## A PROPOS DES QUASICRISTAUX

## FABRICE NAVIN

Dans un récent article de FUSION. M. Laurence Hecht nous a présenté une hypothèse sur la structure des quasicristaux1. Sa démarche est exemplaire: pédagogie, hypothèse hardie, démonstration à partir d'observations concrètes et de travaux historiques, et surtout bilan honnête des questions qui restent non résolues.

on article est une leçon qui s'oppose à la démarche « ploutoscientifique » (néologisme formé par le physicien Jean-Pierre Petit pour fustiger les chercheurs qui pensent qu'il n'est possible de faire de la recherche que dans de vastes et coûteux laboratoires. Du grec « ploutos » qui signifie cher). Laurence Hecht nous rappelle qu'une aire de battage et un bâton suffisaient à Archimède et aux anciens pour tracer de magnifiques démonstrations mathématiques dans la poussière.

Qu'est-ce qu'un quasicristal? On appelle quasicristaux des édifices cristallins qui ne respectent pas les lois de la cristallographie édictées au XIX<sup>e</sup> siècle. Les cristaux dodécaédriques, par exemple, sont interdits par les lois de la cristallographie classique. Pourtant, on les synthétise facilement en laboratoire, et une grande marque de matériel de cuisine nous propose des poêles à frire antiadhérentes qui sont recouvertes de poudre de quasicristaux.

Lors de leur découverte par Dan Sechtman en 1982, l'existence même des quasicristaux a été mise en doute, notamment par le prix Nobel Linus Pauling. Sur ce dossier aussi, ce scientifique féru d'écologie aurait mieux fait de réfléchir avant de parler : il avait déjà proposé, en 1952, un modèle pour l'ADN qui s'était révélé faux. Il plaçait les bases à l'extérieur et les phosphates à l'intérieur de la double hélice.

L'idée n'était pas stupide en soi : n'étaitce pas la structure qu'il avait si justement imaginée pour les protéines ? Pauling avait tout simplement oublié qu'en science, c'est l'expérience qui doit avoir le dernier mot. Les groupes phosphates étant chargés négativement, ils ne pouvaient que se repousser.

On retrouve cet état d'esprit déplorable dans l'actuelle polémique sur la « fusion froide ». Les lecteurs de *Fusion* savent déjà que la problématique des quasicristaux est liée à celle de la fusion froide<sup>2</sup>.

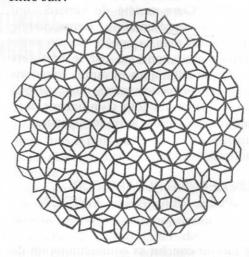
## UN PEU DE GÉOMÉTRIE:

e plan euclidien peut être pavé régulièrement par des carrés ou des triangles, et l'espace peut être pavé par des cubes ou des prismes.

Par contre, il n'est pas possible de remplir le plan à l'aide de pentagones sans laisser d'espace entre eux.

Il n'est pas non plus possible de remplir l'espace à l'aide de dodécaèdres ou d'icosaèdres.

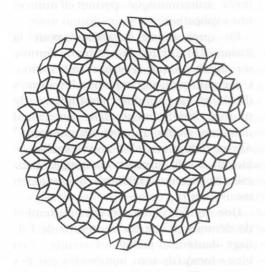
Le mathématicien Penrose a décrit des tétragones capables de remplir le plan de façon quasi-régulière, sans laisser d'espace entre eux:



Problème: si on laisse les losanges de Penrose s'assembler au hasard, cela ne marche pas. Il faut l'intervention d'un paveur pour paver le plan en utilisant des règles strictes.

Notons qu'apparaissent des motifs dodécagonaux enchevêtrés. Le cerveau humain les distingue très bien. Ce pavage est non-régulier. Néanmoins, des points matériels situés aux nœuds du réseau vont diffracter une onde selon des directions discrètes. En effet, un nombre non défini de points est aligné selon un nombre fini de directions (vérifiez vous-même avec un double-décimètre).

1. Une Solution képlérienne au problème des quasicristaux, L. Hecht, Fusion n°110. 2. Le Feu sous la Banquise, Fusion n°103. Si on utilise d'autres règles d'assemblage, le résultat est différent.



Des points matériels placés aux nœuds d'un tel réseau vont donner une figure de diffraction diffuse<sup>3</sup>.

Si on laisse les losanges de Penrose s'assembler au hasard, sans règle précise, cela ne marche plus du tout: on obtient un enchevêtrement truffé de lacunes. On peut aussi disposer les losanges selon un arrangement cristallin classique: le lecteur pourra essayer de trouver les règles d'arrangement dans ce cas.

