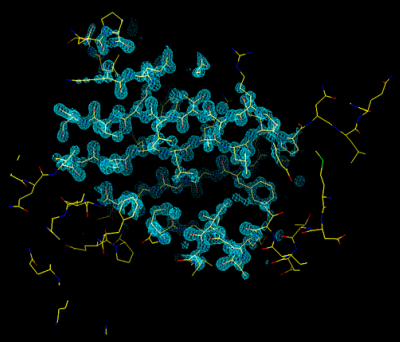
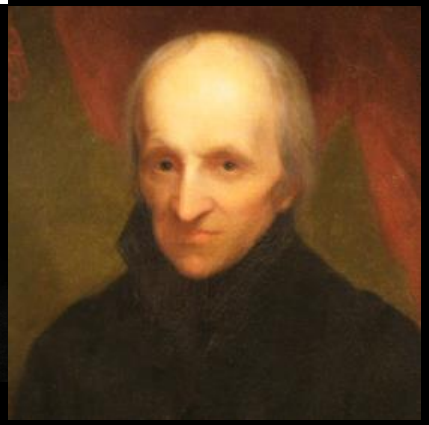
Comment Fourier a transformé la cristallographie



Cent ans après
sa mort !!!

Sylvain RAVY

Ligne CRISTAL



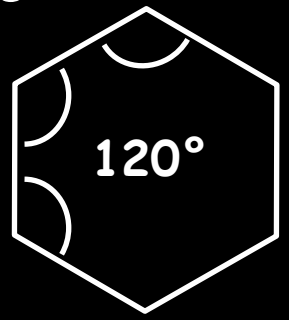
La cristallographie… qu'est-ce c'est ?

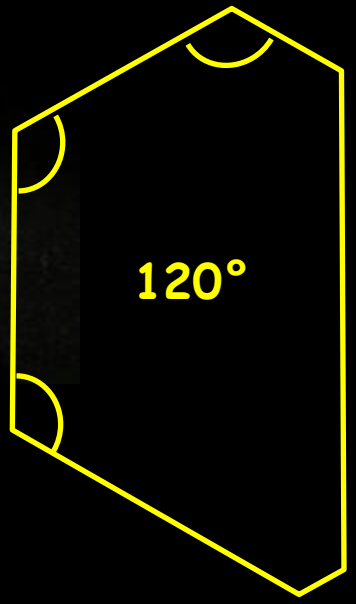
La science qui étudie les **substances cristallines à l'échelle atomique** en vue de comprendre leurs **propriétés physique, chimique et biologique**.

Elle a un rôle fondamental en physique, chimie, biologie, sciences de la terre...

Naissance de la cristallographie

- Des précurseurs aux XVIIe : Kepler, Hooke, Sténon, Lomonossov
- 1772 **J.-B. Romé de l'Isle** et **Arnould Carangeot** :
  Loi générale de constance des angles

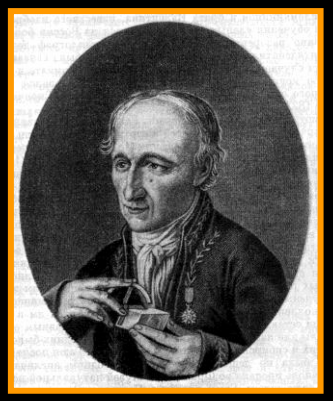


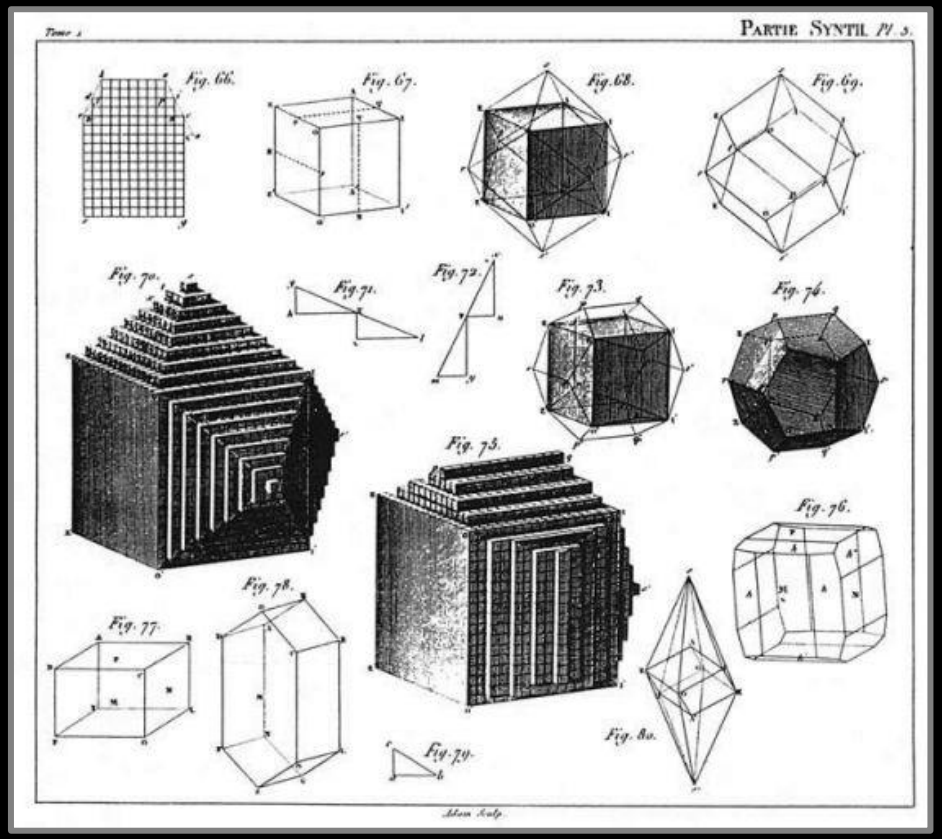


Une première révolution…

- 1781 René-Just Haüy : « Père de la cristallographie. »

Forme extérieure d'un cristal reflète sa structure intérieure.
Le cristal est un empilement périodique de « molécules intégrantes »





Une première révolution…

- 1781 René-Just Haüy : « Père de la cristallographie. »

Forme extérieure d'un cristal reflète sa structure intérieure.
Le cristal est un empilement périodique de « molécules intégrantes »

Une première révolution…

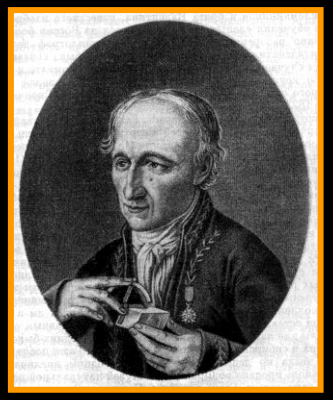
- 1781 René-Just Haüy : « Père de la cristallographie. »

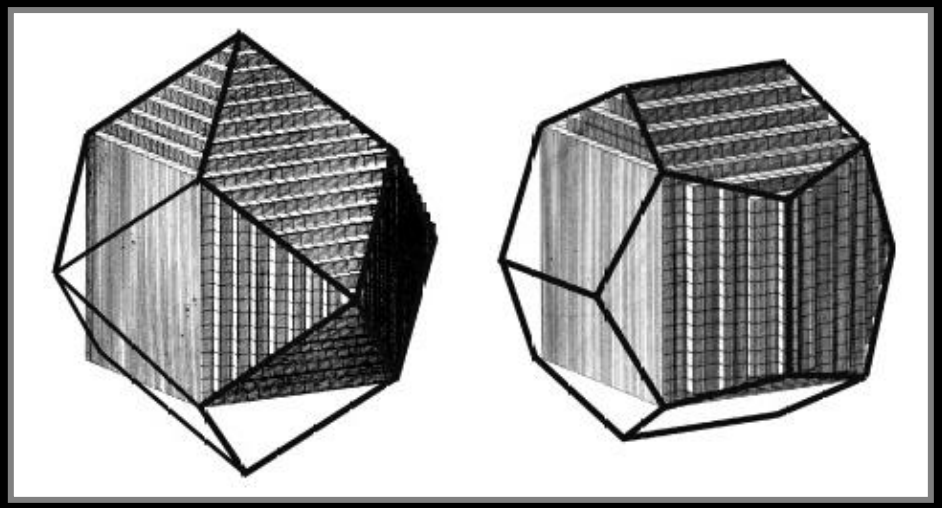
Forme extérieure d'un cristal reflète sa structure intérieure.
Le cristal est un empilement périodique de « molécules intégrantes »

Une première révolution…

- 1781 René-Just Haüy : « Père de la cristallographie. »

Forme extérieure d'un cristal reflète sa structure intérieure.
Le cristal est un empilement périodique de « molécules intégrantes »





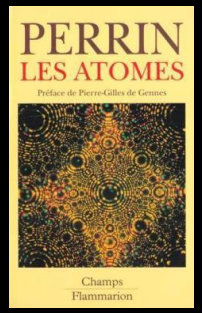
Haüy introduit la notion de périodicité
à la base des maths de Fourier

Haüy est atomiste
et
son hypothèse est explicative !

Au cours du XIXe siècle… et au début du XXe

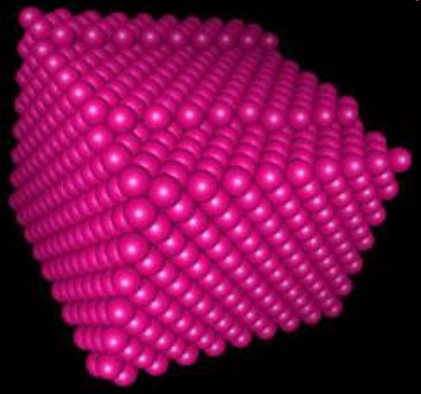
La notion d'**atome** devient **universellement acceptée**
Mais il y a des réticences et des débats, en France :

Jean Perrin
(1870-1942)
Atomiste…



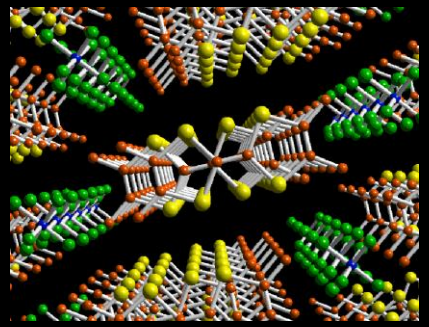
Marcellin Berthelot
(1827-1907)
…anti-atomiste

La notion de **cristal**, comme empilement régulier d'**atomes**
dans l'espace est considérée comme
« l'hypothèse la plus probable » (George Wulff)



Comment s'empilent-il ?
Quelle est leur distance ?

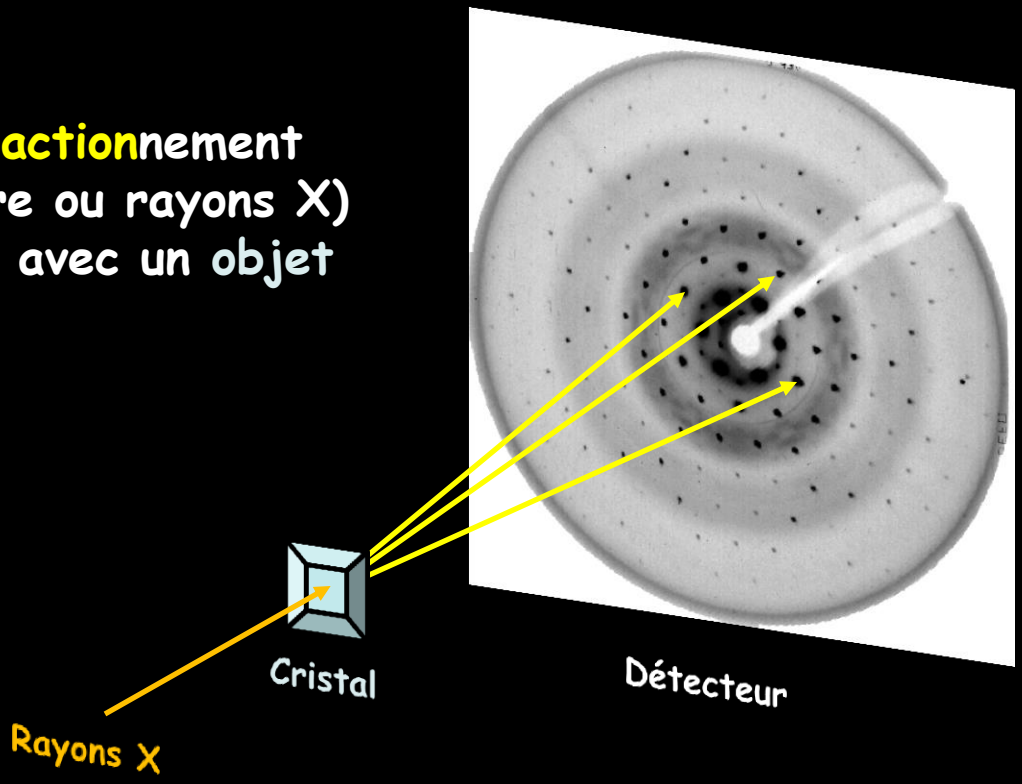
Aucune mesure n'est disponible



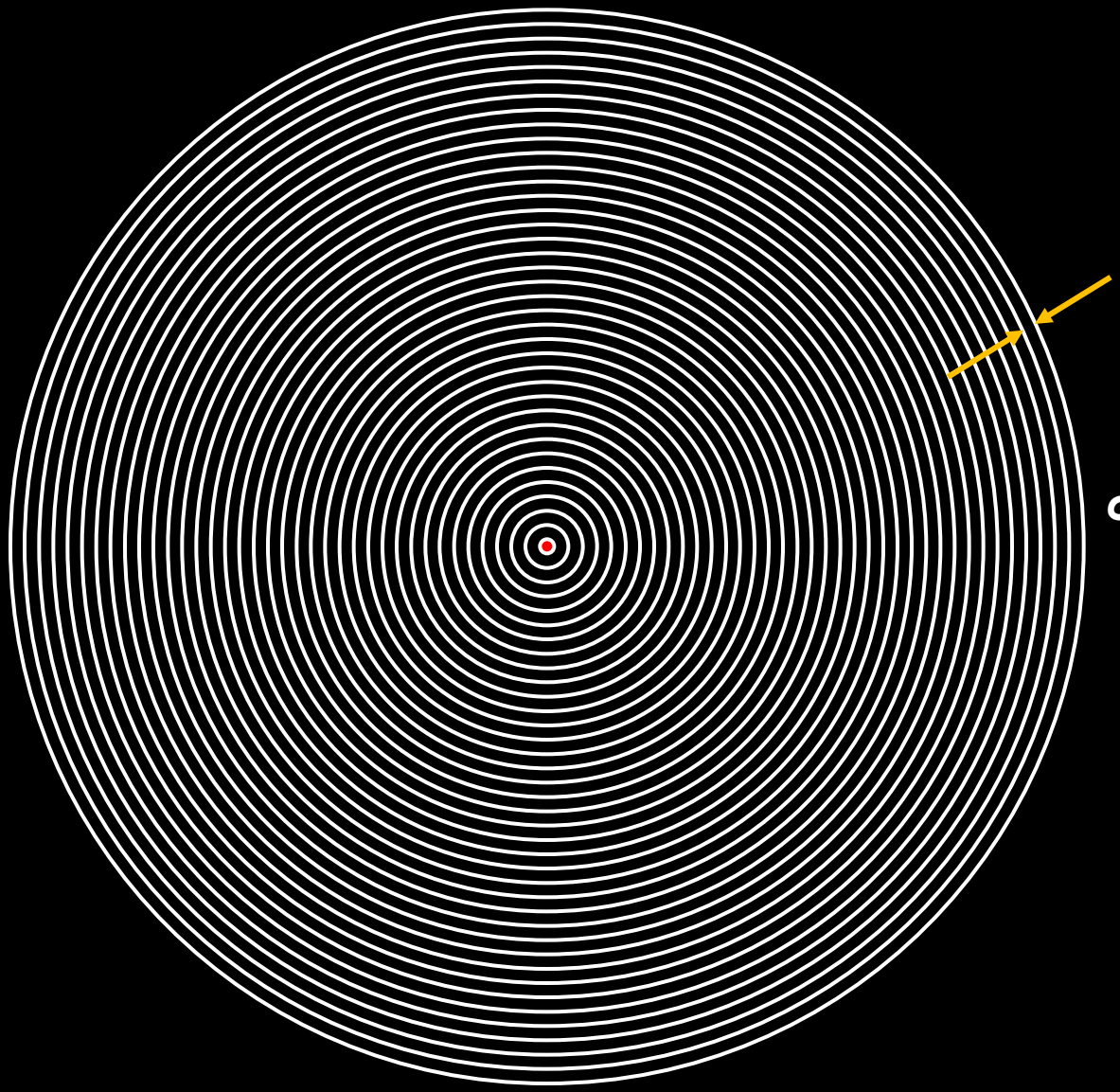
Une découverte capitale : la diffraction des rayons X par les cristaux

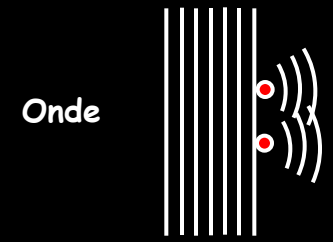
1912 : M. von Laue, W. Friedrich, P. Knipping

Diffraction : fractionnement d'une onde (lumière ou rayons X) après interaction avec un objet



