Introduction à la cristallographie

Pour observer le monde de l'infiniment petit où siègent les protéines, plusieurs approches sont possibles :

- Méthode directe : Microscopie électronique
- Méthodes indirectes : Cristallographie (grâce à la diffraction) ou Résonance ÉlectroMagnétique (par la spectroscopie)

La cristallographie étudie :

_ la formation et la croissance des cristaux
_ la forme extérieure des cristaux
_ les propriétés physiques de la matière cristallisée
_ la structure interne de la matière cristallisée.

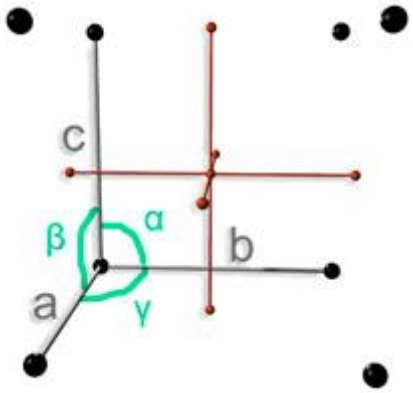
I Rappels sur les cristaux et les ondes électromagnétiques

A. Les cristaux

Un cristal est un solide constitué d'une substance pure. C'est l'état le plus stable (thermodynamiquement et de moins haute énergie interne) d'un solide. On caractérise l'état cristallisé par un ordre structural tridimensionnel parfait.

On peut alors définir des mailles élémentaires qui sont répétées dans le cristal, suivant un réseau. Ces mailles et ces réseaux sont en réalité fictifs.

Ex : Système cristallin cubique :
a = b = c et Ñ = Ò = Ó = 90°
C'est un réseau primitif, centré et à faces centrées.



On peut aussi décrire les réseaux d'une autre manière : les nœuds du réseau sont séparés par des plans parallèles équidistants et équivalents : ce sont les plans réticulaires (HKL).

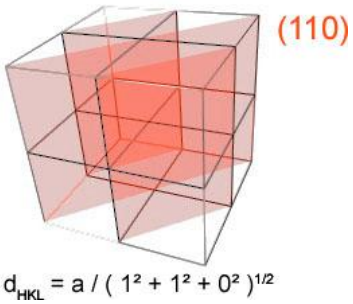
Dans le système cubique, la distance entre plans réticulaires donnés est définie par :

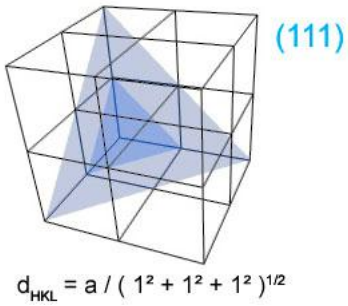
$$d_{HKL} = a / (H^2 + K^2 + L^2)^{1/2}$$

a est la taille des mailles élémentaires (l'arrête du cube)
H est le nombre de fois que le plan coupe l'arrête a
K est le nombre de fois que le plan coupe l'arrête b
L est le nombre de fois que le plan coupe l'arrête c

Create PDF with GO2PDF for free, if you wish to remove this line, click here to buy Virtual PDF Printer

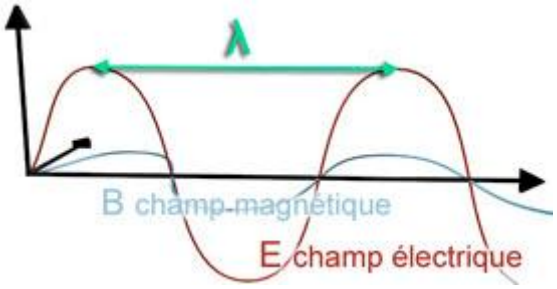
Ex :





B. Rayonnements électromagnétiques

Les ondes électromagnétiques sont les manifestations de deux champs agissant sur les photons. Ces champs suivent une loi sinusoïdale. L'onde se propageant dans l'espace et dans le temps, on obtient deux périodes : T pour la période temporelle et Û pour la période spatiale.



