

SUR LES FONDEMENTS DE LA CRISTALLOGRAPHIE GÉOMÉTRIQUE: UNE DÉMONSTRATION ÉLÉMENTAIRE DE LA STRUCTURE RÉTICULAIRE

G. SABATIER

Centre de Synthèse et Chimie des Minéraux, C.N.R.S., rue de la Férollerie,
45045 Orléans Cedex, France

SOMMAIRE

La structure réticulaire est présentée comme une conséquence de la définition géométrique générale du cristal: un ensemble obtenu par répétition de motifs congruents ou énantiomorphes, symétrique, tridimensionnel, remplissant l'espace avec une densité partout finie. On donne une démonstration élémentaire de ce théorème fondamental qui est à la base de la cristallographie géométrique. La démonstration est faite en deux étapes: on montre d'abord qu'un ensemble satisfaisant à la définition générale ne comporte ni axes de rotation ni axes hélicoïdaux irrationnels (c'est-à-dire où l'angle de rotation est de la forme $2\pi h$, avec h irrationnel); on en déduit l'existence de trois translations non coplanaires parmi les opérations de symétrie.

ABSTRACT

Reticular structure is presented as a result of the general geometrical definition of crystals: a symmetrical, three-dimensional set obtained by repetition of congruent or enantiomorphic motifs filling space with a density everywhere finite. An elementary proof is given of this fundamental theorem which is the basis of geometrical crystallography. The proof is presented in two steps: it is first shown that a set satisfying the general definition cannot contain irrational rotation or screw axes (*i.e.*, with rotation angle of the form $2\pi h$, with h irrational); then it is inferred that there exist three non-coplanar translations among the symmetry operations.

INTRODUCTION

Lorsqu'on cherche à construire une cristallographie géométrique "rationnelle", comme on dit mécanique rationnelle, pour reprendre une expression de Mauguin (1955), on est amené à rechercher quelles sont les propriétés géométriques minima qui suffisent à caractériser le cristal et dont toutes les autres propriétés découlent. On est ainsi conduit à la définition très générale suivante.

Définition géométrique du cristal

(a) Le cristal est formé par la répétition dans

l'espace de motifs géométriquement égaux. Ces motifs peuvent être congruents ou énantiomorphes. (b) Le cristal est symétrique. De façon plus précise, tout déplacement (au sens large, en y incluant les opérations de seconde espèce qui transforment un motif en son énantiomorphe) transportant un motif sur un autre motif, transporte tous les motifs sur d'autres motifs. (c) Les motifs forment un édifice tridimensionnel. Ils remplissent l'espace. Pour un cristal donné on peut fixer une longueur finie L telle qu'il existe au moins un motif à l'intérieur d'une sphère de rayon L centrée sur un point quelconque. (d) La densité des motifs est partout finie. Si l'on considère une sphère centrée sur un point quelconque de l'espace, le rapport du nombre des motifs contenus dans la sphère à son volume est fini (éventuellement nul) quel que soit le rayon de la sphère. Cette condition est évidemment nécessaire dans le cas de motifs matériels.

Structure de groupe des opérations de symétrie

On déduit immédiatement des conditions (a) et (b) un grand nombre de conséquences bien connues. Rappelons certaines d'entre elles qui nous seront utiles dans la suite. Les déplacements, ou opérations de symétrie du cristal, forment un groupe. Si une opération existe, toutes les opérations qu'on en déduit par répétition (les puissances de cette opération) existent aussi. Il en est de même de l'opération inverse et de ses puissances. Si deux opérations de symétrie existent, toutes les opérations qu'on en déduit en multipliant une puissance quelconque, positive ou négative, de la première par une puissance quelconque, positive ou négative, de la seconde existent aussi.

Si l'on matérialise dans l'espace les divers éléments géométriques, vecteurs libres de translation, centres, axes, plans de symétrie, tous ces éléments sont transformés par les opérations de symétrie comme les motifs eux-mêmes. Si le cristal possède des motifs énantiomorphes et, par suite, des opérations de première et de seconde espèces, les opérations de première espèce forment un sous-groupe d'indice 2. De façon moins technique les motifs vont par paires

congruent-énantiomorphe. Le sous-ensemble que l'on déduit d'un motif donné par toutes les opérations de symétrie de première espèce satisfait lui aussi aux conditions (a) à (d).

Le problème de la structure réticulaire

Les conditions (a) et (b) ne suffisent pas à elles seules à caractériser le cristal. Elles sont, par exemple, satisfaites pour un ensemble qui est formé de motifs déduits d'un motif donné par toutes les opérations d'un groupe ponctuel, qui laisse fixe un point de l'espace, ou encore, pour un ensemble déduit d'un motif donné par une succession indéfinie de déplacements autour d'un axe hélicoïdal, de translation et rotation quelconques. Mais ni dans un cas, ni dans l'autre, on n'obtient, géométriquement parlant, un cristal. C'est pourquoi il est nécessaire de leur adjoindre les conditions (c) et (d).

Il est remarquable que dans la définition du cristal ainsi donnée, il ne soit fait nulle mention de la structure réticulaire, c'est-à-dire de l'existence de trois translations non-coplanaires parmi les opérations de symétrie. C'est qu'en effet cette triple périodicité est une *conséquence* des conditions (a) à (d). Tout ensemble satisfaisant à ces conditions est *nécessairement* triplement périodique. Cette proposition peut être considérée comme le premier théorème, et le théorème fondamental, de la cristallographie géométrique. Pourtant, sauf rares exceptions (Delaunay 1934, Mauguin 1955), ce théorème est rarement mentionné dans les exposés modernes, et moins souvent encore démontré. Il paraît plus simple d'admettre l'existence de la structure réticulaire comme une donnée immédiate de l'expérience et d'éviter une démonstration qui, sous sa forme classique, repose sur des propositions difficiles concernant les groupes de déplacements (Jordan 1869). Mais en suivant une telle démarche on parvient à une vue tronquée et moins harmonieuse des bases de la cristallographie géométrique. En particulier la question reste alors posée de savoir s'il ne pourrait exister d'autres états de la matière que l'état cristallin qui seraient symétriques, rempliraient l'espace, mais ne seraient pas triplement périodiques. Le théorème en question permet de répondre par la négative.

Nous nous proposons de donner ici une démonstration élémentaire de ce théorème. Nous montrerons d'abord qu'un ensemble satisfaisant aux conditions (a) à (d) ne peut posséder d'axes de rotation ou d'axes hélicoïdaux irrationnels. Nous en déduirons ensuite l'existence de la triple périodicité. Les axes rationnels et irrationnels jouant un rôle essentiel dans la démonstration, nous commencerons par rappeler leur définition et certaines de leurs propriétés.

