

Le problème est compliqué par le fait que, si l'on connaît tous les pavages périodiques du plan, on ne connaît pas bien, il s'en faut de beaucoup, les structures périodiques qui pavent l'espace.

Le physicien Peter Kramer, de l'Université de Tübingen, a découvert un remplissage non périodique de l'espace avec des rhomboèdres, des cubes déformés par cisaillement dans les trois directions spatiales (les faces sont des losanges). Ce remplissage présente une symétrie d'ordre 5 (plus précisément, une symétrie icosaédrique).

Néanmoins, comme il est plus facile de visualiser, et donc de comprendre, deux dimensions que trois, la plupart des activités de recherche sur les pavages possédant une symétrie d'ordre cinq ont porté sur des structures à deux dimensions, et non pas à trois, avec des losanges, et non des rhomboèdres.

Les résultats les plus connus de ces activités sont les pavages du mathématicien Roger Penrose, pavages qui comportent deux motifs élémentaires en forme de losanges l'un large, l'autre étroit. Lorsqu'on juxtapose les losanges d'une seule espèce, on obtient un motif

périodique ; quand on combine les deux formes selon des règles précises (voir la figure 1), on obtient des pavages non périodiques.

Les pavages de Penrose peuvent être réalisés avec différentes formes. Il existe ainsi des pavages équivalents réalisés avec deux sortes de triangles, avec des pentagones, des étoiles à cinq branches, des losanges étroits ou des «bateaux», ou encore avec les célèbres «cerfs-volants» et «flèches».

Et la chimie dans tout cela ?

Les physico-chimistes ont cherché la structure de leurs quasi-cristaux auprès des mathématiciens, et un choix possible consistait à assimiler les formes de base à des atomes de natures différentes. Ainsi l'une des formes aurait été un atome d'aluminium, l'autre un atome de manganèse et les règles d'assemblage auraient exprimé les forces qui s'exercent entre les atomes ; l'endroit où une règle d'assemblage interdit la pose d'un pavé symbolisant le manganèse correspond dans le quasi-cristal réel à un site énergétiquement défavorable à la mise en place d'un tel atome.

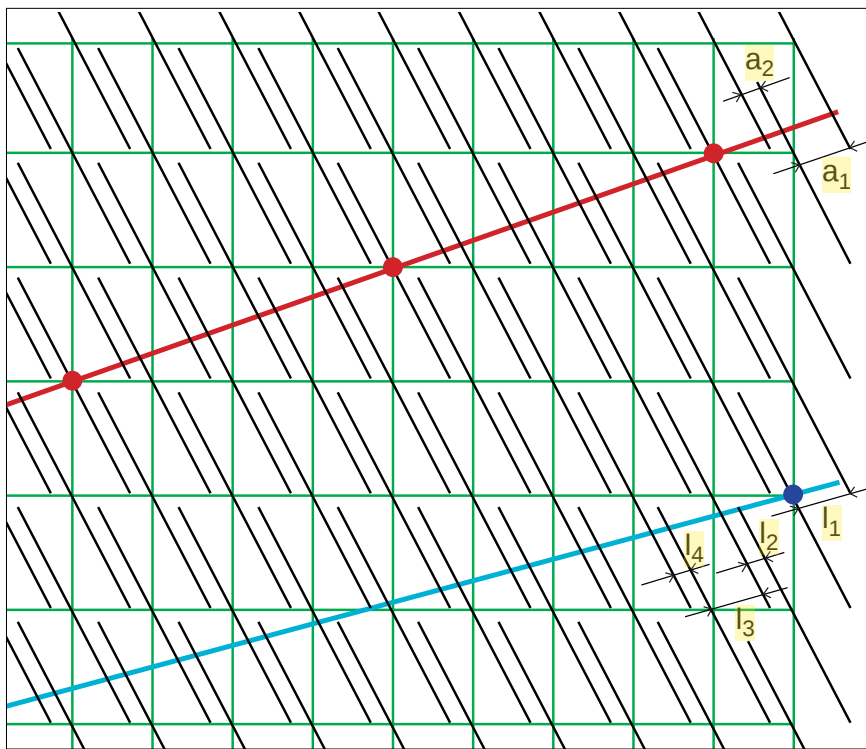
Hélas pour le réalisme, les atomes ne sont pas des losanges ou des rhomboèdres, et une forme de Penrose correspondrait plutôt à un agrégat de plusieurs atomes. Il faudrait «décorer» avec des atomes un losange (à deux dimensions) ou un rhomboèdre (à trois dimensions) de façon que le résultat global soit en concordance avec le spectre de rayons X ou avec les autres résultats de mesures. On a déjà obtenu quelques modestes résultats avec cette méthode. Toutefois, il est difficile d'imaginer pourquoi les atomes adopteraient un tel agencement en cellules rhomboédriques plutôt qu'un autre.

