LES MATHÉMATIQUES DE L'ENSEIGNEMENT SCIENTIFIQUE LES CRISTAUX

Mots-clés

Sphère ; cube ; maille ; réseau ; volume ; cristaux.

Références au programme

La compréhension de l'organisation cristalline au travers des exemples choisis (réseaux cubique simple et cubique à faces centrées) mobilise des connaissances sur la géométrie du cube. Elle fournit l'occasion de développer des compétences de représentation dans l'espace et de calculs de volumes. La description de l'état cristallin est l'occasion d'utiliser les mathématiques (géométrie du cube et de la sphère, calculs de volumes, proportions) pour décrire la nature et quantifier ses propriétés.

Savoirs

Les cristaux les plus simples peuvent être décrits par une maille cubique que la géométrie du cube permet de caractériser. La position des entités dans cette maille distingue les réseaux cubique simple et cubique à faces centrées. La structure microscopique du cristal conditionne certaines de ses propriétés macroscopiques, dont sa masse volumique.

Savoir-faire

Utiliser une représentation 3D informatisée du cristal de chlorure de sodium.

Pour chacun des deux réseaux (cubique simple et cubique à faces centrées) :

- représenter la maille en perspective cavalière ;
- calculer la compacité dans le cas d'entités chimiques sphériques tangentes ;
- dénombrer les atomes par maille et calculer la masse volumique du cristal.

Notions mathématiques mobilisées

- Géométrie dans le plan et dans l'espace : repérage cartésien, représentation en perspective cavalière, solides usuels (cube et boule), théorème de Pythagore.
- Nombres et calcul : dénombrer, calculer des proportions.
- Grandeurs et mesure : calculs de longueurs, d'aires et de volumes.

Histoire, enjeux, débats

La question de la compacité maximale pour des empilements de sphères est illustrée dans la vie quotidienne par l'arrangement optimal retenu par les vendeurs d'oranges pour présenter leurs fruits. Bien avant la découverte des structures cristallines, les mathématiciens se sont penchés sur ce problème.

Ainsi, en 1611 Johannes Kepler émet la conjecture que, pour un empilement de sphères identiques, la compacité maximale est de $\frac{\pi\sqrt{2}}{6}$. Cette compacité maximale est obtenue par l'empilement tétraédrique qui correspond au réseau cubique à faces centrées. En 1831, Karl Friedrich Gauss prouve cette conjecture dans le cas particulier d'empilements périodiques. Lors du congrès international de mathématiques qui s'est tenu à Paris en 1900, David Hilbert présente sa fameuse liste des 23 problèmes mathématiques majeurs « pour le nouveau siècle » ; le 18e problème de Hilbert consiste à démontrer la conjecture de Kepler dans le cas général. En 1998 Thomas C. Hales apporte une preuve assistée par ordinateur. Ce n'est qu'en 2014 que cette preuve a été certifiée.

Ces recherches mathématiques se sont développées bien avant le début de la cristallographie à laquelle elle fournissent aujourd'hui des modèles.

Les mathématiques et les cristaux

L'approche de la cristallographie au programme de l'enseignement scientifique permet de mettre en évidence le rôle d'un modèle géométrique pour décrire des éléments physico-chimiques. C'est aussi l'occasion de remobiliser des connaissances et des compétences mathématiques (géométrie dans l'espace, calculs de volumes, proportions).

Le modèle utilisé dans les deux réseaux du programme (cubique simple et cubique à faces centrées) assimile les entités chimiques (atomes ou ions) à des sphères dures tangentes de même rayon réparties dans l'espace de manière périodique. Ce modèle de sphères dures tangentes rend compte de la non-pénétrabilité des nuages électroniques.

Dans la réalité, le diamètre de ces sphères est de l'ordre de l'ångström.

Une maille est une unité de base parallélépipédique à partir de laquelle on peut engendrer tout le cristal uniquement par des translations. Dans les deux cas simples étudiés ici, les mailles sont des cubes et les sphères sont tangentes les unes aux autres.