Les chercheurs qui étudient les quasicristaux ont postulé l'existence de deux « briques » prismatiques distinctes, chacun de ces prismes étant l'équivalent tridimensionnel d'un losange de Penrose. Le problème est le même que dans le plan : le quasicristal ne peut se former en l'absence de règle d'assemblage préalable. Au hasard, cela ne marche pas! (par ailleurs, les polyèdres proposés ne correspondraient pas de façon évidente à des angles de valence connus).

Plutôt que d'utiliser des « prismes de Penrose » Laurence Hecht préfère décrire l'arrangement quasicristallin à l'aide d'icosaèdres et de dodécaèdres emboîtés. De façon hardie, il nous propose une nouvelle façon de voir les quasicristaux. Le problème de l'auto-arrangement des atomes demeure : ainsi qu'il l'a bien noté, toutes les positions possibles pour les atomes ne sont pas équivalentes. On a l'impression que le cristal « recherche » une symétrie dodécaèdrique.

Cette remarque paradoxale pose évidemment problème: autant il est tout à fait justifié d'imaginer que l'évolution biologique a été guidée au cours de l'évolution par un « dessein inspiré », (« Intelligent Design » en anglais), autant il est difficile d'imaginer l'intervention d'une « main invisible » guidant individuellement chaque atome vers une place assignée pendant la solidification d'un alliage dans un creuset.

Les lecteurs de *Fusion* ont à leur disposition les indices qui leur permettent de résoudre ce problème paradoxal. Dans un précédent article sur les quasicristaux, nous avions cité les hypothèses formulées par Thierry Dauxois, alors que ce brillant enseignant de l'Ecole Normale Supérieure était encore étudiant<sup>4</sup>.

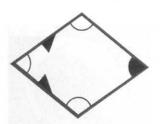
Selon Dauxois, un arrangement quasicristallin est un ensemble d'oscillateurs anharmoniques. Les vibrations thermiques du réseau (phonons) s'additionnent de façon constructive dans des zones précises qu'il appelle « breathers ». Les atomes situés à ces endroits particuliers vibrent plus fort : en deux mots, ils sont plus chauds.

Nous avons fait remarquer que cette hypothèse impliquait que l'effet inverse se produise dans d'autres endroits du cristal, de façon à maintenir l'équilibre thermique. Appelons ces endroits où les atomes sont plus « froids » des « freezers ».

En considérant cette hypothèse, la croissance paradoxale des quasicristaux s'explique aisément: si certains points sont plus « chauds » que les autres, les atomes (ou bien les molécules) auront moins tendance à s'y agréger. Inversement, les ions ou les atomes auront tendance à se fixer définitivement aux endroits les plus « froids » du réseau cristallin.

On voit que c'est la structure même du réseau cristallin qui guide sa croissance, selon un processus autosimilaire. Si cette hypothèse est exacte, une des conséquences doit être que la structure des quasicristaux doit comporter d'autant moins de défauts que le quasicristal est gros. En cristallographie classique, c'est le contraire: les défauts s'accumulent au hasard et plus le cristal est gros, plus il est difficile d'éviter les défauts. Ce fait a des conséquences très gênantes en microélectronique, ainsi que dans la technologie des lasers de puissance et des miroirs de focalisation pour les sources synchrotron.

Il est clair que seule l'expérience pourra valider une telle hypothèse et la technologie Mössbauer semble s'imposer dans ce domaine. Dans une poudre de quasicristaux nanométriques contenant des atomes de fer, on doit observer plusieurs environnements thermiques différents

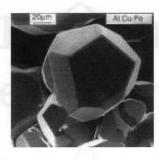




Les losanges du pavage de Penrose. Les sommets s'assemblent selon leur couleur et les flèches se complètent

3. Les pavages, les quasicristaux et le 18° problème de Hilbert, Marjorie Senechal, Structural Topology, 7-25, 20,

4. T. Dauxois, Thèse de doctorat, Université de Bourgogne (1993). Dynamique non linéaire et mécanique statistique d'un modèle d'ADN.



Microcristaux d'alliage AlCuFe

5. M. E. Manley et al. Formation of a New Dynamical Mode in alpha-Uranium Observed by Inelastic X-Ray and Neutron Scattering, Phys. Rev. Lett. 96, 125501 (2006) 6. Fusion n°49, janvierfévrier 1994, Hypothèse de la diafluidité.