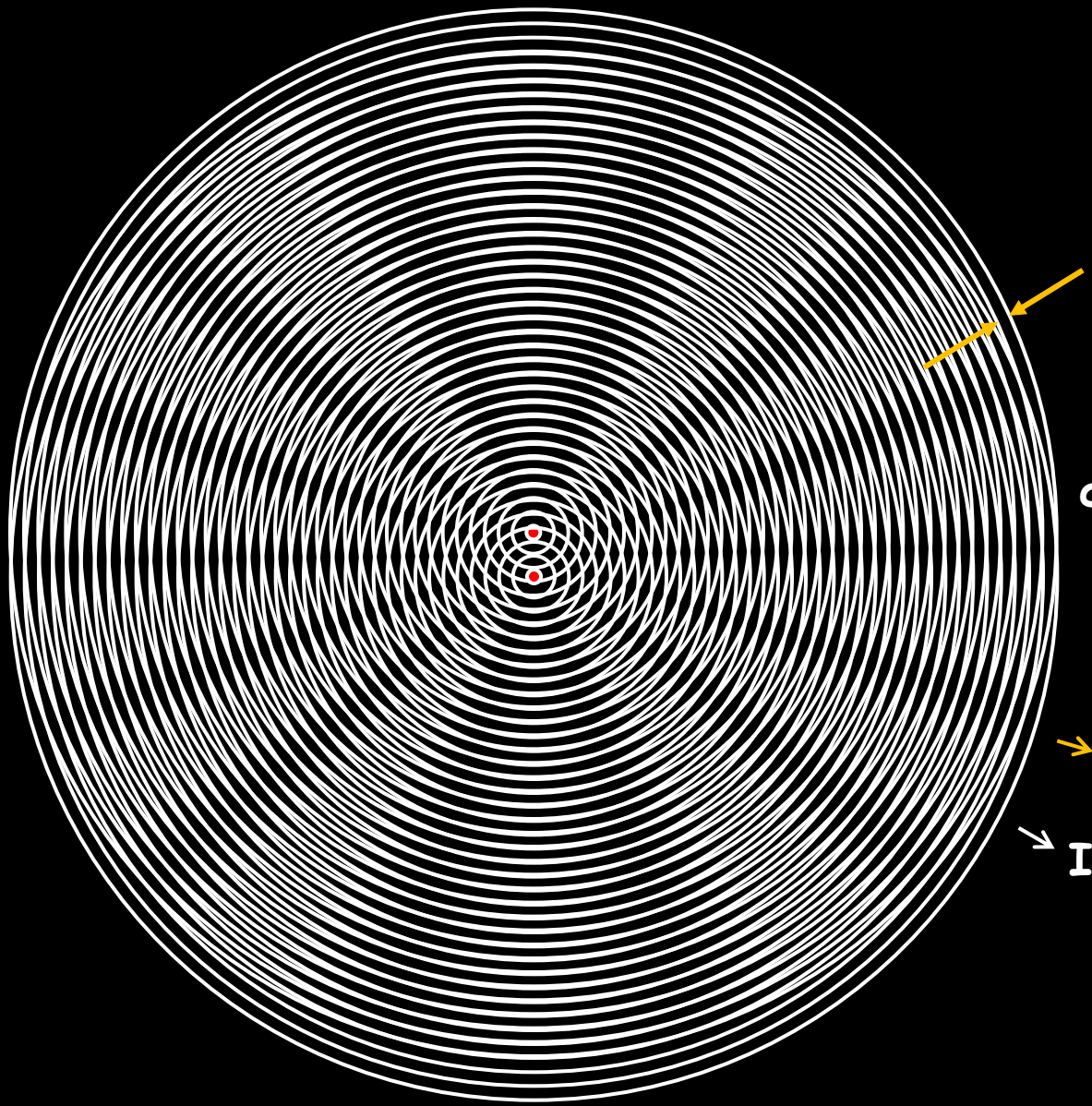
Interférence et diffraction

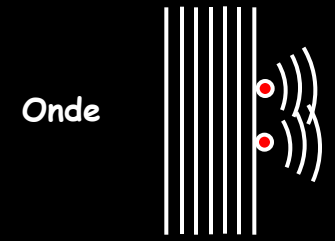




Longueur d'onde λ
plus petite
que la distance entre objets

Interférence et diffraction



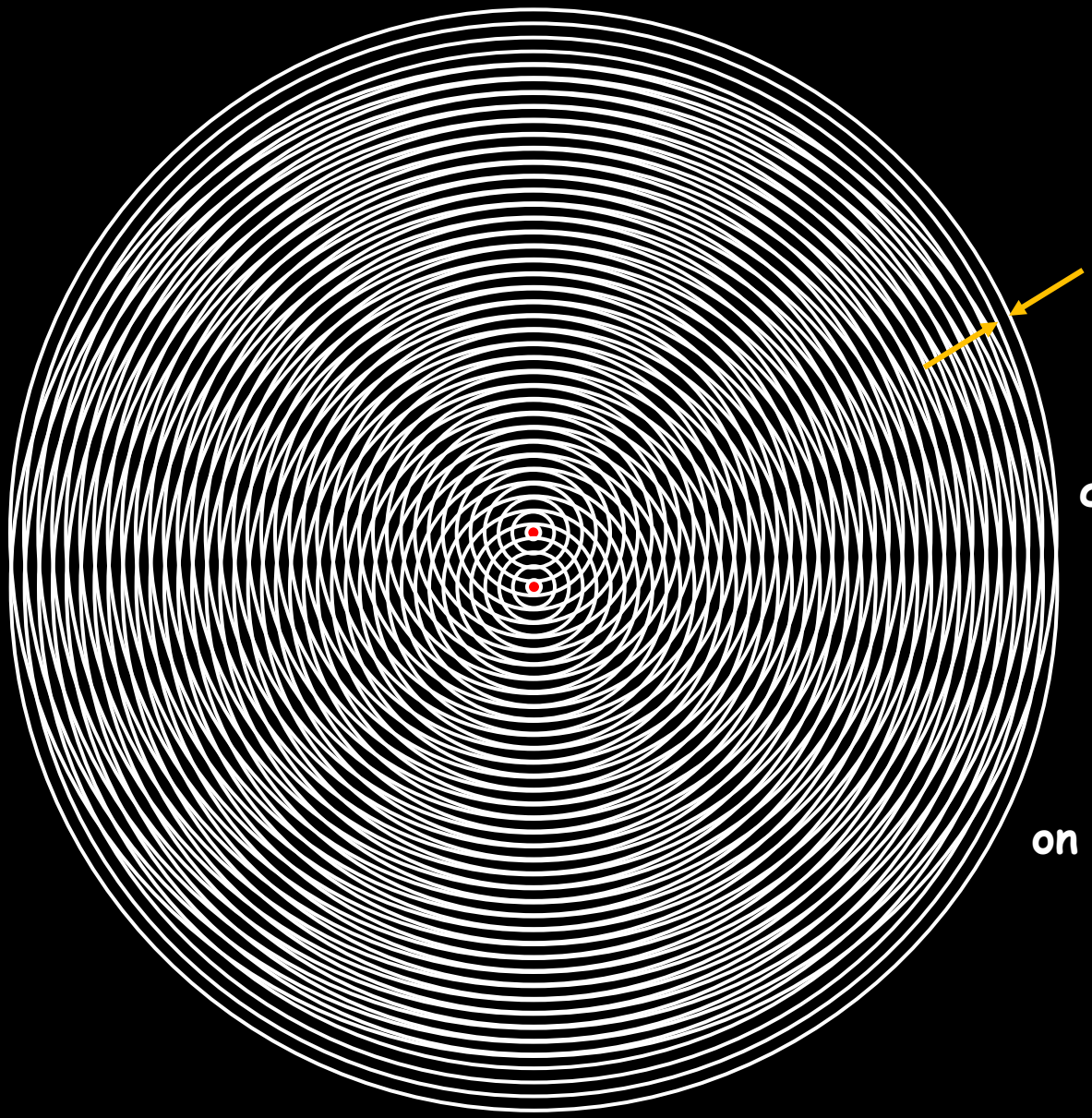


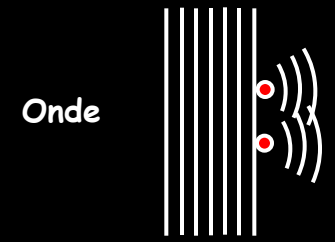
Longueur d'onde λ
plus petite
que la distance entre objets

→ **Interférence constructive**

→ **Interférence destructive**

Interférence et diffraction





Longueur d'onde λ
plus petite
que la distance entre objets

Connaissant
l'angle de diffraction
on peut en déduire la distance

En 1912, les cristallographes savent que
les **distances** entre atomes sont de l'ordre de **0,1 nm**

En 1895 (17 ans avant)
Wilhelm Röntgen a découvert les « rayons X »

Leur nature (lumière) est encore inconnue,
mais les spécialistes pensent que
leur **longueur d'onde** est **$\lesssim$ 0,1 nm**

Qui fera le lien ?

Max von Laue
à Münich
en février 1912

L'idée va germer à Münich en 1912

Ludwig-Maximilians-Universität München

Institut de physique théorique
Arnold Sommerfeld, Max von Laue

Institut de minéralogie-cristallographie
Paul von Groth

Institut de physique expérimentale
Wilhelm C. Röntgen

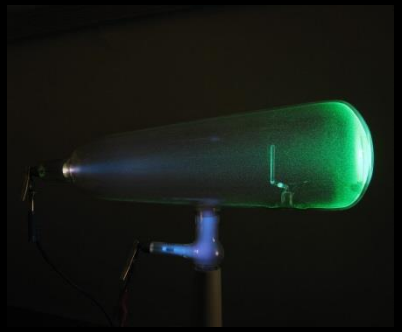
L'idée va germer à Münich en 1912

Ludwig-Maximilians-Universität München

Institut de physique théorique
Arnold Sommerfeld, Max von Laue

Institut de minéralogie-cristallographie
Paul von Groth

Institut de physique expérimentale
Wilhelm C. Röntgen



La rencontre de Paul Ewald et Max von Laue

Paul Ewald, doctorant d'Arnold Sommerfeld, étudie la propagation d'une onde **lumineuse** dans un **cristal**.

Il en parle à Laue, à qui **il apprend** que les cristaux auraient des périodes de qqs **0,1 nm**

?

Et si la lumière avait une longueur d'onde **beaucoup plus courte** ?

Max von Laue veut faire
diffracter les rayons X par les cristaux

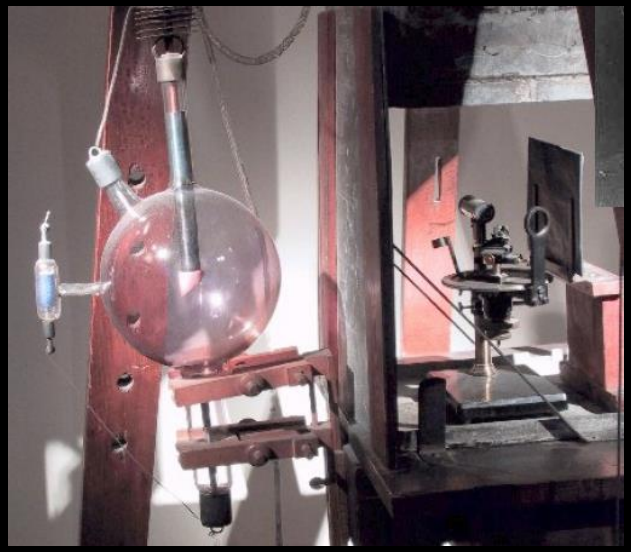
Mais son chef
Arnold Sommerfeld
ne veut pas !

Avril 1912 : quand le chat n'est pas là…

Friedrich et Knipping profitent de l'absence de Sommerfeld pour tenter l'expérience !

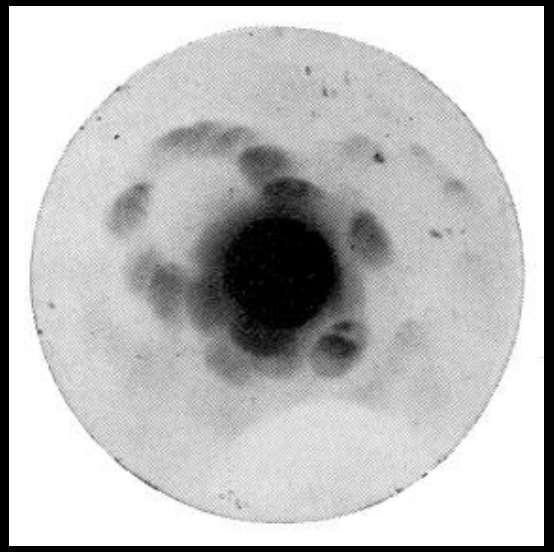
Walter Friedrich
Assitant de Sommerfeld

Paul Knipping
Doctorant de Röntgen



Deutsche Museum, Munich

Sulfate de cuivre pentahydraté
« Vitriol bleu »

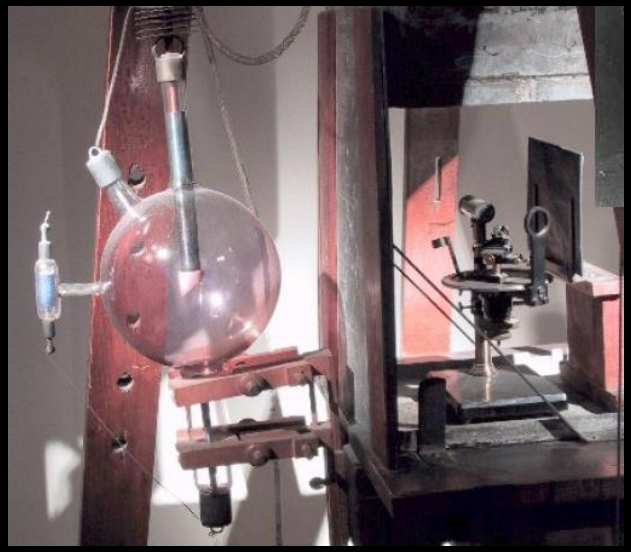


Avril 1912 : quand le chat n'est pas là…

Friedrich et Knipping profitent de l'absence de Sommerfeld pour tenter l'expérience !

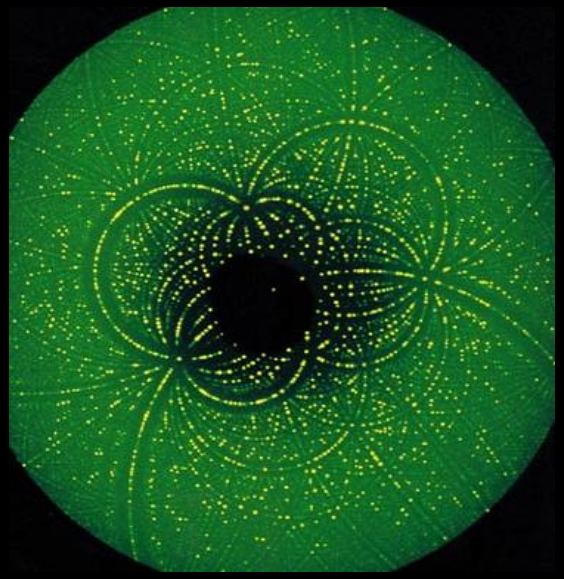
Walter Friedrich
Assitant de Sommerfeld

Paul Knipping
Doctorant de Röntgen



Deutsche Museum, Munich

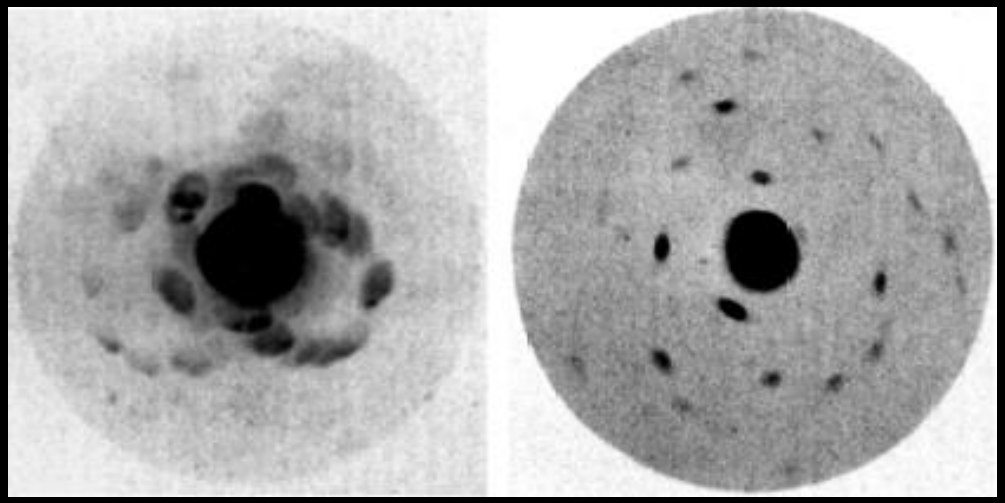
Sulfate de cuivre
pentahydraté
« Vitriol bleu »



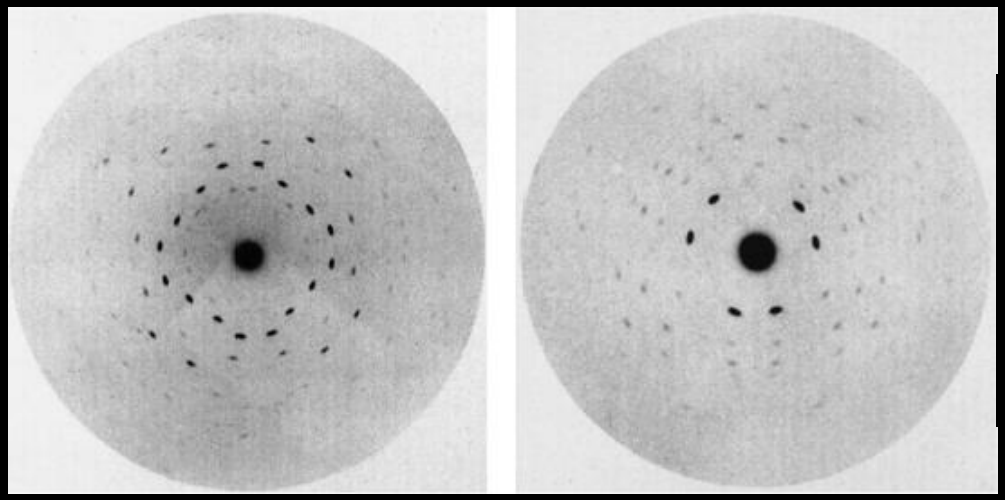
crédit DESY

Des progrès rapides… et un succès foudroyant

Sulfate de cuivre pentahydraté



Mais Laue n'interprète pas correctement les résultats



Blende ZnS

Les Bragg père et fils entrent en jeu…

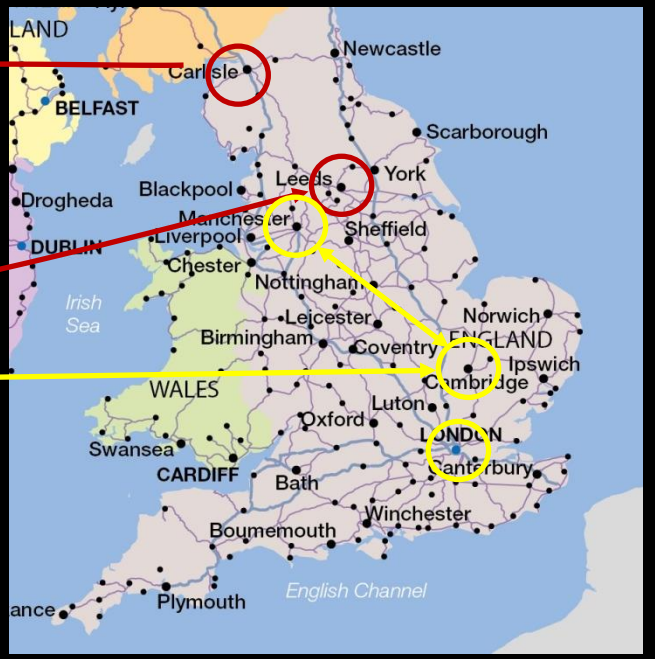
William Henry (1862-1942)

William Lawrence (1890-1971)
1938 :
Cavendish laboratory
Cambridge

1885

Ne croient pas
à l'interprétation de Laue

1908

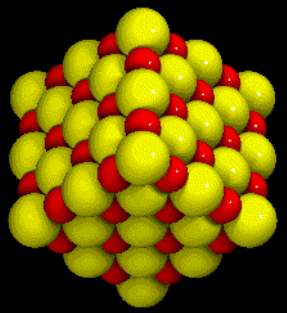


Nov.1912:
W. Lawrence va donner la bonne !