La compacité d'un réseau cristallin est le rapport du volume occupé par les sphères sur le volume de la maille.

Remarque : en mathématiques, le problème des empilements denses de sphères (dimension 3) peut être étendu à d'autres dimensions.

Intentions pédagogiques

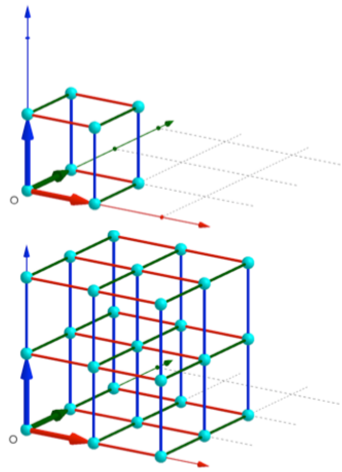
L'étude mathématique de ce sous-thème, qui permet à la fois des manipulations d'objets réels ou virtuels, des calculs et des raisonnements, contribue à consolider les acquis du cycle 4, notamment dans les domaines de la géométrie et des grandeurs.

Réseau cubique simple

Peu présent dans la nature, ce réseau élémentaire sert de premier modèle.

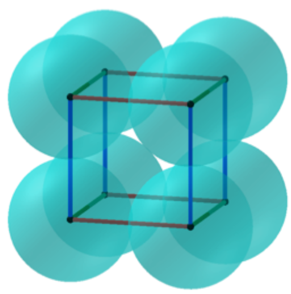
L'utilisation de logiciel tel que GeoGebra © permet de modéliser et de visualiser ce réseau. Se placer dans un repère orthonormé de l'espace à trois dimensions permet de remobiliser le repérage dans l'espace rencontré par les élèves au cycle 4 dans le cadre des pavés droits.

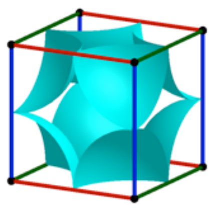
Considérons un point origine O et les trois vecteurs unitaires $\vec{\imath}, \vec{\jmath}, \vec{k}$ de coordonnées respectives (1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1), colorés respectivement en rouge, vert et bleu ci-dessous.



La maille est cubique et est définie par son origine O et trois vecteurs de base $\vec{\imath}, \vec{\jmath}, \vec{k}$.

Pour que les sphères centrées aux nœuds du réseau soient tangentes, il faut que leur rayon soit égal à la moitié de la longueur d'une arête de la maille (figure de gauche). On peut alors donner un motif qui, par translation selon les trois vecteurs, engendrera tout le cristal. La figure de droite représente ce motif obtenu comme intersection du cube et des huit sphères.





Calcul de la compacité

Chaque maille contient huit huitièmes de sphère, soit l'équivalent d'une sphère dont le rayon est la moitié de l'arête du cube. La compacité est le rapport de ces volumes. Si on prend pour unité de longueur l'arête du cube, la compacité est égale au volume de la boule de rayon $\frac{1}{2}$, soit :

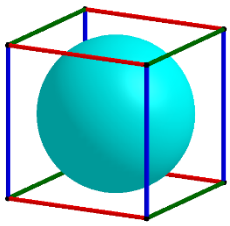
$$\frac{4}{3}\pi\left(\frac{1}{2}\right)^3 = \frac{\pi}{6}$$

On peut aussi partir d'une maille cubique d'arête a pour prouver que cette compacité ne dépend pas de la taille de la maille, on calcule alors :

$$\frac{\frac{4}{3}\pi\left(\frac{a}{2}\right)^3}{a^3} = \frac{\frac{4}{3}\pi\times\frac{a^3}{2^3}}{a^3} = \frac{4\pi a^3}{3\times8\times a^3} = \frac{\pi}{6}$$