D'où l'équation de l'énergie d'une onde électromagnétique :

$$E = E_0 \cos (2\grave{a} /T * t - 2\grave{a} /\hat{U} * x + \hat{i}_0)$$

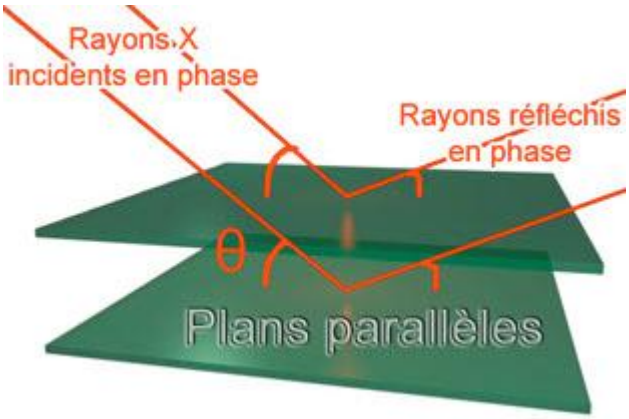
E_0 est l'amplitude de l'onde
$\hat{i}_0$ est la phase initiale de l'onde

Lorsque deux ondes électromagnétiques de même longueur d'onde et de même période se mélangent, leurs amplitudes s'additionnent (positivement ou négativement).

II_ Diffractométrie des rayons X

A. Principe

Le principe de la diffractométrie des rayons X est d'envoyer deux rayons X parallèles et en phase sur le cristal. Ceux-ci vont être diffractés par les plans qu'ils vont rencontrer. Si ses plans sont parallèles, ils vont diffracter en phase. C'est alors que l'on mesure leur angle de réfraction, et que l'on obtient la distance entre les plans.

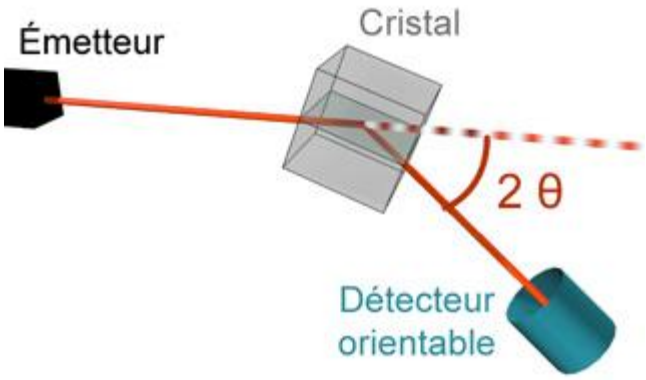


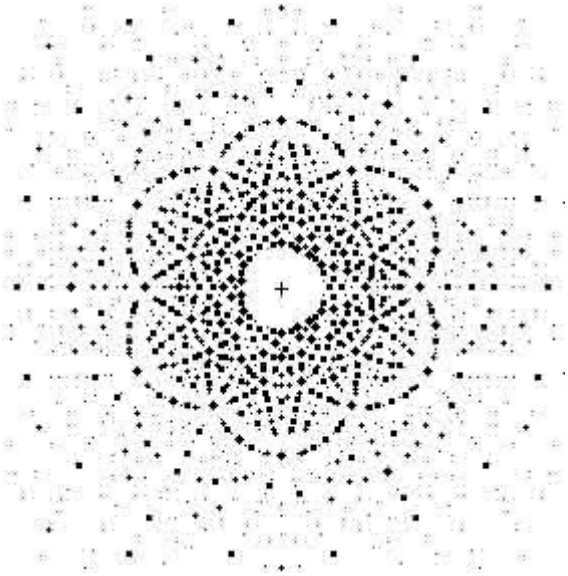
$$2\, d_{HKL} \sin \emptyset = n\, \hat{U}$$

C'est la loi de Bragg.

Create PDF with GO2PDF for free, if you wish to remove this line, click here to buy Virtual PDF Printer

è On va alors observer plusieurs taches obéissant à la loi de Bragg, selon l'orientation du cristal :





à Le cristal doit alors être orienté de façon à ce que les rayons forment un angle ø entre les plans et l'émetteur, ainsi qu'avec le détecteur.

Remarque : les spécialistes utilisent le système hkl plutôt que le HKL,
tels que : h = nH, k = nK et l = nL.
Ex : hkl (222) correspond à HKL (111) d'ordre n = 2.

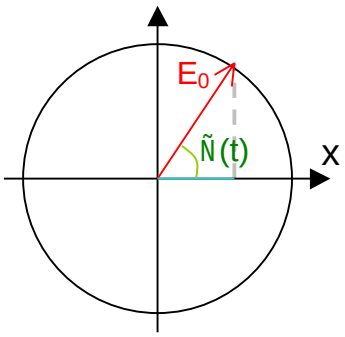
B. Analyse du champ électrique d'une onde électromagnétique

L'équation du champ électrique d'une onde électromagnétique est donnée par :

$$E = E_0 \cos (2à /T * t - 2à /Û * x + î_0) = E_0 \cos (Ñ(t))$$

Où Ñ(t) est la phase de l'onde.