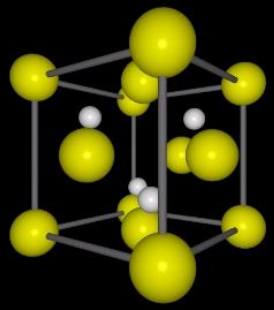
L'approche de Bragg

W.L. Bragg comprend **immédiatement** que la diffraction permet de **déterminer les structures cristallines**, en étudiant la répartition et l'intensité des taches (de Bragg)

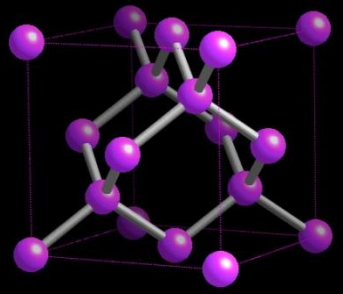
Méthodes **essai-erreur**, (avec l'aide de W. Pope - Barlow)



1913
NaCl



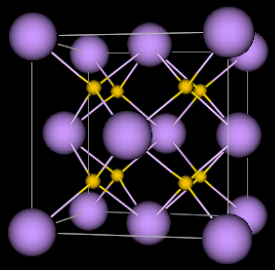
1913
ZnS



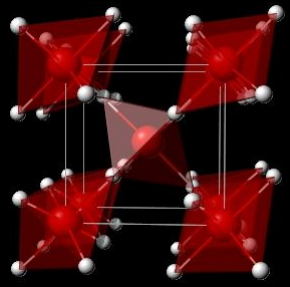
1913
Diamant
B&B

Some books are lies frae end to end… Prof Bragg asserts that "In sodium chloride there appear to be no molecules represented by NaCl."

"This statement is more than **repugnant to common sense**… It is **absurd to the nth degree**…" H. Armstrong 1927



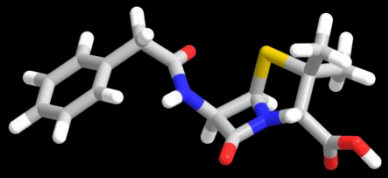
1914
CaF_2



1916
TiO_2
Vegard

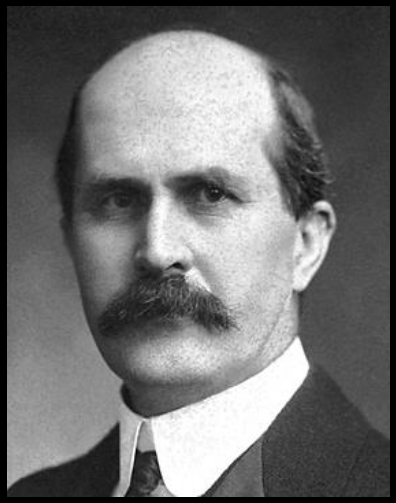
En 1920 : 50 structures…
En 1925 : 600 (160 organic)

Fourier à la rescousse !



Penicilline

Les structures de molécules organiques
sont **trop complexes** pour des
méthodes au cas par cas.



W. Henry Bragg comprend en 1915 le lien
entre les mathématiques de Fourier et la diffraction

If we know the nature of the periodic variation of the density of the medium we can analyse it by FOURIER'S method into a series of harmonic terms. The

Bakerian Lecture: X-Rays and Crystal Structure, W.H. Bragg, Phil. Trans. R. Soc. Lond. A 1915, 215

Jean Baptiste Joseph FOURIER
1768-1830

30 ans

vers 40 ans

50-55 ans

Caricaturé avec
Adrien-Marie Legendre
par
Julien-Léopold Boilly
(vers 1820)

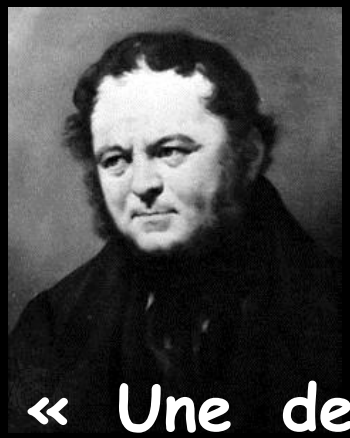
Jean Baptiste Joseph FOURIER
1768-1830

30 ans

vers 40 ans

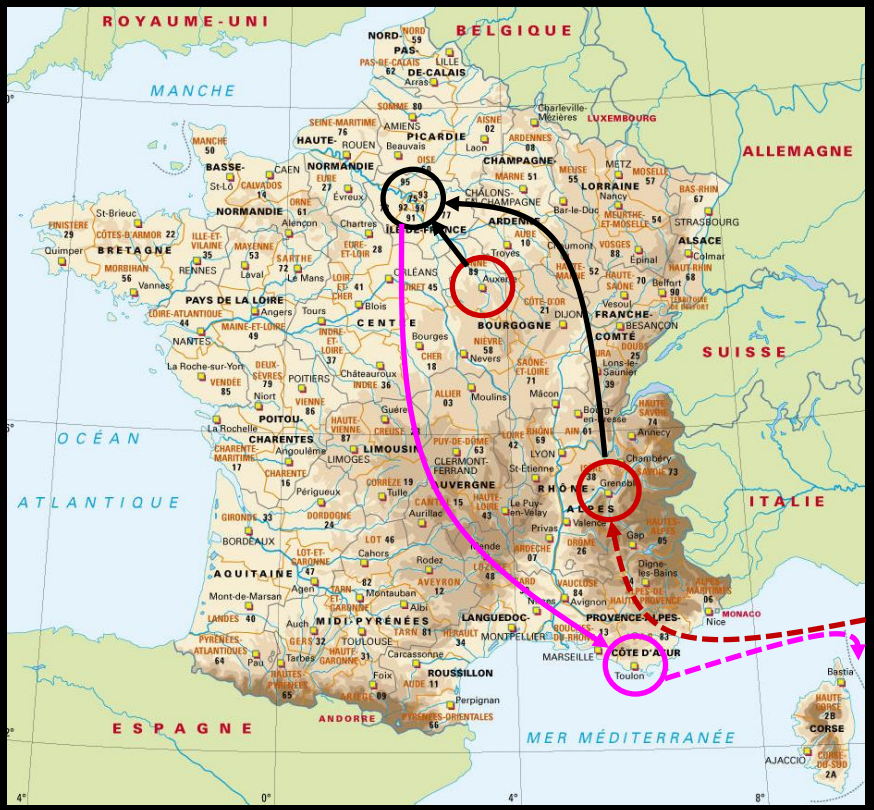
50-55 ans

Pas de femme,
pas de maîtresse ?
Une amie
mathématicienne :
Sophie Germain



« Une des sources de mon ennui à Grenoble était le petit savant spirituel à l'âme parfaitement petite et à la politesse basse de domestique revêtu, nommé Fourier. »

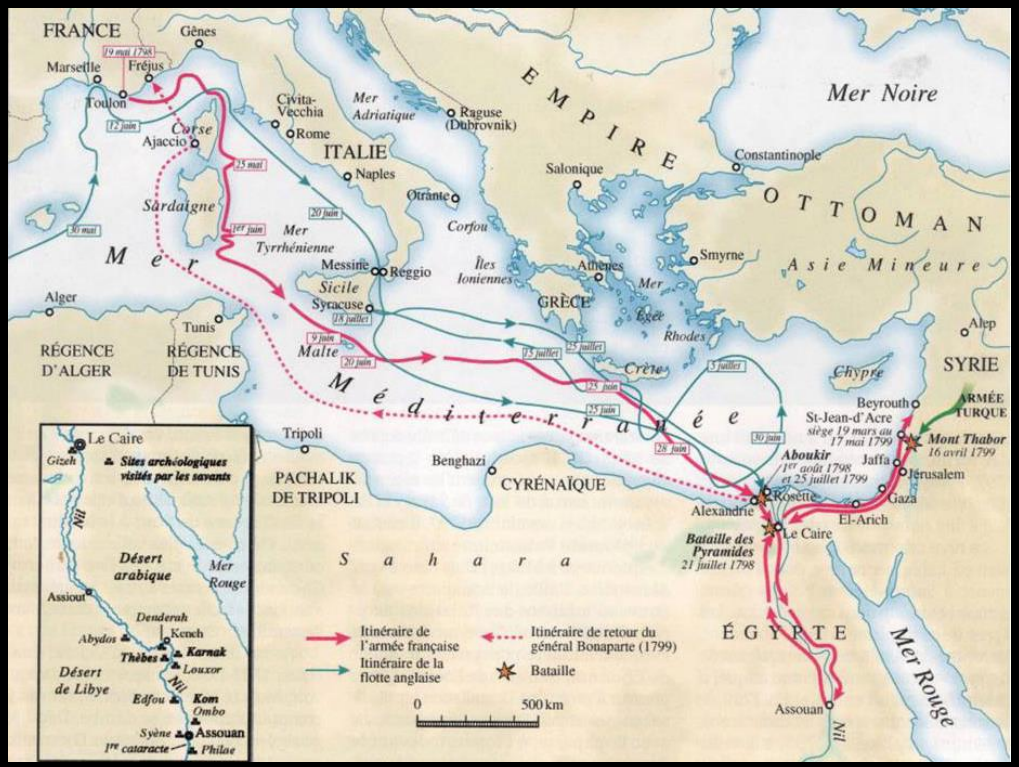
Stendhal
Journal V, p. 233 (1814)



1768 : Naissance à Auxerre

1797 : Professeur à Polytechnique

1798 : Campagne d'Égypte



1802 : Préfet de l'Isère

1817 : Académie des sciences

1822 : « La théorie analytique de la chaleur »

La jeunesse 1768-1798

1768 : Naissance à Auxerre, père tailleur

1778 : Orphelin à 10 ans

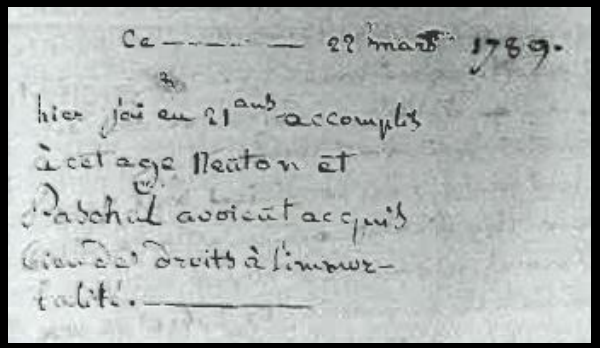
École militaire d'Auxerre (Bénedictins)…
…y enseigne à 16 ans

1787 : Veut entrer dans l'artillerie…

« Fourier n'étant pas noble, ne pourrait entrer dans l'artillerie, quand il serait un second Newton ! »

1789 : Novice à Saint-Benoît-sur-Loire… ne prononce pas ses vœux.

« Hier j'ai eu 21 ans accomplis ; à cet âge Newton et Pascal avoient acquis bien des droits à l'immortalité. »


Ce —— — 22 mars 1789.
hier j'ai eu 21 ans accomplis
à cet age Newton et
Pascal avoient acquis
bien des droits à l'immor-
talité. ——

1794 : Emprisonné sous la terreur…
…sauvé par la chute de Robespierre

1795 : École normale de l'an III
1795-1798 : Professeur à Polytechnique.

L'expédition d'Égypte : 1798-1801

Le directoire envoie une armée en Égypte
Pour couper la route des Indes aux anglais…
…et pour éloigner Bonaparte

400 navires
13 vaisseaux de ligne
47 000 hommes (10 000 †)
167 scientifiques et artistes

L'expédition d'Égypte : 1798-1801

Le directoire envoie une armée en Égypte
Pour couper la route des Indes aux anglais…
…et pour éloigner Bonaparte

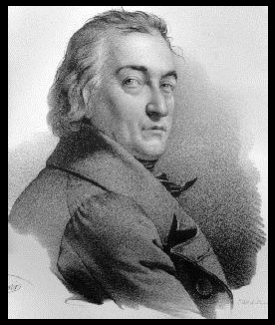
400 navires
13 vaisseaux de ligne
47 000 hommes (10 000 †)
167 scientifiques et artistes

J'en reviens toujours à ce voyage. Toutes les personnes qui prennent engagement pour en être ne savent pas où elles vont. Le citoyen Fourier en est aussi. […] Quel que soit le but de ce voyage, il ne peut être que fort long et dangereux. Il ne transpire rien de positif. Berthollet est aussi discret qu'il faut bien l'être en pareil cas. J'ai eu beau lui faire boire du vin de Champagne, je n'ai rien obtenu.

Catherine Huart, épouse Monge

L'expédition d'Égypte : 1798-1801

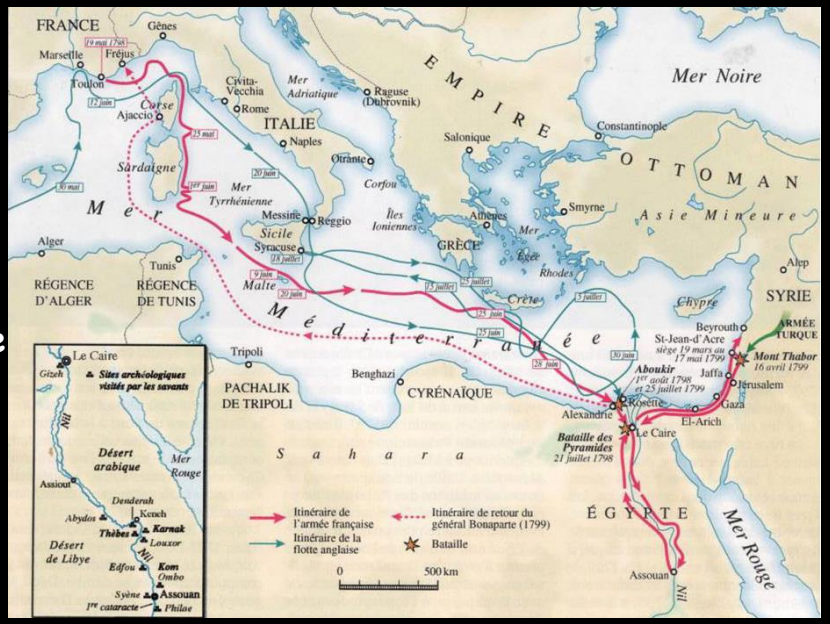
Le directoire envoie une armée en Égypte
Pour couper la route des Indes aux anglais…
…et pour éloigner Bonaparte



400 navires
13 vaisseaux de ligne
47 000 hommes (10 000 †)
167 scientifiques et artistes

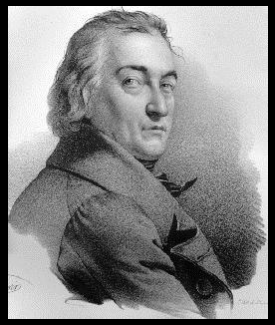
Commandant : Maximilien Caffarelli
Chimie : Claude Berthollet
Math. : Gaspard Monge, Joseph Fourier
Médecin : René-Nicolas Desgenettes
Physique : Étienne Malus
Naturaliste : Étienne Geoffroy Saint-Hilaire
Ingénieur : Nicolas Conté

Fourier secrétaire perpétuel
de l'Institut d'Égypte



L'expédition d'Égypte : 1798-1801

Le directoire envoie une armée en Égypte
Pour couper la route des Indes aux anglais…
…et pour éloigner Bonaparte



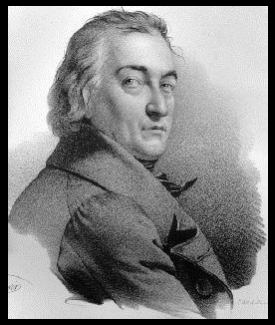
400 navires
13 vaisseaux de ligne
47 000 hommes (10 000 †)
167 scientifiques et artistes

Commandant : Maximilien Caffarelli
Chimie : Claude Berthollet
Math. : Gaspard Monge, Joseph Fourier
Médecin : René-Nicolas Desgenettes
Physique : Étienne Malus
Naturaliste : Étienne Geoffroy Saint-Hilaire
Ingénieur : Nicolas Conté

Fourier secrétaire perpétuel
de l'Institut d'Égypte

L'expédition d'Égypte : 1798-1801

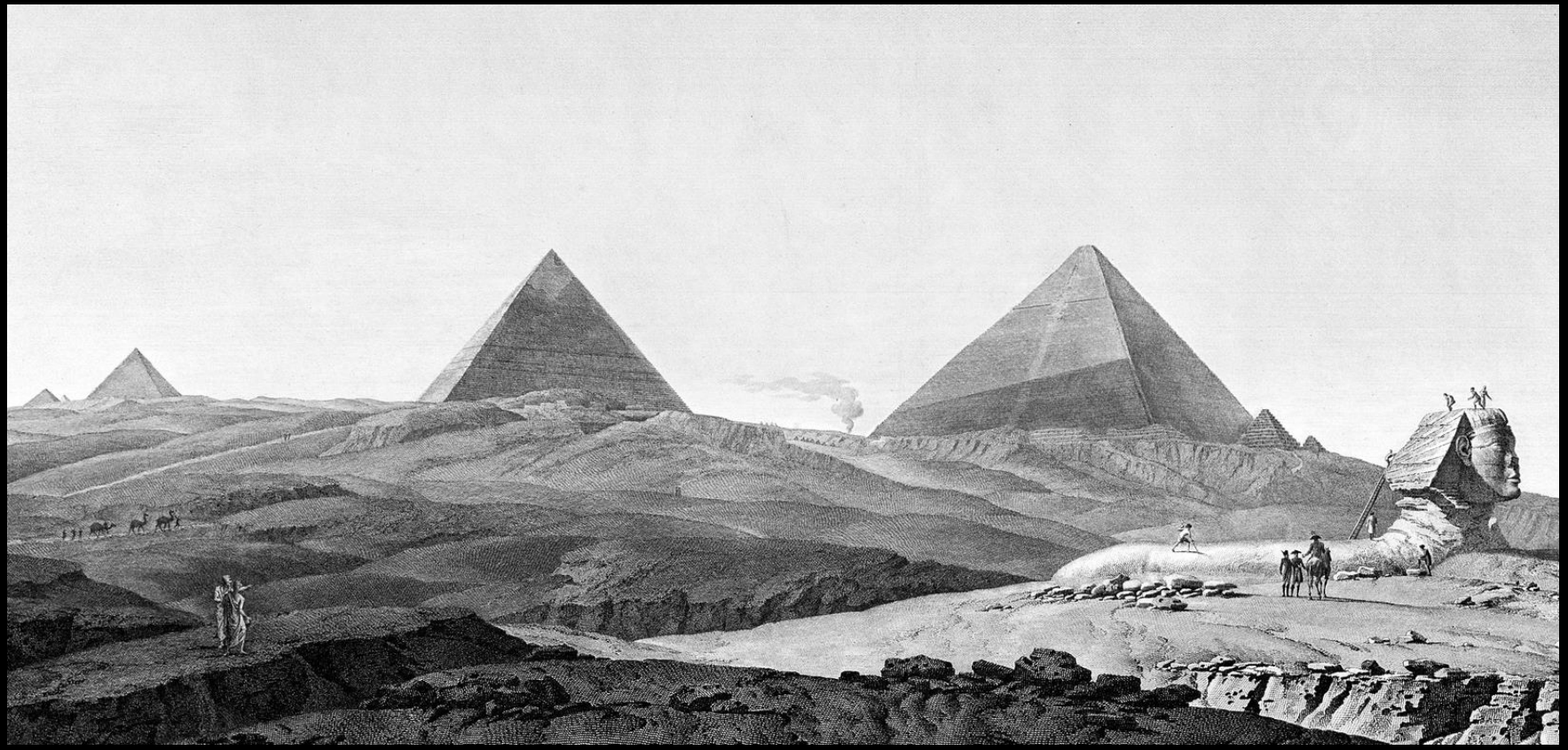
Le directoire envoie une armée en Égypte
Pour couper la route des Indes aux anglais…
…et pour éloigner Bonaparte

