

tème d'équations des distances. Comme on l'a déjà indiqué, la non-convergence de l'algorithme ne prouve pas qu'il n'existe pas de solution. En pratique, les risques de passer à côté d'un empilement valide sont très faibles ; selon la conception que l'on se fait de la rigueur, on estimera la question préoccupante ou non.

Des questions liées à des travaux de physique

Si l'équipe de Harvard comme celle de Yale se sont livrées à cet exercice, c'est par intérêt pour les agrégats de sphères matérielles plutôt que pour les sphères mathématiques. Le groupe de Yale se penche sur les mystères de la cristallisation. Dans leur masse, les matériaux tendent à privilégier les configurations qui maximisent la densité, comme l'empilement de Kepler. Mais la croissance des cristaux a pour point de départ des agrégats de quelques atomes seulement, pour lesquels les configurations qui minimisent l'énergie ne sont pas les mêmes.

N. Arkus s'intéresse à l'auto-assemblage dans les nanostructures, qu'elles soient naturelles (comme les capsides des virus) ou artificielles. Guangnam Meng de Harvard, en collaboration avec N. Arkus, M. Brenner et V. Manoharan, a développé un système expérimental qui offre un autre moyen d'explorer les petits amas de sphères collantes. Les sphères sont des billes de polystyrène d'un micromètre de diamètre, en suspension dans de l'eau et en présence d'une population plus importante de nanoparticules de plastique. Quand deux sphères se rapprochent, la présence des nanoparticules crée une attraction effective de courte portée entre les sphères, ce qui fait du système un bon modèle de sphères collantes.

Dans les expériences de G. Meng, on étalait les microsphères sur des plaques de verre comportant des milliers de micropuits cylindriques, où se formaient des grappes d'environ dix sphères par puits. Les puits étaient examinés au microscope pour évaluer les abondances relatives des différentes configurations. Si l'énergie potentielle était le seul critère, les grappes ayant davantage de contacts seraient plus nombreuses, mais l'entropie entre également en ligne de compte : les structures qui peuvent se former de nombreuses façons différentes sont plus probables. Pour l'essentiel, les résultats étaient à peu près en accord avec les attentes théoriques. L'entropie

n	$n(n-1)/2$	$3n-6$	C_n	Multiplicité
1	0		0	1
2	1		1	1
3	3	3	3	1
4	6	6	6	1
5	10	9	9	1
6	15	12	12	2
7	21	15	15	5
8	28	18	18	13
9	36	21	21	52
10	45	24	24	259
			25	3
			27	1 620
11	55	27	28	20
			29	1

10. CE TABLEAU RÉSUME ce que l'on sait à ce jour des grappes de n sphères collantes qui maximisent le nombre C_n de contacts. Jusqu'à $n = 4$, $\max\{C_n\}$ est égal à $n(n-1)/2$, le nombre de contacts formés quand chaque sphère touche chacune des autres sphères. De $n = 5$ à $n = 9$, $\max\{C_n\}$ est égal à $3n-6$, le minimum pour avoir la stabilité mécanique. La « multiplicité » désigne le nombre de grappes différentes ayant la même valeur de C_n .

■ SUR LE WEB

Pour des figures de cet article en version animée, voir : www.americanscientist.org/issues/pub/2012/6/the-science-of-sticky-spheres/1

■ BIBLIOGRAPHIE

R. S. Hoy *et al.*, Structure of finite sphere packings via exact enumeration : Implications for colloidal crystal nucleation, *Physical Review E*, vol. 85, 051403, 2012.

N. Arkus *et al.*, Deriving finite sphere packings, *SIAM Journal on Discrete Mathematics*, vol. 25(4), pp. 1860-1901, 2011.

R. S. Hoy et C. S. O'Hern, Minimal energy packings and collapse of sticky tangent hard-sphere polymers, *Physical Review Letters*, vol. 105, 068001, 2010.

N. Arkus *et al.*, Minimal energy clusters of hard sphere with short range attractions, *Physical Review Letters*, vol. 103, 118303, 2009.

N. J. A. Sloane *et al.*, Minimal-energy clusters of hard spheres, *Discrete and Computational Geometry*, vol. 14, pp. 237-259, 1995.

favorisait les grappes de symétrie inférieure, et augmentait aussi la proportion de structures non rigides. Mais parce que les contacts supplémentaires abaissent l'énergie potentielle, les structures ayant plus de $3n-6$ contacts étaient également surreprésentées.

En dehors de ces applications physiques des sphères collantes, le dénombrement des contacts évoque un problème ouvert de mathématiques pures, posé en 1964 par le mathématicien d'origine hongroise Paul Erdős : étant donné n points dans un espace de dimension d , combien de paires de points peuvent être séparées par la même distance ? On peut toujours s'arranger pour que cette distance soit égale à 1, et c'est pourquoi on parle parfois du problème de la distance-unité.

En trois dimensions, le problème du maximum de contacts pour des sphères est équivalent au problème de la distance-unité d'Erdős, avec la contrainte supplémentaire qu'aucune distance ne soit inférieure à 1. Ainsi, les résultats récents sur les sphères collantes résolvent cette version restreinte du problème pour tout $n \leq 11$.

Qu'y a-t-il au-delà de $n = 11$? D'après N. Arkus, le principal obstacle est le problème combinatoire consistant à engendrer toutes les matrices d'adjacence qui conviennent. Ces dernières sont si rares que le processus devient extrêmement inefficace. N. Arkus suggère une approche alternative, mais qui n'a pas encore abouti. Jusqu'à $n = 10$, elle a montré que toute grappe à $3n-6$ contacts peut être convertie en n'importe quelle autre grappe à $3n-6$ contacts par une chaîne de transformations simples, où une seule liaison est cassée et une autre formée. Elle fait l'hypothèse que cette propriété est vérifiée pour tout n . Si c'est le cas, le problème du maximum de contacts pourrait être résolu en produisant n'importe quelle structure à $3n-6$ contacts, puis en parcourant systématiquement l'arbre de toutes les transformations constituées d'un simple échange de liaisons.

Quand n atteindra une valeur suffisamment grande, la diversité de ces curieuses structures géométriques commencera nécessairement à diminuer, puisqu'en grossissant, les grappes ressemblent de plus en plus à des morceaux d'empilements de Kepler. Mais nous n'en sommes pas encore là, et il pourrait y avoir encore bien des curiosités à découvrir. ■