PROPRIÉTÉS DES AXES RATIONNELS ET IRRATIONNELS

Axes de rotation rationnels

Un axe de rotation, noté $A(\alpha)$, fait tourner les motifs autour d'une droite A dans un sens convenu, par exemple celui de la rotation des aiguilles d'une montre, d'un angle $\alpha = 2\pi h$. Si l'axe est rationnel, h est une fraction a/b , avec $a < b$, que l'on peut toujours supposer réduite de façon que a et b soient premiers entre eux. Soit H la trace de A sur le plan de la figure, supposé normal à A , et soit P_0 un point de ce plan (Fig. 1). Par rotation de $2\pi a/b$ on passe de P_0 à P_1 , par rotation de $2 \times 2\pi a/b$ on passe à $P_2 \dots$ par rotation de $b \times 2\pi a/b$ on retrouve P_0 . Les points $P_0, P_1, P_2 \dots P_b = P_0$ occupent les sommets d'un polygone régulier de b côtés, mais, sauf dans le cas où $a = 1$, ces points ne se disposent pas à la suite les uns des autres sur la circonférence; ils se présentent dans un ordre capricieux qui dépend de la valeur de a .

Axes de rotation irrationnels

Ici h est un nombre irrationnel que l'on peut développer en fraction continue. Soit a/b l'un des termes, par excès, de ce développement; h peut être mis sous la forme:

$$h = a/b - \epsilon/b^2 \quad (1)$$

où a et b sont deux entiers premiers entre eux, $a < b$, et où ϵ est un nombre irrationnel compris entre 0 et 1. Si, comme précédemment (Fig. 1), partant de P_0 on effectue b rotations successives, on obtient b points $P'_1, P'_2, \dots P'_b$; mais maintenant P'_b ne coïncide pas avec P_0 .

Exemple: Soit la rotation irrationnelle $\alpha = 2\pi/\sqrt{3}$. Le développement de $1/\sqrt{3}$ en fraction continue donne les approximations suivantes par excès: $3/5, 11/19, 41/71, 153/265 \dots$ Nous limitant au premier terme nous pouvons écrire:

$$1/\sqrt{3} = 3/5 - \epsilon/5^2 \quad (2)$$

où $\epsilon = 0.56624327 \dots$ C'est avec ces données qu'a été construite la Figure 1.

On remarque que chaque point P'_i tombe entre deux points P_i consécutifs sur la circonférence. Cette propriété est générale. En effet la longueur Δi de l'arc séparant P_i de P'_i s'écrit:

$$\Delta i = i2\pi a/b - i2\pi(a/b - \epsilon/b^2) = \epsilon i2\pi/b^2 \quad (3)$$

i étant au plus égal à b , et ϵ étant compris entre 0 et 1, Δi est inférieur à l'écart $2\pi/b$ séparant deux points P_i consécutifs sur la circonférence.

Comme b peut être pris supérieur à tout nombre fixé à l'avance en choisissant la frac-

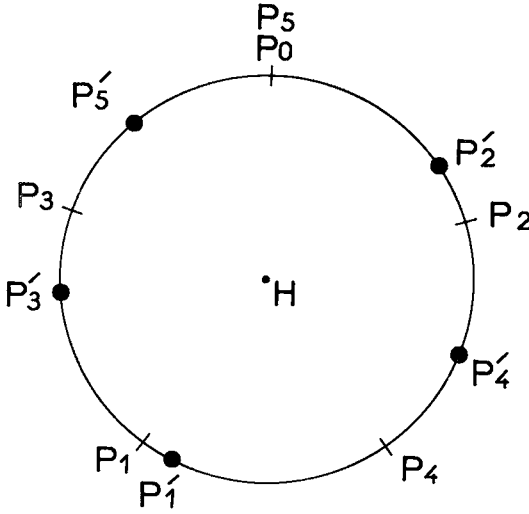


FIG. 1. Suite des points P_i obtenus par rotation de P_0 , de $2\pi \times 3/5$, autour de H et des points P'_i obtenus par rotation de $2\pi/\sqrt{3}$.

tion a/b assez loin dans le développement de h en fraction continue, on tire de cette discussion deux conclusions essentielles: (1) Les points $P'_1, P'_2 \dots$ sont tous distincts et leur nombre peut être accru sans limite; (2) la longueur de l'arc séparant deux points P'_i consécutifs sur la circonférence est inférieure à $2 \times 2\pi/b = 4\pi/b$ et peut être rendue aussi petite que l'on veut.

Axes hélicoïdaux rationnels et irrationnels

Un axe hélicoïdal, noté $A(\alpha, t)$, de rotation α et de translation t , est dit rationnel ou irrationnel selon que α étant mis sous la forme $\alpha = 2\pi h$, h est rationnel ou irrationnel. Si l'axe est rationnel, avec $h = a/b$, on retrouve après b rotations un motif ayant la même orientation que le motif initial et qui s'en déduit par une translation bt parallèle à A . Dans un groupe de déplacements comportant un axe hélicoïdal rationnel on trouve donc aussi une translation. Il n'en est plus de même si l'axe est irrationnel. Les motifs s'enroulent autour de lui sans que deux d'entre eux puissent être déduits l'un de l'autre par une translation.

Combinaisons d'axes

Si un ensemble de motifs satisfait aux conditions (a) à (d) et qu'il possède deux opérations de symétrie, nous avons vu qu'il possède aussi l'opération produit d'une puissance quelconque de la première par une puissance quelconque de la seconde. On a, en particulier, les résultats

suivants qui nous seront utiles dans la suite et dont la démonstration est tout à fait classique (e.g., Jaeger 1917, Buerger 1956). S'il existe deux axes de rotation $A(\alpha)$ et $B(\beta)$ concourant en un point O , il existe un troisième axe de rotation $C(\gamma)$ passant par O , et A, B, C ne sont pas coplanaires (théorème d'Euler). S'il existe deux axes de rotation $A(\alpha)$ et $B(\beta)$ non concourants et non parallèles, il existe un axe hélicoïdal $C(\gamma, t)$ de translation t non nulle, ce que nous sous-entendrons toujours lorsqu'il sera question d'axes hélicoïdaux dans la suite, et A, B, C ne sont pas coplanaires. S'il existe un axe de rotation $A(\alpha)$ et une translation t non perpendiculaire à A , il existe un axe hélicoïdal $A'(\alpha, t')$ parallèle à A . S'il existe deux axes hélicoïdaux parallèles $A(\alpha, t)$ et $A'(\alpha, t)$ de mêmes rotation et translation, il existe une translation t' perpendiculaire à leur direction commune. Dans le cas particulier où $\alpha = \pi$, t' est, de plus, parallèle au plan contenant les deux axes. S'il existe deux axes hélicoïdaux $A(\pi, t)$ et $A'(\pi, t')$, de rotation π , non parallèles et non concourants, il existe un axe hélicoïdal $A''(\alpha, t')$ perpendiculaire à A et A' . Nous introduirons maintenant la seconde notion générale dont nous aurons besoin, celle de point équivalent.

POINTS ÉQUIVALENTS

Soit P un point quelconque de l'espace. Si la condition (c) est satisfaite, il existe un motif M dans une sphère, de rayon fini L , centrée sur P . Toute opération de symétrie qui transforme M en un motif M' , transforme P en un point P' dit point équivalent. A l'ensemble des motifs on peut ainsi faire correspondre un ensemble de points équivalents. On sait que ces points équivalents jouent un grand rôle en cristallographie et qu'ils possèdent de nombreuses propriétés intéressantes. Nous mentionnerons seulement l'une d'entre elles qui nous sera utile dans la suite: les points équivalents à un point donné, comme les motifs, remplissent l'espace. De façon plus précise, il existe au moins un point équivalent à l'intérieur de toute sphère de rayon $2L$, où L est défini par la condition (c).

