

Has dut mai unes ulleres atòmiques?
2014, Any Internacional de la Cristal·lografia

Xavi Carpena
UCE_2014
Prades

Has dut mai unes ulleres atòmiques?
2014, Any Internacional de la Cristal·lografia

Història i fonaments de la cristal·lografia de R-X (I): de la sal a la doble hèlix

Pràctiques-I: Cristal·lització i manipulació de cristalls de lisozim

Bellesa i simetria dels cristalls

Història i fonaments de la cristal·lografia de R-X (II): de la primera proteïna al ribosoma

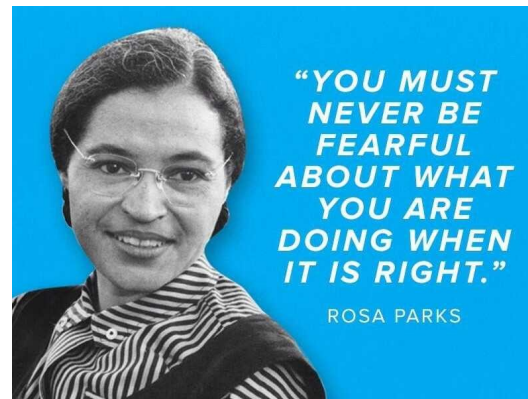
Pràctiques-II: Processat i resolució de dades de difracció

Has dut mai unes ulleres atòmiques?
2014, Any Internacional de la Cristal·lografia



De com la vida s'ha protegit de l'oxidació: estructura d'oxidoreductases

Aportacions biomèdiques de la cristal·lografia: canvi de forma, canvi de funció





L'Univers a tocar ...



Hans
Lippershey



Un Univers de la mida d'un cap d'agulla..



Zaccharias
Jansen



Antoine Van
Leeuwenhoek



[Portada](#) > [Ciencia](#)

UN NOBLE LO SUBASTÓ

El inventor del telescopio fue un español

Actualizado lunes 15/09/2008 17:55 (CET)



EDUARDO SUÁREZ

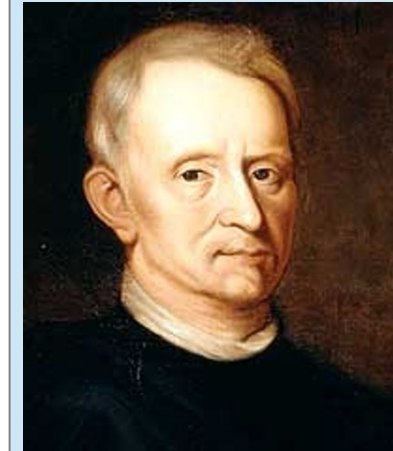
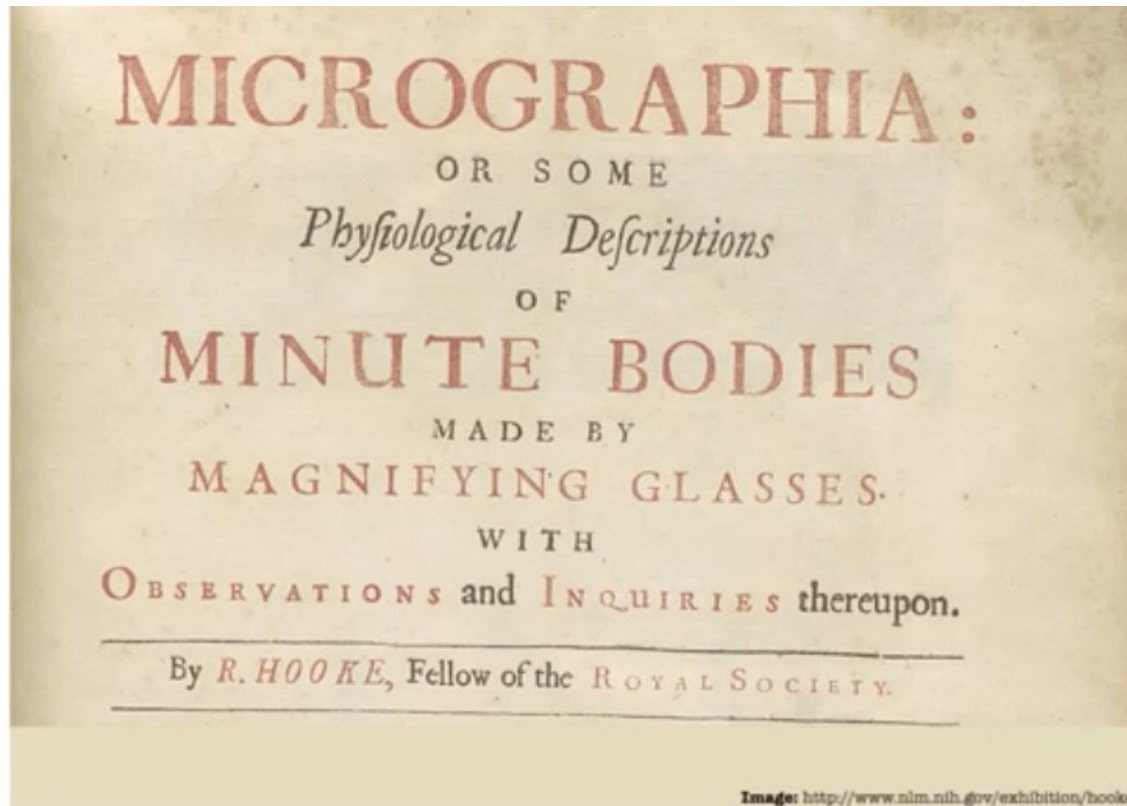
LONDRES.- El telescopio lo inventó un catalán. He aquí la sorprendente hipótesis que pone la revista británica '[History Today](#)'. La historia lleva la firma de Nick Pelling -informático, consultor e historiador en ciernes- y caerá como una losa sobre los fastos que conmemorarán a lo largo del otoño el 400º aniversario del invento.

Hasta ahora se daba por hecho que el telescopio lo había inventado un óptico holandés aunque no estaba muy claro cuál. Hasta tres artesanos distintos **trataron de patentar el invento en el plazo de una semana** en 1608.

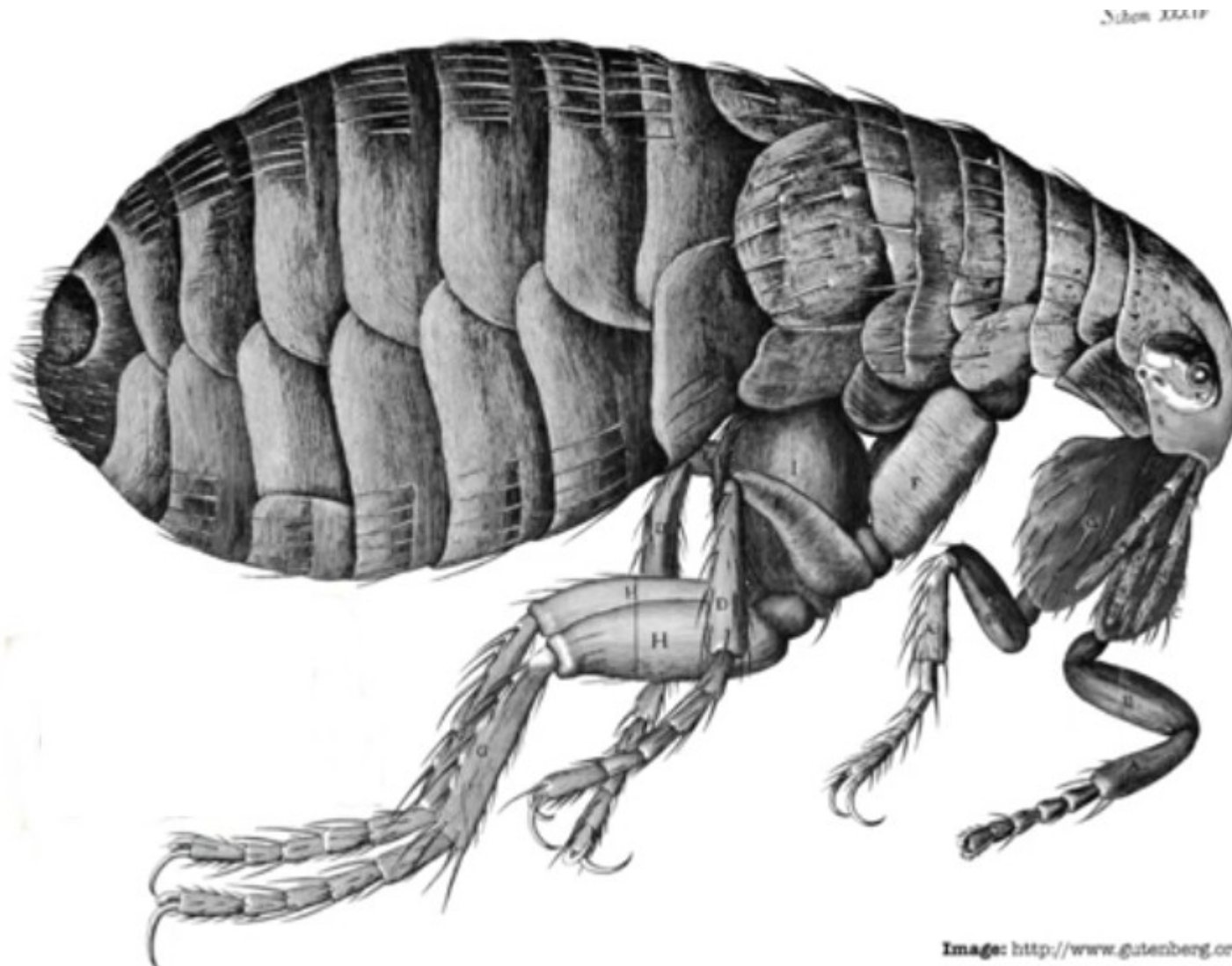
Nick Pelling suggests that credit should go not to the Netherlands but much further south to Catalonia.



