

Les surfaces minimales périodiques

Un nouvel outil pour l'enseignement de la chimie structurale

Michael Jacob* professeur assistant, Alain Mosset** professeur

Summary : *Periodic minimal surfaces : a new tool for teaching structural chemistry*

Using the method of the exponential scale, a number of fundamental crystal structures can be described as simple mathematical functions. The plotting of the equations gives a classical « ball » representation of the structures. In the case of intricate structures, the pedagogical interest lies in the possibility of describing the whole structure as the « sum » of very simple partial structures, each corresponding to a part of the equation. A « crystal structure dynamics » is described. Varying a constant in the equation, it is possible to modify the representation of the structure from small ball-shaped atoms to packing of interconnected polyhedra and finally to minimal-like surfaces. This last description gives a much deeper understanding of the actual structure in term of forces and open spaces. The final, and may be the main, interest of this concept of surfaces is the possibility to give a simple light on the difficult problems of structure-properties relationships.

Mots clés : *Chimie structurale, surfaces minimales.*

Key-words : *Structural chemistry, minimal surfaces.*

A tous les niveaux de l'enseignement de la chimie, la chimie structurale est la parente pauvre. Les origines de cette « discrimination » sont multiples : la difficulté de nombreux étudiants à « voir » dans l'espace, le manque de formation spécifique des enseignants, la rareté des livres sur le sujet, le manque d'aides informatiques à la visualisation, etc. Il en résulte un très grand conservatisme dans la matière enseignée. Sont décrits les empilements compacts monoatomiques, l'empilement cubique pseudo-compact, les structures simples comme celles des chlorures de césium et de sodium ou la structure du diamant ; les plus audacieux abordent la structure de la blende, la variété cubique du sulfure de zinc (mais pas la variété hexagonale !). Dans ces conditions, les étudiants perçoivent souvent la chimie structurale comme une sorte

de zoo où coexistent (pacifiquement) quelques entités de races différentes. Il est alors tout à fait illusoire de vouloir décrire des structures complexes, les filiations dans les grandes familles structurales ou encore de parler des relations entre les propriétés physiques ou chimiques et la structure d'un composé.

Pourtant, au cours des vingt dernières années, un très gros effort de description et de classement a été fait. En particulier, afin de fournir des descriptions simples et logiques des structures les plus compliquées [1]. La recherche de méthodes permettant d'unifier la chimie structurale a débouché récemment sur la reconnaissance de l'intérêt fondamental des surfaces comme outils mathématiques pour comprendre l'organisation des solides cristallins [2]. Les surfaces minimales périodiques ont été les premières surfaces utilisées pour la description de structures. Ces surfaces sont définies comme des surfaces de courbure moyenne nulle, c'est-à-dire que la somme des deux courbures principales est nulle ; elles correspondent aux surfaces d'énergie minimale adoptées par

des films de savon. D'autres surfaces comme les surfaces périodiques équipotentielles, les surfaces périodiques à potentiel nul [3] ou les surfaces nodales [4] ont également été utilisées comme outils de description. Même si ces surfaces ont des définitions mathématiques différentes, elles conduisent toutes au même résultat. Toutefois, les mathématiques employées pour les décrire sont très complexes et restent l'affaire de spécialistes.

Une nouvelle description mathématique de ces surfaces est développée depuis 1994 par S. Andersson et collaborateurs [5-8]. Elle est basée très simplement sur l'utilisation de sommes de fonctions exponentielles ; chaque structure est décrite par une fonction analytique. Outre sa simplicité, cette description permet de relier des structures partielles aux différentes parties de l'équation. Avantage inappréciable quand il s'agit de « démonter » une structure complexe ou de souligner des analogies et des filiations. L'objet de cet article est de montrer l'intérêt pédagogique de cette approche pour les descriptions de structures et pour la mise en évidence des relations structure-properties.

* Inorganic Chemistry, Arrhenius Laboratory, Stockholm University, S-10691 Stockholm, Suède.
Tél. : +48 (8) 16 36 98. Fax : +48 (8) 15 21 87.
Email : jacob@inorg.su.se

** Laboratoire de cristallographie, CNRS, BP 166, 38042 Grenoble Cedex.
Tél. : 04.76.88.10.45. Fax : 04.76.88.10.38.
E-mail : mosset@polycnrs-gre.fr

Pourquoi des fonctions exponentielles ?