Remarque

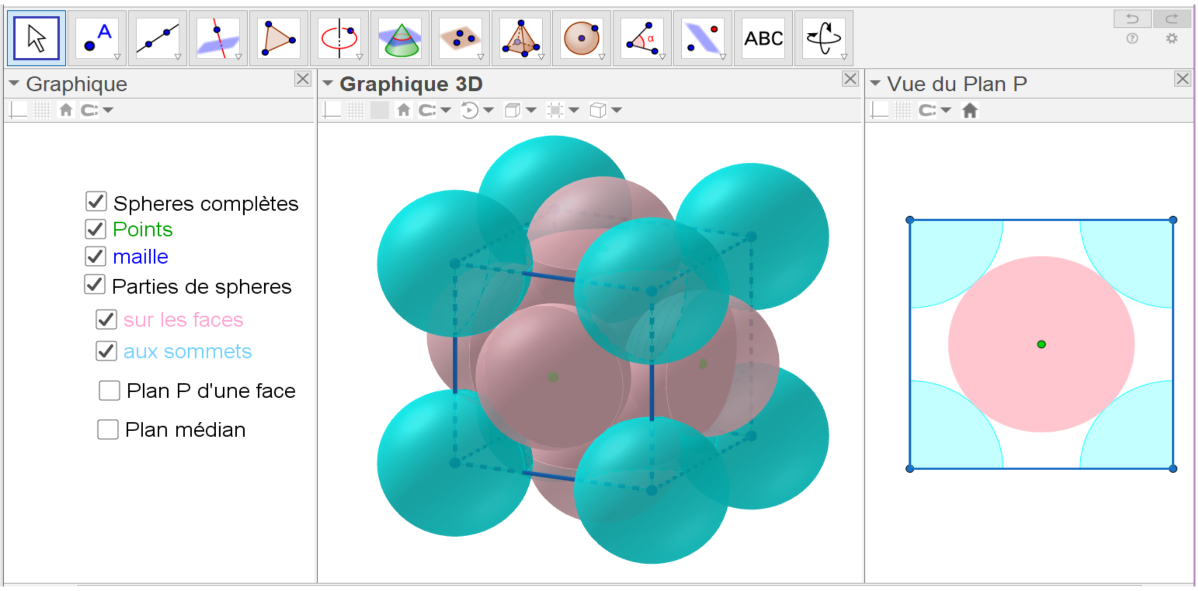
Le choix de la maille n'est pas unique. Au lieu de prendre le cube dont les sommets sont les centres des sphères, on aurait pu choisir le cube circonscrit à l'une de ces sphères comme sur la figure ci-après.



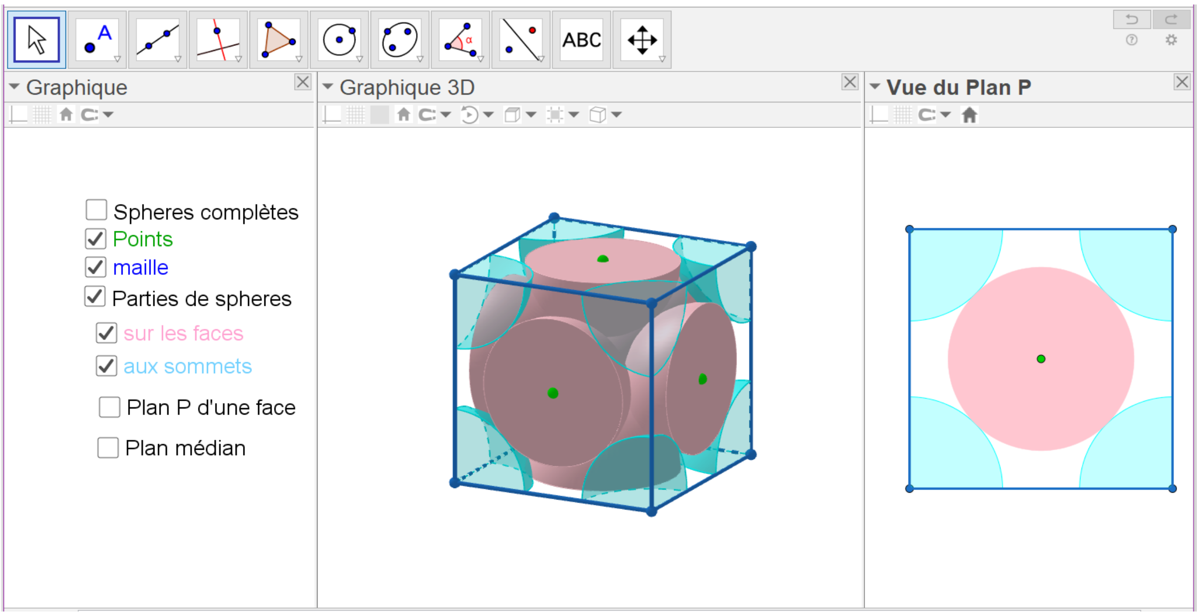
Télécharger l'animation Geogebra © intitulée « [structure cristalline : cubique simple et à faces centrées]() ». Cette animation permet à la fois de visualiser les structures cubique simple et cubique à faces centrées et d'obtenir une valeur approchée du rayon correspondant à des sphères tangentes dans les deux cas.