Le succès d'une décoration repose aussi sur la réponse qu'elle apporte à une question : comment un quasi-cristal se forme-t-il ? Si l'on essaie de construire un pavage de Penrose par ajouts successifs d'éléments en respectant les règles d'assemblage, on aboutit généralement à une impasse : en certains endroits, on ne peut plus rien ajouter du tout. Les règles d'assemblage ne sont pas suffisantes, même lorsqu'on les renforce en prescrivant comment il faut disposer les losanges autour d'un sommet (c'est ce que l'on dénomme les configurations *Vertex*).

Même si ces règles étaient suffisamment précises, il faudrait qu'un quasi-cristal croisse exactement de cette façon : sur un germe cristallin, les atomes s'ajoutent les uns après les autres, guidés par les forces qui déterminent leur position momentanée dans un voisinage changeant. Lorsque ces informations locales ne fournissent plus les indications suffisamment précises, les atomes ne trouvent pas leur place, et le quasi-cristal ne dépasse pas la taille d'un nanomètre.

Les mathématiciens sont plus chanceux : il construisent des pavages sans défaut et aussi grands qu'ils le souhaitent en considérant que le quasi-cristal est la projection d'un cristal périodique d'une dimension supérieure (voir la figure 2).

Ainsi le pavage d'une surface par les motifs de Penrose est interprété comme la projection à trois dimensions d'un motif périodique très simple en cinq dimensions. Il est non périodique uniquement parce que le réseau en cinq dimensions est projeté sous un angle oblique (irrationnel). Cette simplicité de construction à partir d'un espace de dimensions cinq fait qu'il existe un grand nombre d'empilements non périodiques.



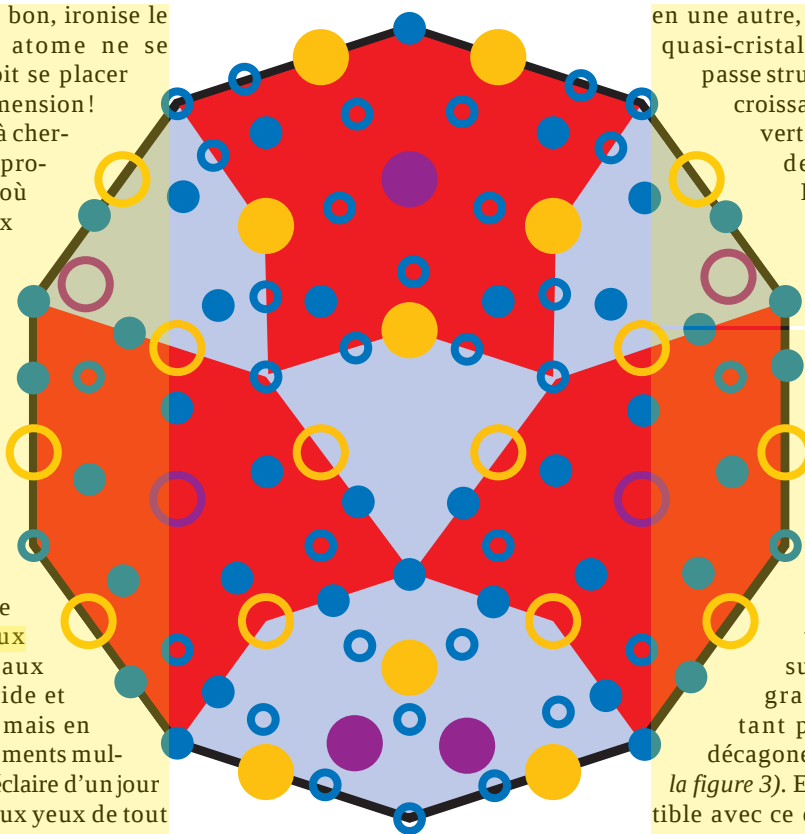
2. LA PROJECTION D'UN ESPACE PÉRIODIQUE à deux dimensions donne un espace périodique à une dimension si la droite (en rouge) représentant l'espace à une dimension a une pente rationnelle (elle passe par une infinité de nœuds du réseau) et un espace quasipériodique si la droite (en bleu) a une pente irrationnelle, c'est-à-dire ne passe que par un nœud du réseau. Sur le réseau à deux dimensions (en vert), on a des structures figurées par des segments inclinés dont les intersections avec les droites donnent les positions des atomes dans l'espace à une dimension. Similairement les structures quasipériodiques à trois dimensions sont les projections des structures périodiques à cinq dimensions, difficilement représentables.

Tout cela est bel et bon, ironise le physicien, mais un atome ne se demande pas où il doit se placer dans la cinquième dimension ! Il faut donc continuer à chercher des solutions au problème dans le monde où vivent les atomes, à deux ou à trois dimensions.

