réel qui réalise la transformation. Ces ajouts ou retraits de matière qui doivent être introduits dans l'espace courbe pour le “décourber” sont appelés *disinclinaisons* et agissent sur la structure parfaite de cet espace et la transforment en une nouvelle structure qui est compatible avec les contraintes de l'espace euclidien.

Ainsi dans les verres où les molécules ont tendance à vouloir prendre une structure qui serait idéale dans un espace courbe, on observera des défauts puisque la structure doit s'adapter à l'espace euclidien à courbure nulle. On pourra alors dire que le désordre n'est qu'apparent puisqu'il sera issu d'une structure parfaite.