Réseau cubique à faces centrées

Télécharger l'animation Geogebra © intitulée « [maille cubique à faces centrées]() ». Cette animation, permet de visualiser la maille et de préparer au calcul de la compacité en montrant des sections planes de cette maille.



Retrouvez éduscol sur :



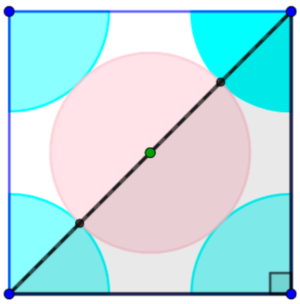
On visualise qu'une maille est occupée par :

- six hémisphères et ;
- huit huitièmes de sphères.

La maille est donc occupée par un volume correspondant à celui de quatre sphères de même rayon r.

Vue d'une face

La représentation de face d'une face du cube permet d'établir une relation entre le rayon r des sphères et l'arête a du cube.



Les sphères turquoise centrées aux sommets sont tangentes à la sphère rose centrée au centre de la face du cube.

Une diagonale du carré de longueur $4r$ est l'hypoténuse d'un triangle isocèle rectangle de côté a. Les côtés de l'angle droit mesurent chacun a. Le théorème de Pythagore donne alors :

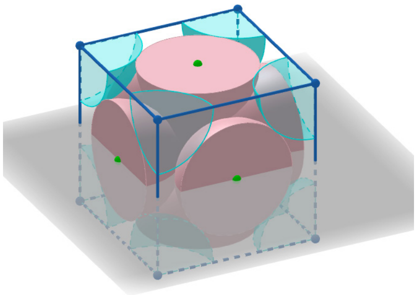
$$a^2 + a^2 = (4r)^2$$

Ce qui donne $2a^2 = 16r^2$ et donc $4r = a\sqrt{2}$ soit :

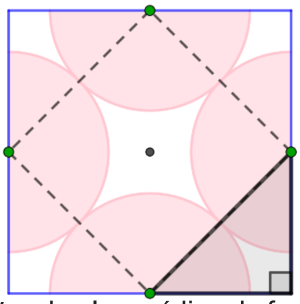
$$r = \frac{a\sqrt{2}}{4}$$

Vue de face d'un plan médian

On doit vérifier que, pour cette valeur de r, les hémisphères roses sont bien tangents. On coupe le cube par un plan médian c'est-à-dire parallèle à une face du cube et passant par le centre du cube. Cette section est un carré identique à celui des faces et dont les milieux des côtés correspondent aux centres de quatre hémisphères. Le triangle isocèle rectangle exhibé ici se déduit du précédent par une réduction de rapport $\frac{1}{2}$; son hypoténuse est donc égale à $2r$, soit la somme des rayons des deux sphères, ce qui assure leur tangence.



Plan médian



Vue du plan médian de face

Ainsi, lorsque $r = \frac{a\sqrt{2}}{4}$, les sphères aux centres des faces du cube sont à la fois tangentes entre elles et aussi tangentes aux sphères dont les centres sont les sommets du cube.

