Cristallographie et Polyèdres : de R.J. Haüy à E.S. Fédorov

Jean-Jacques DUPAS

CEA

Les cristaux fascinent l'humanité depuis l'aube des temps. Leurs formes géométriques parfaites, leurs angles vifs, leurs arêtes rectilignes et leurs faces planes ne sont-elles pas la matérialisation exemplaire de la notion de polyèdres ? La nature fournit trois des cinq solides platoniciens : le tétraèdre, le cube et l'octaèdre, ce qui a certainement motivé les premières recherches sur le sujet.

Mais d'où proviennent ces formes anguleuses ? Très tôt, les hommes de science pensent qu'un cristal est peut-être un empilement de polyèdres identiques, modèle réduit du cristal complet. En 1665, Robert Hooke (1635-1703) émet l'hypothèse qu'un cristal est un empilement de sphères. Le fait que les cristaux se rompent facilement suivant certains plans conduit Christian Huygens (1629-1695) à penser que ces plans de clivage sont des divisions naturelles entre les plans de ces sphères. Domenico Guglielmini (1655-1710), professeur de mathématiques à Bologne et Padoue, observe que les directions de clivages sont toujours les mêmes pour un matériau donné ; il est alors persuadé qu'un cristal est un empilement de petits cristaux.

En 1772, Jean Baptiste Louis Romé de l'Isle (1736-1790) publie son *Essai de cristallographie* dans lequel il classe les cristaux suivant leurs formes extérieures. Il décrit d'abord plus de 100 formes, onze ans plus tard sa liste en contient plus de 450. Des mesures précises de chaque cristal lui permettent d'énoncer la loi de la constance des angles dièdres. Contemporain de ce dernier, l'abbé René Just Haüy (1743-1822), académicien des sciences reconnu pour ses travaux sur les cristaux, laisse choir et brise, un jour, un gros cristal de calcite qu'un de ses amis lui avait prêté.

René-Just Haüy
est le frère de Valentin Haüy
qui inventa l'alphabet Braille.

Il remarque alors que les plans de clivage ne sont pas les angles des faces externes. Il conçoit un modèle où un empilement à partir d'un polyèdre de base, appelé *molécule intégrante* peut conduire, en respectant des lois de croissance, à des polyèdres différents avec d'autres faces que l'empilement des polyèdres de base. L'idée qu'un cristal est composé de blocs, très petits, empilés en réseaux, constituant des solides de formes très différentes, est fondamentale. Elle fait de Haüy un des pères de la cristallographie. Dans son traité de minéralogie, publié en 1801, Haüy montre comment en empilant des cubes on construit un dodécaèdre rhombique ou un pyritoèdre.

Les débuts de l'analyse de symétrie par Auguste Bravais

Comprendre les structures internes demande une analyse détaillée de leur symétrie. Cette analyse commence avec Auguste Bravais (1811-1863) en 1849 quand il énumére une liste de type de symétries possibles.
Le mathématicien August Ferdinand Möbius (1790-1868) étudie aussi les systèmes de symétrie des polyèdres, définissant la symétrie avec une modernité étonnante. Christian Hessel (1796-1876) exhibe 32 groupes de symétrie que peuvent avoir les cristaux, mais son travail passe inaperçu jusqu'à ce que Leonhard Sohncke (1842-1897) le fasse republier.

En 1850, A. Bravais découvre sept réseaux aujourd'hui appelés cubique, hexagonal, rhomboédrique, quadratique, orthorhombique, monoclinique, triclinique.

Une classification avec quatorze réseaux suivra.

Nom du réseau	côtés	angles	Exemple
cubique	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$	le fer, le cuivre
hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \frac{\pi}{2} ; \gamma = \frac{2\pi}{3}$	le zinc, le magnésium
rhomboédrique	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq \frac{\pi}{2}$	l'arsenic, le bismuth
quadratique	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$	la martensite
orthorhombique	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$	l'uranium
monoclinique	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = \frac{\pi}{2} \neq \beta$	
triclinique	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq \frac{\pi}{2}$	

Figure 1 : Les 7 systèmes cristallins de Bravais, Le parallélépipède de base a des arêtes de côté a , b , c et les angles entre les arêtes sont α , β , γ .