Avant de préciser quelle est la relation entre ces fonctions et les structures, intéressons-nous au cas, plus simple, de la morphologie des cristaux. La construction de ces polyèdres permet de montrer le fonctionnement de ces mathématiques.

La fonction $x = 10$ correspond, dans l'espace à trois dimensions, à un plan parallèle au plan yz ; la fonction $y = 10$ à un plan parallèle au plan xz . Il est possible d'« additionner » ces deux plans pour construire un seul objet ne présentant ni intersections ni singularités en utilisant des fonctions exponentielles comme dans l'équation (1) :

$$e^x + e^y = C \quad (1)$$

La constante C est la valeur pour laquelle cette fonction est tracée. La figure 1 montre l'objet ainsi créé pour une valeur $C = e^{10}$. Il est possible d'ajouter un plus grand nombre de plans. Dans l'équation (2), six plans interviennent et permettent de dessiner un cube (figure 2).

$$e^x + e^y + e^z + e^{-x} + e^{-y} + e^{-z} = C \quad (2)$$

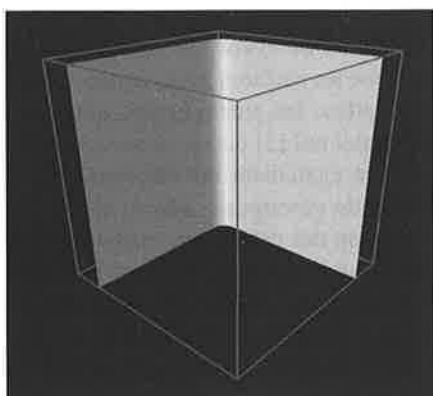


Figure 1 - Deux plans additionnés exponentiellement. $C = e^{10}$, $-15 < x, y, z < 15$.

Dans toutes les figures, les limites représentées correspondent aux limites de calcul et non à une maille cristalline.

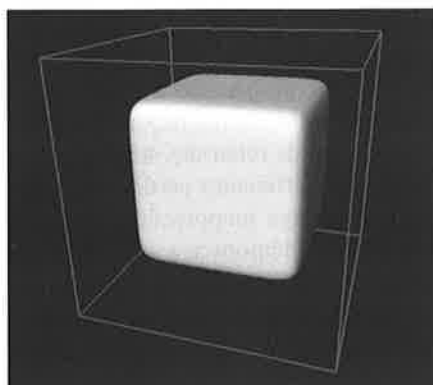


Figure 2 - Six plans additionnés formant un cube. $C = e^{10}$, $-15 < x, y, z < 15$.

Plus la valeur de la constante C est grande, plus les arêtes du cube sont aiguës. Pour une valeur faible de C , les plans interagissent fortement et l'objet créé devient sphérique (figure 3).

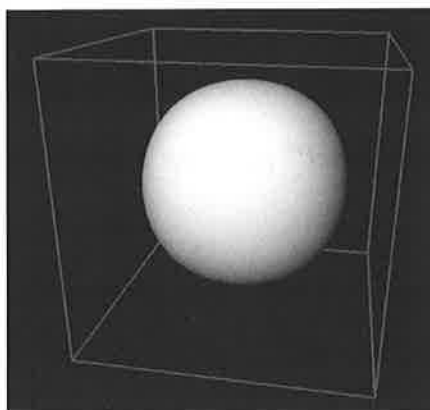


Figure 3 - Six plans additionnés formant une sphère. $C = e^2$, $-1,5 < x, y, z < 1,5$.

Avec ce type de fonctions, il est possible de construire toutes les morphologies cristallines, y compris reproduire la forme des cristaux naturels [8, 9]. Ce qui peut présenter un intérêt en minéralogie. Il devient possible de construire des objets de plus en plus complexes comme, par exemple, la molécule de fullerène (figure 4) [10]. La fonction exponentielle agit comme une sorte de « colle » mathématique.



Figure 4 - Une molécule de C_{60} (équation en référence [10]).