Cette proposition est presque évidente. En effet considérons (Fig. 2) un point quelconque P , une sphère S de rayon L et un motif M contenu dans cette sphère (d'après la condition (c) il en existe au moins un). Soit O un autre point quelconque. Il existe un motif M' dans une sphère Σ centrée sur O , de rayon L . L'opération qui fait passer de M à M' , transforme P en P' et S en S' . Comme les sphères S' et Σ contiennent toutes deux M' , elles sont nécessairement sécantes et, par suite, la distance de O à P'

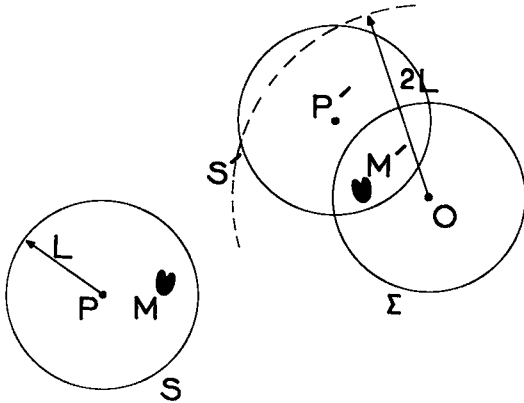


FIG. 2 S'il existe un motif M à l'intérieur d'une sphère S , de rayon L , centrée sur un point quelconque P , il existe un point équivalent P' dans une sphère, de rayon $2L$, centrée sur un autre point quelconque O .

est inférieure à la somme de leurs rayons, soit $2L$.

UN ENSEMBLE E SATISFAISANT AUX CONDITIONS (a) à (d) NE POSSÈDE PAS D'AXES DE ROTATION IRRATIONNELS

Supposons, en effet, qu'il existe un axe de rotation irrationnel. Nous avons vu que l'on obtient un nombre aussi grand que l'on veut de motifs tous distincts par des rotations répétées

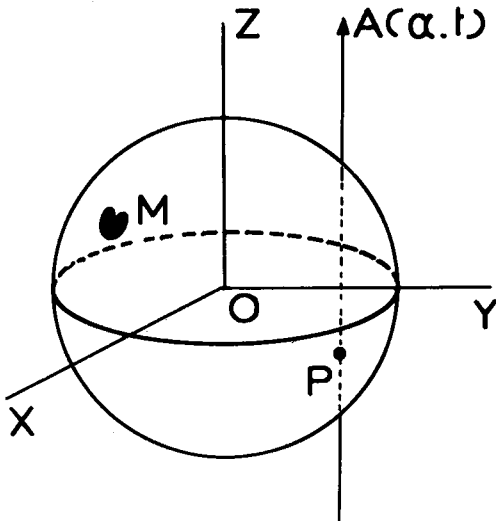


FIG. 3 Le motif M contenu dans la sphère de centre O est transformé par b déplacements autour de $A(\alpha, t)$ qui passe par un point P intérieur à la sphère.

autour de cet axe. Soit P un point de l'axe. Comme les motifs remplissent l'espace on peut trouver un motif à l'intérieur d'une sphère, de rayon fini L , centrée sur P (condition (c)). Les autres motifs qu'on en déduit par rotation sont aussi contenus dans cette sphère. On a donc une infinité de motifs contenus dans une sphère de rayon fini, en contradiction avec la condition (d).

UN ENSEMBLE E SATISFAISANT AUX CONDITIONS (a) à (d) NE POSSÈDE PAS D'AXES HÉLICOÏDAUX IRRATIONNELS

La démonstration requiert deux propositions auxiliaires.

Lemme 1: Soit une sphère de centre O et de rayon R contenant un motif M . Soit $A(\alpha, t)$ un axe hélicoïdal, rationnel ou non, passant par un point P également intérieur à la sphère (Fig. 3). Le motif M' déduit de M par b déplacements répétés autour de A est contenu dans une sphère centrée sur O de rayon $5D$, en désignant par D la plus grande des deux longueurs R et bt .

Introduisons un trièdre trirectangle $OXYZ$ tel que OY soit dans le plan OPA et perpendiculaire à $A(\alpha, t)$ et OZ lui soit parallèle. Désignons par x, y, z les coordonnées d'un point quelconque de M , par x', y', z' les coordonnées du point équivalent de M' . Comme $|x|, |y|, |z| < R$, on a toujours:

$$|x'| < 2R \quad |y'| < 3R \quad |z'| < R + bt \quad (4)$$

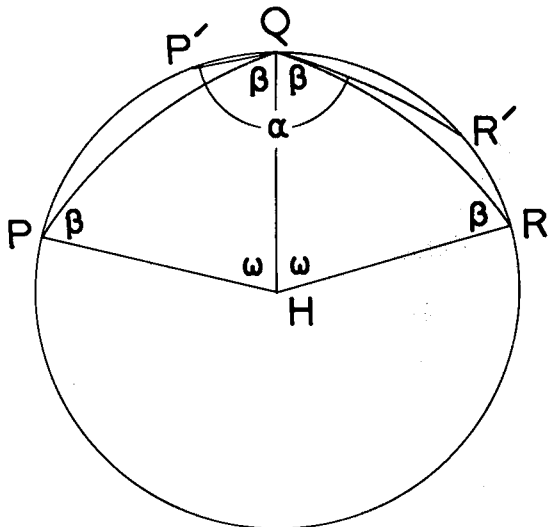


FIG. 4. Borne inférieure de l'angle d'un triangle sphérique inscrit dans un cercle: $\alpha > \pi - \omega$.

La distance de O au point de coordonnées x', y', z' satisfait donc aux inégalités:

$$\sqrt{x'^2 + y'^2 + z'^2} < \sqrt{4R^2 + 9R^2 + (R + bt)^2} < \sqrt{4D^2 + 9D^2 + 4D^2} = \sqrt{17D} < 5D \quad (5)$$

Lemme 2: Soit H un point d'une sphère et C un cercle de centre H sur cette sphère. Soient P, Q, R trois points situés sur C tels que les triangles sphériques HPQ et HQR soient égaux et d'angle ω au sommet H . Soient P' un point situé sur C entre P et Q , et R' un point situé sur C entre Q et R (Fig. 4). L'angle α au sommet Q du triangle sphérique $P'QR'$ satisfait à l'inégalité:

$$\alpha > \pi - \omega \quad (6)$$

Les angles aux sommets P, Q, R des deux triangles HPQ et HQR sont égaux. Désignons par β leur valeur commune. Comme dans tout triangle sphérique la somme des angles excède π , on a:

$$\omega + 2\beta > \pi \quad (7)$$

d'où découle l'inégalité cherchée puisque $\alpha > 2\beta$.

