

La cristallographie, science et techniques

En 1914, Max von Laue obtient le prix Nobel de physique pour sa découverte de la diffraction des rayons X par les cristaux. Un siècle plus tard, l'Organisation des Nations Unies a proclamé 2014, centenaire du prix Nobel de Laue, « Année internationale de la cristallographie ». En 1915, le prix Nobel de physique est de nouveau décerné dans le champ de la cristallographie, à William Henry et William Lawrence Bragg, pour l'analyse de la structure cristalline au moyen des rayons X. La Société Française de Physique a souhaité célébrer ces deux centenaires en publiant un numéro spécial sur la cristallographie, discipline qui a en quelque sorte irrigué l'ensemble des sciences de la nature (physique, chimie, minéralogie, métallurgie et science des matériaux, biologie, sciences de la Terre...) et a produit à ce jour une quinzaine de prix Nobel.

Qu'est-ce que la cristallographie ? Au départ, cette science a été définie comme celle qui étudie les propriétés des cristaux, et plus précisément l'organisation des atomes et des molécules dans les solides cristallins, où ils sont distribués de manière régulière, formant un « réseau » périodique dans les trois directions de l'espace. La cristallographie s'est révélée une science et une technique multidisciplinaire, d'une grande utilité dans toutes les sciences de la nature, mais où la physique joue un rôle crucial. En effet, ce sont les techniques de physique (diffraction des rayons X, des électrons et des neutrons, EXAFS, microscopie électronique, résonance magnétique nucléaire, et bientôt laser à électrons libres) qui sont à l'origine de notre connaissance des systèmes cristallins. Les concepts issus de la cristallographie irriguent tout un pan de la physique des solides : zones de Brillouin, théorie des bandes, phonons...

Or, depuis le milieu du 20^e siècle, le champ de la cristallographie s'est considérablement étendu :

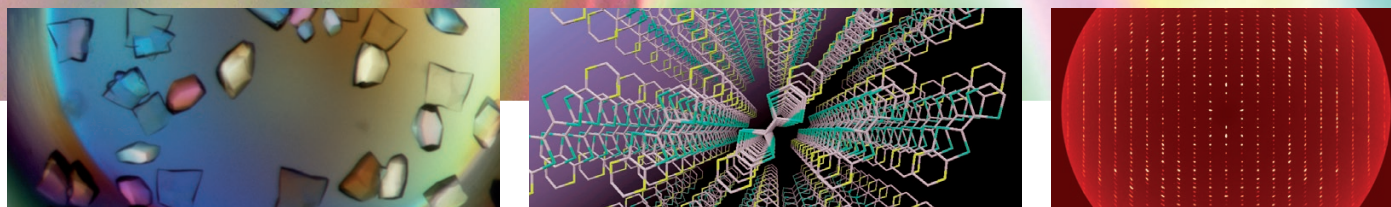
- aux structures cristallographiques de basse dimension : monocouches ordonnées d'atomes ou de molécules adsorbés sur des surfaces solides ; nanocristaux et nanotubes ; graphène...
- aux structures magnétiques ordonnées, responsables du ferromagnétisme et de l'antiferromagnétisme, où les éléments qui s'ordonnent sont les moments magnétiques portés par certains atomes ;

- aux phases mésomorphes ou cristaux liquides, assemblages de molécules anisotropes, qui possèdent en moyenne un ordre à longue distance en orientation ou en position, tout en conservant un désordre de type liquide ;
- aux défauts cristallins : lacunes et interstitiels, impuretés, dislocations, interfaces, textures d'orientation cristalline dans les polycristaux, déformations dues aux contraintes internes ou appliquées...
- la définition d'un cristal s'est élargie avec la découverte de solides présentant un ordre à longue distance sans périodicité tridimensionnelle, mais qui peut être interprété dans des espaces de dimension supérieure : structures incommensurables et quasicristallines ;
- enfin, la notion de cristal peut être étendue à des systèmes périodiques à l'échelle mésoscopique : réseaux de vortex dans les supraconducteurs, cristaux colloïdaux, cristaux coulombiens ultra-froids...

Ce numéro ne peut évidemment pas aborder tous ces aspects. Nous avons décidé de l'organiser en trois parties.

La première partie, « Cristaux et cristallographie », fait d'abord le bilan des multiples actions, en particulier en direction des plus jeunes, menées en France dans le cadre de l'année internationale de la cristallographie : expositions, animations, cycles de conférences, concours de croissance cristalline, jeux... (R. Guinebretière *et coll.*). L'année 2014 aura aussi vu la réouverture de la galerie de minéralogie du Muséum national d'Histoire naturelle à Paris, et une initiative importante de l'Union Internationale de la Cristallographie pour le développement de cette discipline en Afrique (C. Lecomte).