Calcul de la compacité

Déterminons le volume occupé par les sphères dans une maille cubique. Une maille du réseau cubique à faces centrées compte :

- huit huitièmes de sphère centrées aux sommets, soit une sphère, et ;
- six hémisphères (une sur chaque face), soit trois sphères.

Une maille cubique d'arête a, donc de volume a^3, est ainsi occupée par quatre sphères de rayon r. Le volume de quatre sphères, noté V_S, est égal à :

$$V_S = 4\times\frac{4}{3}\times\pi\times r^3 = 4\times\frac{4}{3}\times\pi\left(\frac{a\sqrt{2}}{4}\right)^3 = \frac{4\times4\times\pi\times a^3\times2\times\sqrt{2}}{4\times4\times4\times3} = \frac{\pi\sqrt{2}}{6}\times a^3$$

La compacité de la structure cubique à faces centrées est donc $\frac{\pi\sqrt{2}}{6}$, soit environ 74 %.

Retrouvez éduscol sur :

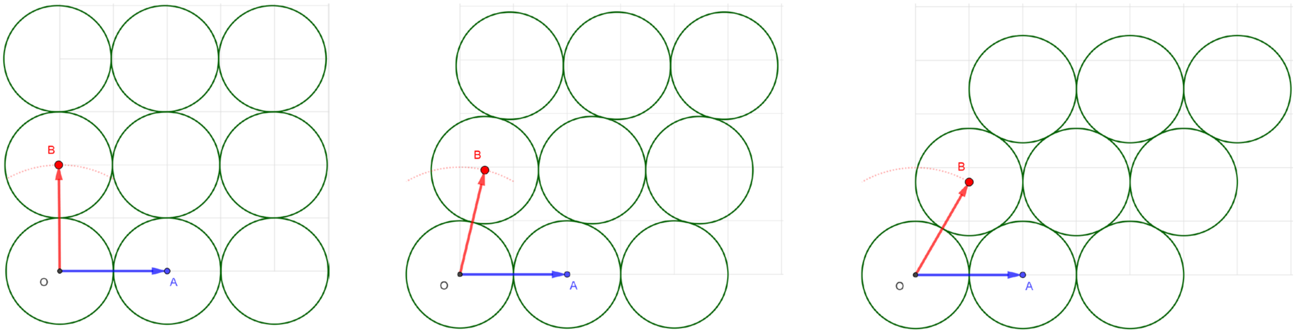
Propositions d'activités

Activité 1 : le même problème en géométrie plane

Avant d'étudier la représentation d'un réseau de l'espace et de calculer sa compacité, l'étude dans le cas du plan permet de comparer plusieurs empilements, notamment celui du réseau carré et celui du réseau hexagonal. L'activité permet de manipuler des pièces de monnaie ou des jetons avant de passer à la représentation géométrique abstraite et de faire émerger la notion de maille en lien avec la notion de pavage étudiée au cycle 4.

Prendre une dizaine de pièces de monnaie ou jetons identiques, les regrouper sur la table de manière régulière, en essayant de minimiser les interstices.

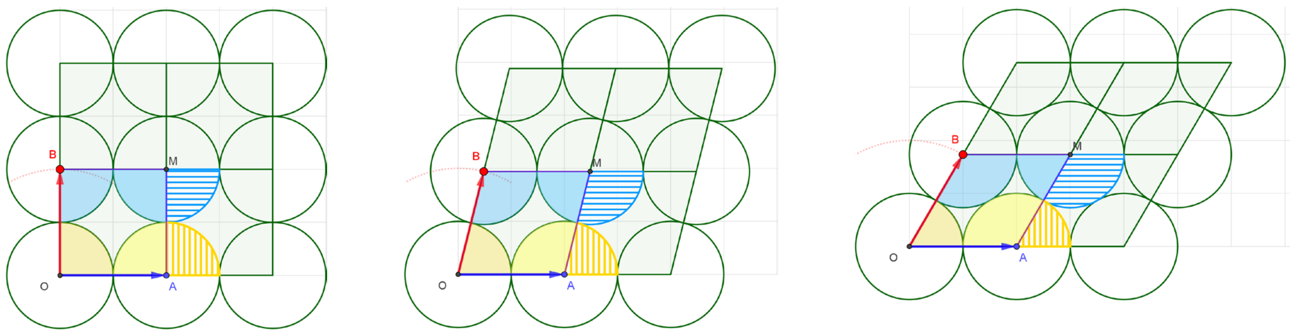
Télécharger l'animation Geogebra © intitulée « empilement de disques à 2D ». Déplacer le point B pour modifier cet empilement de disques identiques selon un maillage de losanges.