Cette structure en réseau n'autorise que des symétries d'ordre 2, 3, 4 et 6. Ces restrictions apparaissent dès les travaux de Haüy. Ces restrictions font que la symétrie des cristaux correspond à l'un des 32 types.
Le type de réseau est déterminé par son bloc de base. Par exemple un bloc cubique peut produire des cristaux de formes cubiques, octaédriques ou de la forme du dodécaèdre rhombique (Figure ci-dessous) ….

Cube Octaèdre Dodécaèdre rhombique
Le bloc cubique permet, à la manière de Haüy, de construire le cube, l'octaèdre, le dédocaèdre rhombique.

La variété des formes externes des cristaux montre qu'il est difficile de classer les cristaux suivant ce critère. Cependant tous les cristaux d'un même matériau ont la même structure interne. Cette structure donne une meilleure classification ce qui permit aux recherches dans ce domaine de se poursuivre pendant la deuxième partie du XIX^{e} siècle.

Vers les 230 groupes.

En fait A. Bravais n'utilise que la translation, ce qui est trop restrictif. Louis Poinsot étudie le vissage, une autre isométrie directe, composée d'une rotation et d'une translation. Travaillant à partir des travaux de Bravais et de Poinsot, Jordan étudie – en les composant – les isométries directes. Il examine la façon dont les translations, rotations et vissages se combinent. Sohncke reprend ces idées de façon moins abstraite et les applique aux motifs de l'espace. La liste des groupes cristallographiques fut portée de 59 à 66 (en fait deux étaient identiques).

Les symétries indirectes sont alors négligées et la théorie cristallographique est incapable d'expliquer certains faits, comme des propriétés directionnelles des cristaux. En étudiant les propriétés pyro-électriques et piézo-électriques, Pierre Curie (1859-1906) s'intéressera aux symétries indirectes.

De son côté, le russe, Evgraf Stéphanovitch Fedorov, publie le premier une liste. A peu près au même moment, l'allemand Arthur Moritz

Schoenflies (1854-1923), sous l'influence de Félix Klein, reprend la méthode de Jordan et publie sa propre liste. Les deux hommes correspondent et fixent la liste des symétries à 230. Enfin, l'anglais William Barlow(1845-1935), arrive indépendamment au même résultat. Ce qui conduit à dénombrer 230 groupes de symétries pour les cristaux. Barlow étudia également l'empilement des sphères, il définit 5 empilements denses de sphères.

Le XX^e siècle, avec les rayons X, mettra en évidence la réalité de la structure interne des cristaux.

Evgraf Stéphanovitch Fedorov

Revenons sur une des figures les plus attachantes et des moins connues de cette histoire : Evgraf Stéphanovitch Fedorov.

Né en 1853 à Oren-bourg en Russie, il grandit à Saint-Pétersbourg. Fils d'un ingénieur, dès l'école élémentaire il nourrit une passion pour la géométrie. Il commence, à l'âge de 16 ans, la rédaction de son livre "*Une introduction à la théorie des figures*".

Ce livre se voulait être la bible des polyèdres.

En parallèle, il étudie d'abord dans une école militaire, suivant la tradition familiale. Diplômé en 1872, il sert deux ans en Ukraine puis démissionne de l'armée pour reprendre des études de médecine, puis de chimie et de physique. Il termine son ouvrage en 1879, après 10 ans de travail.

Il s'inscrit en 1880 à un cours de cristallographie à l'institut des mines de Saint-Pétersbourg. Il y présente sa théorie mais celle-ci n'est guère reconnue. Il a toutes les peines du monde à se faire publier.


Evgraf Stéphanovitch Fedorov.

Finalement il sera malgré tout intégré dans ce même institut ; il meurt en 1919, des suites de privations.