Si E possède un axe hélicoïdal $A(\alpha, t)$, rationnel ou non, il possède aussi un autre axe hélicoïdal de mêmes rotation et translation

Soit P un point de l'axe $A(\alpha, t)$. Il existe un motif M à l'intérieur d'une sphère, de rayon L fini, centrée sur P (condition (c)). Multiplions M par des déplacements répétés autour de A ; on obtient une suite de motifs $M', M'' \dots$ qui s'enroulent autour de A et une suite de points $P', P'' \dots$ équivalents à P situés sur l'axe

(Fig. 5). Comme l'ensemble des points équivalents à P remplit l'espace, il existe nécessairement un point équivalent P_o non situé sur A et à distance finie de P . L'opération qui permet de passer de P à P_o transforme M en un autre motif M_o . Elle transforme également l'axe $A(\alpha, t)$ en un autre axe $A_o(\alpha, t)$, de mêmes rotation et translation, qui passe par P_o . En effet nous savons que si E satisfait aux conditions (a) et (b) ses éléments de symétrie sont multipliés par les opérations de symétrie comme les motifs eux-mêmes.

Nous supposons maintenant que les axes A et A_o sont irrationnels. Nous allons montrer que cette hypothèse est incompatible avec la condition (d). Nous distinguerons deux cas selon que A et A_o sont, ou non, parallèles.

Les axes A et A_o sont parallèles

De l'existence de ces deux axes découle celle d'une translation T perpendiculaire à leur direction commune. Transformons cette translation par des déplacements répétés autour de A , ou A_o . Nous obtenons une suite de translations T_1, T_2, \dots que nous avons représentées dans la Figure 6, en leur donnant une origine commune O , par les vecteurs $OT_1, OT_2 \dots$. Ces vecteurs se déduisent de OT par des rotations répétées de l'angle α autour de O . Comme il s'agit de rotations irrationnelles, les points $T_1, T_2 \dots$ sont tous distincts et en nombre aussi grand que l'on veut. En appliquant ces translations à un motif quelconque, nous obtiendrons des motifs distincts, appartenant tous à E , qui occupent un volume fini et peuvent être aussi nombreux que l'on veut. Ceci contredit la condition (d).

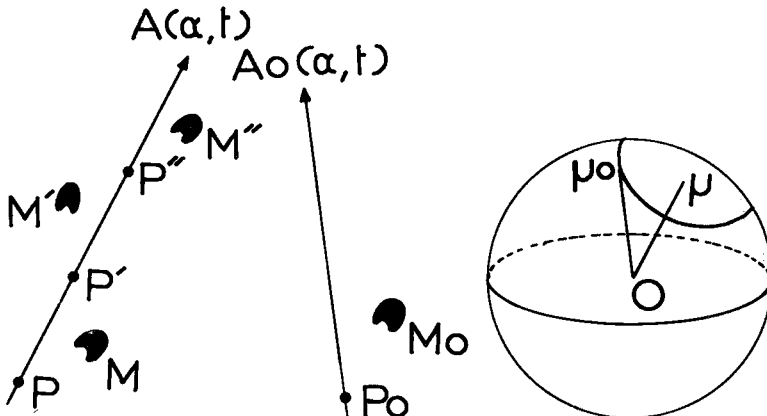


FIG. 5. L'existence d'un axe hélicoïdal $A(\alpha, t)$ entraîne celle d'un autre axe hélicoïdal $A_o(\alpha, t)$ de mêmes rotation et translation. Représentation des axes par leurs pôles sur une sphère.

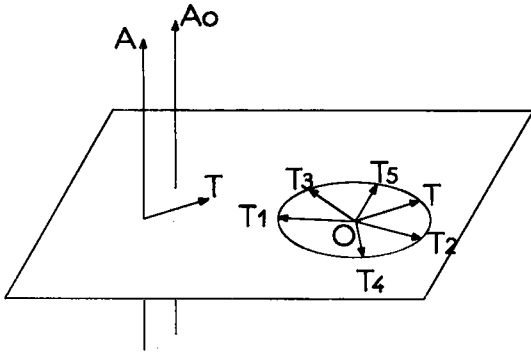


FIG. 6. L'existence de deux axes hélicoïdaux parallèles irrationnels entraîne celle d'une infinité de translations distinctes T_1, T_2, \dots

Les axes A et Ao ne sont pas parallèles

Nous allons montrer que l'on peut déduire de l'existence de ces deux axes une suite d'opérations de symétrie qui, appliquées au motif Mo , donnent une suite de motifs de densité infinie. Chaque opération transforme Mo en un autre motif. En même temps Po est transformé en un point équivalent, et Ao en un autre axe de mêmes rotation et translation.

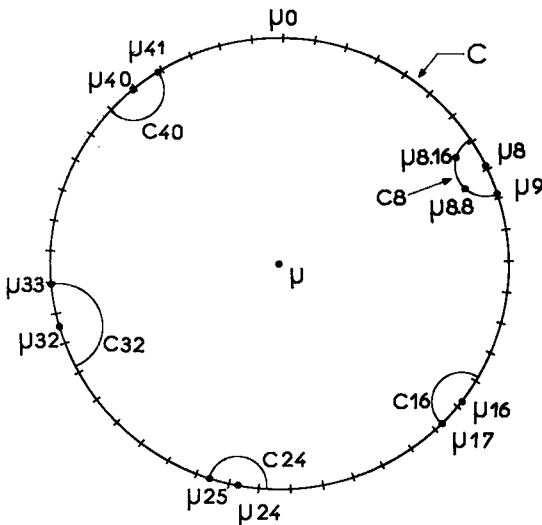


FIG. 7. Disposition des pôles μ_i sur le cercle C . La figure a été tracée pour $\alpha = \pi/\sqrt{12}$. Le développement de $1/\sqrt{12}$ en fraction continue par excès donne $13/45, 181/627, \dots$. On a choisi pour a/b la première fraction. Pour simplifier seuls les pôles μ_{8p} et μ_{8p+1} ont été représentés et les cercles ont été tracés comme s'ils étaient dans le plan de la figure alors qu'ils sont, en fait, sur une sphère.

Nous dirons de ce motif, de ce point et de cet axe qu'ils sont associés. Il est commode de suivre la marche du raisonnement en reportant sur une sphère les pôles des axes ainsi obtenus (Fig. 5). Nous désignerons par μ le pôle de l'axe A , par μ_o celui de l'axe Ao . Nous supposons d'autre part que l'on a développé en fraction continue la rotation α autour de ces axes et que l'on a retenu dans le développement une certaine fraction a/b .

Dans une première étape, nous allons transformer Mo par b déplacements successifs autour de A . Mo et Po se trouvant à distance finie de A , il est toujours possible, quelle que soit la grandeur de la translation t , d'inclure les b motifs M_i ainsi obtenus, et les b points associés P_i , dans une sphère de rayon bt . Il suffit pour cela de prendre b assez grand, c'est-à-dire de pousser le développement en fraction continue assez loin, ce que nous supposons réalisé.