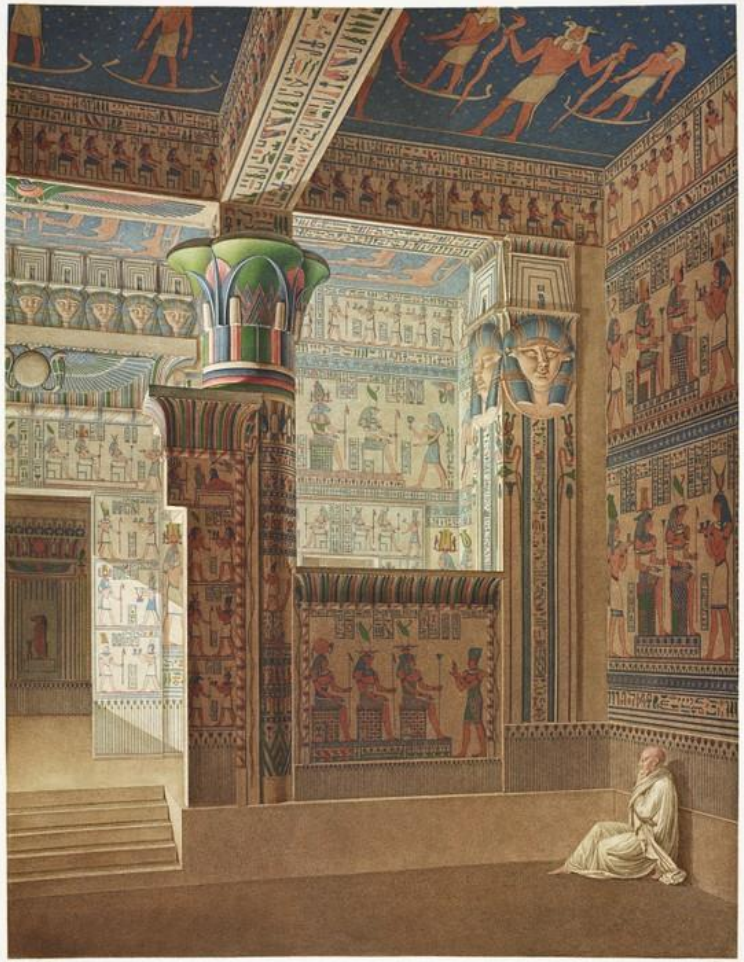


400 navires
13 vaisseaux de ligne
47 000 hommes (10 000 †)
167 scientifiques et artistes

Commandant : Maximilien Caffarelli
Chimie : Claude Berthollet
Math. : Gaspard Monge, Joseph Fourier
Médecin : René-Nicolas Desgenettes
Physique : Étienne Malus
Naturaliste : Étienne Geoffroy Saint-Hilaire
Ingénieur : Nicolas Conté

Fourier secrétaire perpétuel
de l'Institut d'Égypte

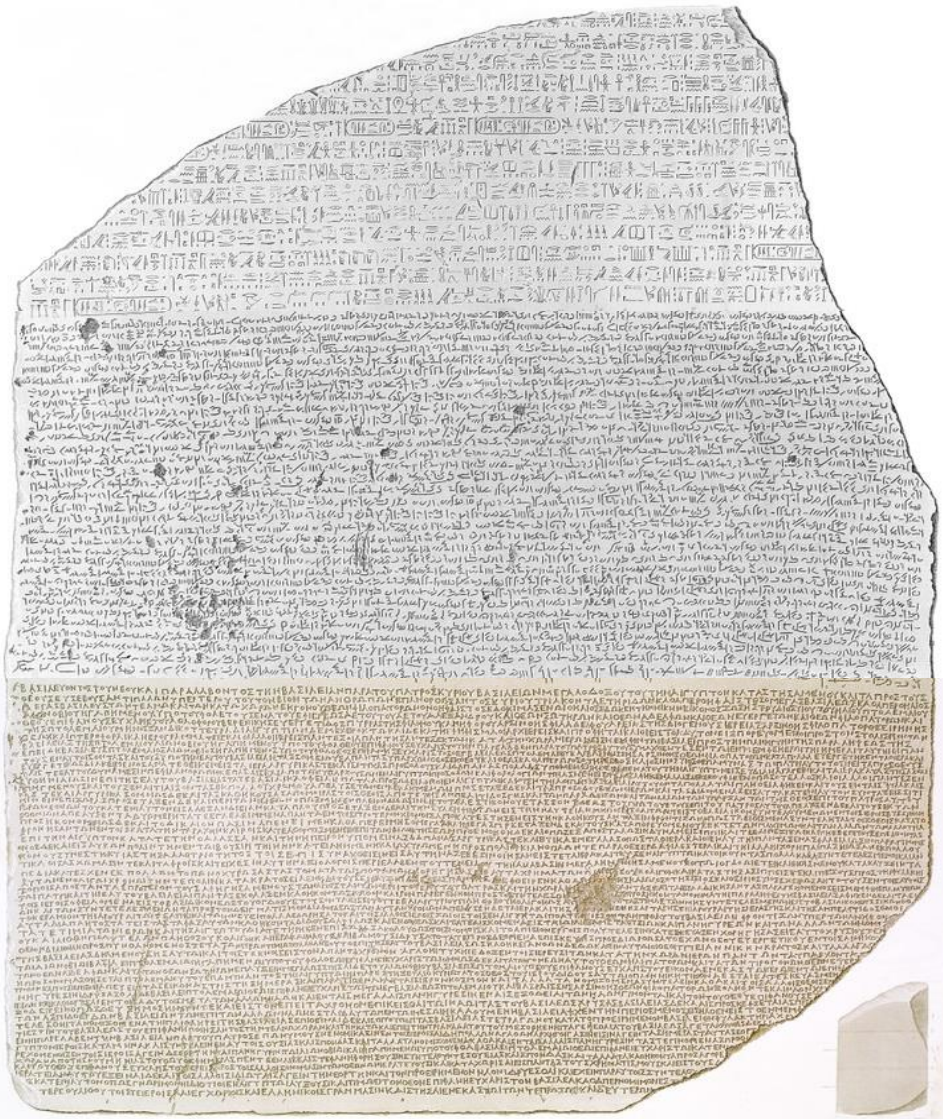


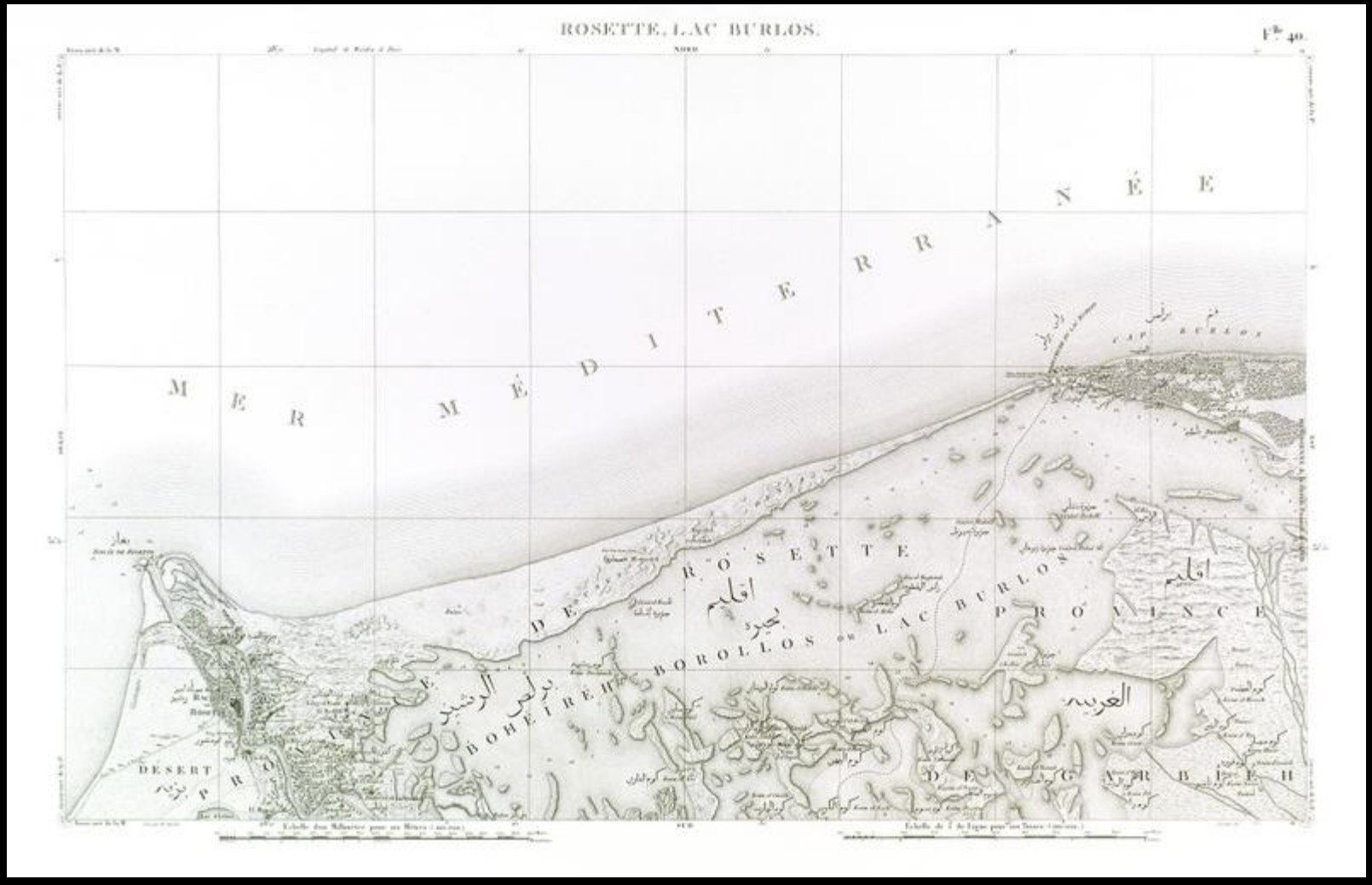


VUE PERSPECTIVE INTÉRIEURE. COLORIÉE DU TEMPLE DE L'OUEST.

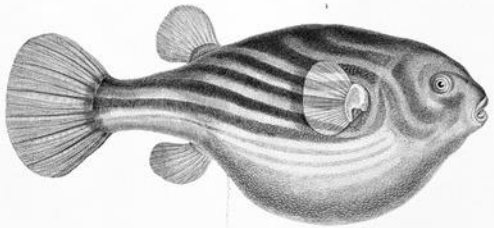
THÈBES. BYBÂN EL MOLOUK.

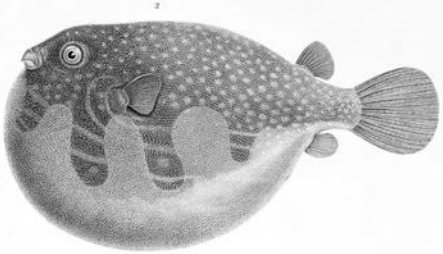
1. 6. STATUES ET FRAGMENS DE GRANIT NOIR ET DE GRANIT ROUGE TROUVÉS DANS LES TOMBEAUX DES ROIS À L'OUEST.
7. 15. COUVERCLES DE VASES TROUVÉS DANS LES HYPOGÉES.




ROSETTE, LAC BURLOS.
Fle 40.
NORD
MER MÉDITERRANÉE
CAP BURLOS
ROSETTE
PROVINCE DE
BOROLLOS OU LAC BURLOS
PROVINCE DE GARBIEH
BOHEIREH
DESERT
اقليم
بحيرة
برلس
الرشيد
الغربية
بغاز

H. N. Zoologie. POISSONS DU NIL. *Par M^r. Geoffroy de Saint Hilaire. Dessinés par Mr Redouté.* Pl. 1.

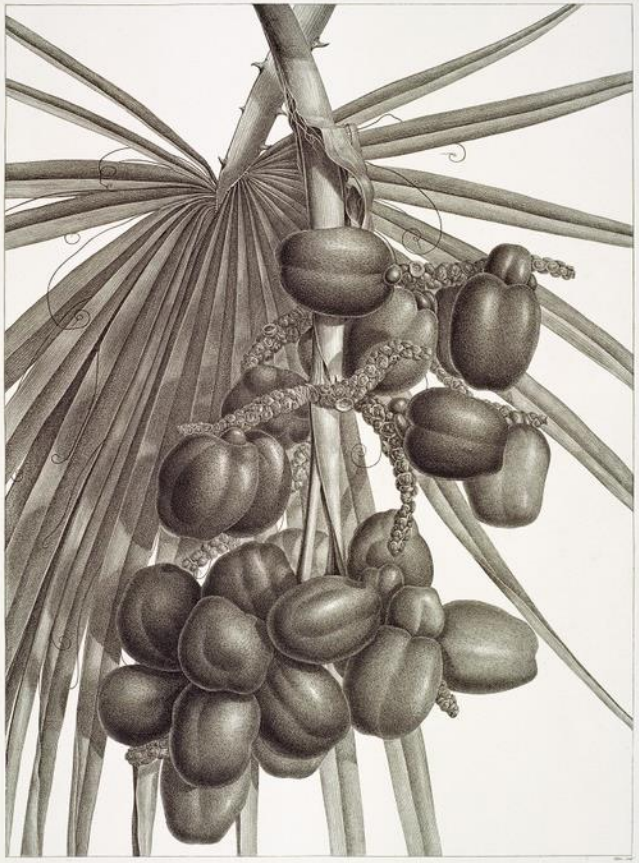




1. LE TETRODON FAHAKA. *TETRODON PHYSA.*

2. LE TETRODON HERISSÉ. *TETRODON HISPIDUS.*

H. N. Botanique. *par M. Poiteau. Dessiné par P. J. Redouté.* PALMIER DOUM. Pl. 2



DÉTAILS DE LA FEUILLE ET DE LA GRAPPE.

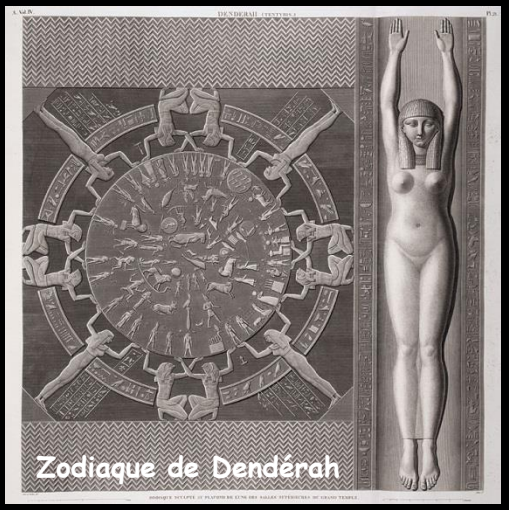
Fourier fait des contributions sur:

Les équations algébriques
« L'optimisation linéaire »
Les Oasis
Les révolutions et mœurs d'Égypte
Une machine à irriguer…

La datation des monuments

Éditeur en chef du
« Courier de l'Égypte »

Gouverneur de basse-Égypte
Bon administrateur, habile négociateur:
« *Je prends l'épi dans son sens* »


Zodiaque de Dendérah

COURIER DE L'EGYPTE.

N.° I.er

LE 12 FRUCTIDOR, VI.e ANNÉE DE LA RÉPUBLIQUE.

NOUVELLES.

Corfou, 27 messidor an 6. Le vaisseau de guerre *le Siregel* est arrivé d'Ancône dans ce port, escortant un convoi de trois mille Français qui sont venus pour renforcer la garnison des îles Ioniennes.

La prise de Malte par la France a fait ici une joie universelle. Les départements d'Ithaque, de Corcyre et de la mer Egée sont dans la situation la plus satisfaisante; il y règne le plus grand enthousiasme pour la liberté; et le plus grand attachement à la mère patrie.

De Janina, le 13 messidor. Notre Pâché est toujours sous les murs de Widin, commandant en second l'armée du grand seigneur sous le capitan-pâché, qui est destiné à faire la guerre à Passewan Oglou, qui reprend toujours de nouvelles forces. Après le combat malheureux où notre armée a perdu 700 hommes, et a été obligée d'abandonner le champ de bataille, l'armée de ce rebelle s'est encore augmentée.

Il y a quelques jours, est arrivé ici l'adjudant général Rose, qui a eu une audience de cérémonie du fils du pâché, à l'issue de laquelle il a été expédié un courier sur un grand cheval, portant sa pâché une dépêche extraordinaire.

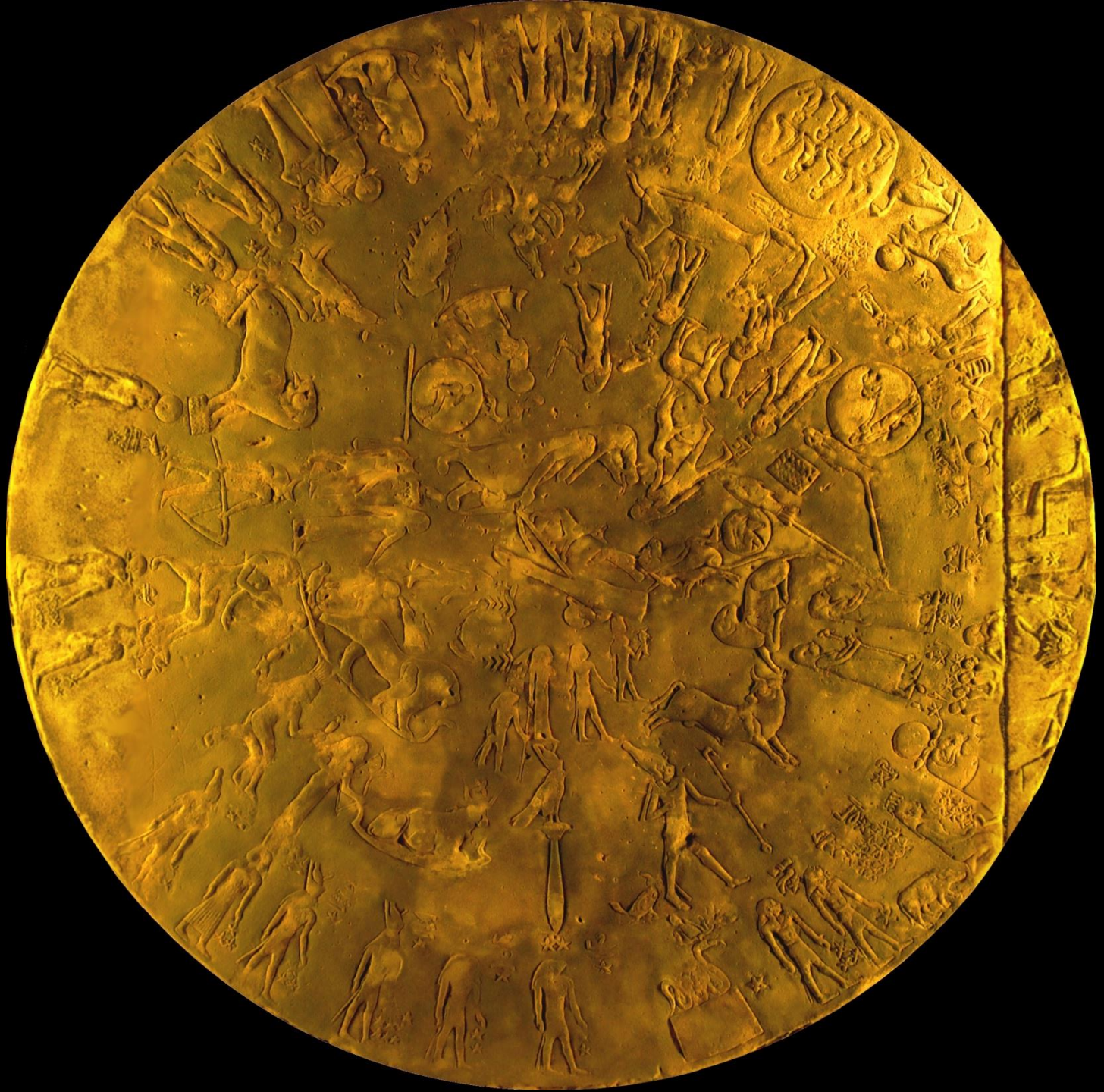
Scalier, 25 messid. La fête du 14 juillet s'est célébrée ici avec la plus grande pompe. Les bienfaits de la liberté se font sentir dans toutes les classes; il n'est pas un seul Maltois qui ne bénisse l'heureux changement qui a opéré.