Structures cristallines

En répétant de façon périodique les plans constituant les polyèdres, il est possible de construire des structures cristallines. Pour cela, il faut faire appel aux fonctions trigonométriques. Dans ce paragraphe, nous voudrions montrer comment il est possible de visualiser les empilements atomiques à partir d'équations très simples et comment la combinaison de structures partielles, c'est-à-dire d'équations partielles, permet de

décrire des structures plus compliquées. Toutes les équations données dans ce paragraphe peuvent être tracées avec des logiciels mathématiques classiques comme Mathematica ou Maple.

Commençons par répéter périodiquement le cube, ou plutôt la sphère, en utilisant la fonction cosinus. En raison des propriétés de cette fonction, seuls les termes positifs sont nécessaires comme dans l'équation (3).

$$e^{\cos(2\pi x)} + e^{\cos(2\pi y)} + e^{\cos(2\pi z)} = C \quad (3)$$

Le résultat, illustré par la figure 5, est un empilement cubique simple (ou primitif cP) d'atomes. De façon à garder des équations aussi simples que possible, il est possible de tirer parti des relations trigonométriques et d'utiliser des produits plutôt que des sommes. Notre « brique de construction » sera donc : $e^{(\cos(2\pi x) \cos(2\pi y) \cos(2\pi z))}$.

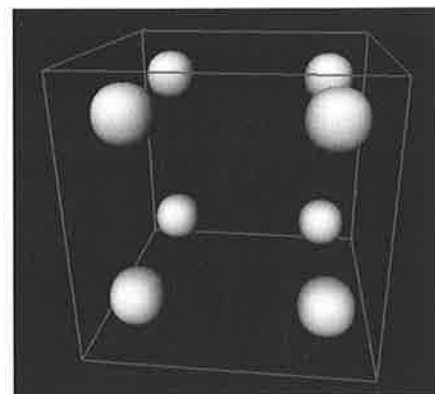


Figure 5 - L'empilement cubique simple cP. $C = 1,3$, $-0,75 < x, y, z < 0,75$.

Si l'on trace la fonction (4)

$$e^{(\cos(2\pi x) \cos(2\pi y) \cos(2\pi z))} = C \quad (4)$$

le résultat est un empilement cubique à faces centrées (cF). Une maille élémentaire d'un tel empilement est visualisée sur la figure 6. Si l'on porte les fonctions trigonométriques au carré, la fonction (5)

$$e^{(\cos^2(2\pi x) \cos^2(2\pi y) \cos^2(2\pi z))} = C \quad (5)$$

conduit à un empilement cP analogue à celui obtenu avec la fonction (3).

Notons un point très important pour la suite de cette démonstration : **un changement de phase dans une équation se traduit par une translation de l'origine de la maille**. Par exemple dans l'équation (4), changer $\cos(2\pi x)$ en $-\cos(2\pi x)$ entraîne une translation de $1/2$ le long de l'axe x ; changer $\cos(2\pi x)$ en $\sin(2\pi x)$ se traduit par une translation de $1/4$ le long de l'axe x . Changer tous les cosinus de l'équation (4) en sinus translate l'origine du point $0, 0, 0$ au

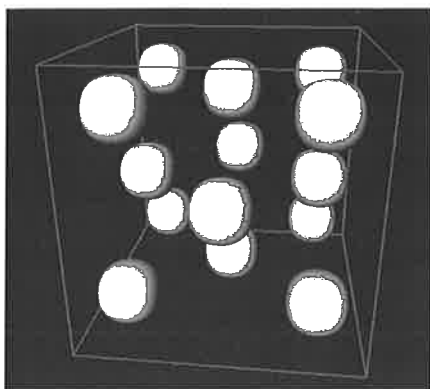


Figure 6 - L'empilement cubique à faces centrées cF. $C = 0,6, -0,75 < x, y, z < 0,75$.

point $1/4, 1/4, 1/4$. De même, dans l'équation (5), changer tous les cosinus en sinus translate l'origine du point $0, 0, 0$ au point $1/2, 1/2, 1/2$. **Chaque terme exponentiel constitue le générateur d'une structure partielle. L'addition de plusieurs termes permet donc de construire des structures plus complexes et de montrer les parentés existantes.**

Par exemple, l'empilement cP peut être décrit comme l'interpénétration de deux empilements cF décalés de $1/2$. Donc l'équation représentative sera :

$$e^{(\cos(2\pi x) \cos(2\pi y) \cos(2\pi z))} + e^{(-\cos(2\pi x) \cos(2\pi y) \cos(2\pi z))} = C \quad (6)$$