Les pôles μ_i des axes A_i associés à ces b motifs se déduisent de μ_o par b rotations successives d'angle α autour de μ et se disposent sur un cercle C centré sur μ (Fig. 7). Nous avons également porté sur cette figure à partir de μ_o les sommets du polygone régulier de b côtés inscrit dans C . Nous appellerons division de C chacun des arcs $2\pi/b$ ainsi délimités. Nous savons qu'il tombe un pôle μ_i , et un seul, sur chacune de ces divisions. On peut indexer ces pôles, en même temps que les axes, les motifs et les points équivalents associés, dans l'ordre où ils apparaissent au cours des rotations successives. Mais il est plus commode de les indexer dans l'ordre, généralement différent, où ils se succèdent sur le cercle C dans le sens convenu, c'est-à-dire celui de la rotation des aiguilles d'une montre, à partir de μ_o .

Portons notre attention sur les pôles dont l'indice i est de la forme $8p+1$, avec $p > 0$. Leur nombre est égal à $[(b-1)/8]$ en désignant par ce symbole l'entier égal ou immédiatement inférieur au nombre inscrit dans le crochet. Par exemple en Figure 7, $b = 45$ et il y a $[(45-1)/8] = 5$ pôles μ_{8p+1} .

Dans une seconde étape, considérons parmi les motifs M_i ceux de la forme M_{8p+1} , associés aux pôles précédents, et multiplions chacun d'eux par b déplacements successifs autour de l'axe A_{8p} d'indice immédiatement inférieur. Nous noterons les motifs ainsi obtenus M_{8pj} . Ils sont déduits des motifs M_i , contenus dans une sphère de rayon bt , par b déplacements successifs autour d'axes hélicoïdaux A_i qui passent par des points P_i également contenus dans cette sphère. Appliquant le lemme 1, nous en

déduisons que les motifs $M8p,j$ sont contenus dans une sphère de rayon quintuple $5bt$. On montre de même que les points équivalents $P8p,j$ associés à ces motifs sont également contenus dans cette sphère.

A chaque motif $M8p,j$ est associé un axe de pôle $\mu8p,j$, et ces pôles sont disposés sur des cercles centrés sur $\mu8p$ que nous noterons $C8p$ (Fig. 7). Chacun de ces cercles peut être divisé, comme nous l'avons fait pour C , en b divisions, à partir de $\mu8p+1$, par les sommets du polygone régulier inscrit de b côtés. Il y a un pôle $\mu8p,j$, et un seul, sur chaque division. Les cercles $C8p$ sont en même nombre que les pôles de forme $\mu8p+1$, soit $[(b-1)/8]$. Comme il tombe un pôle μ_i , et un seul, sur chaque division du cercle C , les cercles $C8p$ "couvrent" au maximum 4 divisions et, étant construits de 8 en 8 divisions, ne peuvent se couper. Nous indexerons les pôles $\mu8p,j$ de façon à ce que l'indice j prenne les valeurs 1, 2, 3 ... dans l'ordre où les pôles se succèdent dans le sens convenu, à partir de $\mu8p+1$, sur chaque cercle $C8p$.

Portons notre attention sur les pôles d'indice f de la forme $8q+1$, avec $q > 0$ et, parmi ces pôles, ceux qui sont intérieurs au cercle C , que nous noterons $\mu^*8p.8q+1$. Il y a b pôles $\mu^*8p.j$ sur chaque cercle $C8p$ et chacun d'eux occupe une division $2\pi/b$ de ce cercle. Sur l'arc intérieur à C , il y en a au moins

$$\left[\frac{\text{longueur de l'arc intérieur}}{2\pi/b} \right],$$

la partie fractionnaire de l'arc pouvant, ou non, porter un pôle. Une borne inférieure de la longueur de l'arc intérieur peut être obtenue en appliquant le lemme 2. L'écart angulaire de deux pôles consécutifs sur C est

inférieur à $4\pi/b$, donc la longueur de l'arc $C8p$ intérieur à C est plus grande que $(\pi - 4\pi/b)$. Ainsi il y a au moins

$$\left[\frac{\pi - 4\pi/b}{2\pi/b} \right] = [(b-4)/2] \quad (8)$$

pôles $\mu8p.j$ intérieurs à C sur chaque cercle $C8p$. Parmi ces pôles, ceux d'indice $j = 8q+1$, $q > 0$, sont donc en nombre

$$\left[\frac{[(b-4)/2] - 1}{8} \right] = \left[\frac{[(b-6)/2]}{8} \right] = [(b-6)/16] \quad (9)$$

Comme il y a $[(b-1)/8]$ cercles $C8p$, il y a donc, au total, au moins $[(b-1)/8] [(b-6)/16]$ pôles $\mu^*8p.8q+1$ intérieurs à C .

Dans une troisième étape, nous multiplierons chaque motif $M8p.8q+1$, associé au pôle $\mu^*8p.8q+1$, par b déplacements successifs autour de l'axe $A8p.8q$ d'indice j immédiatement inférieur. Nous noterons $M8p.8q.k$ les motifs ainsi obtenus. Ils dérivent de motifs $M8p.j$ contenus dans une sphère de rayon $5bt$ par b déplacements successifs autour d'axes hélicoïdaux $A8p.j$ passant par des points $P8p.j$ également intérieurs à cette sphère. Ils sont donc contenus dans une sphère de rayon 5^2bt . Il en est de même des points $P8p.8q.k$ associés.

A chacun de ces motifs est associé un axe de pôle $\mu8p.8q.k$, et ces pôles sont disposés sur des cercles centrés sur $\mu8p.8q$, que nous noterons $C8p.8q$ (Fig. 8a). Ces cercles sont en même nombre que les pôles $\mu^*8p.8q+1$, soit au moins $[(b-1)/8] [(b-6)/16]$. Comme précédemment ces pôles seront indexés de façon à ce que l'indice k prenne les valeurs 1, 2, 3 ...

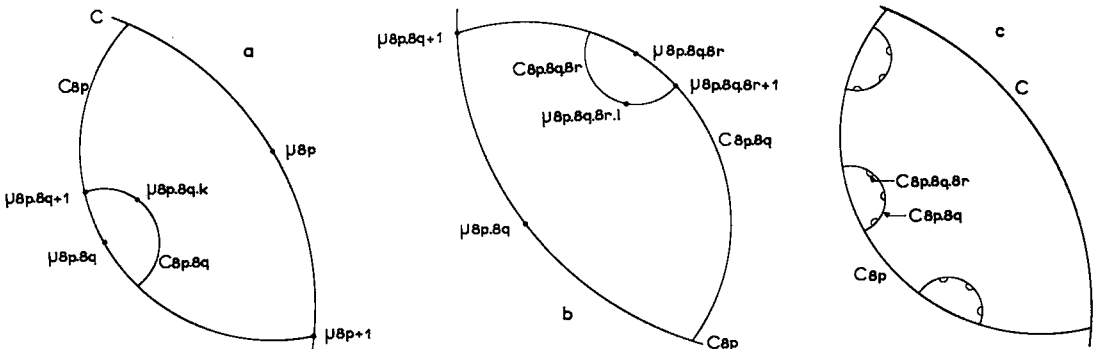


FIG. 8. (a) Schéma de la disposition des pôles $\mu8p.8q.k$ sur les cercles $C8p.8q$. Schéma de la disposition des pôles $\mu8p.8q.8r.l$ sur les cercles $C8p.8q.8r$. (c) Schéma de l'imbrication des cercles C , $C8p$, $C8p.8q$, $C8p.8q.8r$.

dans l'ordre où ils se succèdent, dans le sens convenu, à partir de $\mu^*8p.8q+1$ sur les cercles $C8p.8q$. Portons notre attention sur les pôles où $k = 8r+1$, avec $r > 0$, qui sont intérieurs aux cercles $C8p$. Par un raisonnement semblable au précédent, on montre qu'il y a au moins $[(b-6)/16]$ pôles $\mu^*8p.8q.8r+1$ de ce type sur chaque cercle $C8p.8q$. Comme il y a au moins $[(b-1)/8] [(b-6)/16]$ cercles $C8p.8q$, il y a, au moins $[(b-1)/8] [(b-6)/16]^2$ pôles $\mu^*8p.8q.8r+1$ intérieurs aux cercles $C8p$.