Early depiction of a 'Dutch telescope' from the "Emblemata of zinne-werck" (Middelburg, 1624) of the poet and statesman Johan de Brune (1588-1658). The print was engraved by Adriaen van de Venne, who, together with his brother Jan Pieters van de Venne, printed books not far from the original optical workshop of Hans Lipperhey.



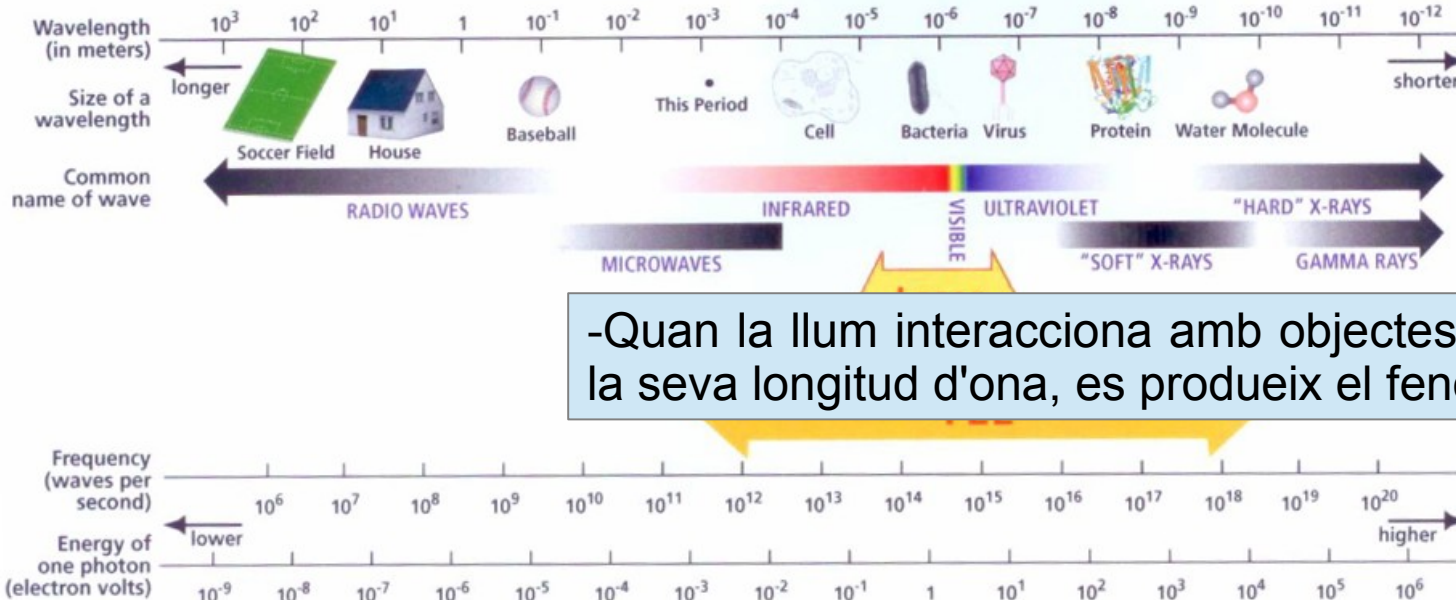
Robert
Hooke



- No permet conèixer l'interior.
- No permet veure coses encara més petites

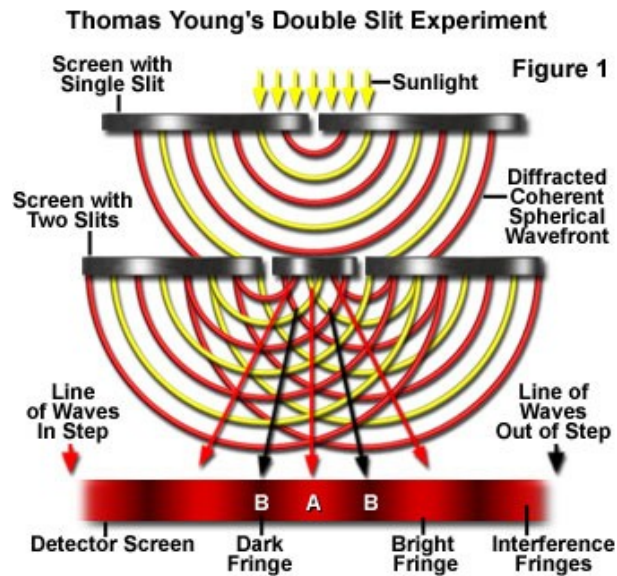
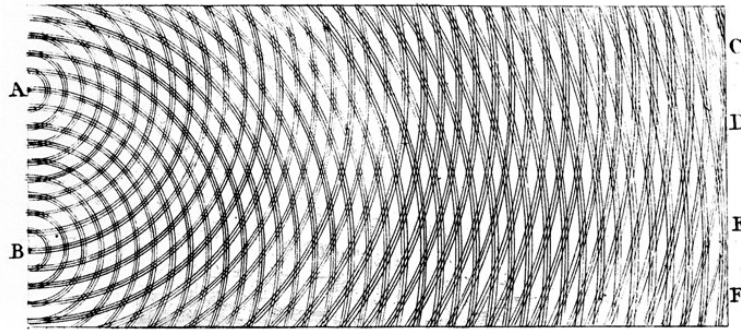


THE ELECTROMAGNETIC SPECTRUM

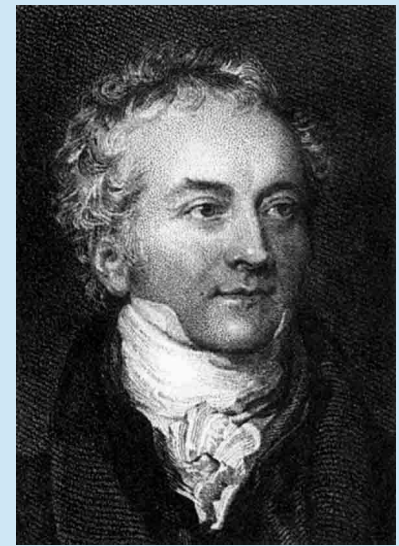


- Quan la llum interacciona amb objectes de mida equivalent a la seva longitud d'ona, es produeix el fenomen de la difracció

Difracció de la llum



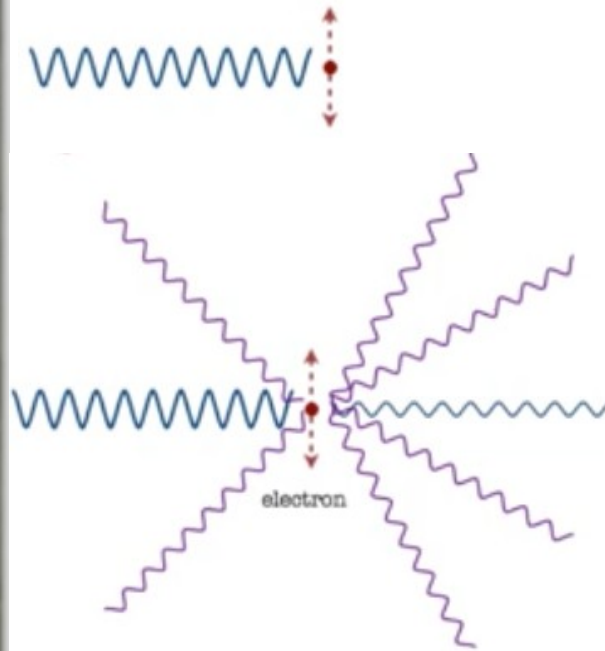
F.M.Grimaldi



T. Young

- Del llatí *diffringere*, «trencar en peces».
- Conegut des del s. XVII (Grimaldi), extès per altres (Newton, Young..).
- Té lloc amb tot tipus de llum però només és observable quan $w\lambda$ equival a la mida de l'objecte.

La primera radiografia (22/12/1895)



Roöntgen



Anna Bertha

-La matèria és majoritàriament transparent o semi (només òssos i metalls absorbeixen).

-Els elements electrodensos -més electrons- dispersen els R-X (difracció).