Puis sont présentées les notions nécessaires pour aborder les deux parties suivantes. B. Toudic trace un panorama de l'évolution historique de la notion de cristal, jusqu'à la découverte des phases incommensurables modulées et des quasicristaux, qui présentent un ordre à grande distance sans symétrie de translation, ce qui a amené à modifier en 1992 la définition officielle du cristal. Enfin, cette partie se termine avec une liste d'ouvrages recommandés et un glossaire.



La partie centrale porte sur des « Développements expérimentaux récents en cristallographie ». Les deux premiers articles sont consacrés à la résolution de la structure de nano-objets ordonnés. M.S. Amara *et coll.* montrent comment la combinaison de la diffusion des électrons sur un objet unique et de celle des rayons X sur un volume plus important permet de déterminer la structure individuelle et d'ensemble des nanotubes. H. Klein expose les possibilités offertes par la diffraction électronique en précession pour la résolution de la structure de nanocristaux individuels.

É. Collet *et coll.* nous présentent le laser X à électrons libres (X-FEL), qui ouvre des perspectives fascinantes pour observer des mouvements atomiques en temps réel, ou faire de l'imagerie à l'échelle atomique d'objets très petits, tels que des macromolécules ou des virus. S. Cadars *et coll.* montrent comment la résonance magnétique nucléaire (sonde strictement locale), associée à la modélisation moléculaire, permet de décrire la structure de systèmes partiellement désordonnés au-delà de la vision moyenne à grande distance donnée par la diffraction.

Les neutrons, grâce à leur faible absorption par la matière, permettent d'étudier des matériaux en volume dans des conditions extrêmes de température, de pression ou d'environnement chimique, et de faire des études cinétiques *in situ* (L. Laversenne et T. Hansen). La diffraction de neutrons polarisés est une technique unique pour obtenir les cartes de densité de *spin* dans des cristaux magnétiques : M. Deutsch *et coll.* retracent les étapes ayant conduit à une « première », la détermination expérimentale de la densité d'électrons résolue en *spin* dans un cristal magnétique moléculaire. Enfin, J.S. Micha et O. Robach nous montrent comment la diffraction Laue, avec un micro-faisceau de rayonnement X synchrotron de haute énergie, permet de caractériser les déformations et l'orientation grain par grain dans un polycristal.

La dernière partie présente quelques cas d'études de « Cristaux imparfaits ou exotiques ». Si la théorie du comportement d'une dislocation individuelle dans un cristal est bien connue depuis les années 1960, ce n'est pas le cas de leur comportement collectif, qui gouverne la plasticité cristalline. Des avancées importantes

dans ce domaine ont été obtenues par des simulations numériques à l'échelle mésoscopique : c'est l'objet de l'article de B. Devincere. T. Baudin et ses co-auteurs montrent l'importance de la détermination des textures cristallines, c'est-à-dire de l'orientation des grains dans un polycristal, pour de nombreux problèmes industriels tels que l'optimisation de la mise en forme de tôles ou de fils métalliques.

Enfin, deux articles illustrent l'élargissement de la notion de cristal à des systèmes d'objets ordonnés de dimensions micrométriques : les cristaux colloïdaux (L. Cipelletti et L. Ramos), sur lesquels on peut sonder des mécanismes physiques non accessibles sur les systèmes atomiques et moléculaires, telle que la dynamique sous sollicitation des joints de grains ; et les cristaux d'ions piégés à très basse température dans des réseaux créés par interférence de faisceaux lasers (O. Dulieu et S. Willitsch), qui représentent l'élément de base d'horloges de très grande précision, et constituent une technologie originale pour le développement d'un ordinateur quantique.

Quel est l'avenir de la cristallographie ? Dans ce numéro, cette question est abordée dans l'éditorial d'A. Fontaine et dans l'article de R. Guinebretière, J.-L. Hodeau et B. Capelle. Technique utilisée très largement dans toutes les sciences « dures » et en biologie, mais aussi dans les laboratoires de recherche appliquée et dans l'industrie, il est indispensable que les pouvoirs publics prennent conscience que la cristallographie est une science dont les récents progrès spectaculaires, tant au niveau des concepts et des développements expérimentaux, que de son couplage avec les calculs théoriques *ab initio* et la simulation numérique, démontrent à quel point l'enseignement de cette discipline reste primordial. Ce numéro spécial de *Reflets de la physique* se situe dans cette optique.

Je remercie le Comité de pilotage de l'AICr2014, et plus particulièrement René Guinebretière et Pascale Launois, pour l'aide apportée à la réalisation de ce numéro.

Charles de Novion
Rédacteur en chef de *Reflets de la physique*