Trois frégates anglaises bloquaient notre port. Le vaisseau de guerre *le Dego* et la frégate la *Carthaginoise* sont sortis pour leur donner chasse.

Le vice-roi de Sicile avait refusé de nous donner des vivres, malgré les instances de notre ambassadeur à Naples; il vient de permettre l'exportation de la Sicile. Au reste nous avons du bled pour la garnison et les habitans pour dix huit mois.

Tripoli, 28 messidor. Le pâché de Tripoli a dès l'instant qu'il a eu reçu le commode du Général en Chef, de mettre en liberté tous les esclaves maltois. Le Général en Chef lui avait envoyé une grande quantité de Tripolitains et autres esclaves turcs) ici a envoyés par un bâtiment à Malte, avec une grande quinzaine de bœufs et de fruits, et quarante-trois chevaux de race dont il a fait présent au général commandant à Malte.

Alexandrie. La ville est encombrée de matelots et d'équipages de nos vaisseaux, provenans de l'escadre. Tous les prisonniers ont été rendus.



Préfet de l'Isère à Grenoble : 1802-1815

Préfet…

- 1804 Lance le projet de route Grenoble-Turin
- Crée un lycée en 1804 et l'**Université** (JF !) en 1810
- 1805-1812 : Il fait assécher les marais de Bourgoin
- Baron d'Empire en 1809

…mais aussi **égyptologue…**

- 1809 : Rédige la préface de la **Description de l'Égypte**, en 10 volumes
- Réfléchit aux zodiaques égyptiens…
- Par Fourier, J.F. Champollion s'intéressera à l'Égypte et la **pierre de Rosette**.

Préfet de l'Isère à Grenoble : 1802-1815

Préfet…

- 1804 Lance le projet de route Grenoble-Turin
- Crée un lycée en 1804 et l'**Université** (JF !) en 1810
- 1805-1812 : Il fait assécher les marais de Bourgoin
- Baron d'Empire en 1809

…mais aussi **égyptologue…**

- 1809 : Rédige la préface de la **Description de l'Égypte**, en 10 volumes
- Réfléchit aux zodiaques égyptiens…
- Par Fourier, J.F. Champollion s'intéressera à l'Égypte et la **pierre de Rosette**.

Préfet de l'Isère à Grenoble : 1802-1815

Préfet…

- 1804 Lance le projet de route Grenoble-Turin
- Crée un lycée en 1804 et l'**Université** (JF !) en 1810
- 1805-1812 : Il fait assécher les marais de Bourgoin
- Baron d'Empire en 1809

…mais aussi **égyptologue…**

- 1809 : Rédige la préface de la **Description de l'Égypte**, en 10 volumes
- Réfléchit aux zodiaques égyptiens…
- Par Fourier, J.F. Champollion s'intéressera à l'Égypte et la **pierre de Rosette**.

…et toujours **physicien-mathématicien…**

- 1807 : 1ère version de la « théorie de la chaleur » où il introduit les **Séries de Fourier.**
  Critiqué par **Poisson, Laplace, Lagrange**
- 1811 : 2e version, pour un concours.
  Lauréat mais critiqué par Lagrange, non publié…

Paris (1816-1830) : la consécration

1822 : Théorie analytique de la chaleur

1817 : Académie des sciences

1822 : Secrétaire perpétuel

1826 : Académie française

Paris (1816-1830) : la consécration

1822 : Théorie analytique de la chaleur

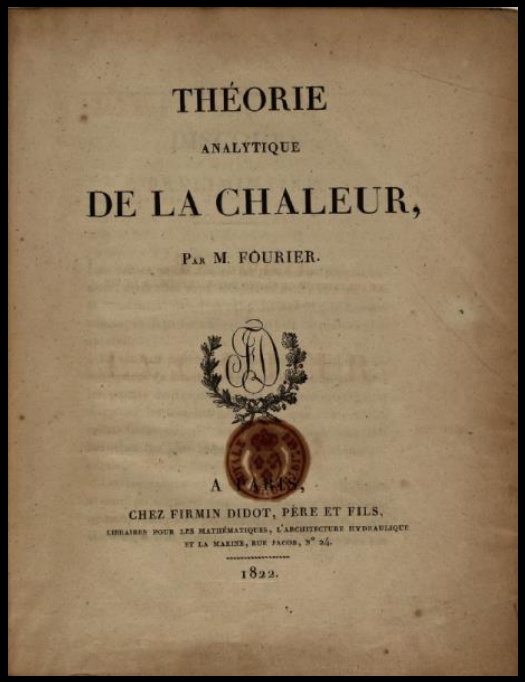
1817 : Académie des sciences

1822 : Secrétaire perpétuel

1826 : Académie française

Paris (1816-1830) : la consécration

1822 : Théorie analytique de la chaleur



THÉORIE

ANALYTIQUE

DE LA CHALEUR,

PAR M. FOURIER.

A PARIS,

CHEZ FIRMIN DIDOT, PÈRE ET FILS,

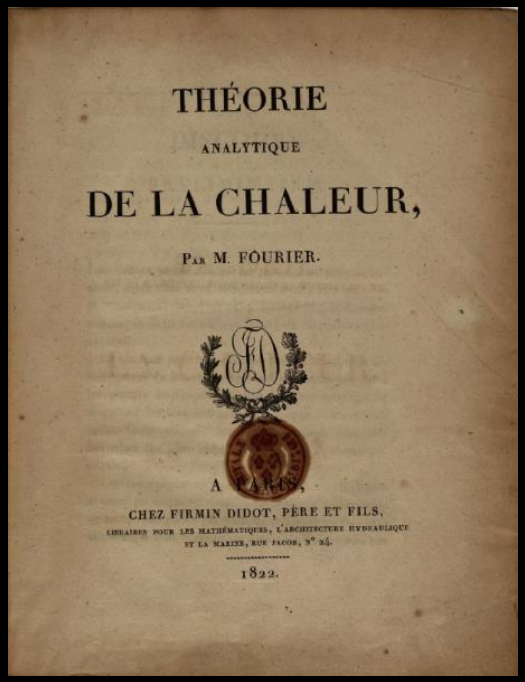
LIBRAIRES POUR LES MATHÉMATIQUES, L'ARCHITECTURE HYDRAULIQUE ET LA MARINE, RUE JACOB, N° 24.

1822.

« La question de la propagation de la chaleur consiste à déterminer quelle est la température de chaque point d'un corps à un instant donné, en supposant que les températures initiales sont connues. »

Paris (1816-1830) : la consécration

1822 : Théorie analytique de la chaleur



THÉORIE

ANALYTIQUE

DE LA CHALEUR,

PAR M. FOURIER.

A PARIS,

CHEZ FIRMIN DIDOT, PÈRE ET FILS,

LIBRAIRES POUR LES MATHÉMATIQUES, L'ARCHITECTURE HYDRAULIQUE ET LA MARINE, RUE JACOB, N° 24.

1822.

« La question de la propagation de la chaleur consiste à déterminer quelle est la température de chaque point d'un corps à un instant donné, en supposant que les températures initiales sont connues. »

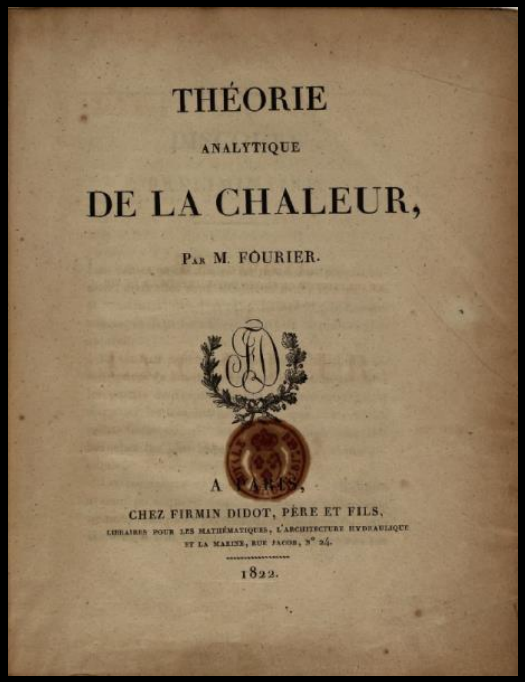
Pour résoudre son équation de la chaleur

$$\lambda\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right)=\varrho c\frac{\partial T}{\partial t}$$

Fourier se sert de sommes (séries) qui maintenant portent son nom

Paris (1816-1830) : la consécration

1822 : Théorie analytique de la chaleur



THÉORIE

ANALYTIQUE

DE LA CHALEUR,

PAR M. FOURIER.

A PARIS,

CHEZ FIRMIN DIDOT, PÈRE ET FILS,

LIBRAIRES POUR LES MATHÉMATIQUES, L'ARCHITECTURE HYDRAULIQUE ET LA MARINE, RUE JACOB, N° 24.

1822.

« La question de la propagation de la chaleur consiste à déterminer quelle est la température de chaque point d'un corps à un instant donné, en supposant que les températures initiales sont connues. »

Découvreur de l'effet de serre

« la chaleur trouve moins d'obstacle à pénétrer l'air, étant à l'état de **lumière**, qu'elle n'en trouve pour repasser dans l'air quand elle est convertie en **chaleur obscure** »

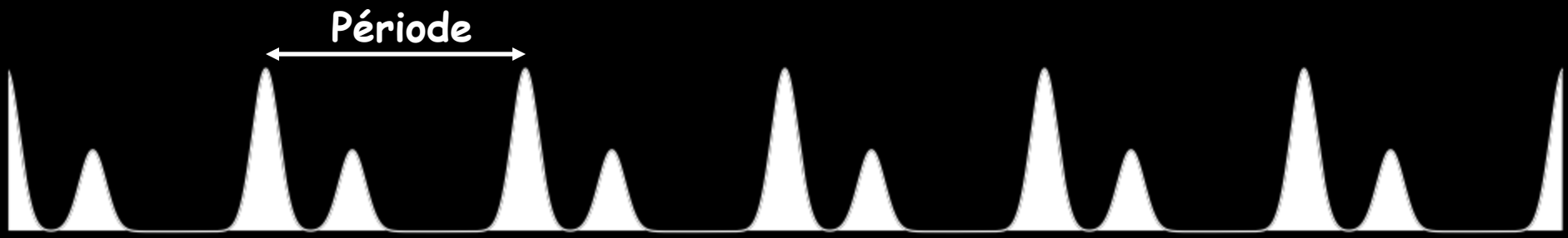
1824

Pour résoudre son équation de la chaleur

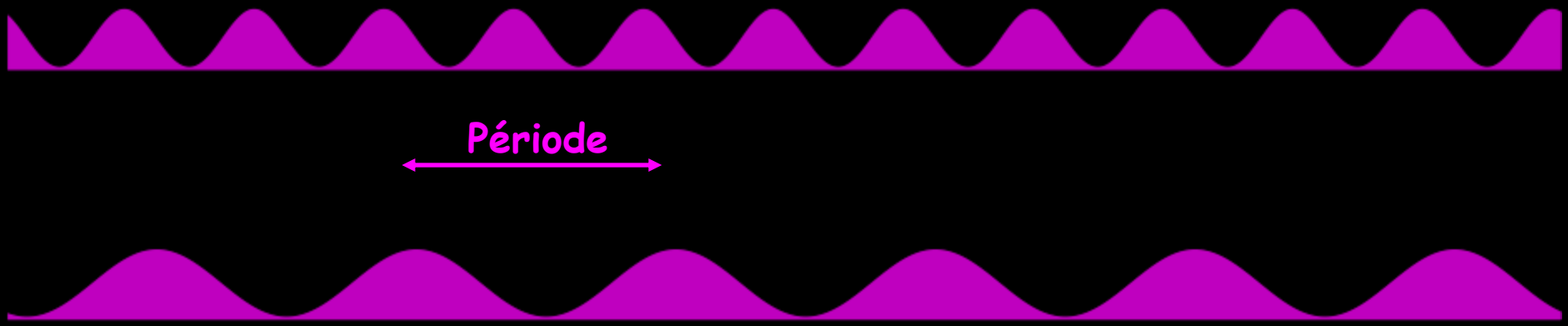
$$\lambda\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right)=\varrho c\frac{\partial T}{\partial t}$$

Fourier se sert de **sommes (séries)** qui maintenant portent son nom

Une courbe périodique…



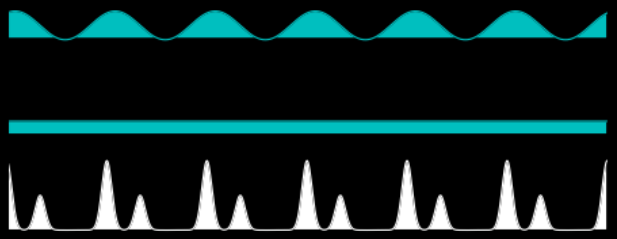
…est-elle une somme de **sinus** ?

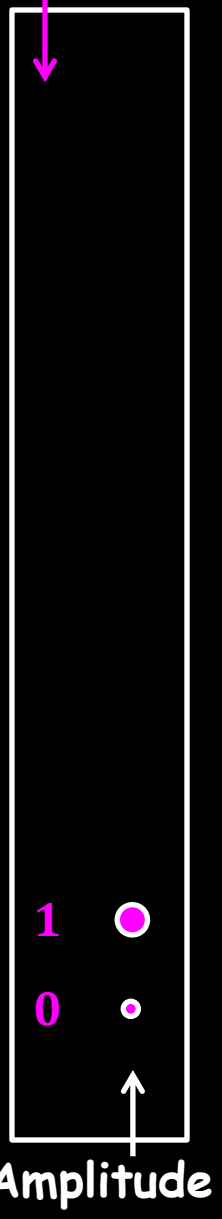


Oui !