À partir du disque inférieur gauche centré à l'origine, un empilement est construit par deux translations de vecteurs $\vec{u}$ et $\vec{v}$ respectivement bleu et rouge.

On conjecture visuellement que, parmi les différents empilements possibles, le dernier est le plus compact. Cette conjecture est démontrée dans la suite.

En faisant apparaître le réseau construit à partir des vecteurs $\vec{u}$ et $\vec{v}$, et le maillage en forme de losanges, la question revient à prouver que c'est dans le dernier cas que les interstices ont la plus petite aire. Un raisonnement par découpage et recollement permet de prouver que l'aire des quatre portions de disque contenus dans une maille est toujours égale à celle d'un disque. L'animation permet de le visualiser.



Démonstration

Le côté du losange OAMB modéisant la maille a même longueur qu'un diamètre des disques, mais son aire est variable. On rappelle que l'aire d'un parallélogramme est le produit d'un côté par la hauteur correspondante ; le côté OA reste fixe, mais la hauteur, elle, est variable. Ainsi l'aire de la maille est minimale lorsque la hauteur est minimale, ce qui est réalisé dans la dernière configuration. On peut alors faire le calcul de la compacité dans la première et la dernière des trois configurations.

Lorsque la maille est un carré, la surface occupée dans une maille est celle d'un disque de rayon $\frac{1}{2}$ soit $\pi\left(\frac{1}{2}\right)^2$ que l'on divise par 1 qui est l'aire du carré de côté unitaire. La compacité est égale exactement à $\frac{\pi}{4}$ soit environ 78,5 %.

Le cas le plus compact est obtenu lorsque le triangle AOB est équilatéral. On parle de réseau hexagonal. Un triangle équilatéral AOB de côté 1 a une hauteur de $\frac{\sqrt{3}}{2}$, donc plus grande que son côté, l'aire de AOB est donc : $\frac{1}{2}\times\frac{\sqrt{3}}{2}$. L'aire de la maille est le double de celle de AOB, et on a toujours l'équivalent d'un disque à l'intérieur. La compacité de ce réseau hexagonal est égale à $\frac{\pi/4}{\sqrt{3}/2}=\frac{\pi\sqrt{3}}{6}\approx 0{,}907$, soit environ 90,7 %.

Cette étude dans le plan permet d'introduire les notions de maille, de motif élémentaire répété périodiquement et de compacité avant de les aborder dans l'espace. Le réseau plan carré anticipe le réseau cubique simple et le réseau plan hexagonal anticipe le réseau cubique à faces centrées, dont on verra qu'il correspond à un empilement tétraédrique de sphères.

Activité 2

Télécharger les animations Geogebra © intitulées « structure cristalline : cubique simple et à faces centrées » et « maille cubique à faces centrées ». Ces animations permettent de visualiser les réseaux cubique simple et cubique à faces centrées et de conjecturer dans les deux cas la relation entre l'arête de la maille et le rayon des sphères pour assurer la tangence.