Petra Gummelt, de l'Université de Greifswald, a réussi une telle entreprise (*Geometriae Dedicata*, vol. 62, pp. 1-17, 1996, et *Aperiodische Überdeckungen mit einem Clustertyp*, Shaker, Aix-La-Chapelle, 1999). Elle a généralisé la construction en ne se limitant pas aux pavages, c'est-à-dire aux recouvrements sans vide et sans chevauchement, mais en autorisant des recouvrements multiples. Cette possibilité éclaire d'un jour nouveau ce qui saute aux yeux de tout observateur des pavages de Penrose : le motif comporte de nombreux décagones réguliers. Penrose les a dénommés *cart-wheels* (roues de charrette) : leur fréquence est si élevée que chaque point de la surface est couvert par au moins une telle roue décagonale.

La théorie du pavage de Penrose fournit encore plus d'informations : deux de ces décagones ne peuvent, quand ils se chevauchent, le faire que d'une manière très particulière. Ces règles peuvent être illustrées de façon convaincante : on colorie certaines parties des décagones en rouge et l'on fixe la règle d'assemblage suivante : les décagones doivent se chevaucher en faisant correspondre les couleurs (rouge sur rouge et blanc sur blanc), et toutes les surfaces rouges doivent être recouvertes au moins deux fois (voir la figure 1).

Le résultat de Petra Gummelt rapproche les physico-chimistes de leur but, qui est d'expliquer comment se forme un quasi-cristal. D'abord, il n'existe plus qu'un seul type d'élément de pavage, dont on coud divers exemplaires comme dans un patchwork. Cette hypothèse est plus plausible que celle selon laquelle les mêmes atomes devraient être prêts à prendre



3. LA « DÉCORATION » DE PAUL STEINHARDT des décagones de Gummelt. Les grands cercles représentent des atomes de nickel (en violet), de cobalt (en jaune), et les petits cercles des atomes d'aluminium (en bleu). En recouvrant la surface de décagones en respectant les règles de superposition, on obtient une couche de l'hypothétique quasi-cristal. Sur une couche, les atomes sont disposés sur les cercles pleins, sur la couche suivante sur les cercles vides, et ainsi de couche en couche.

deux formes différentes et ce en proportion à peu près égales : généralement, un agencement donné est énergétiquement plus favorable et se produit avec une fréquence beaucoup plus élevée que d'autres. Il est donc raisonnable de penser qu'il n'y a qu'un seul type de motif.

D'autre part, la forme du décagone est déjà relativement arrondie. Que des atomes s'assemblent en une telle cellule, ou en ce qui lui correspond en trois dimensions, paraît moins saugrenu que la forme très pointue du losange.

La croissance difficile

Enfin, quand la croissance d'un quasi-cristal, qui se fait par additions successives d'éléments conformément aux règles de chevauchement des décagones, aboutit à une impasse, le grand nombre des configurations possibles fait que les éléments se replacent en une position permettant la poursuite du processus. Certaines pièces de la construction déjà en place pourraient passer d'une configuration autorisée

en une autre, également possible. Le quasi-cristal sortirait ainsi de l'impasse structurelle, poursuivant sa croissance sur le chemin de la vertu, guidé par la recherche de l'énergie minimale. L'organisation idéale est celle qui présente la plus forte densité maximale réalisable en décagones.

Paul Steinhardt, un physicien de l'Université de Princeton, a développé cette idée. Il a trouvé une décoration du décagone par les atomes, qui non seulement respecte les règles de chevauchement, mais qui de surcroît, rapportée à une grande surface, est d'autant plus favorable que les décagones sont plus denses (voir la figure 3). En outre, elle est compatible avec ce que l'on sait des forces

entre les atomes. Seul inconvénient : en général les quasi-cristaux existant réellement ne se préoccupent pas de petites différences d'énergie entre les divers états. Les quasi-cristaux sont souvent obtenus par refroidissement rapide, et leur état peut être fortement hors d'équilibre.

Jusqu'ici, toutes ces considérations sont faites en deux dimensions, ce qui ne gêne pas leur vérification, car il existe effectivement des quasi-cristaux constitués de telles surfaces empilées périodiquement : ils sont quasi périodiques en deux dimensions et périodiques dans la troisième dimension.

L'objectif à long terme est d'appliquer à l'espace les techniques développées avec succès par Petra Gummelt dans le plan. Des travaux que Peter Kramer a publiés sur l'Internet <http://xxx.lanl.gov/abs/math-ph/9904001> pourraient y contribuer : il propose une structure dans un espace abstrait de dimension élevée, dont les décagones sont les projections à deux dimensions.

Christoph PÖPPE est rédacteur à la revue *Spektrum der Wissenschaft*.