Ce qui est encore équivalent au résultat de l'équation (5). Dans la structure du chlorure de sodium, on trouve aussi l'interpénétration d'un empilement cF de cations et d'un empilement identique, mais décalé de $1/2$, d'anions. L'équation (7), dans laquelle le coefficient 1,5 permet de différencier les deux types d'ions, permet de rendre compte de cette structure visualisée sur la figure 7.

$$e^{(\cos(2\pi x) \cos(2\pi y) \cos(2\pi z))} + e^{(-1,5 \cos(2\pi x) \cos(2\pi y) \cos(2\pi z))} = C \quad (7)$$

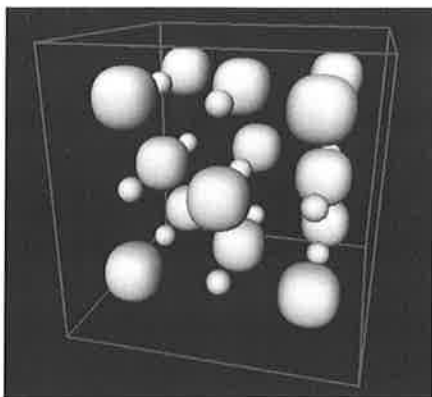


Figure 7 - La structure NaCl. $C = e, -0,8 < x, y, z < 0,8$.

Bien entendu, dans l'empilement cP, il n'y a qu'un seul type d'atomes alors qu'il y a deux espèces d'ions pour NaCl. Ce qui explique la différence de symétrie malgré la similitude des équations (6) et (7).

L'empilement pseudo compact cubique centré peut être décrit comme l'interpénétration de deux empilements cP décalés de $1/2, 1/2, 1/2$. En conséquence, il peut être décrit par une équation dérivant soit de l'équation (5)

$$e^{(\cos^2(2\pi x) \cos^2(2\pi y) \cos^2(2\pi z))} + e^{(\sin^2(2\pi x) \sin^2(2\pi y) \sin^2(2\pi z))} = C \quad (8)$$

soit de l'équation (6) :

$$e^{(\cos(2\pi x) \cos(2\pi y) \cos(2\pi z))} + e^{(-\cos(2\pi x) \cos(2\pi y) \cos(2\pi z))} + e^{(\sin(2\pi x) \sin(2\pi y) \sin(2\pi z))} + e^{(-\sin(2\pi x) \sin(2\pi y) \sin(2\pi z))} = C \quad (9)$$

Ce qui est évidemment moins simple. La figure 8 décrit cet empilement. Comme dans le cas de NaCl, il est possible de changer sélectivement la taille des atomes. En plaçant un coefficient 1,5 dans le second terme de l'équation (8), on obtient la structure bien connue du chlorure de césium.

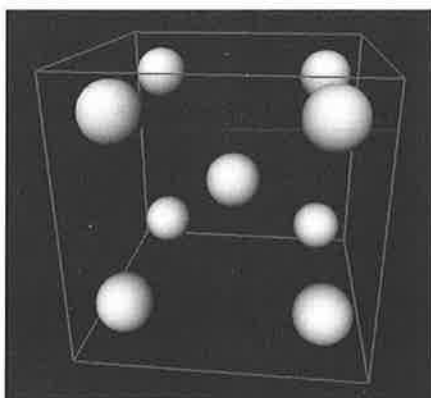


Figure 8 - L'empilement cubique centré cI. $C = 3,2, -0,36 < x, y, z < 0,36$.

Une des structures les plus importantes de la chimie du solide est celle du diamant. Elle peut être décrite comme l'interpénétration de deux empilements cF décalés de $1/4, 1/4, 1/4$. Son équation représentative est donc :

$$e^{(\cos(2\pi x) \cos(2\pi y) \cos(2\pi z))} + e^{(\sin(2\pi x) \sin(2\pi y) \sin(2\pi z))} = C \quad (10)$$

Cette structure est visualisée sur la figure 9. Là encore, un changement sélectif de taille d'atomes permet de visualiser la structure de la variété cubique de ZnS en plaçant un coefficient 1,5 dans le second terme. Par ailleurs, la structure du diamant est