Radiació "X".



Max
von Laue

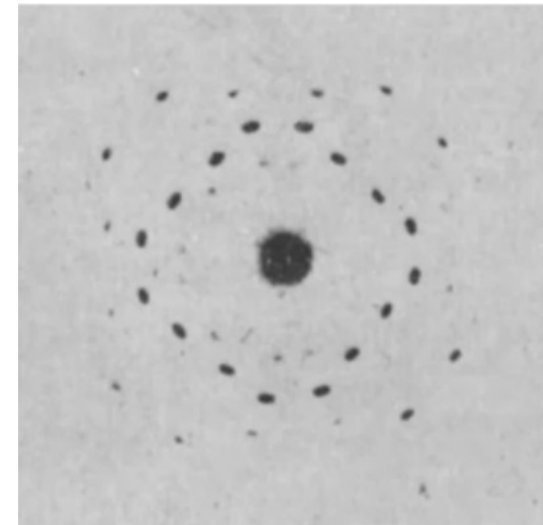
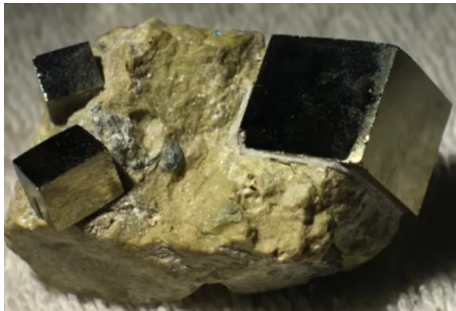
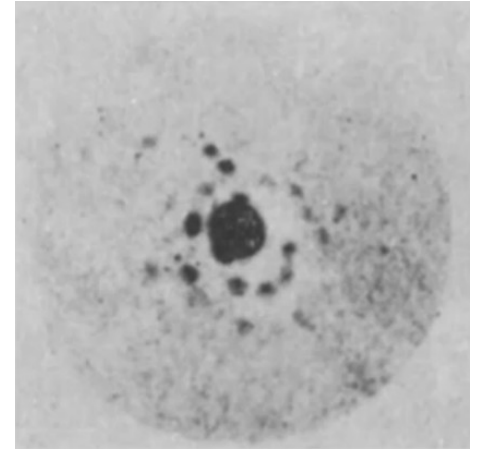
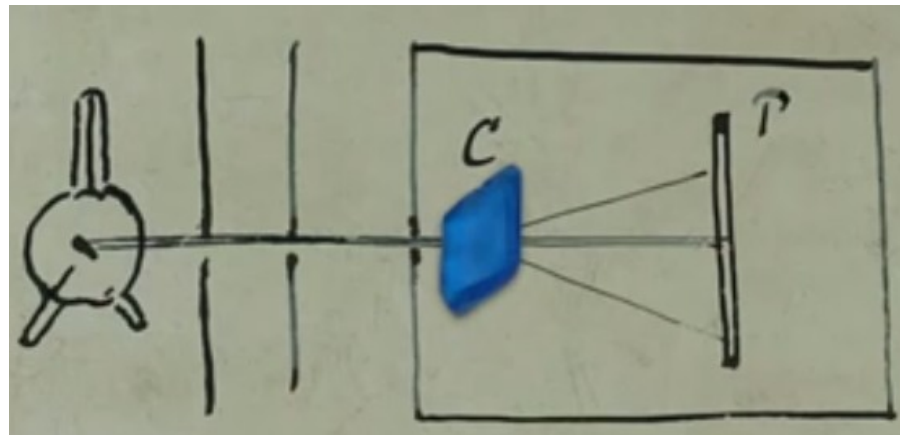


Walter
Friedrich

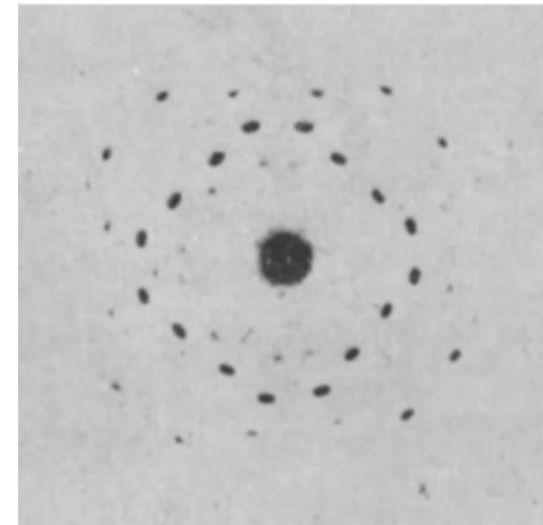
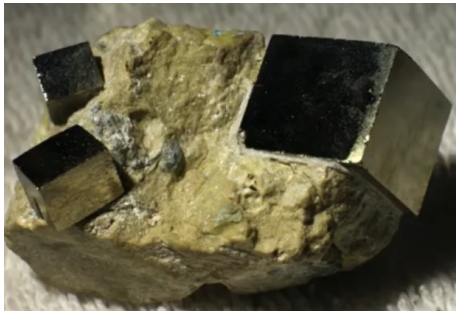
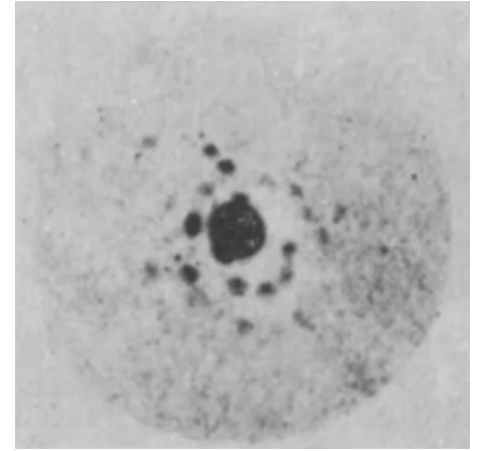
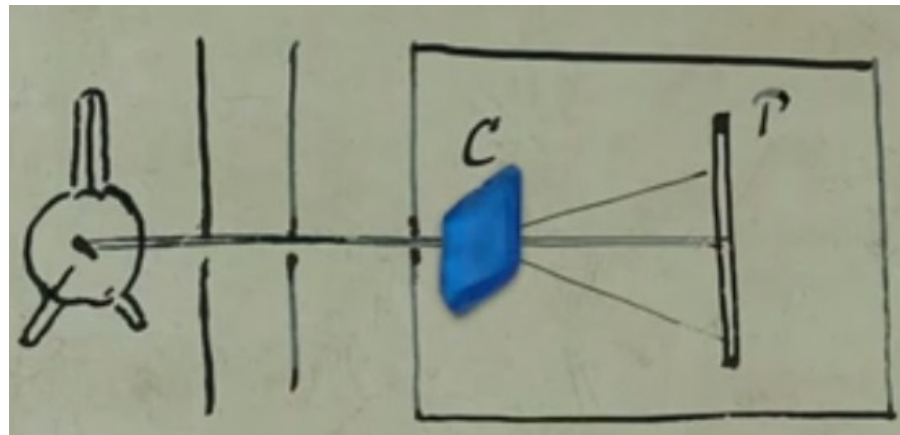


Paul
Knipping

- Coneguts des de l'antiguitat, ja se suposava que tindria interiorment una estructura repetitiva.
- Von Laue va creure que la λ dels R-X seria equivalent a les distàncies entre els àtoms que composaven els cristalls ($\lambda_{R-X} \approx d_{CuSO_4}$)



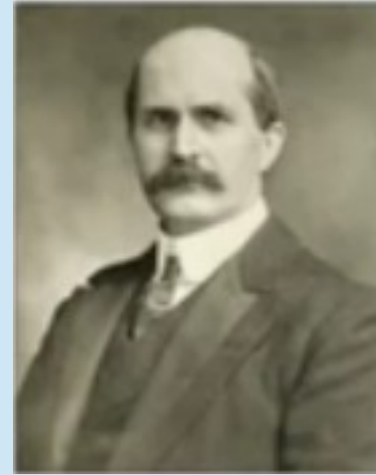




*Recently, however, certain
new curious properties of
X-rays have been discovered
by Dr. Laue in Munich.*

*“Recentment, tanmateix, algunes noves i curioses
proprietats dels raigs-X han estat descobertes pel
Dr. Laue a Munich.*