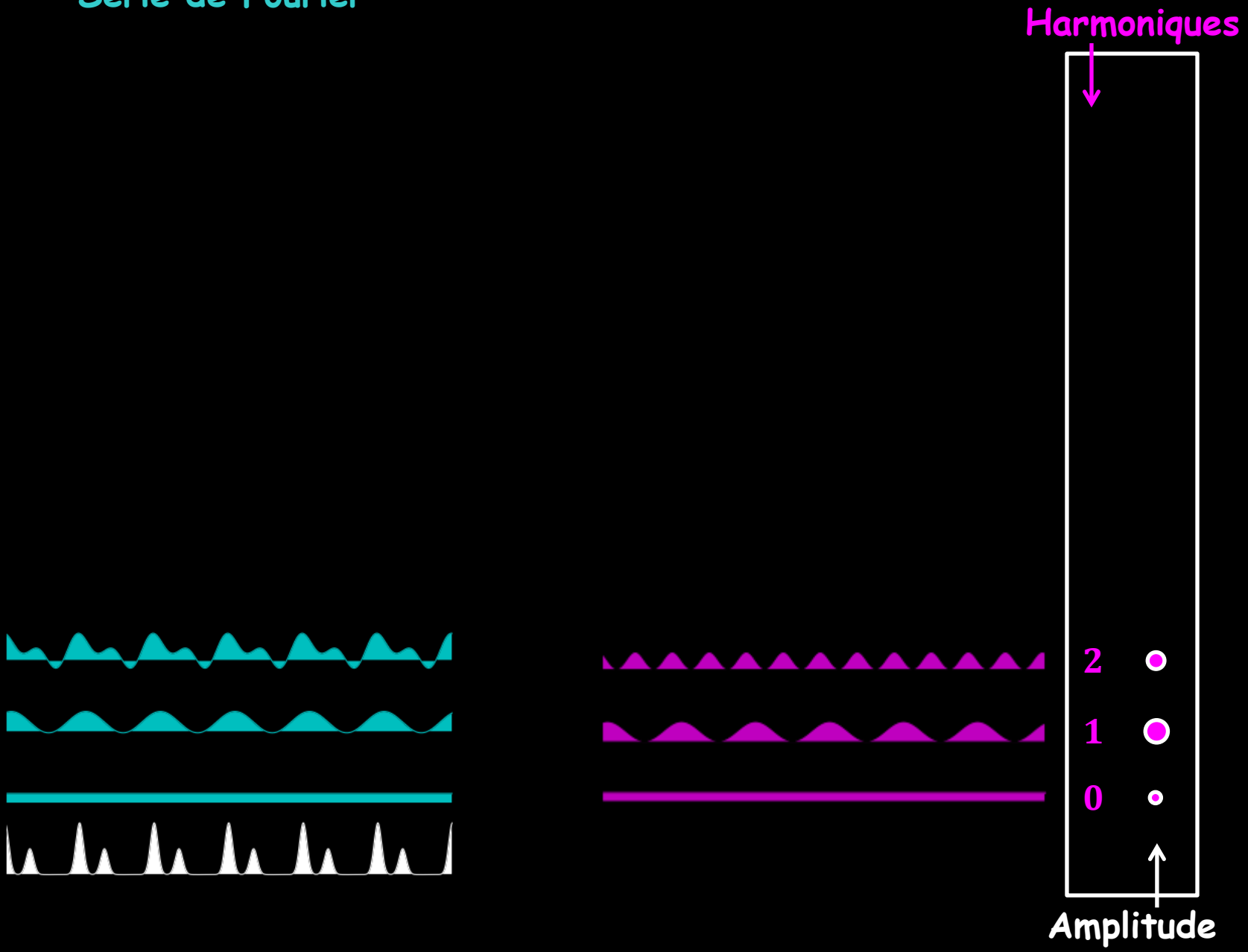
Série de Fourier

Série de Fourier

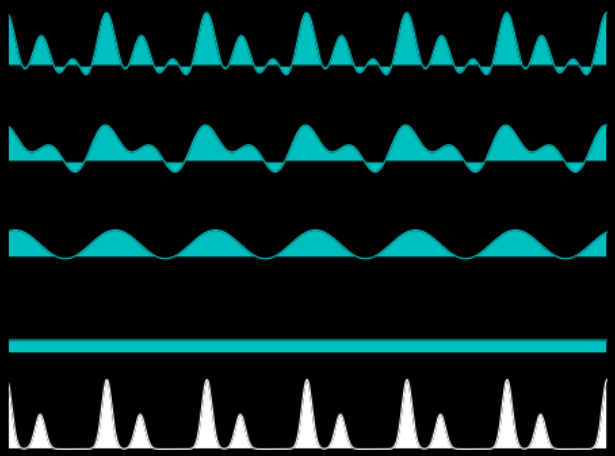


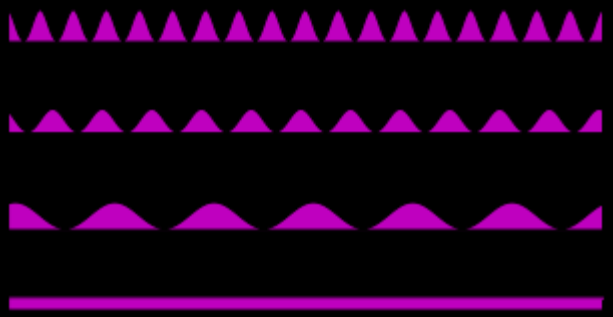


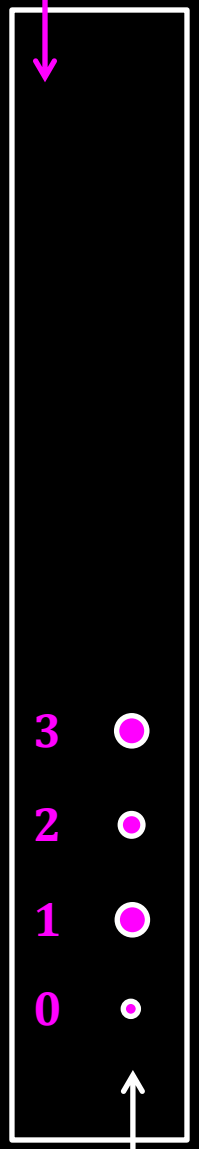
Série de Fourier



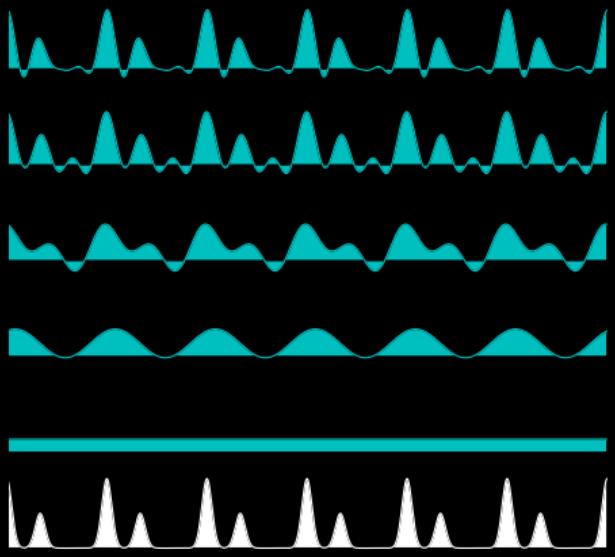
Série de Fourier

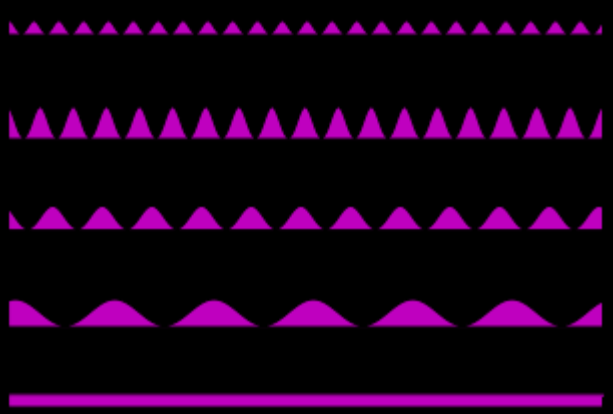


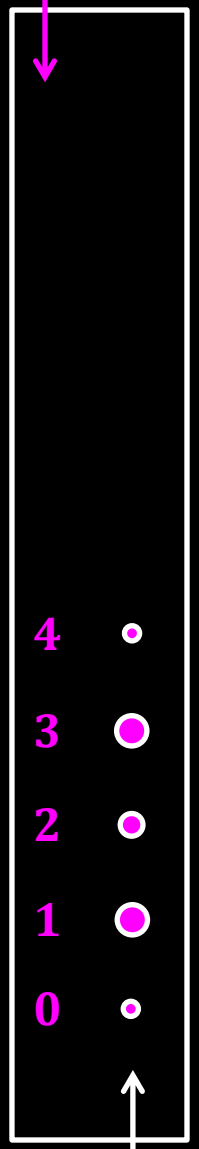




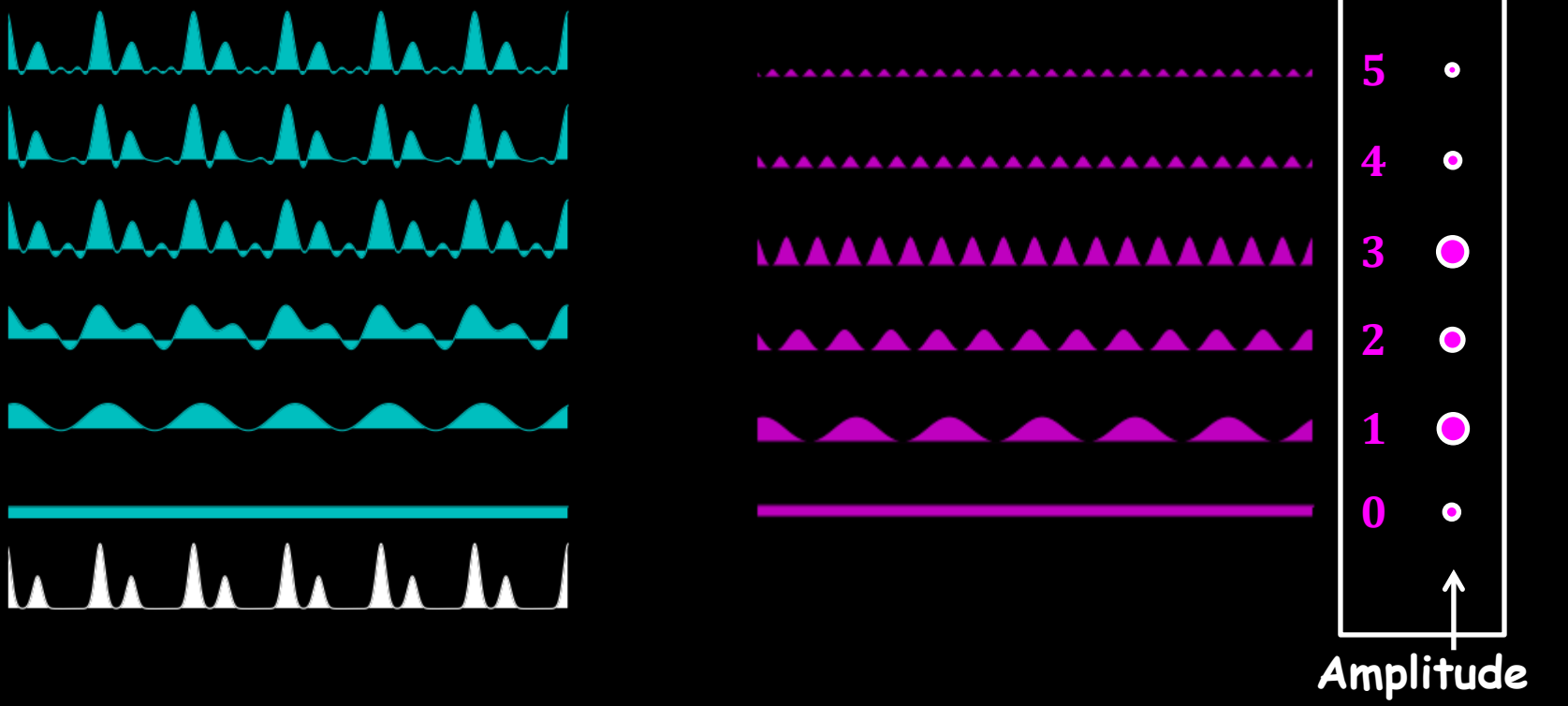
Série de Fourier



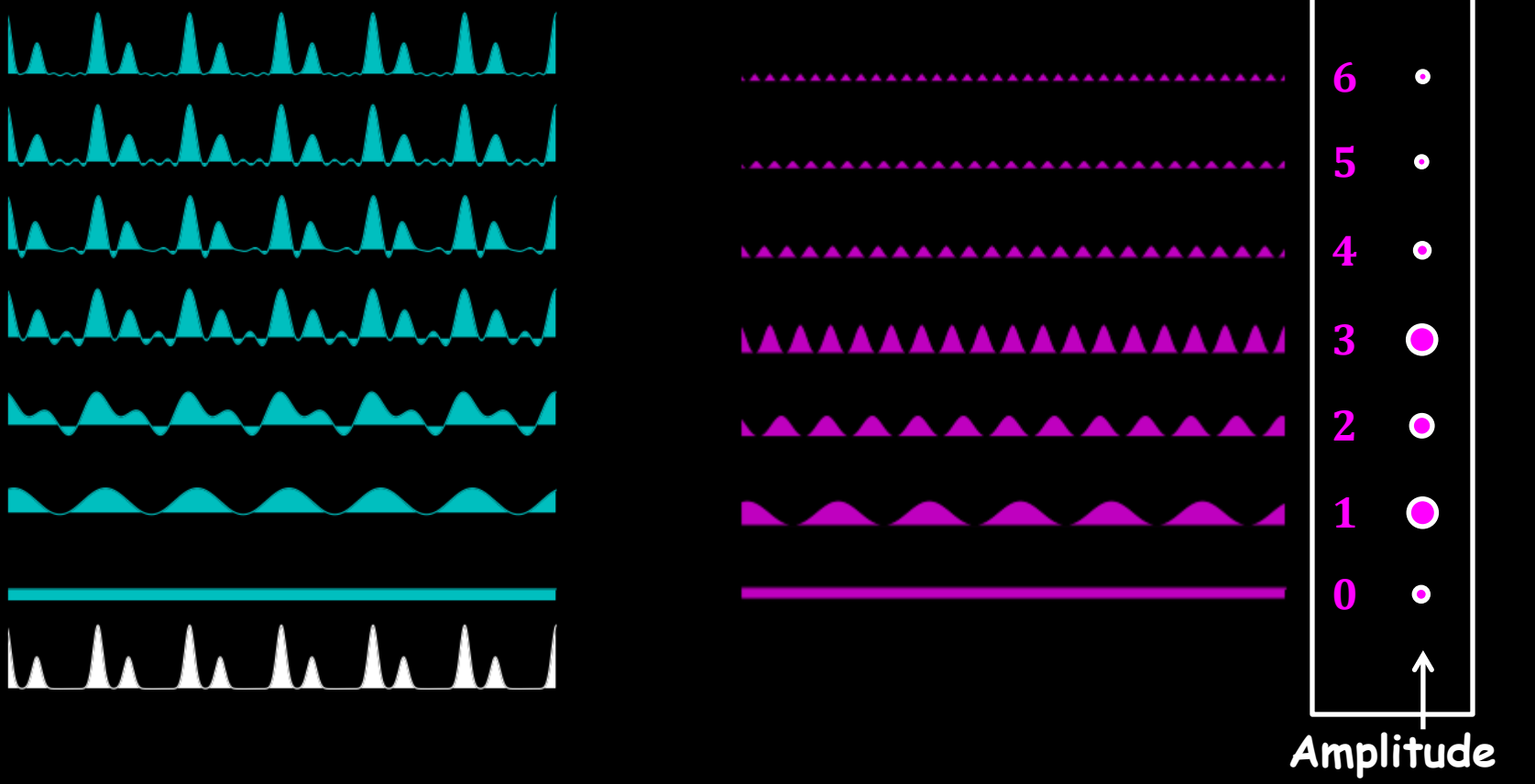




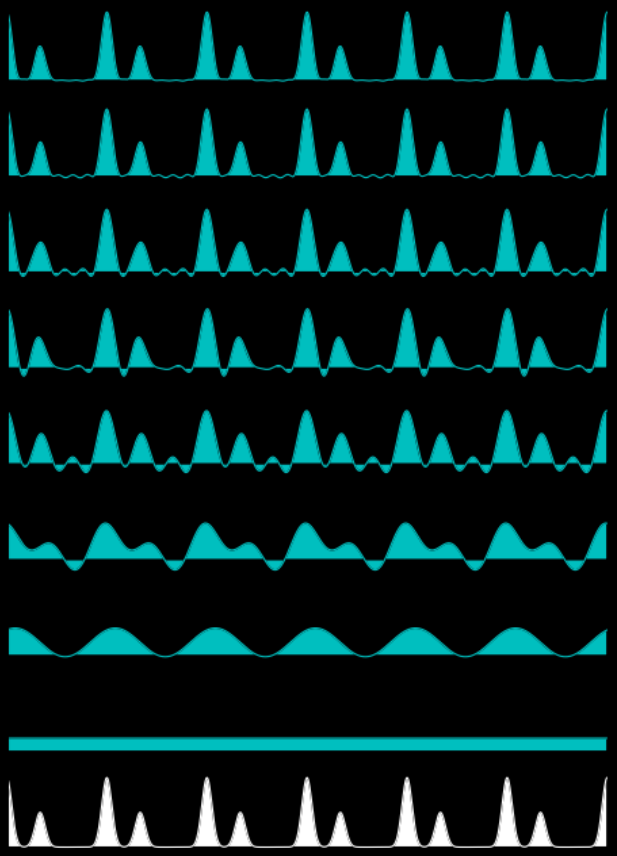
Série de Fourier

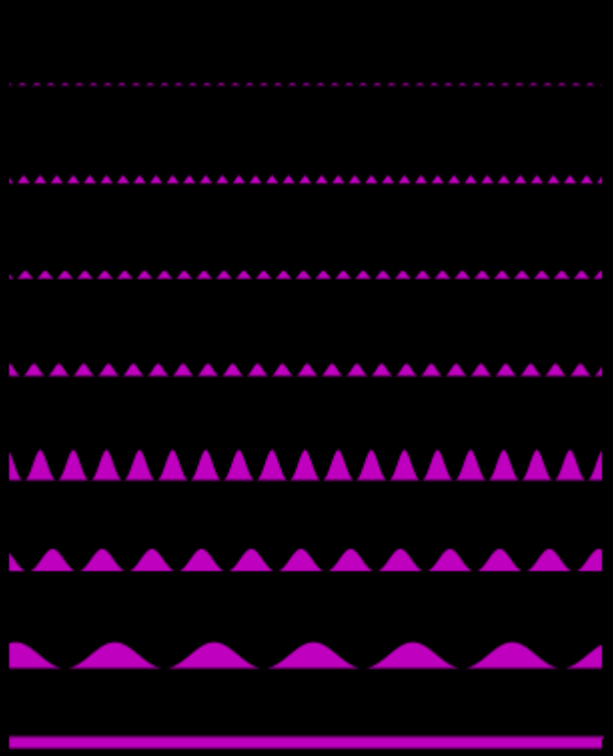


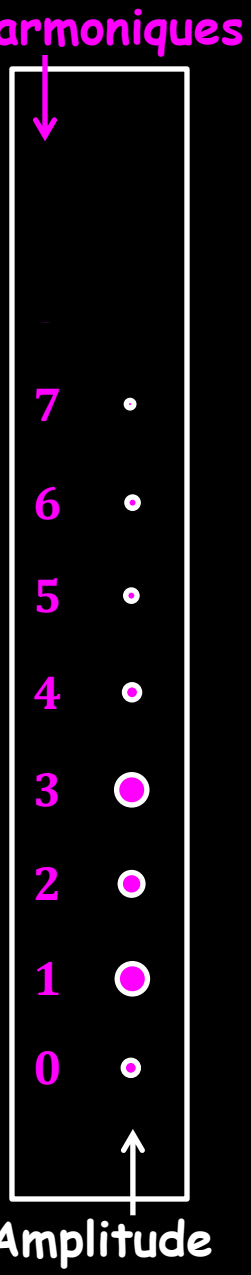
Série de Fourier



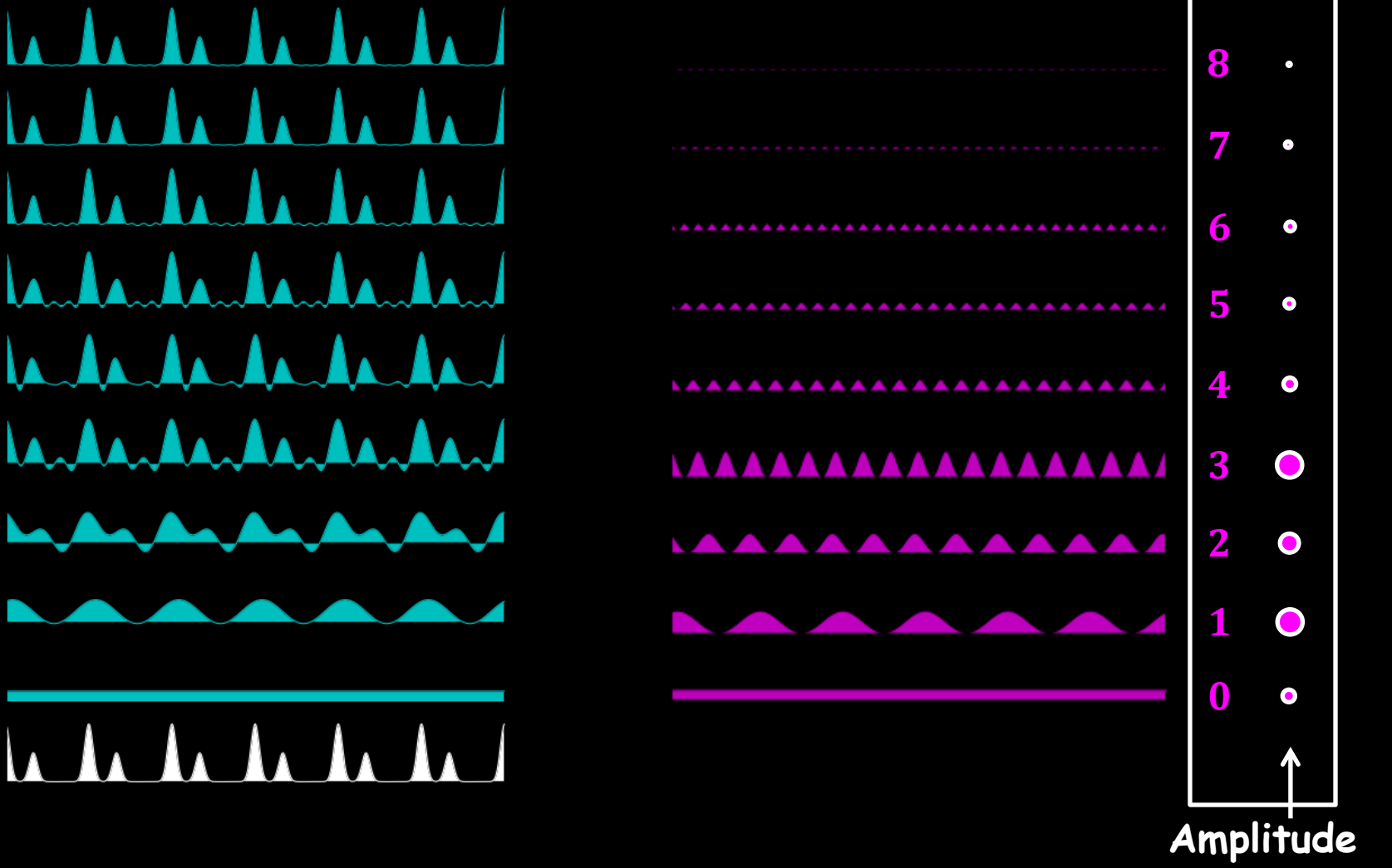
Série de Fourier



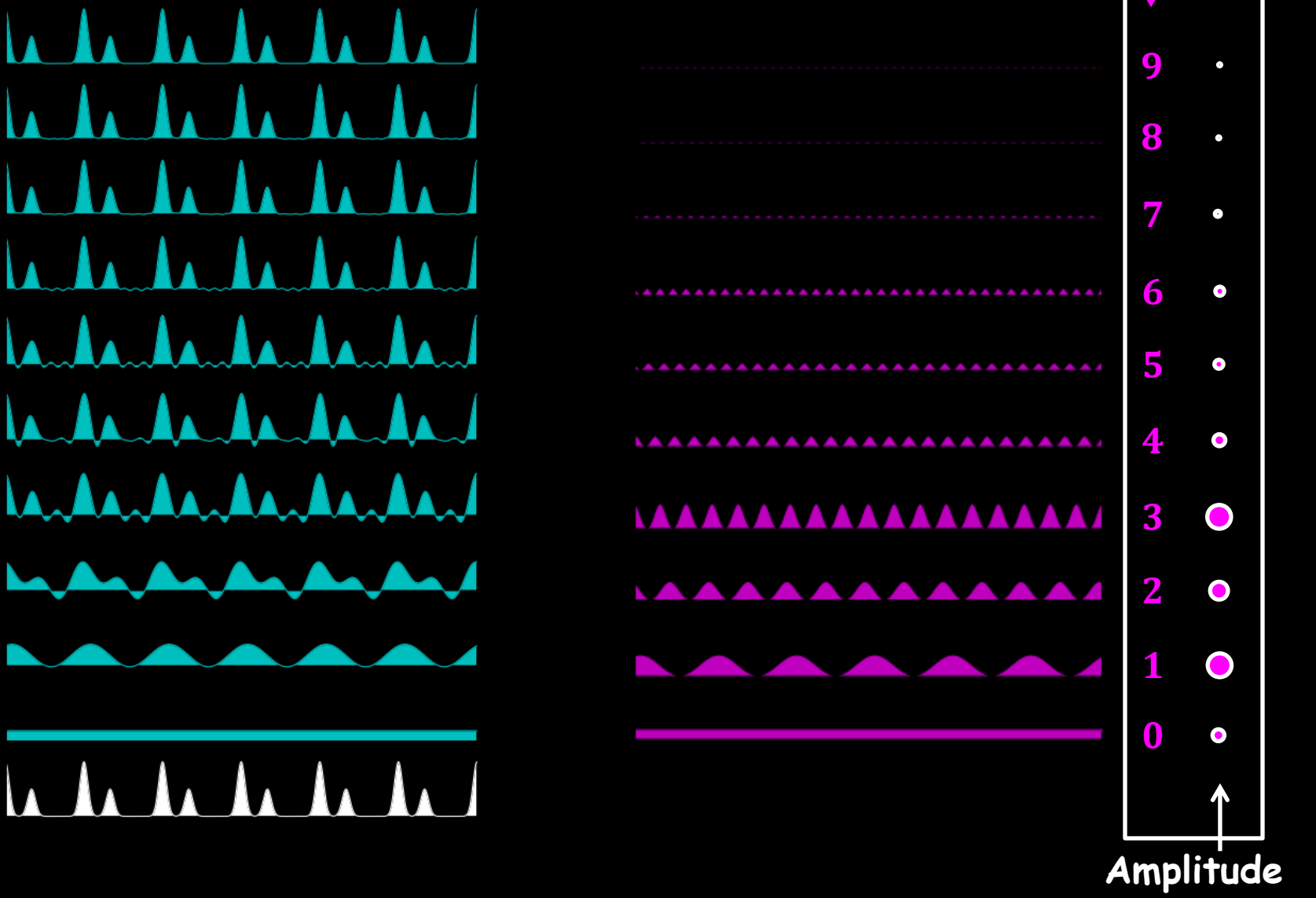


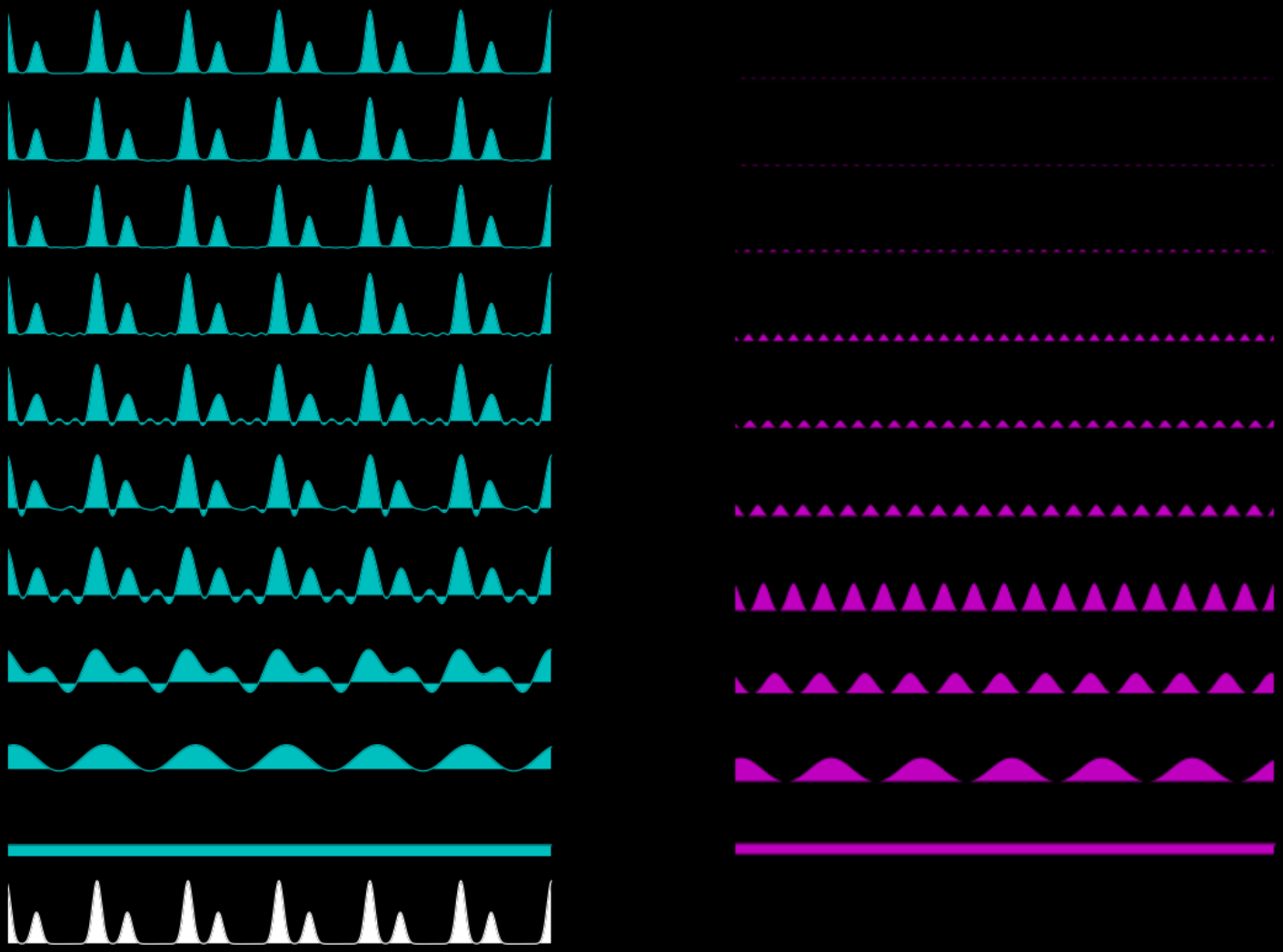


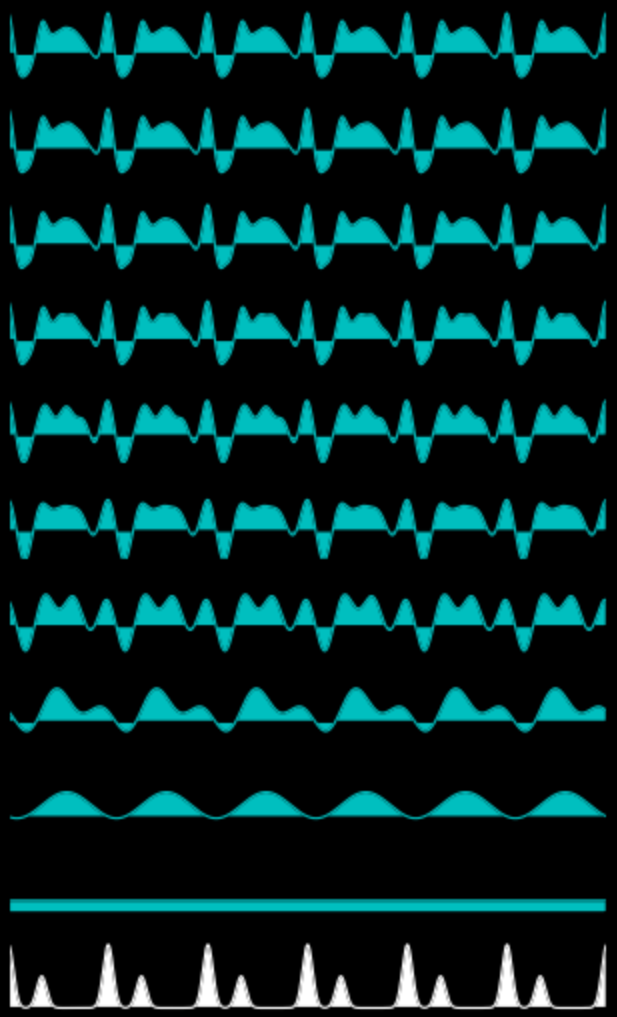
Série de Fourier



Série de Fourier

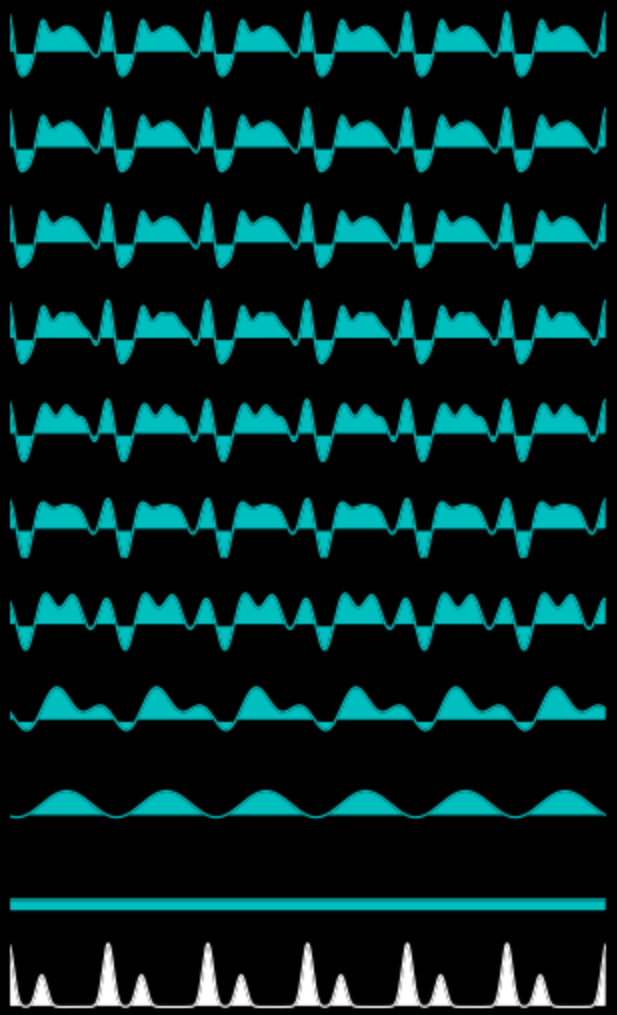






Résultat non-physique !

Phase

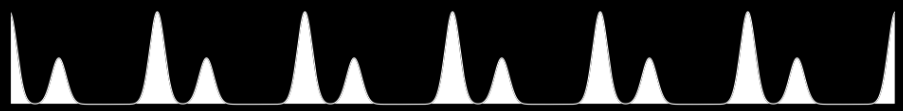


Résultat non-physique !

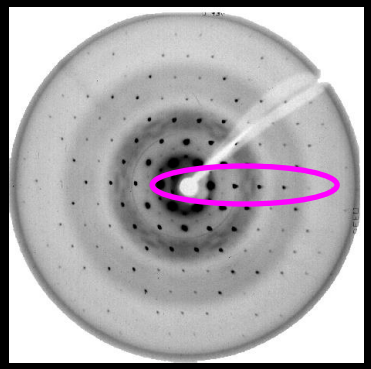
Phase

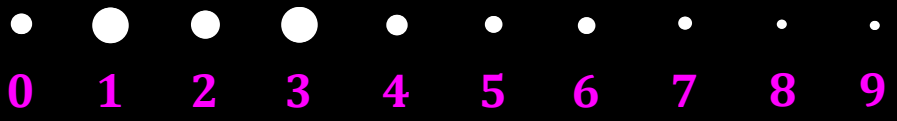
Il faut deux informations :
Amplitude et phase

Ce que comprend Bragg père (100 ans après Fourier) :
La diffraction réalise une
Transformée de Fourier
de la densité électronique du cristal
sauf les phases ☹



Transformée de Fourier : TF





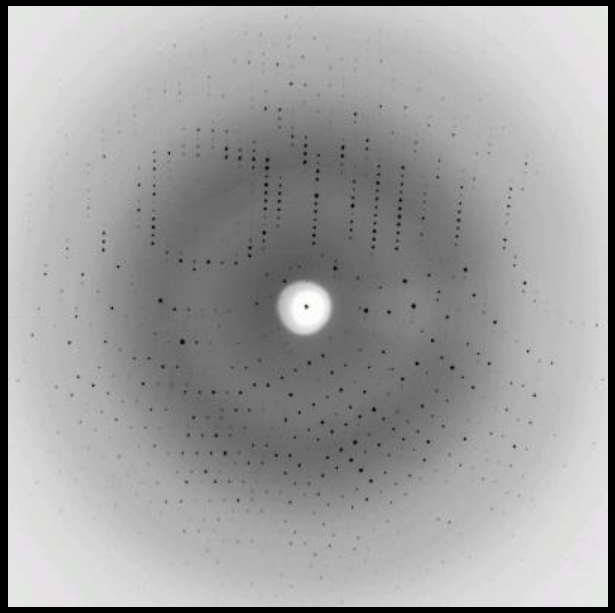
Spectre de Fourier

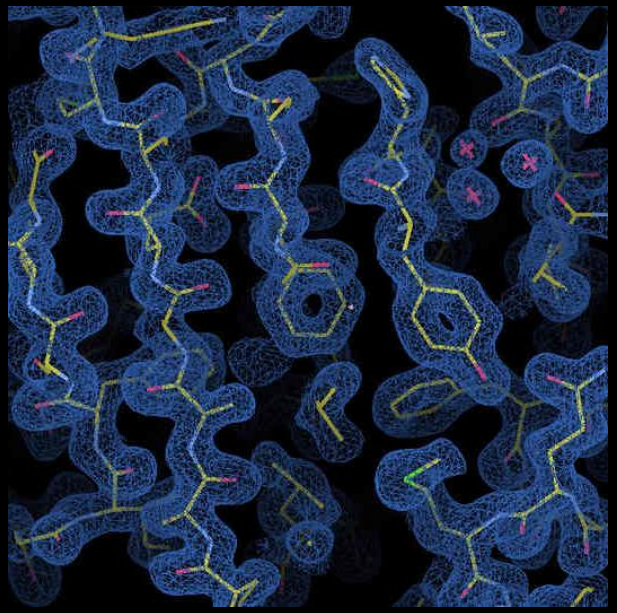
Pour déterminer une structure, il faut :

1. Mesurer l'intensité des taches de Bragg
2. Trouver leur phase ☹

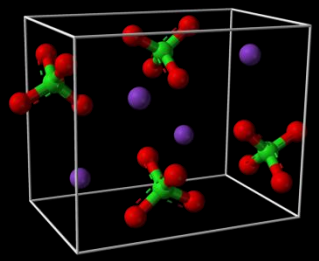
(Duane 1925 ; Bragg 1929 ; Perutz 1953 ; Karle & Hauptman : Nobel 1985)

3. Faire la transformée de Fourier du spectre ☺



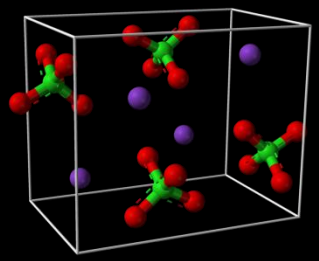