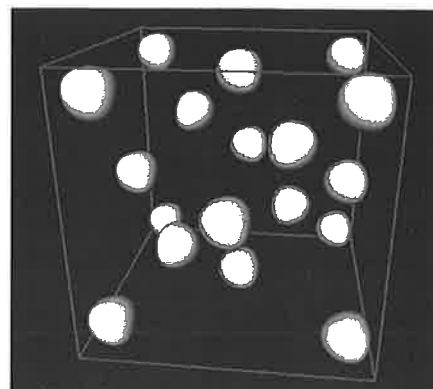


Figure 9 - La structure diamant, $C = 3,2, -0,87 < x, y, z < 0,87$.

adoptée par des composés semi-conducteurs comme le silicium et le germanium. Il est intéressant de noter que la structure de la variété de haute température de la silice, la cristobalite, peut se décrire à partir de la structure diamant. Les atomes d'oxygène se placent à mi-distance entre les atomes de silicium occupant les positions de la structure diamant. L'équation permettant de construire la structure de la cristobalite est :

$$e^{(1,2 \cos(2\pi x) \cos(2\pi y) \cos(2\pi z))} + e^{(1,2 \sin(2\pi x) \sin(2\pi y) \sin(2\pi z))} + e^{(\cos^2(2\pi x) \cos^2(4\pi y) \cos^2(4\pi z))} + e^{(\sin^2(4\pi x) \sin^2(4\pi y) \sin^2(4\pi z))} = 3,8 \quad (11)$$

Un deuxième point important à noter concerne le paramètre de la maille élémentaire. La fonction $e^{(\cos(2\pi x) \cos(2\pi y) \cos(2\pi z))}$ donne un paramètre double de la fonction $e^{(\cos^2(2\pi x) \cos^2(2\pi y) \cos^2(2\pi z))}$. Ce fait peut être utilisé pour construire une structure plus compliquée, celle du fluorure de calcium. La fluorine cristallise dans le système cubique et se décrit de la façon suivante : un empilement cF de cations Ca^{2+} avec un paramètre de maille a et un empilement cP décalé de $1/4, 1/4, 1/4$ d'anions F^- avec un paramètre

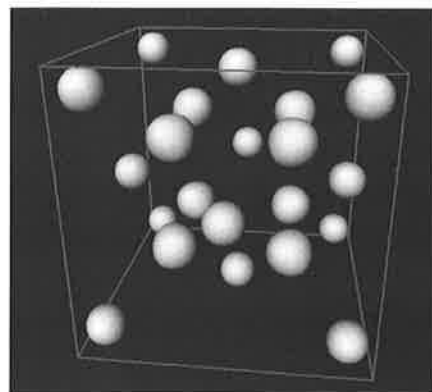


Figure 10 - La structure fluorine CaF_2 . $C = 2,9, -0,1 < x, y, z < 1,1$.

$a' = a/2$. L'équation (12) permet de rendre compte de cette structure visualisée sur la *figure 10* :

$$e^{(0,75 \cos(2\pi x) \cos(2\pi y) \cos(2\pi z))} + e^{(\sin^2(2\pi x) \sin^2(2\pi y) \sin^2(2\pi z))} = C \quad (12)$$

Grâce aux mathématiques utilisées dans ce paragraphe, nous avons donc la possibilité unique de construire pas à pas les structures les plus compliquées à partir d'empilements très simples. De nombreuses autres structures, comme la très célèbre perovskite, sont décrites dans les références [8] et [11]. Il est bien évident que cette méthode ne se limite pas à la symétrie cubique que nous avons adoptée ici par souci de simplicité. Toutefois, pour les symétries non cubiques, il faut tenir compte des rapports de longueur entre les paramètres de maille. Par exemple, dans le cas de la symétrie hexagonale, le coefficient $2\sqrt{2} / \sqrt{3}$ correspondant au rapport idéal des paramètres doit être introduit dans les termes en z . Ces équations, qui restent toujours très simples, permettent à l'étudiant de progresser dans la complexité de la chimie structurale en prenant conscience des relations qui existent entre les structures fondamentales et les structures plus complexes. Une fois que les caractéristiques de chaque exponentielle (type d'empilement, translation de l'origine, changement du paramètre de maille) sont assimilées, il devient relativement aisé et très formateur, pour l'étudiant ou l'enseignant, de construire d'autres structures que celles présentées ici.