*Lars Vegard
Juny 1912”*

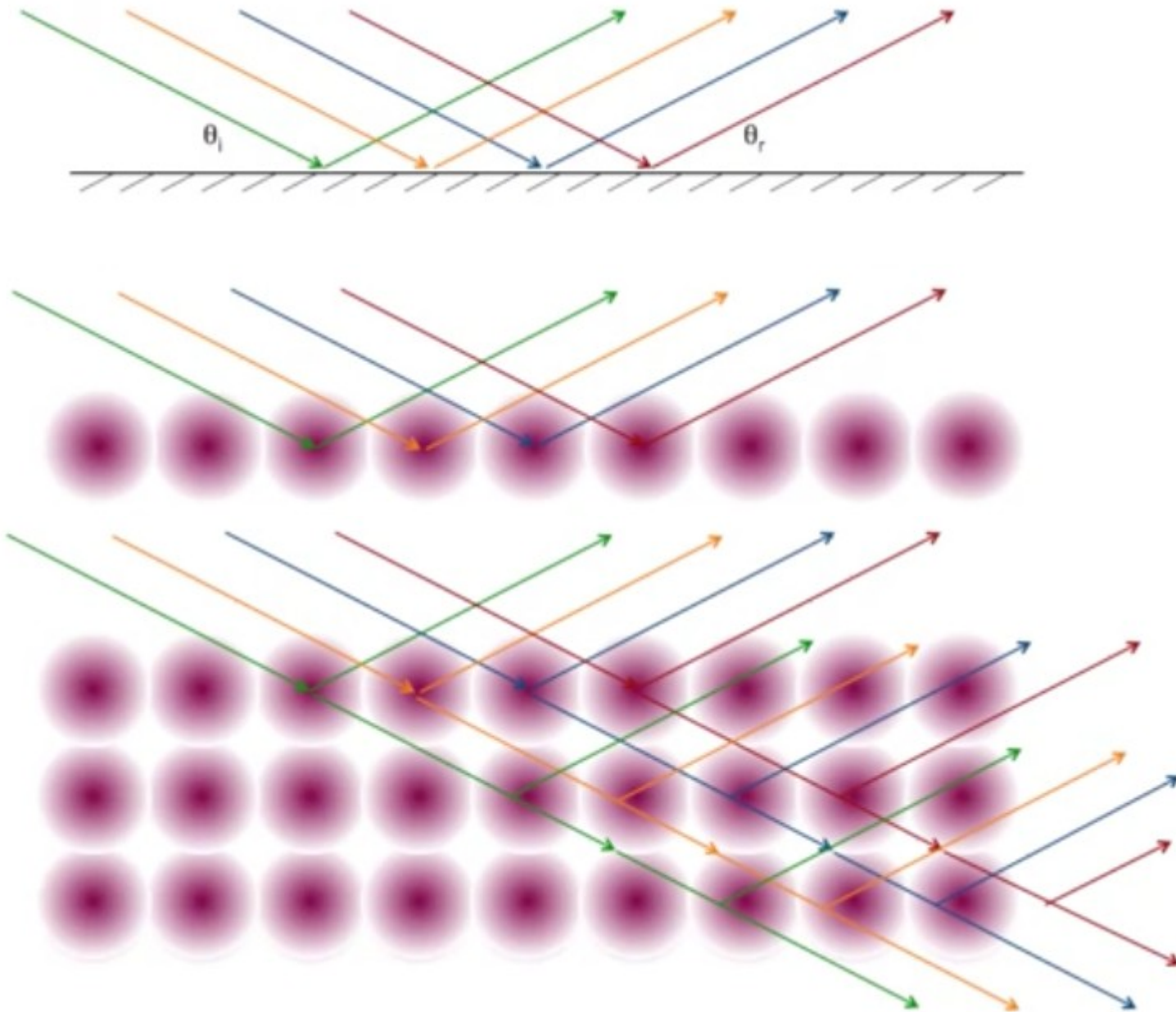


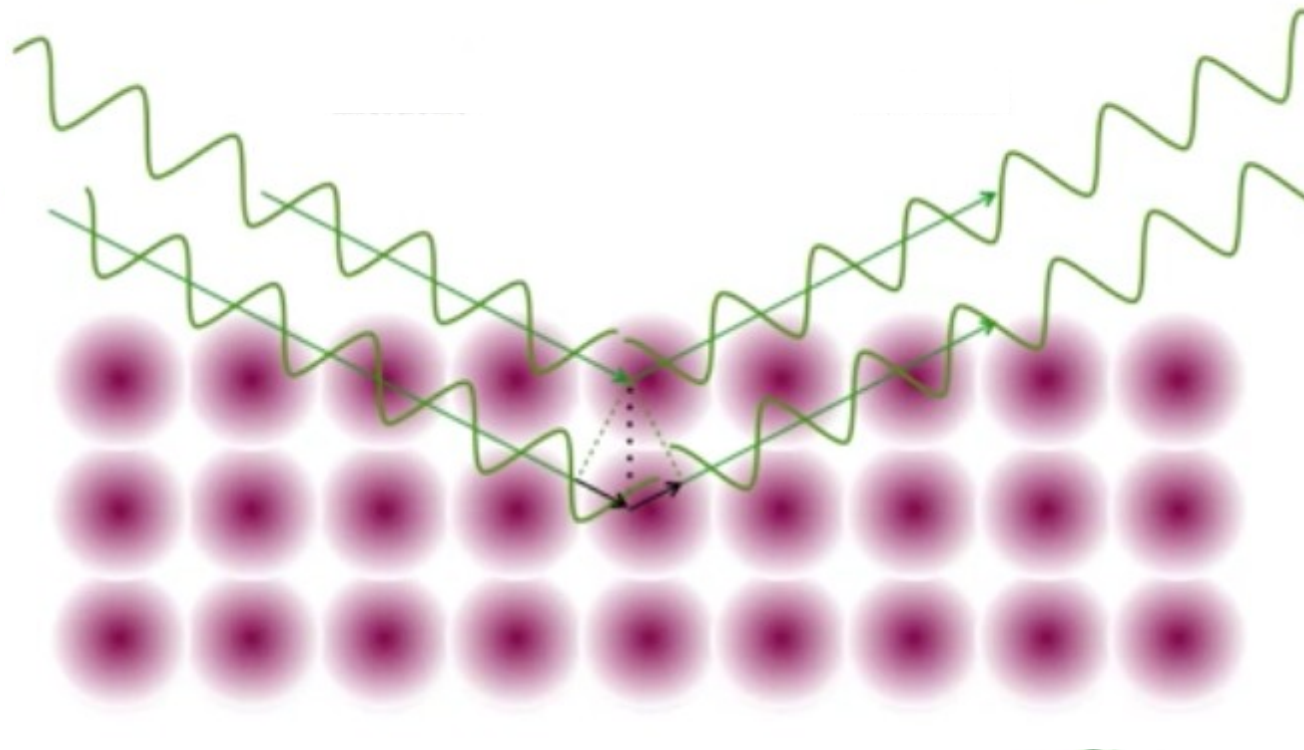
William Henry
Bragg

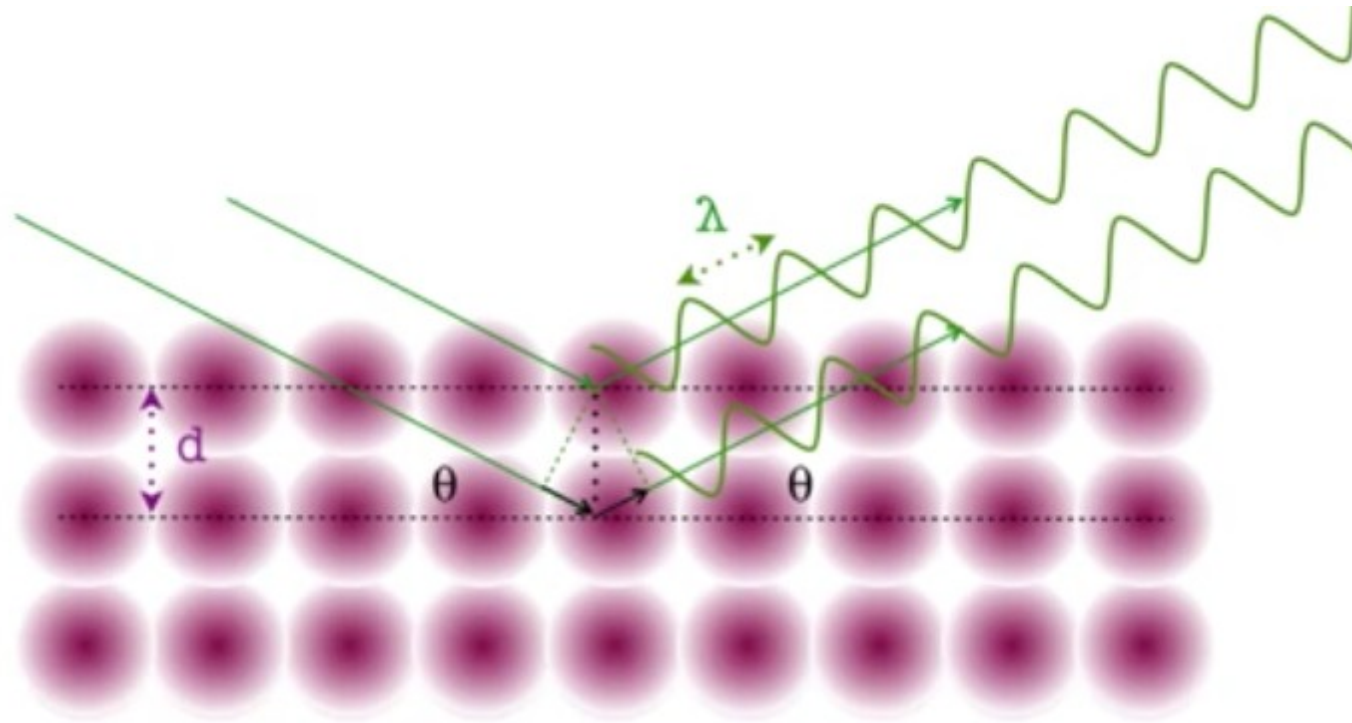


William Lawrence
Bragg

- Laue proporcionà gentilmente una foto a W.H. Bragg.
- Fou W.L. Bragg qui va resoldre el problema de la interpretació.