à On peut alors représenter le vecteur par une courbe complexe :



$$f(t) = E_0 e^{iÑ(t)}$$

L'onde peut alors être décrite par un vecteur tournant :
_ sa longueur représente son amplitude E_0
_ son orientation représente sa phase Ñ(t)
_ sa projection sur l'axe x représente sa valeur à t

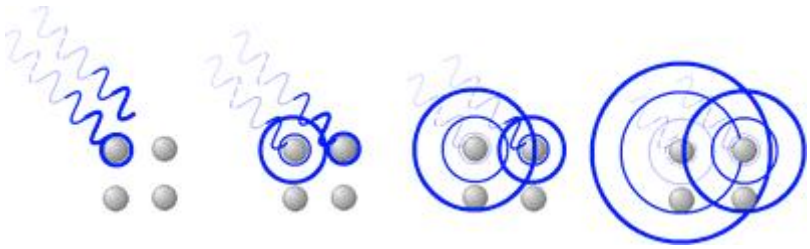
à L'interférence entre deux ondes se réduit alors à l'addition de deux vecteurs.

C. Intensité diffractée

En fonction du réseau de Bravais, des extinctions spécifiques de certaines taches peuvent survenir. Elles sont dues aux diffractions des rayons lumineux qui s'associent de manière destructive.

Create PDF with GO2PDF for free, if you wish to remove this line, click here to buy Virtual PDF Printer

En effet, lorsqu'un atome renvoie de la lumière après avoir été excité, il la renvoie dans toutes les directions, formant ainsi une sorte de halo sur l'écran. C'est le croisement de tous ces halos qui donnent l'apparence de sphères espacées au spectre.



Ce qu'il faut retenir :

Réseau de Bravais	*Conditions d'extinction*
Primitif	Pas d'extinction spécifique
Centré	(h+k+l) est un nombre pair
À faces centrées	h, k et l sont de même parité
À une face centré	(k+l) est un nombre pair

III Production des rayons X

A. Matériel

Les rayons X s'obtiennent par irradiation d'un élément particulier à des électrons. Pour se faire, l'élément bombardé devient l'anode d'un circuit électrique, et on applique une forte différence de potentiel à la cathode placée juste devant. C'est le principe utilisé dans les tubes scellés.

Tube scellé

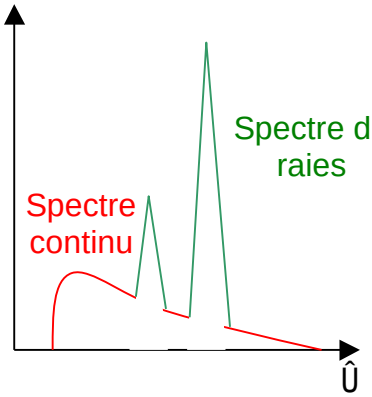
Anode tournante

Ce procédé rejette beaucoup de chaleur, et on peut aussi avoir recours à une anode tournante qui permet de dissiper la chaleur sur une plus grande partie du matériau, évitant ainsi la modification de ce matériau.

Le rayonnement peut aussi être récupéré dans un synchrotron, qui va accélérer les électrons à de très hautes vitesses, qui vont alors émettre un certain rayonnement. La brillance de ce rayonnement est 10 milliard de fois supérieure à celle d'un tube scellé.

Synchrotron

B. Spectre obtenu



à Le spectre continu vient du fait que les électrons projetés sont décélérés en arrivant sur l'anode, d'où une émission de photons. Plus le potentiel électrique est fort, plus ce spectre est important.

à Le spectre de raies est le résultat des transitions électroniques dus aux bombardements électroniques sur l'anode. Deux transitions peuvent survenir, d'où deux pics …

Create PDF with GO2PDF for free, if you wish to remove this line, click here to buy Virtual PDF Printer

- Filtration des rayons X :

Il suffit de faire passer les rayonnements à travers un matériau qui absorbe tout sauf le plus grand pic. Mais la méthode la plus utilisée consiste à faire réfléchir le rayonnement. Sachant que l'angle de réflexion dépend de la longueur d'onde, on peut ainsi ne sélectionner que la longueur d'onde qui nous intéresse.

IV Méthodes de diffraction

A. Sur poudre cristalline

Les cristaux se trouvent orientés dans toutes les directions. La somme de diffraction des différents cristaux sera alors l'entrecroisement de tous cônes de diffraction, qui sera mesuré dans toutes les directions.

B. Sur monocristal

On fait tourner le cristal dans la direction que l'on veut, tandis qu'un capteur circulaire mesure les intensités de diffraction.

Create PDF with GO2PDF for free, if you wish to remove this line, click here to buy Virtual PDF Printer