

Joseph Fourier et la cristallographie: un voyage perpétuel entre l'espace direct et l'espace réciproque

R. Guinebretière, le 26 mars 2018, Lycee Gay-Lussac à Limoges

Alors qu'il étudiait la propagation de la chaleur¹, J. Fourier a introduit au début du 19^{ème} siècle l'idée que toute fonction continue périodique peut être décomposée en une somme de fonctions sinusoïdales, on parlera plus tard de « *décomposition en série de Fourier* ». Environ 100 ans plus tard, un physicien anglais, W.H. Bragg, étudie l'arrangement interatomique au sein des cristaux en utilisant un phénomène que viennent de découvrir M. Laue et ses collègues en Allemagne à Munich : la diffraction des rayons X par les cristaux². Les cristaux constituent l'archétype d'une organisation périodique tridimensionnelle et l'on peut donc décrire leur densité électronique comme une fonction continue tridimensionnelle périodique. W.H. Bragg³ comprend que le signal de diffraction des rayons X peut être décrit comme étant la transformée de Fourier de la fonction de densité électronique. Il en déduit, que si l'on peut mesurer ce signal de diffraction alors l'on peut au moyen du formalisme introduit par J. Fourier, accéder à la densité électronique interne du cristal et donc à son organisation interatomique, c'est-à-dire à sa structure cristalline.

Cette approche initiée au début du siècle dernier est à la base des travaux actuels de cristallographie. Le cristal est décrit comme un empilement, parfois très complexe, d'atomes ou de groupement d'atomes. Dans l'espace de Fourier, qui a la même dimensionnalité que celle du cristal et que les cristallographes appellent l'espace réciproque, la distribution d'intensité diffractée décrit « à une transformée de Fourier près » l'organisation interatomique.

Après une introduction générale sur la cristallographie, nous décrirons comment l'utilisation des séries de Fourier permet aujourd'hui aux cristallographes, qu'ils soient physiciens, chimistes, biologistes ou encore spécialistes des sciences de la Terre, de comprendre la structure des cristaux idéaux mais aussi des cristaux réels qui de par les défauts qu'ils contiennent présentent des propriétés exacerbées et qui sont à la base de la plupart des objets qui nous entourent.

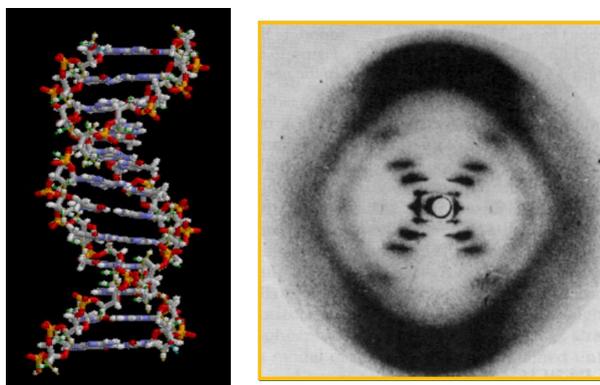


Fig. 1: représentation de la structure interatomique de l'ADN (à gauche); Cliché de diffraction des rayons X d'un cristal d'ADN mesuré en 1952 et interprété par R. Franklin (à droite)

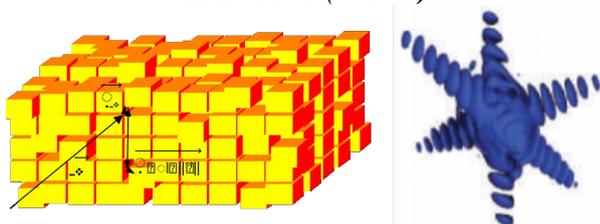


Fig. 2. Représentation schématique d'un cristal contenant des défauts (à gauche); distribution tridimensionnelle dans l'espace réciproque de l'intensité diffractée.

Bibliographie

[1] J. Fourier, « *Théorie analytique de la chaleur* » Ed. par F. Didot, Paris, 1822.

- [2] W. Friedrich, P. Knipping, M. Laue “*Interferenzerscheinungen bei Röntgenstrahlen*”, publié d’abord dans “Sitzungsberichte der Königlich Bayerischen Akademie der Wissenschaften” en juin 1912, puis repris dans *Annalen der Physik*, 41, 1913, 971-988
- [3] W.H. Bragg, “*Bakerian Lecture: X-Rays and Crystal Structure*” *Phil. Trans. Roy. Soc. Lond. A* 215(1915) 253—274.