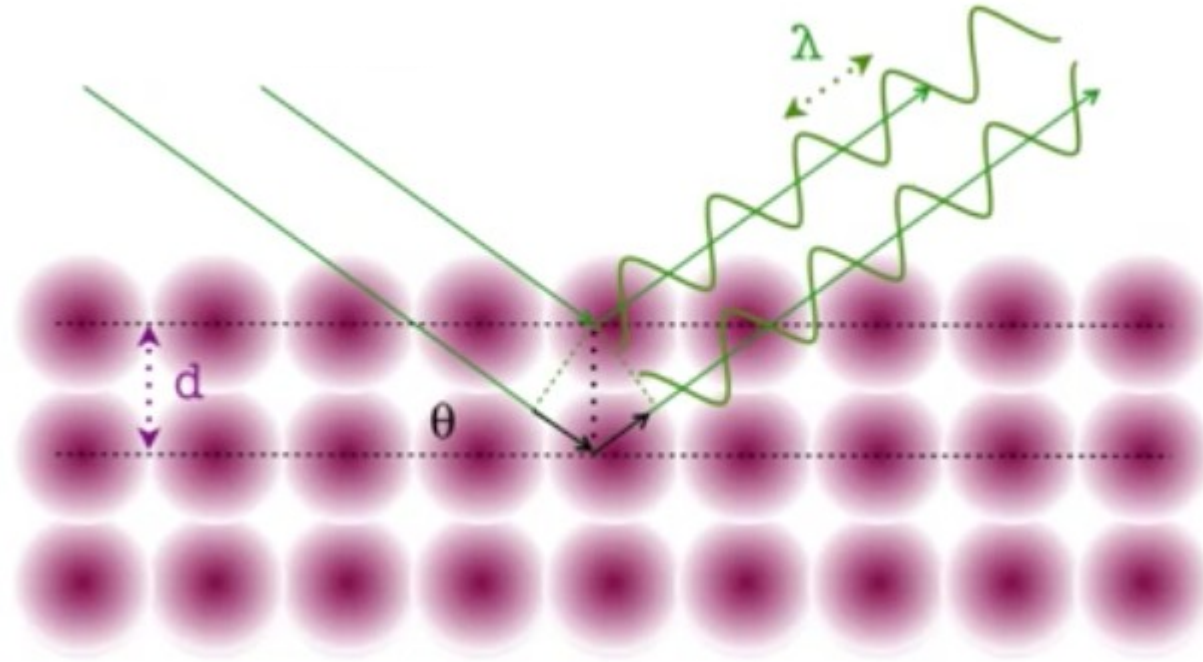






-Diferència de recorregut: $2d\sin\theta$ → →

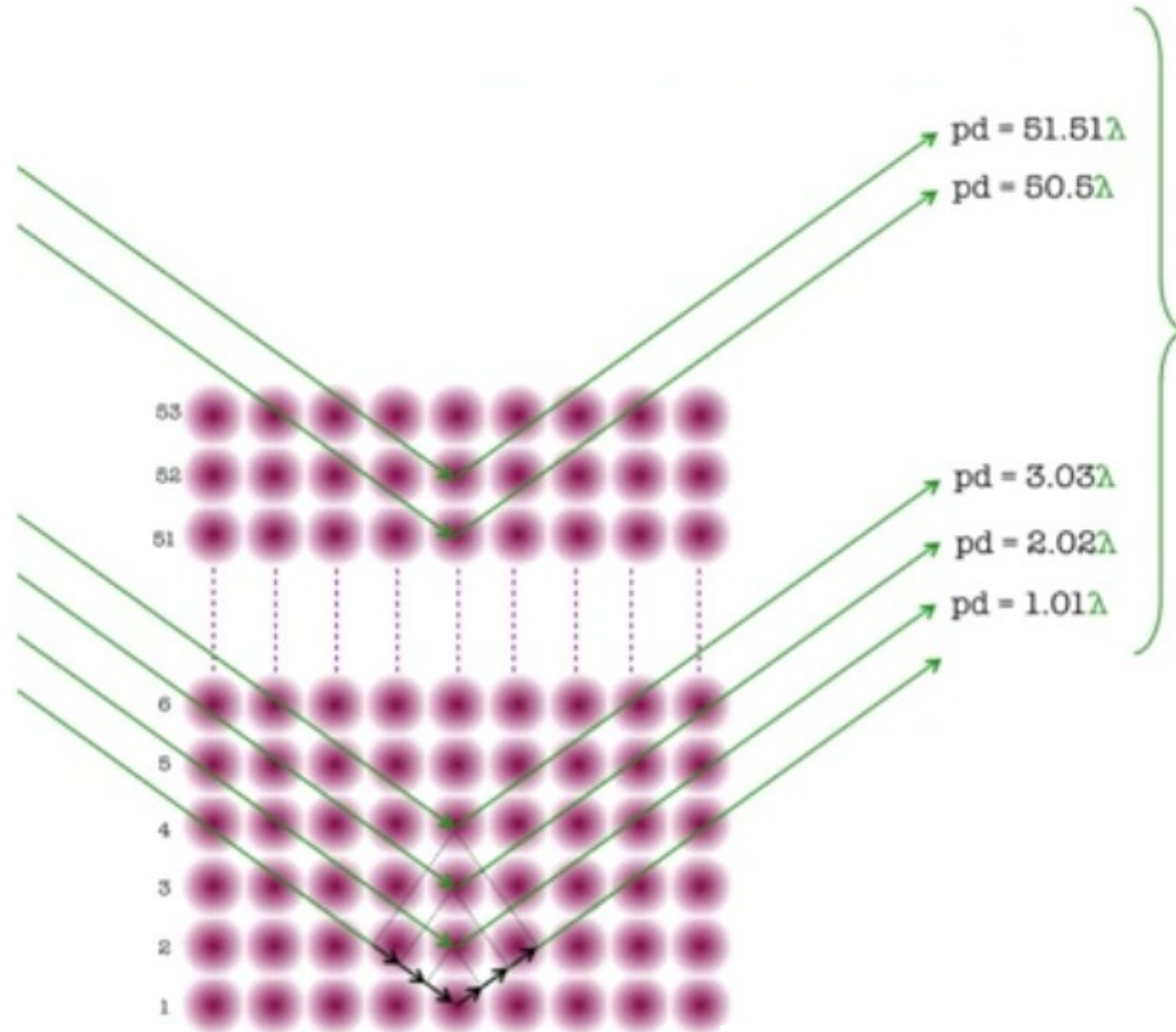
-Difracció **intensa** quan: $2d\sin\theta = n\lambda$



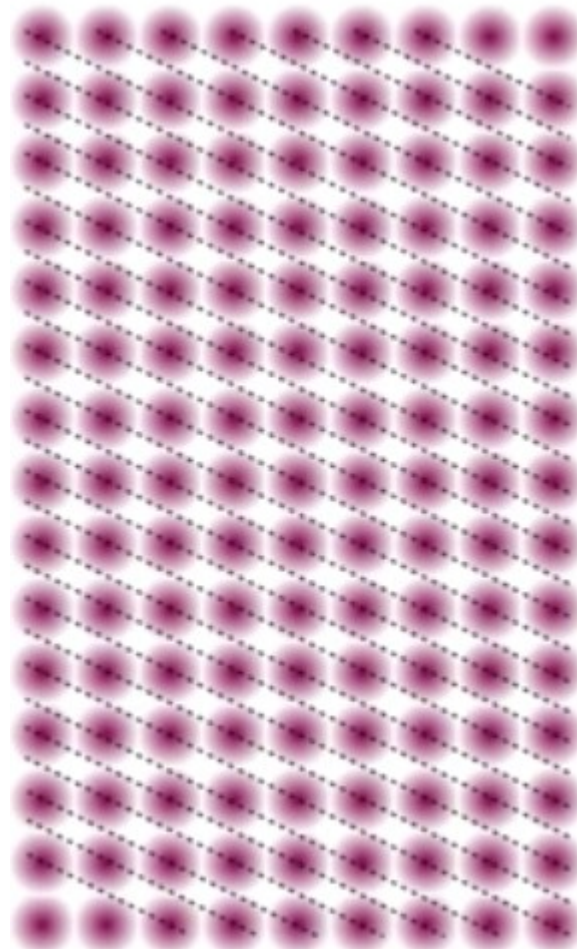
-Diferència de recorregut: $2d\sin\theta$