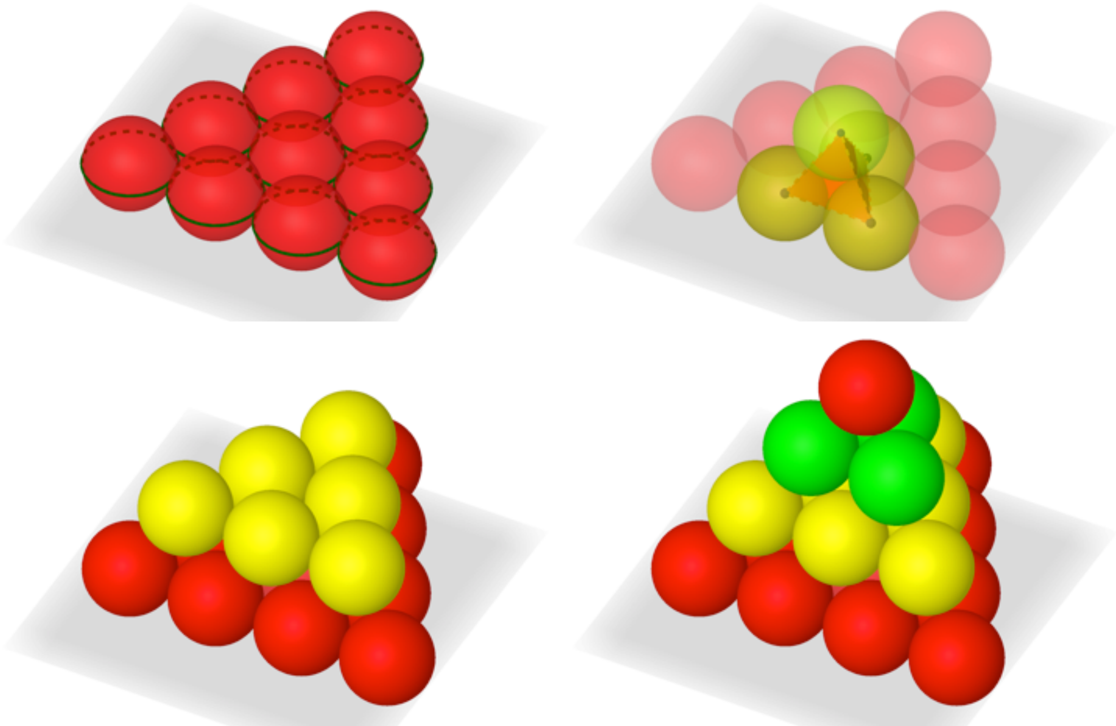
Pour aller plus loin

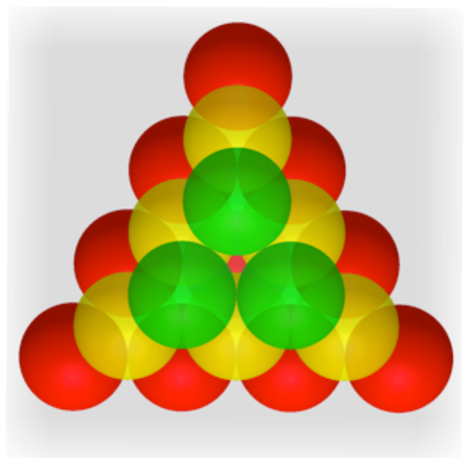
De la pile d'oranges au réseau cubique à faces centrées (CFC)

On se propose d'expliquer pourquoi des empilements d'oranges rangées à chaque couche selon un maillage hexagonal correspondent au réseau cubique à faces centrées.

Télécharger l'animation Geogebra intitulée « Empilement tétraédrique ». Les images ci-dessous sont issues de ce fichier.

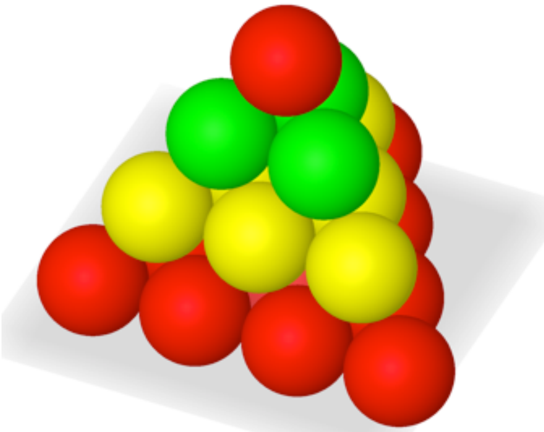
Partir d'un empilement de sphères tangentes les unes aux autres, posées sur un plan comme les disques de l'activité 1, et construire les couches supérieures pour constituer une pile tétraédrique de sphères, comme indiqué dans les figures ci-dessous.