Description dynamique. Relations structure-propriétés

Les fonctions présentées dans le paragraphe précédent ont été tracées pour une valeur particulière de la constante C . Une variation systématique de cette

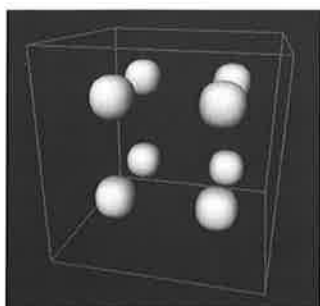
constante permet une vision plus large et une meilleure compréhension des structures. C représente une sorte de quatrième dimension des structures. En variant la valeur de C , il est possible de relier les structures représentées comme des empilements d'atomes et les surfaces minimales correspondantes. Ces surfaces présentent au moins trois intérêts pour l'enseignement de la chimie structurale. Elles constituent un outil puissant d'unification et permettent de comparer des structures de composés appartenant à des domaines très différents de la chimie (alliages métalliques, oxydes...). Elles offrent une vision simplifiée mais exacte des structures les plus compliquées et peuvent être utilisées pour expliquer les interactions atomiques. Enfin, elles sont un outil très efficace pour montrer les relations entre la structure et les propriétés physiques ou chimiques.

Avant de donner des exemples illustrant ces trois points, nous allons montrer sur un cas simple, l'empilement cP , la relation structure-atome-surface minimale. Reprenons l'équation (3). La *figure 11* représente la surface calculée pour différentes valeurs de la constante C . Dans cette figure, le cube représenté correspond à l'espace dans lequel la fonction est calculée et non à la maille élémentaire. En *11a*, la constante est égale à 1,5 et la surface correspond à une vision atomique classique. Quand la valeur de la constante augmente, la taille des atomes augmente jusqu'à se toucher pour $C = 3,5$. Pour une constante de 3,8, les atomes ont fusionné formant des caténoïdes (*figure 11b*). La structure forme alors une surface continue divisant l'espace en deux régions ; cette surface est l'analogue de la surface minimale périodique dite surface P . Pour $C = 5,7$, on obtient un empilement d'octaèdres liés par le sommet, une des

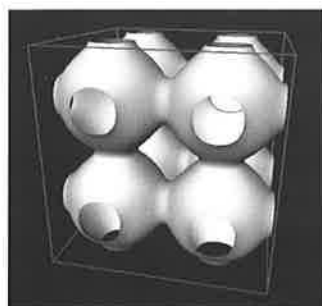
représentations possibles de la structure fondamentale ReO_3 (*figure 11c*). Enfin, pour $C = 7$, on retrouve l'empilement cP classique (*figure 11d*). Mais les atomes sont de l'autre côté de la surface P , comme on peut s'en convaincre en comparant les positions des atomes sur les *figures 11a* et *11d*. Ceci démontre une propriété générale des surfaces minimales. Elles partagent l'espace en deux domaines qui s'interpénètrent.

Un intérêt majeur de ce concept de surface réside dans la possibilité de comparer des structures appartenant à des domaines très différents de la chimie. Par exemple, la surface P que nous venons de décrire permet la description de $CsCl$ aussi bien que de $\alpha\text{-Mn}$, Na_xWO_3 ou encore la zéolithe Linde A. La surface D , qui correspond à la structure du diamant, permet de décrire également des alliages comme $MgCu_2$ et $Li_{21}Si_5$ ou bien la faujasite, zéolithe naturelle à structure très compliquée. Dans le cas de ces structures complexes, il est d'ailleurs souvent suffisant de s'intéresser à la topologie pour rendre compte des propriétés physiques ou chimiques.

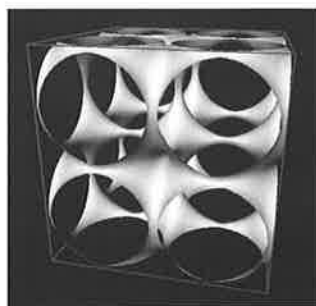
Dans d'autres cas, la comparaison des deux descriptions, positions atomiques et surfaces, est extrêmement utile. Si l'on reprend le cas des zéolithes Linde A et faujasite, le positionnement des atomes par rapport à la surface montre que le squelette aluminosilicate se place « sur » la surface alors que les cations échangeables et les molécules d'eau se trouvent dans les tunnels ou les cages. De plus, les atomes d'oxygène du squelette sont coordonnés de telle façon que les doublets électroniques libres pointent, de chaque côté de la surface, vers les cations [3]. D'où une description très simple des forces en jeu dans ces structures compliquées.