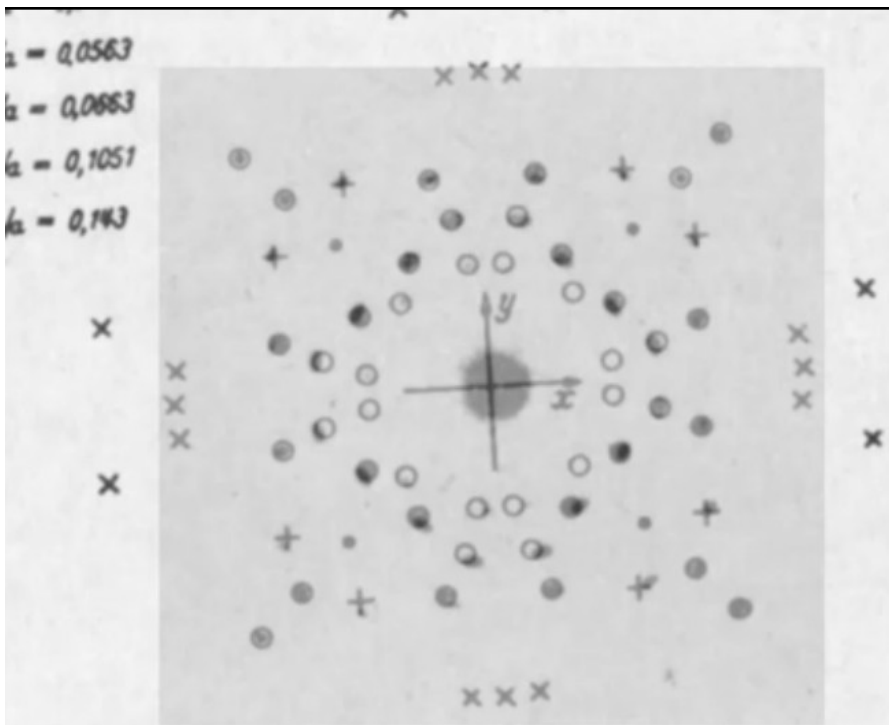
-Difracció nul·la quan: $2d\sin\theta = (2n-1)\lambda/2$

-Així doncs, la difracció es funció de d (estructura) i θ .



-La Llei de Bragg es compleix escrupulosament!





No 2 was taken for 40 minutes. The pattern is not quite symmetrical as you can see, it is curious that it should be so nearly so.
 angle of incidence $90^\circ - (17.5^\circ - 5.5^\circ) = \underline{80.3^\circ}$
 Distance of plate from mica alt 4.2 cm.

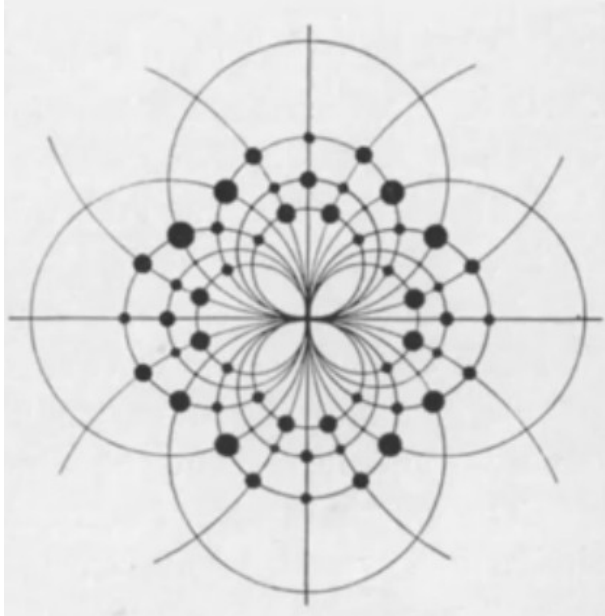
Bragg's letter to his father (late 1912)

Dear Dad,
 I enclose some very bad prints

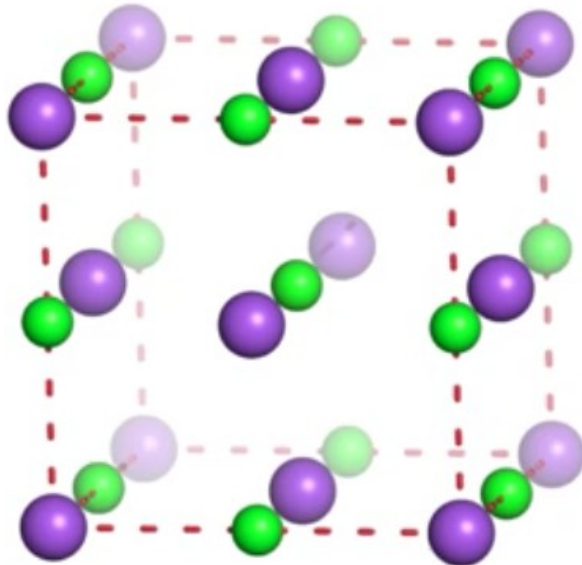
Lower thing was equivalent to reflection but of course he didn't see it, and it's great fun getting it straight off, isn't it?

On each exposure being made, the plate was shifted on one, so to speak, and the angle of incidence altered, in Plot No 1.





NaCl: Sal comuna



“En base a aquesta lleugera evidència, un xic indirecta, vaig ser capaç d'assignar l'estructura.. en un article publicat a la Royal Society al Juny de 1913; per sort, investigacions posteriors en van confirmar la seva veracitat.

-No existeix un aparellament real dels compostos iònics en sol·lució.

WL Bragg, 1975”

“En el clorur de sodi, no existeixen molècules de NaCl ... l'equiparació entre els àtoms de sodi i els de clor, és el resultat d'una disposició dels mateixos en forma d'un taulell d'escacs.

W. Henry Bragg, Nature 1927”

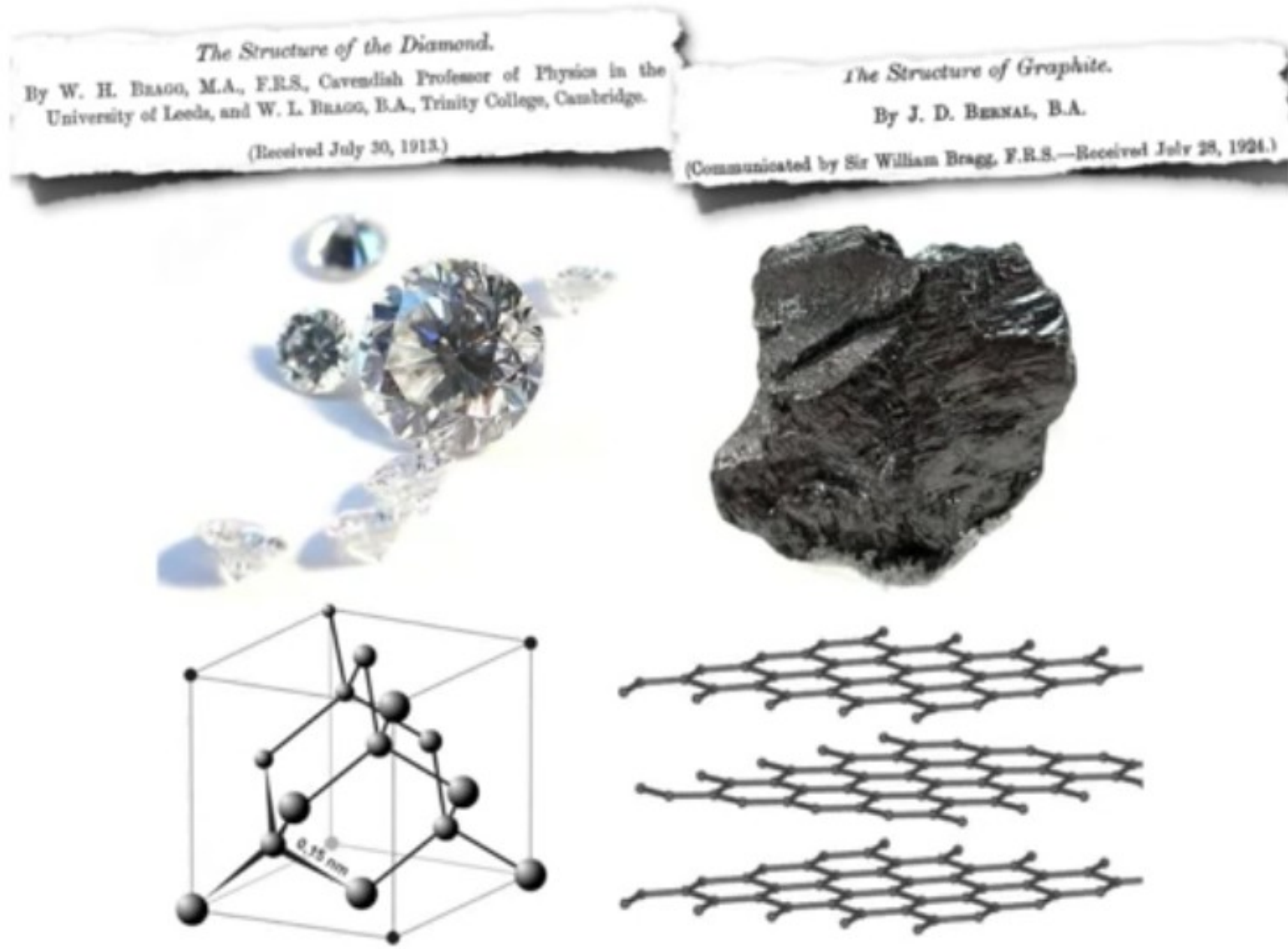


“Aquest argument és absurd fins a l'enèssima potència.