Dans une quatrième et dernière étape, nous multiplierons les motifs $M8p.8q.8r+1$, associés à ces pôles, par b déplacements successifs autour de l'axe $A8p.8q.8r$ d'indice k immédiatement inférieur. Appliquant une fois encore le lemme 1, on voit que ces motifs que nous noterons $M8p.8q.8r.l$ sont contenus dans une sphère de rayons 5^3bt .

A chaque motif est associé un axe de pôle $\mu8p.8q.8r.l$, et ces pôles sont disposés sur des cercles centrés sur $\mu8p.8q.8r$, que nous noterons $C8p.8q.8r$ (Fig. 8b). Ces cercles sont en même nombre que les pôles $\mu^*8p.8q.8r+1$, soit au moins $[(b-1)/8] [(b-6)/16]^2$.

Portons notre attention sur les pôles $\mu^*8p.8q.8r.l$ intérieurs aux cercles $C8p.8q$. Sur la totalité de chaque cercle $C8p.8q.8r$ il y a b pôles et sur la partie intérieure aux cercles $C8p.8q$ il y en a $[(b-4)/2]$, en reprenant un raisonnement connu. Comme il y a au moins

$[(b-1)/8] [(b-6)/16]^2$ cercles $C8p.8q.8r$, le nombre total des pôles $\mu^*8p.8q.8r.l$ intérieurs aux cercles $C8p.8q$ est au moins égal à $[(b-1)/8] [(b-6)/16]^2 [(b-4)/2]$.

Le Tableau 1 récapitule le décompte des pôles au cours des quatre étapes et permet de prendre une vue d'ensemble de la suite des opérations. La Figure 8c montre schématiquement l'imbrication des cercles $C, C8p, C8p.8q, C8p.8q.8r$. On voit que, par construction, les arcs de cercle $C8p.8q.8r$ intérieurs aux cercles $C8p.8q$ ne peuvent se couper. Sur chacun de ces arcs nous savons que tous les pôles sont distincts puisque les rotations sont irrationnelles. Ainsi il y a au moins $[(b-1)/8] [(b-6)/16]^2 [(b-4)/2]$ pôles $\mu^*8p.8q.8r.l$ distincts. A chaque pôle est associé un motif et ces motifs sont eux-mêmes distincts. En effet, si deux motifs étaient confondus, les axes qui leurs sont associés le seraient aussi et il en serait de même des pôles.

Nous sommes ainsi parvenus à montrer qu'il y a au moins $[(b-1)/8] [(b-6)/16]^2 [(b-4)/2]$ motifs distincts dans une sphère de rayon 5^3bt et donc de volume $4\pi 5^9 (bt)^3/3$. Le rapport r du nombre de motifs au volume satisfait donc à l'inégalité:

$$r \geq \frac{[(b-1)/8] [(b-6)/16]^2 [(b-4)/2]}{4\pi 5^9 (bt)^3/3} \quad (10)$$

Pour des valeurs élevées de b le terme de droite tend vers une expression de la forme $Cte \times b$. Comme b peut être pris aussi grand que l'on veut, on voit donc que la densité des motifs peut être rendue, elle-même, aussi grande que l'on veut, en contradiction avec la condition (d). Ceci achève la démonstration de la proposition selon laquelle l'ensemble E ne peut posséder d'axes irrationnels.

Nous passerons maintenant à la deuxième partie de la démonstration en montrant qu'il en résulte que l'ensemble E possède trois translations non coplanaires.

UN ENSEMBLE E SATISFAISANT AUX CONDITIONS (a) À (d) POSSÈDE TROIS TRANSLATIONS NON COPLANAIRES

Considérons le sous-ensemble E' que l'on obtient en appliquant à un motif quelconque toutes les opérations de symétrie de première espèce de E . Nous savons que, si E satisfait aux conditions (a) à (d), il en est de même pour E' . Les éléments de symétrie de E' peuvent être des translations, des axes de rotation, des axes hélicoïdaux, et nous venons de montrer que ces axes sont nécessairement rationnels.

TABLEAU 1. RÉSUMÉ DE LA DÉMONSTRATION DE L'INEXISTENCE DES AXES HÉLICOÏDAUX IRRATIONNELS DANS L'ENSEMBLE E

Sur le cercle C :	
nombre de pôles μ^i	b
nombre de pôles $\mu8p+1$ et de cercles $C8p$..	$[(b-1)/8] = N$
Sur chaque cercle $C8p$:	
nombre de pôles $\mu8p.j$	b
nombre de pôles $\mu^*8p.j$ intérieurs à C	$\geq [(b-4)/2]$
nombre de pôles $\mu^*8p.8q+1$ intérieurs à C	$\geq [(b-6)/16]$
nombre total de pôles $\mu^*8p.8q+1$ intérieurs à C et de cercles $C8p.8q$ passant par ces pôles	$\geq N \times [(b-6)/16] = [(b-1)/8] [(b-6)/16] = N'$
Sur chaque cercle $C8p.8q$:	
nombre de pôles $\mu8p.8q.j$	b
nombre de pôles $\mu^*8p.8q.j$ intérieurs à $C8p$	$\geq [(b-4)/2]$
nombre de pôles $\mu^*8p.8q.8r+1$ intérieurs à $C8p$	$\geq [(b-6)/16]$
nombre total de pôles $\mu^*8p.8q.8r+1$ intérieurs à $C8p$ et de cercles $C8p.8q.8r$ passant par ces pôles	$\geq N' \times [(b-6)/16] = [(b-1)/8] [(b-6)/16]^2 = N''$
Sur chaque cercle $C8p.8q.8r$:	
nombre de pôles $\mu8p.8q.8r.l$	b
nombre de pôles $\mu^*8p.8q.8r.l$ intérieurs à $C8p.8q$	$\geq [(b-4)/2]$
nombre total de pôles $\mu^*8p.8q.8r.l$ intérieurs à $C8p.8q$	$\geq N'' \times [(b-4)/2] = [(b-1)/8] [(b-6)/16]^2 [(b-4)/2]$

Nous commencerons par établir une proposition auxiliaire.

Lemme 3: Soient trois droites A, B, C non coplanaires qui concourent en un point O et D une droite ne passant pas par O (Fig. 9). L'une au moins, des droites A, B, C ne rencontre pas D et ne lui est pas parallèle.