En fait le grand problème de Fédorov est d'avoir écrit en russe ce qui n'a guère permit la diffusion de ses idées. Il n'existe que très peu de traductions des travaux de Fédorov bien que son œuvre, très peu connue, contienne des trésors !

Comme par exemple la notion de *zonaèdre* (*zonohedra* en anglais).

Mais qu'est-ce qu'un zonaèdre ?

L'idée de départ du zonaèdre est un polyèdre convexe dont toutes les faces sont des parallélogrammes ; le zonaèdre étant la cellule de base du groupe cristallographique.

Une définition plus générale du zonaèdre le représente comme un polyèdre convexe dont toutes les faces admettent une symétrie centrale. Cette définition est due à H.S.M. Coxeter mais elle est en germe chez Fédorov. Les zonaèdres ont de très nombreuses propriétés.

La plus exotique est qu'ils sont tous des projections tridimensionnelles d'hypercubes de dimensions supérieures par exemple le dodécaèdre rhombique ou le prisme hexagonal peut être vu comme une des projections orthogonales de l'hypercube de dimension 4 alors que l'octaèdre tronqué peut être vu comme une des projections orthogonales de l'hypercube de dimension 6.

De façon plus prosaïque, par définition, chaque face a un nombre paire de côtés, les faces apparaissent en paires opposées et les arêtes parallèles entre elles déterminent une zone ; le nombre de zones caractérise le zonaèdre. Pour que le zonaèdre soit la cellule de base d'un système de symétrie encore faut-il qu'il pave l'espace.

Il existe effectivement 5 zonaèdres équilatères (toutes les arêtes ont la même longueur) pavant l'espace, Fédorov est le premier à en avoir donné la liste complète :

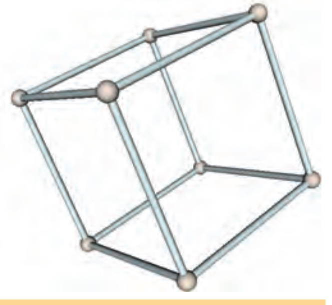
le cube,

le dodécaèdre rhombique,

le prisme hexagonal,

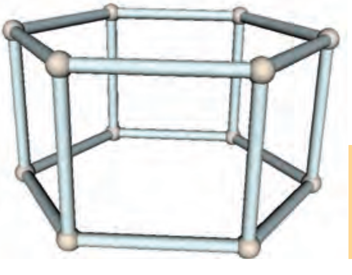
le dodécaèdre allongé,

l'octaèdre tronqué.

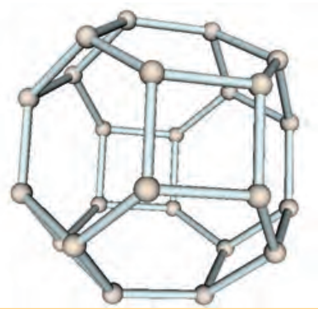


Cube.

Dodécaèdre rhombique.



Prisme hexagonal.



Dodécaèdre allongé.

Octaèdre tronqué.

images
©Jean-Jacques Dupas.

L'œuvre de Fédorov contient bien d'autres idées intéressantes sur les polyèdres ou les pavages,….

Nous venons de voir en quelques lignes les rapports étroits entre la cristallographie et la géométrie, deux sciences qui se sont appuyées l'une sur l'autre afin d'atteindre une meilleure compréhension non seulement de notre monde physique mais surtout d'une notion centrale en mathématiques : la symétrie.

Les plus grands ont participé à cette quête, Fédorov est le moins connu de ces acteurs mais pas le moins intéressant.

J.-J. D.

Pour en savoir (un peu) plus

Peter R.Cromwell, *Polyhedra,*
Cambridge Univerity Press

Marjorie Senechal & R.V.Galiulin, *Une introduction à la théorie des figures : La géométrie d'E.S. Fédorov,*
Topologie Structurale #10,1984

H.S.M.Coxeter, *Regular Polytopes*, Dover