La Química no té res a veure ni amb els escacs ni amb la geometria, sigui quina sigui la Física dels raigs-X.

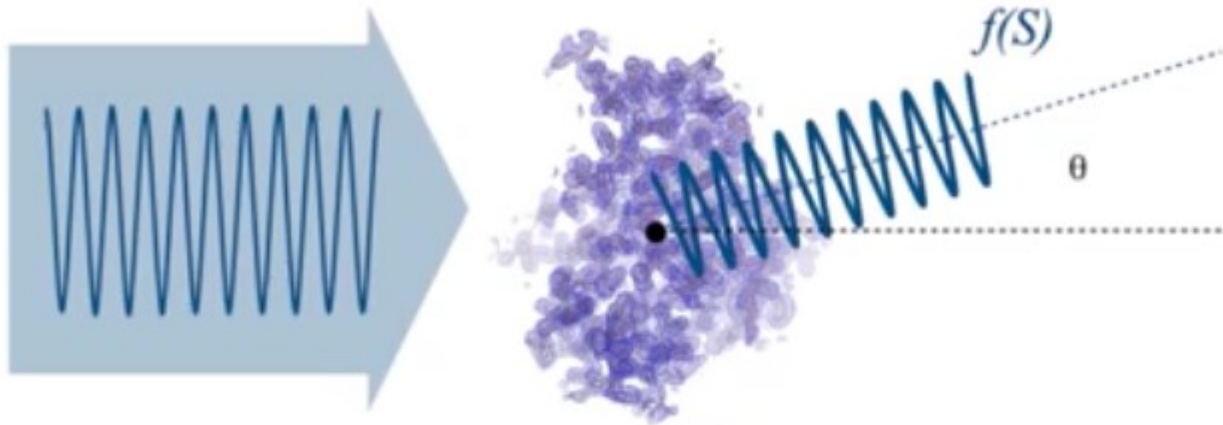
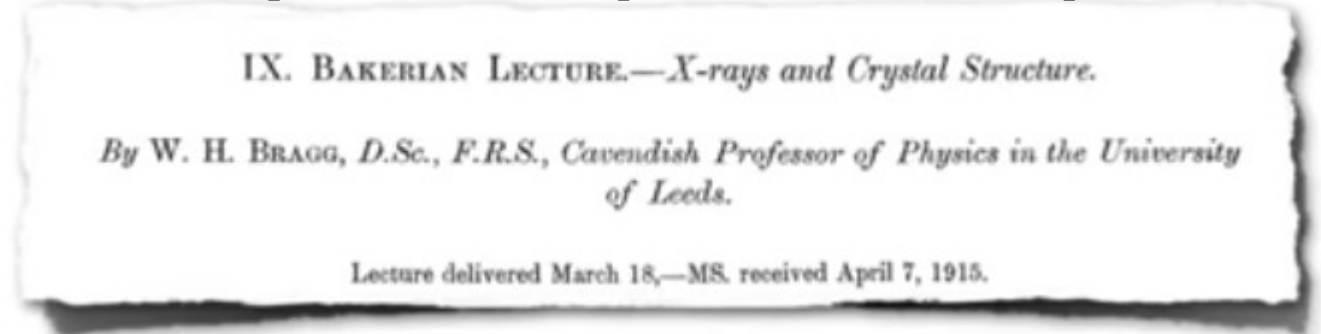
Henry Armstrong, Nature 1927”



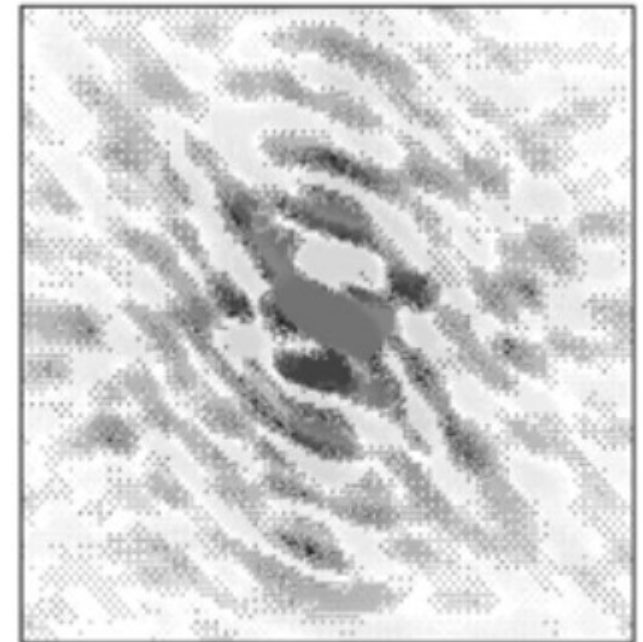


-Entenent l'estructura atòmica dels compostos, entenem el perquè de les seves propietats.

“En els casos senzills que hem considerat.. les dades aportades pel nou mètode han estat suficients. Hem pogut trobar les posicions atòmiques exactes. Aquest no és el cas, per a cristalls més complexos.”



$$f(S) = \iiint [\rho(r) dx dy dz] e^{i2\pi r \cdot S}$$



$$f(S) = \iiint \rho(r) e^{i2\pi r \cdot S} dx dy dz$$

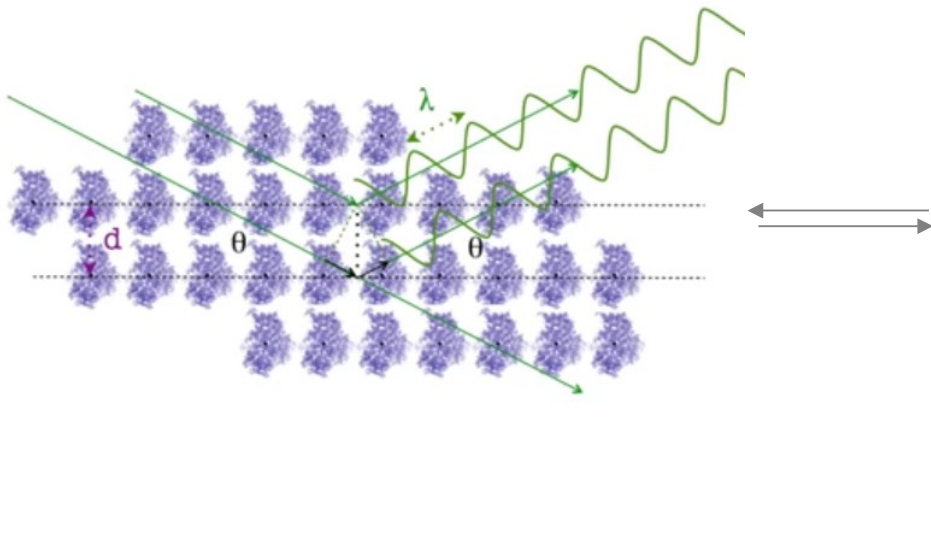
-Aquesta equació matemàtica, es correspon amb la que va desenvolupar Joseph Fourier el s. XVIII i s'anomena **Transformada de Fourier**.