7. F. Premuda, D.Boni, and

De Pasca. La Supercondut-

tivita Nel Palladio Carico Di Deuterio, XXI Secolo Scienza e Technologia, 1:24-31, 1997 8. Kim, Y.E., et al. Proposal for New Experimental Tests of the Bose-Einstein Condensation Mechanism for Low Energy Nuclear, Proceedings of ICCF 11, 2004. Marseille, France. 9. E. Kim et al. Observation of Superflow in Solid Helium, Science nº 305 (5692),1941 24 septembre 2004. Hélium superfluide princeps. 11. Kasagi et al. Kinematical measurement for the D+D --> p+t Reaction in metals at Ed ~ 10keV. Are Target Deuterons

*in Motion Before Collide*? Proc. ICCF12, in press.

pour cet élément. Il doit exister un équilibre entre le fer situé aux endroits « froids » du réseau et celui situé aux endroits « chauds » (essentiellement sur les parois en croissance). Au fur et à mesure de la croissance des cristaux, la raie du fer « chaud » doit diminuer en fonction, grosso modo, du rapport du volume à la surface, c'est-à-dire en fonction du rayon du cristal. Cet effet doit être relativement facile à mettre en évidence.

Cette hypothèse a des conséquences importantes en physique nucléaire: ainsi une équipe des fameux laboratoires de Los Alamos vient-elle de découvrir que dans un bloc d'alliage d'uranium, certains atomes sont plus «chauds» que d'autres5. Cette découverte a des conséquences évidentes, puisque la section efficace de fission dépend justement de la température. En général, plus la température d'un réacteur nucléaire est élevée, plus le nombre de fissions diminue, parce que le spectre des neutrons recouvre la zone des « raies de résonance de capture » (toutes choses étant égales par ailleurs). C'est ce qui donne une stabilité intrinsèque aux réacteurs nucléaires bien conçus. Si des phases quasicristallines apparaissent à certaines températures, on doit observer une variation brusque de la réactivité, alors que la neutronique classique prévoit une variation relativement continue de cette réactivité. Cet effet doit pouvoir être mis en évidence assez facilement, pour peu que l'on prête attention à sa détection.

Dans le domaine de la « fusion froide » les implications sont évidentes : on sait que les molécules de deutérium D, se dissocient à la surface du palladium. L'électron unique de chaque atome de deutérium est mis en commun avec les électrons de conduction et le noyau de deutérium s'insère dans le réseau cristallin du palladium. On pensait jusqu'alors que cette insertion se faisait au hasard mais il est possible que les noyaux de deutérium se disposent de façon quasicristalline à l'intérieur du palladium. Les deutérons se placeront évidemment aux endroits les plus « froids ». Il se peut qu'à ces endroits particuliers le refroidissement anharmonique soit suffisamment intense pour permettre aux fonctions d'onde des noyaux de deutérium de se recouvrir et de former une phase quantique: un condensat de Bose-Einstein (CBE). L'hypothèse de la formation d'un CBE dans l'alliage palladium-deutérium a déjà été avancée par plusieurs auteurs, sans que ceux-ci n'arrivent à expliquer comment les

noyaux de deutérium pouvaient se trouver refroidis. <sup>6-8</sup> L'hypothèse du refroidissement anharmonique permet d'avancer une explication.

En quoi est-ce important pour la fusion? Un CBE réagit « en bloc » comme un objet unique à toute sollicitation. C'est pourquoi, par exemple, les atomes d'hélium superfluide continuent de tourner indéfiniment dans un cristal d'hélium solide à basse température. 9 Aucun défaut cristallin n'est capable de fournir suffisamment d'énergie pour ralentir plusieurs milliards d'atomes en mouvement.

Une équipe japonaise vient justement de démontrer que les deutérons de l'alliage deutérium-palladium reculent « en bloc » lorsqu'ils sont bombardés par des protons, d'une manière analogue à l'effet Mössbauer. 10

Si les deutérons reculent en bloc, alors ils peuvent emporter l'énergie libérée par une fusion. Dans la fusion classique, cette énergie ne peut s'évacuer que par la rupture du noyau d'hélium excité formé par la fusion de deux noyaux de deutérium: il y a émission de neutrons rapides et de protons, et il y a production de tritium radioactif.

Réaction de fusion classique : D + D à  $He_4^* \rightarrow T + p$ D + D à  $He_4^* \rightarrow He_3 + n$ 

Réaction de fusion froide : D + D à  $He_4^* \rightarrow He_4 +$  énergie thermique cédée au CBE

On peut se demander pourquoi l'arrangement quasicristallin du deutérium au sein du palladium n'a pas été mis en évidence jusqu'à maintenant par radiocristallographie. Il faut se souvenir que les atomes légers comme le deutérium et l'hydrogène sont justement invisibles sur les diagrammes de diffraction des rayons y

Rien n'empêche, par contre, d'utiliser la diffraction des neutrons. Ces recherches concernent le palladium deutérié, bien sûr, mais aussi des composés utilisés industriellement dans l'industrie des piles, des accumulateurs portables et des piles à combustible, comme par exemple les hydrures de nickel, les oxydes de manganèse et les bronzes de phosphate. Si on cherche bien, verra-on apparaître des symétries interdites par la cristallographie classique ?