Désignons que Q le plan de AOB et distinguons deux cas selon que D est, ou non, contenue dans Q . Dans le premier cas, comme D , par hypothèse, ne passe pas par O , la droite C satisfait à la proposition. Dans le second cas, D pourra rencontrer Q ou lui être parallèle. Si D rencontre Q , elle n'est parallèle ni à A , ni à B , et son point de concours avec Q ne peut être situé à la fois sur A et sur B , puisque ce ne peut être le point O . Ainsi l'une, au moins, des droites A et B ne rencontre pas D et satisfait à la proposition. Si D est parallèle à Q , elle ne rencontre ni A ni B . D'autre part elle ne peut être parallèle à la fois à l'une et l'autre. L'une, au moins, de ces droites satisfait donc à la proposition.

Si E' possède un axe de rotation, E' possède aussi un axe hélicoïdal

Soit $A(\alpha)$ l'axe de rotation et soit P un point de cet axe. Soit Q le plan perpendiculaire à A passant par P (Fig. 10). Comme le point P et ses équivalents remplissent l'espace, on peut trouver, à distance finie de P , un point équivalent P' qui ne soit pas dans Q . On passe de P à P' soit par un déplacement hélicoïdal, et la proposition est démontrée, soit par une translation, soit enfin par une rotation autour d'un axe $B(\beta)$. S'il s'agit d'une translation, elle n'est pas perpendiculaire à A puisque P' n'est pas dans Q . Combinant cette translation avec la rotation autour de A on obtient le déplacement hélicoïdal cherché. S'il s'agit d'une rotation autour de B , remarquons d'abord que B ne peut être parallèle à A puisque P' n'est pas dans Q . Nous distinguerons deux cas selon que A et B sont, ou non, concourants.

Si A et B ne sont pas concourants, il en résulte l'existence d'un axe hélicoïdal, et la proposition est démontrée. Si A et B sont concourants, soit O leur point d'intersection (Fig. 11). De l'existence des deux axes découle celle d'un axe $C(\gamma)$ passant par O , et nous savons que A, B, C ne sont pas coplanaires. Comme le point O et ses équivalents remplissent l'espace, on peut trouver un point équivalent O' qui soit distinct de O . On passe de O à O' soit par un déplacement hélicoïdal et la proposition est démontrée, soit par une translation, soit par une rotation autour d'un axe $D(\delta)$. S'il s'agit d'une translation elle ne peut être perpendiculaire à la fois à

A, B , et C , qui ne sont pas coplanaires. Combinant cette translation avec celui des axes qui ne lui est pas perpendiculaire on obtient l'axe hélicoïdal cherché. S'il s'agit d'une rotation autour

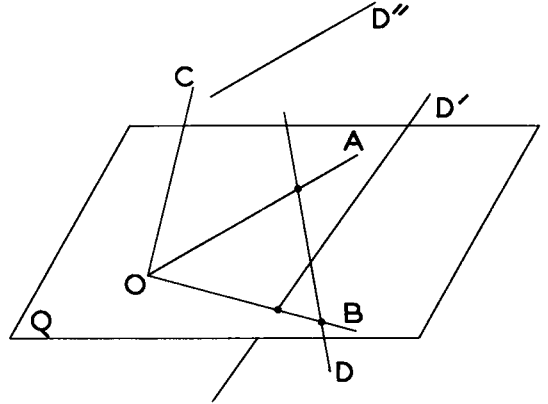


FIG. 9. Disposition d'une droite D par rapport à trois droites concourantes non coplanaires A, B, C . Les droites suivantes sont non parallèles et non concourantes: D et C, D' et A, D'' et B .

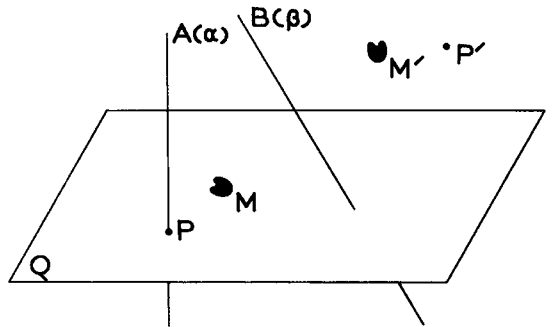


FIG. 10. L'axe de rotation $B(\beta)$ transforme M en M' et P en P' .

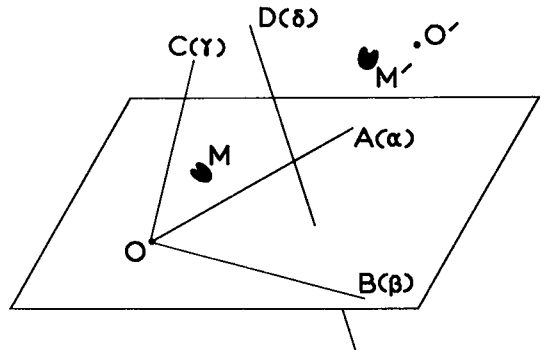


FIG. 11. L'axe de rotation $D(\delta)$ transforme M en M' , et P en P' .

de D , remarquons que D ne peut pas passer par O sinon O et O' seraient confondus. Ainsi A, B, C sont trois droites concourant en O , non coplanaires, et D est une droite qui ne passe pas par O . Appliquant le lemme 3, on en déduit que l'un des axes A, B, C n'est ni concourant ni parallèle à D . De l'existence de cet axe et de D découle celle de l'axe hélicoïdal cherché.

Les cas envisagés épuisant toutes les possibilités, on voit que si E' possède un axe de rotation il possède nécessairement aussi un axe hélicoïdal. Nous pouvons donc nous trouver devant deux éventualités, et deux éventualités seulement: ou E' possède un axe hélicoïdal, ou E' ne possède ni axe hélicoïdal ni axe de rotation et ses seules opérations de symétrie sont des translations.

E' possède un axe hélicoïdal $A(\alpha, t)$

Soit P un point de cet axe. Nous savons qu'il existe à distance finie de P un point équivalent P' par lequel passe un autre axe hélicoïdal $A'(\alpha, t)$, de mêmes rotation et translation. Nous distinguerons divers cas selon que α est égal à π , ou différent, et selon que A et A' sont parallèles ou non parallèles, concourants ou non concourants.

$\alpha \neq \pi$, A et A' non parallèles. Transformons A' par un déplacement hélicoïdal autour de A . Soit $A''(\alpha, t)$ l'axe ainsi obtenu; α étant différent de π , A, A', A'' ne sont pas coplanaires. Comme ces axes sont rationnels, chacun d'eux entraîne l'existence d'une translation qui lui est parallèle. Ces trois translations sont les trois translations cherchées.

$\alpha \neq \pi$, A et A' sont parallèles. De l'existence de chacun des axes A et A' découle celle d'une première translation T parallèle à leur direction commune. De leur coexistence découle l'existence d'une seconde translation T' perpendiculaire à leur direction commune. Nous pouvons enfin transformer T' par un déplacement hélicoïdal autour de A ou A' , et nous obtenons une troisième translation T'' , qui n'est pas dans le plan de TT' puisque $\alpha \neq \pi$. T, T', T'' sont les trois translations cherchées.