$$f(S) = \iiint \rho(r) e^{i2\pi r \cdot S} dx dy dz$$

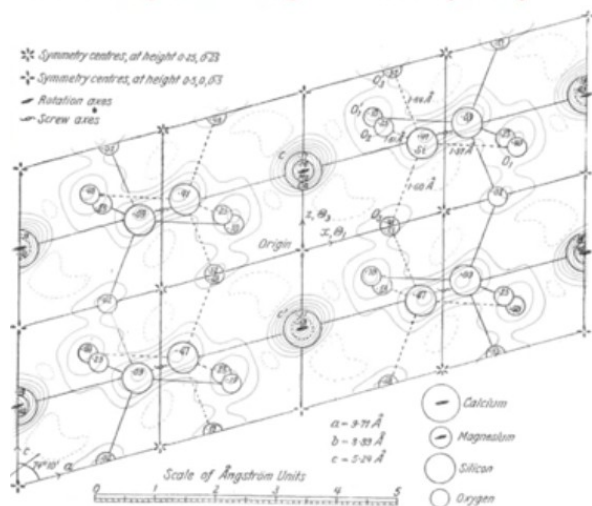


$$\rho(r) = \iiint f(S) e^{-i2\pi r \cdot S} dS$$

Transformada de Fourier Inversa



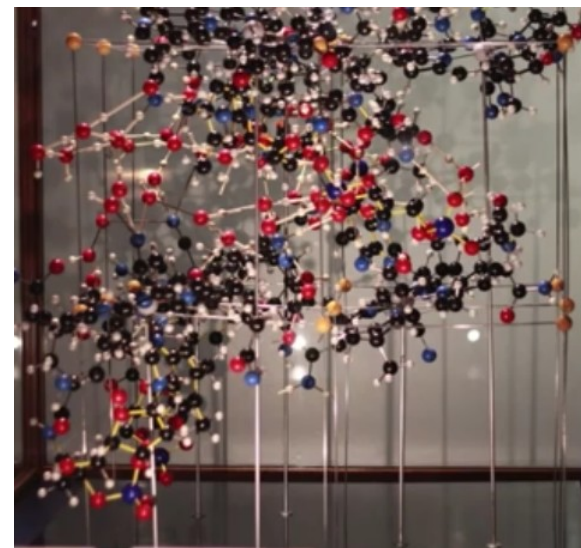
Jean-B. Joseph
Fourier



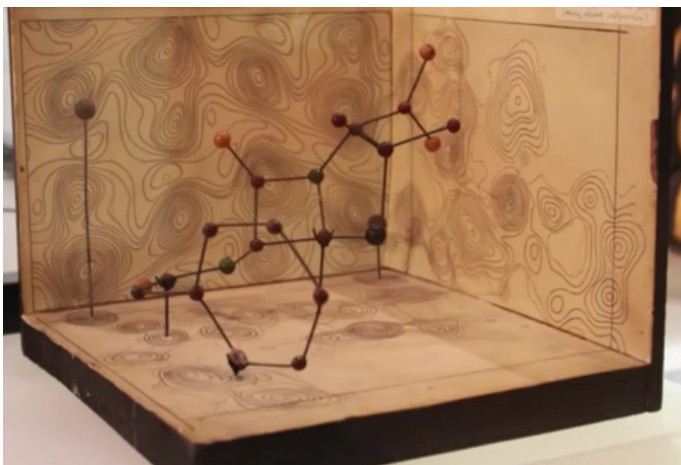
Diopside,
W.L. Bragg, 1929



Dorothy
Crowfoot H.



Vitamina B12,
D. Crowfoot (Hodgkin), 1954



Penicilina,
D. Crowfoot (Hodgkin), 1945

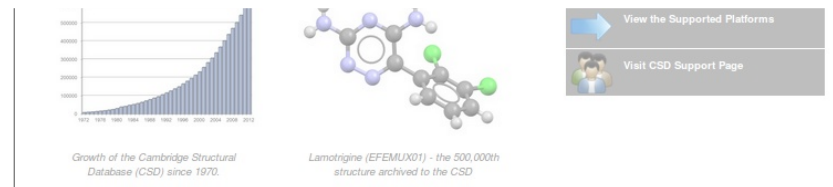
[COMMUNITY](#) [RESEARCH & CONSULTANCY](#) [SOLUTIONS](#) [NEWS & EVENTS](#) [SUPPORT & RESOURCES](#) [CCDC](#)

[Home / Solutions / CSD System / CSD \(Cambridge Structural Database\)](#)

Comprehensive of the published literature and highly curated, the Cambridge Structural Database (CSD) is an essential resource to scientists around the world

[Download CSD System case studies](#)

Cambridge Structural Database (CSD)
 > 500.000 Estructures Atòmiques
 ~ 40.000 Entrades/any





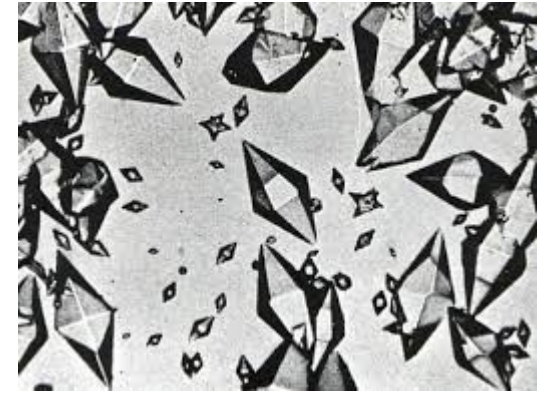
William Astbury &
Florence Bell



John Desmond
Bernal



Dorothy
Crowfoot H.



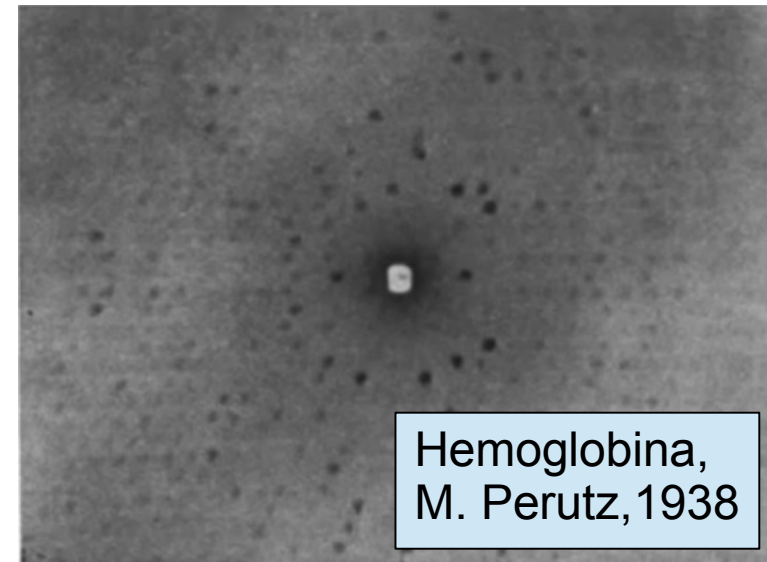
Cristalls de
pepsina, Uppsala



1^{era} difracció d'un cristall
de proteïna, 1934



1^{era} difracció de l'ADN
~ 1938



Hemoglobina,
M. Perutz, 1938

-L'experiment va confirmar que les proteïnes tenen una estructura tridimensional determinada.

“Ara que hem pogut obtenir fotografies de R-X de proteïna cristal·lina, està clar que disposem dels mecanismes per examinar les estructures de les proteïnes (...) amb molt més detall que qualsevol tècnica física o química prèviament ha estat capaç de donar.

*J.D.Bernal & D. Crowfoot,
Nature, 1934”*

“Si tu i jo no som capaços d'obtenir el màxim rendiment de la cristal·lografia biològica ... ens haurien de donar una patada al c__!”

W. Astbury a J.D.Bernal



William
Astbury



John Desmond
Bernal



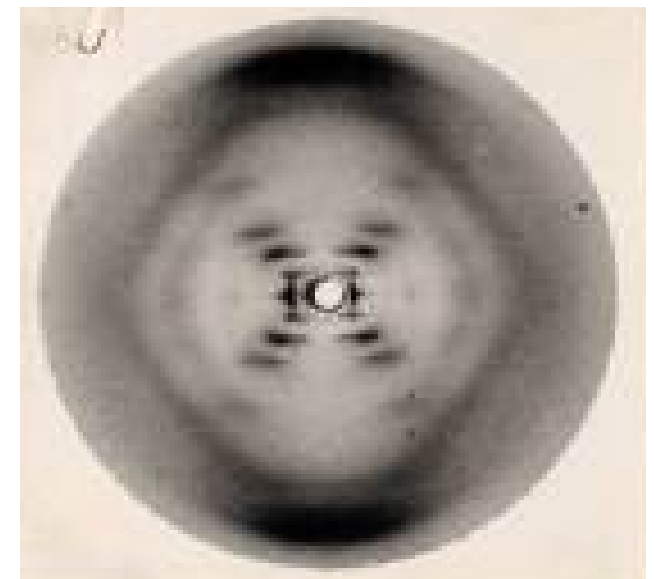
Maurice
Wilkins

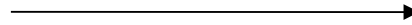
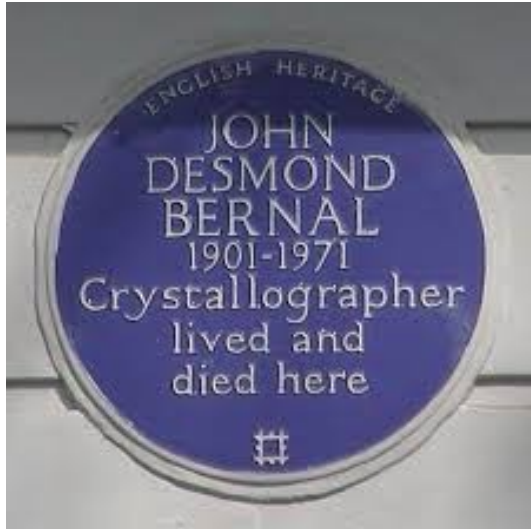


Rosalind
Franklin



J. Watson & F. Crick,
Nature, 1953





Max F.
Perutz

John C.
Kendrew

The Cavendish Laboratory, Cambridge
(dir.: W. Lawrence Bragg)



Premis Nobel 1962:
-Estructura de l'ADN
-Estructura de les primeres proteïnes