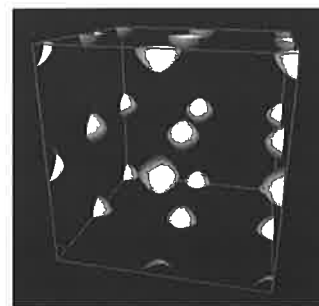
11a : $C = 1,5$. $-1 < x, y, z < 1$.



11b : $C = 3,8$. $-1 < x, y, z < 1$.



11c : $C = 5,7$. $-1 < x, y, z < 1$.



11d : $C = 7$. $-1 < x, y, z < 1$.

Figure 11 - La surface P pour différentes valeurs de la constante C .

Mais le concept de surface périodique minimale est encore plus puissant lorsqu'il s'agit de mettre en évidence les relations structure-propriétés. Un des meilleurs exemples est le problème des chemins de conduction dans les électrolytes solides [12-13]. La structure du très bon conducteur ionique α -AgI est formée d'un réseau cubique centré (cI) d'anions I « immobiles » et de cations Ag^+ désordonnés. Les anions sont situés de part et d'autre de la surface minimale P. Les cations assurant la conductivité se déplacent sur des trajectoires situées sur la surface. Il s'agit du meilleur chemin possible si l'on considère la répartition des charges. En effet, par définition, il n'y a pas de gradient de potentiel le long d'une surface minimale. Les gradients les plus forts sont perpendiculaires à la surface.

Les transitions de phase peuvent aussi être traitées avec ce concept. Prenons le cas de la transformation martensitique dans les aciers ; il s'agit toujours d'un problème difficile à enseigner. La vision classique de cette transition est le mécanisme de Bain. D'un point de vue cristallographique, la transformation fait passer de la phase austénite cubique à faces centrées (cF) à la phase martensite cubique centrée (cI). Ceci suppose une contraction de 17 % le long d'un axe et une dilatation de 12 % le long des deux autres axes. La transformation est caractérisée par un réarrangement atomique drastique, un changement de forme macroscopique, une très grande vitesse et une relation d'orientation cristallographique entre l'austénite de départ et la martensite résultante. Ce mécanisme est universellement accepté car il explique parfaitement les résultats expérimentaux. Mais il est incapable d'expliquer quel est le mouvement réel des atomes pendant la transformation. Les structures de l'austénite et de la martensite peuvent être décrites avec des surfaces minimales, la surface D et une surface appelée gyroïde respectivement. Dans les deux cas, les atomes de fer sont situés sur des dépressions plates de la surface. La transformation martensitique peut se décrire comme une déformation continue de la surface D vers la surface gyroïde de telle sorte que les atomes de fer restent sur les dépressions plates et que toutes les surfaces intermédiaires soient elles-mêmes des surfaces mini-

males. On trouve une excellente illustration graphique de ce mécanisme dans la référence [14].

Conclusion et extensions

Les équations mathématiques proposées dans cet article, basées sur l'échelle exponentielle, constituent à notre avis un outil pédagogique très puissant pour construire les modèles structuraux, comprendre la notion de structure partielle ou de sous-réseau et prendre conscience des liens de parenté entre les structures de composés très différents sur le plan chimique. Le concept de surface et la variation de la constante d'isosurface fournit une vision dynamique des structures qui permet de relier des représentations traditionnelles habituellement séparées (représentation atomique, représentation polyédrique, réseau de liaisons, surfaces minimales...). De nombreux sites Web de groupes de recherche en mathématiques présentent ces surfaces minimales. Les plus remarquables sont ceux du Scientific Graphics Project à Berkeley (<http://www.msri.org/publications/sgp/SGP/>) et de l'Institut de Chimie Physique à Varsovie (<http://niut.ichf.edu.pl/WTGRH/surfaces.html>) qui présentent de superbes illustrations des surfaces les plus simples.