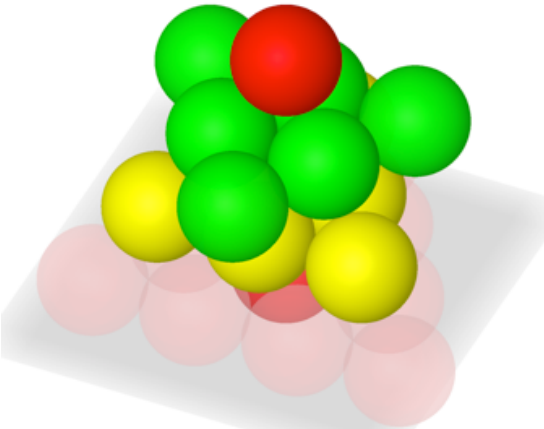
Empilement A-B-C vu du dessus

En partant de la pile tétraédrique, l'ajout de trois sphères à la couche C fait apparaître la maille CFC.

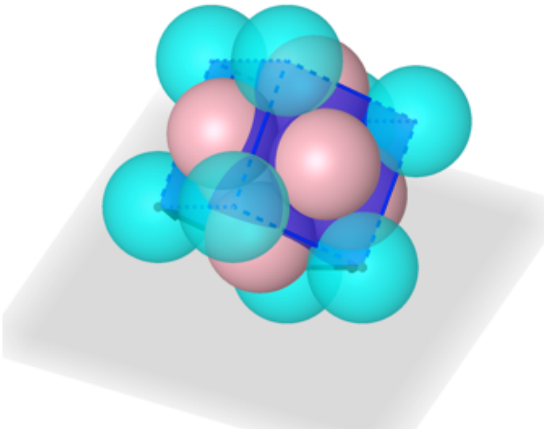


Empilement A-B-C-A de 20 sphères

Prolonger la couche C avec trois sphères



Ne garder que la sphère centrale la 1re couche A pour faire apparaitre les sphères aux sommets d'un cube et au centre de ses faces.



Le cube bleu dont les huit sommets sont les centres des sphères turquoise correspond à la maille de la structure CFC.

Réseau cubique centré et réseau hexagonal compact

Le réseau cubique centré est plus fréquent dans la nature que le cubique simple et mobilise des raisonnements similaires à ceux mis en jeu dans les cas étudiés. Pour déterminer les rayons des sphères, on coupe la maille cubique par un plan perpendiculaire à une face selon une diagonale. C'est ce plan qui passe par les centres des sphères et la section fait apparaître un triangle rectangle dont les côtés sont dans le ratio $1 : \sqrt{2} : \sqrt{3}$.

Le réseau hexagonal compact est, comme le CFC, obtenu par empilements de couches hexagonales, mais où la troisième couche étant à la verticale de la première et non décalée. Bien que différents, ces deux réseaux réalisent la compacité maximale.

Bibliographie et sitographie

- An overview of the Kepler conjecture, Thomas C. Hales, novembre 1998
- Densité maximale des empilements de sphères en dimension 3, [d'après Thomas C. Hales et Samuel P. Ferguson] (Joseph Oesterlé) Séminaire BOURBAKI 51e année, 1998-99.
- « La conjecture de Kepler est enfin vérifiée » revue La Recherche n° 493 nov. 2014, p15.
- Chapter 3. The Structure of Crystalline Solids, University of Virginia, Department of Materials Science and Engineering.
- Compact packings of the plane with two sizes of discs, Tom Kennedy, février 2008.