À partir de 1925, les méthodes utilisant les séries de Fourier permettent d'affiner puis d'obtenir des structures de plus en plus complexes

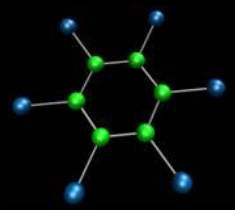


1929
Chlorate de potassium
W.H. Zachariasen

À partir de 1925, les méthodes utilisant les séries de Fourier permettent d'affiner puis d'obtenir des structures de plus en plus complexes

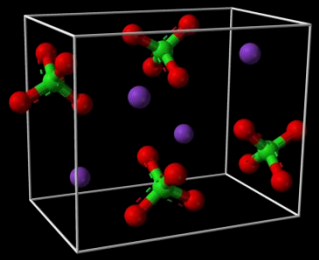


1929
Chlorate de potassium
W.H. Zachariasen



1931
Hexachlorobenzène
Kathleen Lonsdale

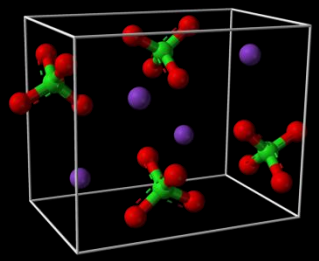
À partir de 1925, les méthodes utilisant les séries de Fourier permettent d'affiner puis d'obtenir des structures de plus en plus complexes



1929
Chlorate de potassium
W.H. Zachariasen

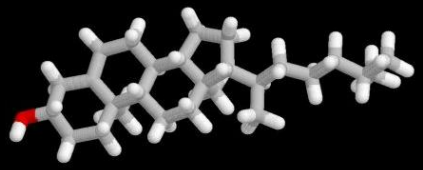
1935
Phthalocyanine
John M. Robertson

À partir de 1925, les méthodes utilisant les séries de Fourier permettent d'affiner puis d'obtenir des structures de plus en plus complexes



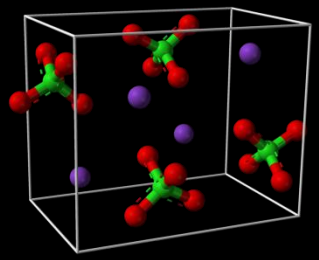
1929
Chlorate de potassium
W.H. Zachariasen

1935
Phthalocyanine
John M. Robertson



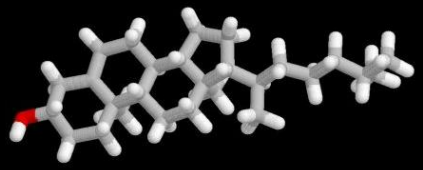
1945
Cholestérol
Dorothy Hodgkin

À partir de 1925, les méthodes utilisant les séries de Fourier permettent d'affiner puis d'obtenir des structures de plus en plus complexes

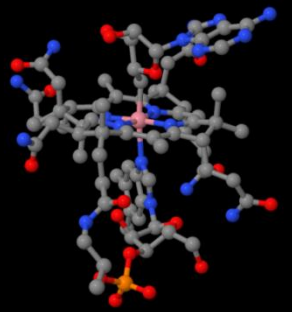


1929
Chlorate de potassium
W.H. Zachariasen

1935
Phthalocyanine
John M. Robertson

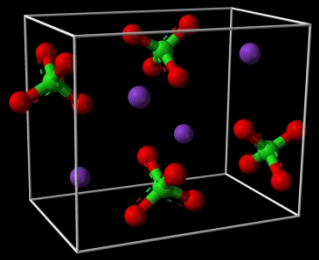


1945
Cholestérol
Dorothy Hodgkin



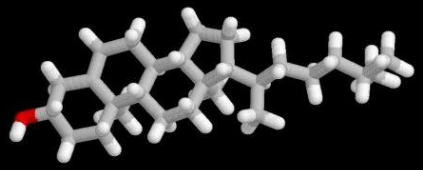
1954
Vitamine B_{12}
Dorothy Hodgkin

À partir de 1925, les méthodes utilisant les séries de Fourier permettent d'affiner puis d'obtenir des structures de plus en plus complexes