Les extensions de ce type de mathématiques sont très vastes. Elles ont déjà été utilisées dans le domaine des microémulsions, des tensioactifs, des copolymères ([15] et références sur le site Web de Varsovie). En biologie, les surfaces minimales ont été utilisées pour modéliser des surfaces de membranes [16-17]. Des fonctions périodiques finies, c'est-à-dire comportant dans leur équation des termes limitant la surface permettent de générer non plus des structures infinies mais des molécules.

La dernière équation de cet article permettra de montrer la puissance de cette approche mathématique. L'équation (13) permet de construire la double hélice de l'ADN.

$$xy \cos\left(\frac{\pi z}{10}\right) + \frac{1}{2}(x^2 - y^2) \sin\left(\frac{\pi z}{10}\right) - \cos\left(\frac{\pi z}{2}\right) + \frac{3}{5}e^{(x^2 + y^2)/10} = 0 \quad (13)$$

Cette équation génère une partie de la double hélice avec dix paires de bases

et les liaisons hydrogène les reliant (figure 12). Les deux premiers termes créent un double hélicoïde, le troisième engendre les liaisons entre bases et le dernier est un cylindre ajouté dans une exponentielle pour fermer la surface [18].

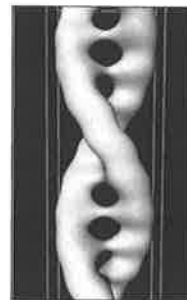


Figure 12 - La double hélice de l'ADN.

Références

- [1] Hyde B.G., Andersson S., *Inorganic Crystal Structures*, Wiley Interscience Pub., N.Y., 1989.
- [2] Andersson S., Hyde S.T., Von Schnering H.G., *Z. Kristallogr.*, 1984, 168, p. 1-17.
- [3] Nesper R., Von Schnering H.G., *Angew. Chem. Int. Ed.*, 1986, 25, p. 110-112.
- [4] Von Schnering H.G., Nesper R., *Z. Phys. B - Condensed Matter*, 1991, 83, p. 407-412.
- [5] Andersson S., Lidin S., Jacob M., *Z. Kristallogr.*, 1995, 210, p. 826-831.
- [6] Jacob M., Andersson S., *Z. Kristallogr.*, 1997, 212, p. 486-492.
- [7] Jacob M., Andersson S., *Colloids and Surface*, 1997, 129-130, p. 227-237.
- [8] Andersson S., Jacob M., *The Mathematics of Structures*, Oldenbourg Verlag, München, 1997.
- [9] Andersson S., Jacob M., Lidin S., *Z. Kristallogr.*, 1995, 210, p. 3-4.
- [10] The C60 equation :

$$10(x+t^2y)^2 + 10(x-t^2y)^2 + 10(z+t^2x)^2 + 10(z-t^2x)^2 + 10(y+t^2z)^2 + 10(y-t^2z)^2 + 10(tx+ty+tz)^2 + 10(tx-ty-tz)^2 + 10\frac{\tau^3}{2}(tx+y)^2 + 10\frac{\tau^3}{2}(-tx+y)^2 + 10\frac{\tau^3}{2}(ty+z)^2 + 10\frac{\tau^3}{2}(-ty+z)^2 + 10\frac{\tau^3}{2}(tz+x)^2 + 10\frac{\tau^3}{2}(-tz+x)^2 = 10^{15}$$
avec $\tau = 1,618$.
- [11] Mosset A., Jacob M., *J. Chem. Educ.*, 2000, sous presse.
- [12] Andersson S., Hyde S.T., Larsson K., Lidin S., *Chem. Rev.*, 1988, 88, p. 221-242.
- [13] Andersson S., Hyde S.T., Bovin J.O., *Z. Kristallogr.*, 1985, 173, p. 97-99.
- [14] Hyde S.T., Andersson S., *Z. Kristallogr.*, 1986, 174, p. 225-236.
- [15] Charvolin J., *J. Phys.*, 1985, 46, C3, p. 173-190.
- [16] Andersson S., Jacob M., Lidin S., Larsson K., *Z. Kristallogr.*, 1995, 210, p. 315-318.
- [17] Larsson K., Jacob M., Andersson S., *Z. Kristallogr.*, 1996, 211, p. 875-878.
- [18] Jacob M., *J. Phys. II France*, 1997, 7, p. 1035-1044.