$\alpha = \pi$, A et A' ne sont ni parallèles ni concourants. Il existe alors un axe hélicoïdal A'' perpendiculaire à A et A' . A chacun de ces axes Ces trois translations non coplanaires sont les correspond une translation qui leur est parallèle. trois translations cherchées.

$\alpha = \pi$, A et A' sont concourants. Soit O leur point de concours et Q' le plan AOA' . Comme les points équivalents à O remplissent l'espace, on peut trouver un point équivalent O' qui ne soit pas dans le plan Q' . Il passe un axe hélicoïdal $A''(\pi, t)$ par O' . Si A'' est parallèle à Q' , il ne peut être parallèle à la fois à A et A' ; l'un de ces axes, au moins, forme avec A'' un couple d'axes

non parallèles et non concourants, et nous sommes ramenés au cas précédent. Si A'' n'est pas parallèle à Q' , les trois axes A, A', A'' ne sont pas coplanaires. Il en résulte par un raisonnement connu l'existence de trois translations non coplanaires.

$\alpha = \pi$, A et A' sont parallèles. Soit Q' le plan contenant A et A' . De l'existence de chacun des axes A et A' découle celle d'une première translation T parallèle à leur direction commune. De leur coexistence découle l'existence d'une seconde translation T' perpendiculaire à leur direction commune et parallèle à Q' . Comme le point P et ses équivalents remplissent l'espace, on peut trouver un point équivalent P'' qui ne soit pas dans Q' . Il passe un axe hélicoïdal $A''(\pi, t)$ par P'' . Si A'' n'est pas parallèle à A et A' , comme il ne peut être concourant à la fois avec A et A' , l'un de ces axes, au moins, forme avec A'' un couple d'axes non parallèles et non concourants, et nous sommes ramenés à un cas précédent. Si A'' est parallèle à A et A' , désignons par Q'' le plan contenant A et A'' . De l'existence de A et A'' découle celle d'une translation T'' parallèle à Q'' et perpendiculaire à la direction commune de A et A'' . Les trois translations T, T', T'' ne sont pas coplanaires et sont les trois translations cherchées.

Ainsi, dans tous les cas possibles, s'il existe un axe hélicoïdal, il existe aussi trois translations non coplanaires.

E' ne possède que des translations

L'existence de trois translations non coplanaires est alors évidente. En effet considérons un motif Mo et, à distance finie, un point associé Po . Comme Po et ses équivalents remplissent l'espace, on peut trouver, à distance finie, un point équivalent P . On passe de Po à P par une opération de symétrie qui ne peut être qu'une translation T . Les point équivalents remplissant l'espace, on peut trouver à distance finie de Po un autre point équivalent P' qui ne soit pas sur la droite PoP . On passe de Po à P' par une translation T' . Finalement on peut trouver un point équivalent P'' qui ne soit pas dans le plan $PoPP'$, et qui se déduit de Po par une troisième translation T'' , T, T', T'' , qui ne sont pas coplanaires, sont les trois translations cherchées.

Les cas que nous venons de discuter épuisant toutes les possibilités, ceci achève la démonstration de la proposition selon laquelle E' possède nécessairement trois translations non coplanaires. Comme toutes les opérations de symétrie de E' sont aussi des opérations de symétrie de E , l'existence d'une structure réticulaire se trouve aussi établie pour l'ensemble E des motifs.

CONCLUSION

Nous ferons, pour terminer, quelques remarques sur le théorème que nous venons de démontrer.

La démonstration peut être facilement adaptée au cas d'un 'cristal' plan à deux dimensions. La condition (c) doit alors être modifiée ainsi: tous les motifs sont à distance finie d'un plan donné; on peut trouver un motif à distance finie de tout point de ce plan. On démontre qu'il existe nécessairement parmi les opérations de symétrie deux translations non colinéaires, évidemment parallèles au plan. Mais il n'est pas possible de démontrer la proposition correspondant au 'cristal' linéaire pour lequel (c) devient: tous les motifs sont à distance finie d'une droite donnée; on peut trouver un motif à distance finie de tout point de la droite. Il n'est pas vrai, en effet, qu'il existe toujours une translation parmi les opérations de symétrie d'un tel 'cristal'. C'est ce qui se produit pour l'exemple déjà cité d'un ensemble de motifs déduits d'un motif donné par des déplacements indéfiniment répétés autour d'un axe hélicoïdal irrationnel.

Le théorème établi montre que l'on peut décomposer l'ensemble des motifs en mailles toutes identiques qui se déduisent les unes des autres par des translations. Mais ces mailles ne sont pas, en général, primitives. Pour poser complètement les fondements de la cristallographie géométrique, il faut encore démontrer que toutes les translations peuvent être déduites de trois translations primitives.

Ce 'théorème de primitivité' remonte à Bravais (1850) et, bien que repris dans l'ouvrage répandu de Hilton (1903), il est assez peu connu pour qu'il ait pu être redécouvert récemment (Guymont & Wu 1973). Une démonstration nouvelle (Sabatier 1977) met en lumière le rôle essentiel joué par les dimensions de l'espace. Tout l'édifice de la cristallographie géométrique et, en premier lieu, la construction des 230 groupes de déplacements, découle de ces deux théorèmes fondamentaux qui sont la conséquen-

ce logique de la définition du cristal posée par les conditions (a) à (d).

REMERCIEMENTS

Je remercie le Prof. R.F. Martin et deux arbitres anonymes pour leurs nombreuses suggestions de fond et de forme qui ont permis d'améliorer la première version de cet article.

RÉFÉRENCES

- BRAVAIS, A. (1850): Mémoire sur les systèmes formés par des points distribués régulièrement sur un plan ou dans l'espace. *J. Ecole Polytech.* 19, 33ème cah., 1-128 (traduction anglaise par Shaler, A. (1949): *Cryst. Soc. Amer. Mem.* 1).
- BUERGER, M. J. (1956): *Elementary Crystallography*. John Wiley & Sons, New York.
- DELAUNAY, B., PADUROV, N. & ALEKSANDROV, A. (1934): *Fondements Mathématiques de l'Analyse Structurale des Cristaux*. Ed. tech. théor. de l'Etat, Leningrad, Moscou.
- GUYMONT, M. & WU, F. (1973): Mailles primitives et plus courtes translations d'un réseau. *Soc. franç. Minéral. Crist. Bull.* 96, 335-339.
- HILTON, H. (1903): *Mathematical Crystallography*. Clarendon Press, Oxford.
- JAEGER, F. M. (1917): *Lectures on the Principle of Symmetry*. Amsterdam (traduction française par Gérald & Chevrier (1925), Gauthier-Villars, Paris).
- JORDAN, C. (1869): Sur les groupes de mouvements. *Ann. Mat. pura appl.* 2, 167-345.
- MAUGUIN, C. (1955): *Encyclopédie Française* 2, sect. C. Larousse, Paris.
- SABATIER, G. (1977): A propos du "théorème de primitivité". *Soc. franç. Minéral. Crist. Bull.* 100, 3-5.

Reçu février 1978, révision acceptée mai 1978.