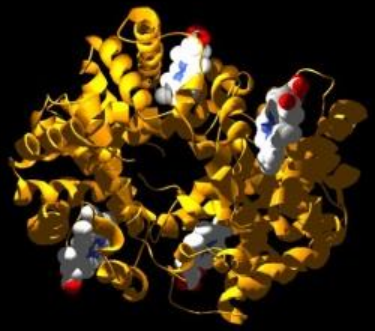


1929
Chlorate de potassium
W.H. Zachariasen

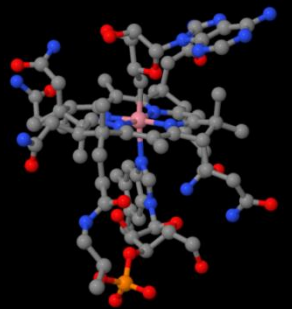
1935
Phthalocyanine
John M. Robertson



1945
Cholestérol
Dorothy Hodgkin

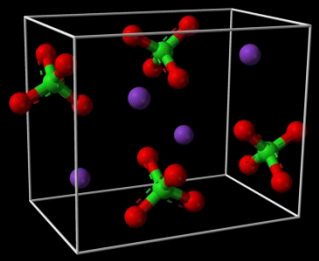


1959
Hémoglobine
Max Perutz



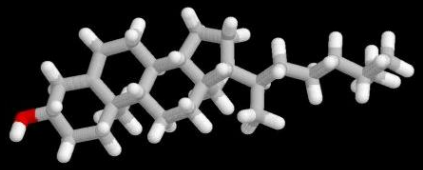
1954
Vitamine B_{12}
Dorothy Hodgkin

À partir de 1925, les méthodes utilisant les séries de Fourier permettent d'affiner puis d'obtenir des structures de plus en plus complexes

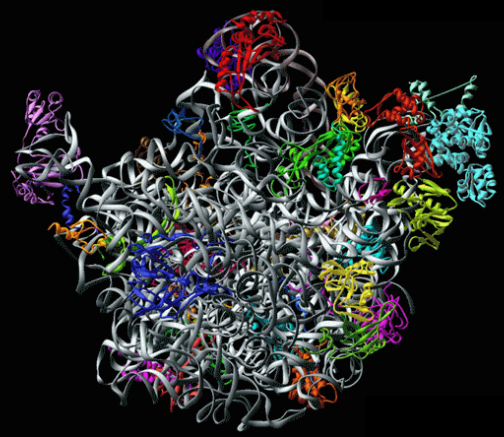


1929
Chlorate de potassium
W.H. Zachariasen

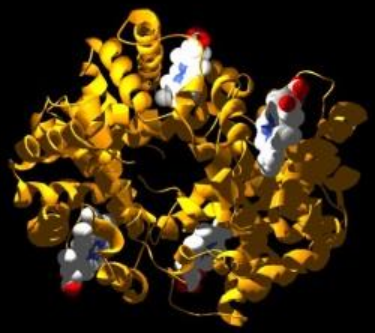
1935
Phthalocyanine
John M. Robertson



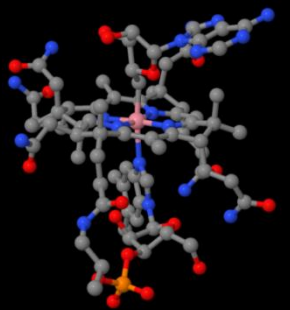
1945
Cholestérol
Dorothy Hodgkin



2000
Ribosome
Ramakrishnan, Steitz, Yonath

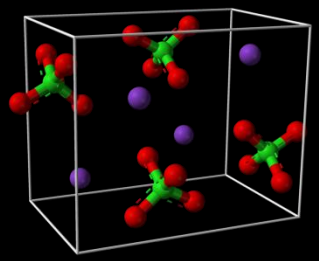


1959
Hémoglobine
Max Perutz



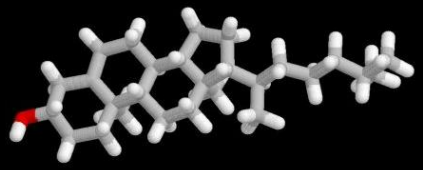
1954
Vitamine B_{12}
Dorothy Hodgkin

À partir de 1925, les méthodes utilisant les séries de Fourier permettent d'affiner puis d'obtenir des structures de plus en plus complexes



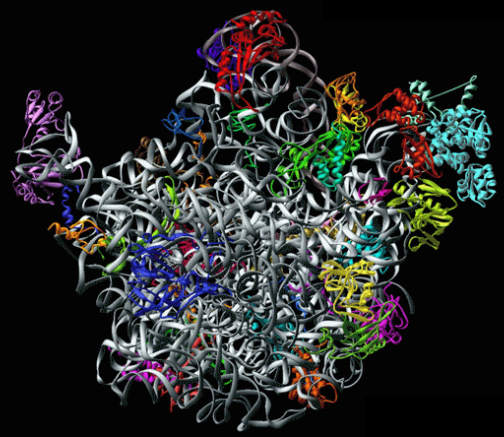
1929
Chlorate de potassium
W.H. Zachariasen

1935
Phthalocyanine
John M. Robertson

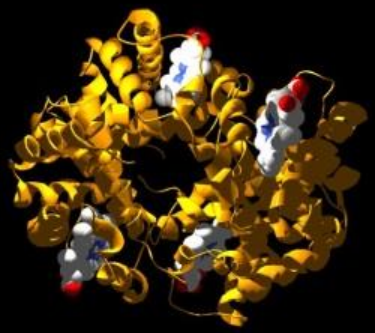


1945
Cholestérol
Dorothy Hodgkin

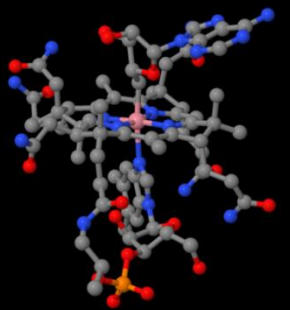
Nobel de Chimie



2000
Ribosome
Ramakrishnan, Steitz, Yonath



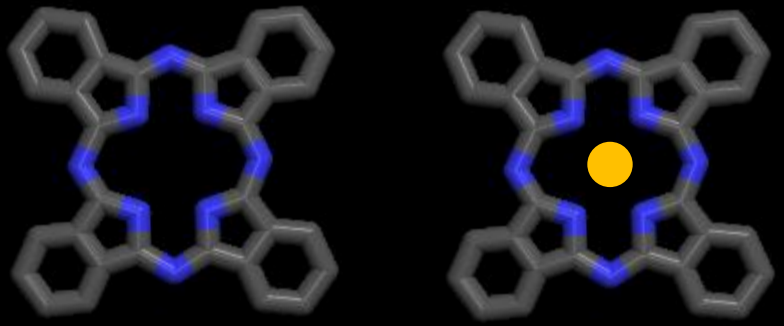
1959
Hémoglobine
Max Perutz



1954
Vitamine B_{12}
Dorothy Hodgkin

Exemple : Structure de la phthalocyanine

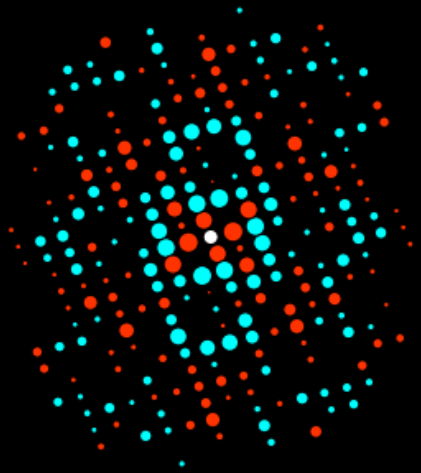
J. Monteath Roberston, J. Chem. Soc. 615, (1935); 1185 (1936)



Métal (Cu, Ni, Pt)

Détermination de la **phase** par comparaison…

Phase -



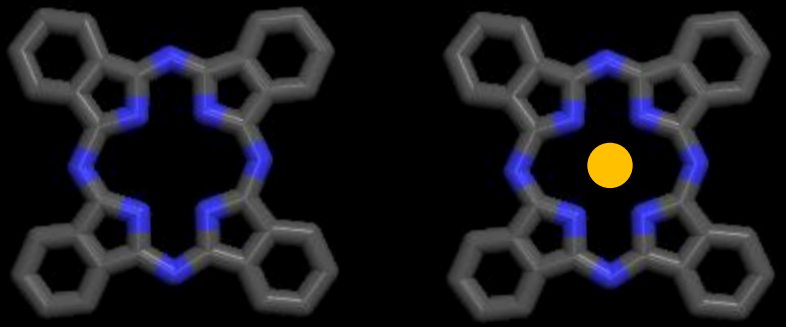
Phase +

Carte de **densité électronique**

Calcul de 1800 sommes de 150 termes (270 000) !

Exemple : Structure de la phthalocyanine

J. Monteath Roberston, J. Chem. Soc. 615, (1935); 1185 (1936)



Métal (Cu, Ni, Pt)

Détermination de la **phase** par comparaison…

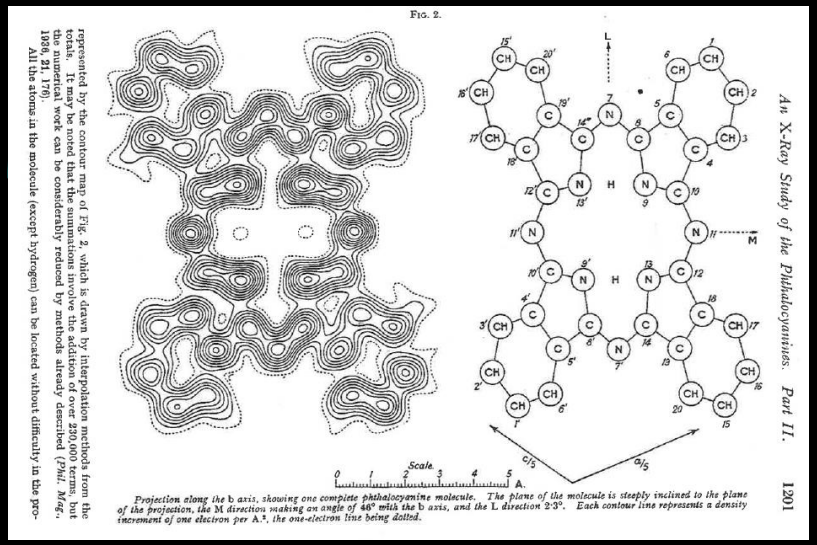


FIG. 2.

represented by the contour map of Fig. 2, which is drawn by interpolation methods from the totals. It may be noted that the summations involve the addition of over 270,000 terms, but the numerical work can be considerably reduced by methods already described (*Phil. Mag.*, 1928, **21**, 176).

All the atoms in the molecule (except hydrogen) can be located without difficulty in the pro-

An X-Ray Study of the Phthalocyanines. Part II. 1201

Projection along the b *axis, showing one complete phthalocyanine molecule. The plane of the molecule is steeply inclined to the plane of the projection, the* M *direction making an angle of 46° with the* b *axis, and the* L *direction 2·3°. Each contour line represents a density increment of one electron per* A.^{3}*, the one-electron line being dotted.*

Carte de **densité électronique**

Calcul de 1800 sommes de 150 termes (270 000) !

Les calculs prenaient plusieurs mois !

1934 : Bandes de Beevers-Lipson (tables de sinus)

With our method, the strips were placed in sequence and added mentally, and although not everyone liked this mental arithmetic, our method soon became generally preferred.

Les calculs prenaient plusieurs mois !

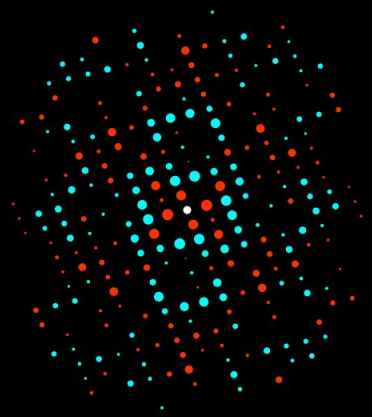
1934 : Bandes de Beevers-Lipson (tables de sinus)

Calcul à la main, puis machines à calcul (Sydney, 1965…)

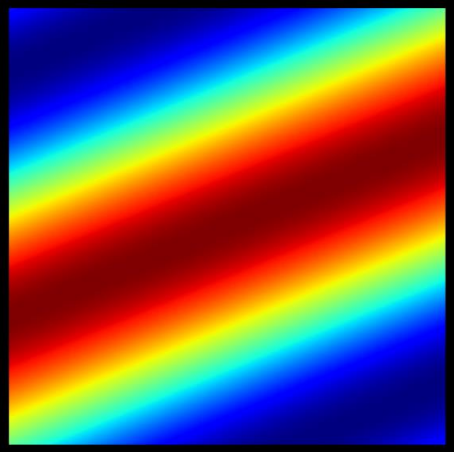
Résolution de la structure par série de Fourier

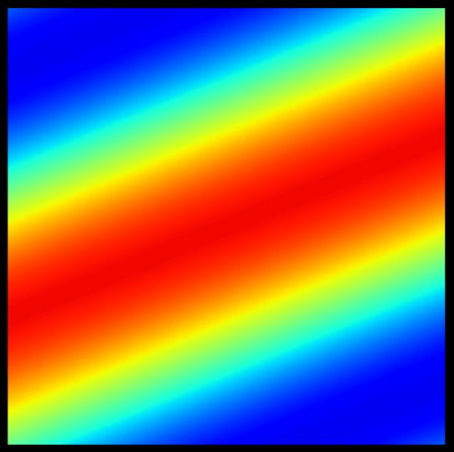
Série
de
Fourier

« Sinus »



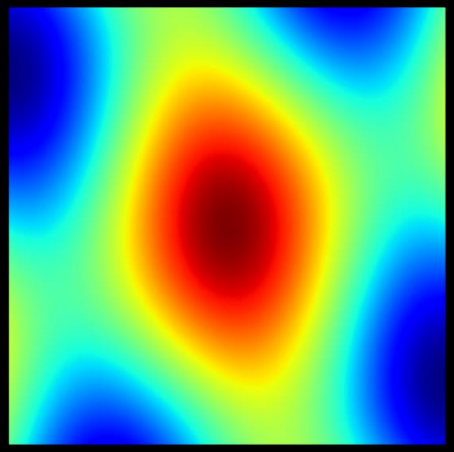
Résolution de la structure par série de Fourier

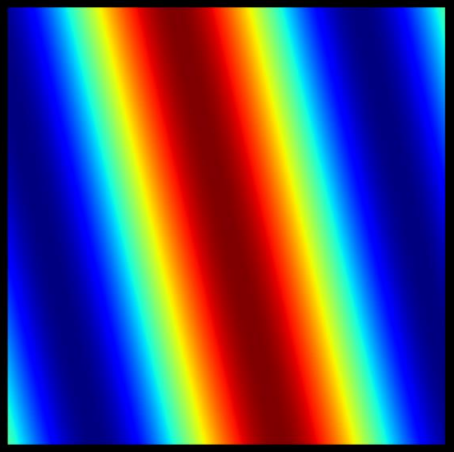




resolution = 12.48 Å

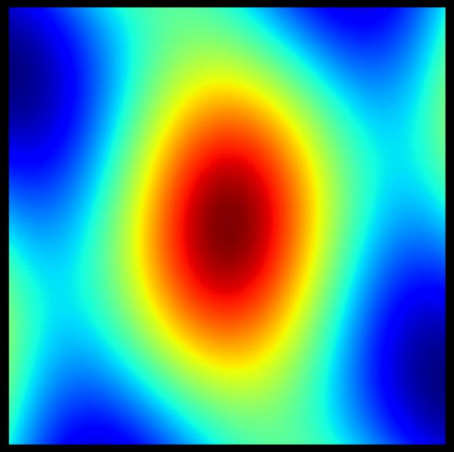
Résolution de la structure par série de Fourier

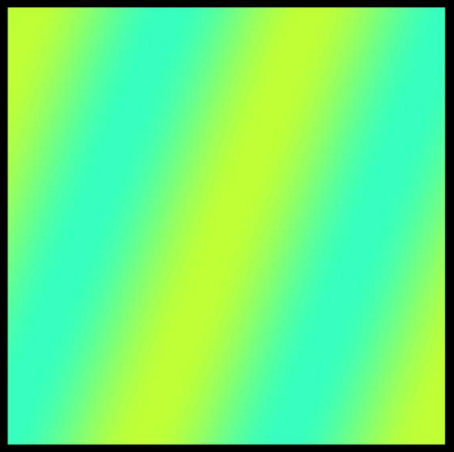




resolution = 9.8 Å

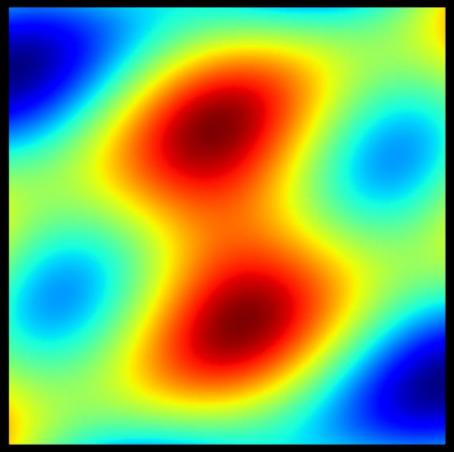
Résolution de la structure par série de Fourier





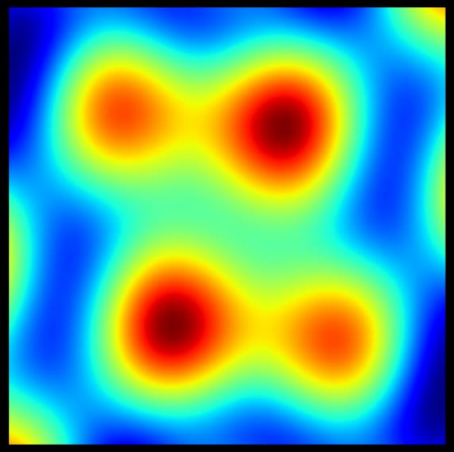
resolution = 7.18 Å

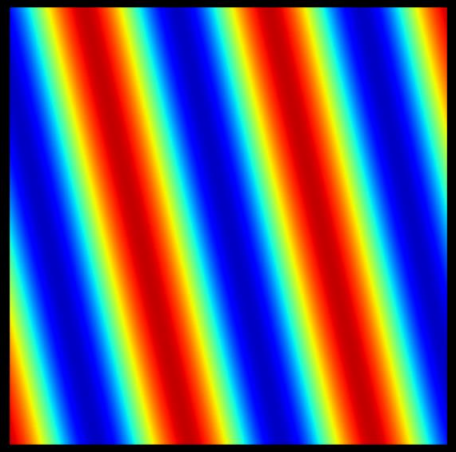
Résolution de la structure par série de Fourier



resolution = 6.24 Å

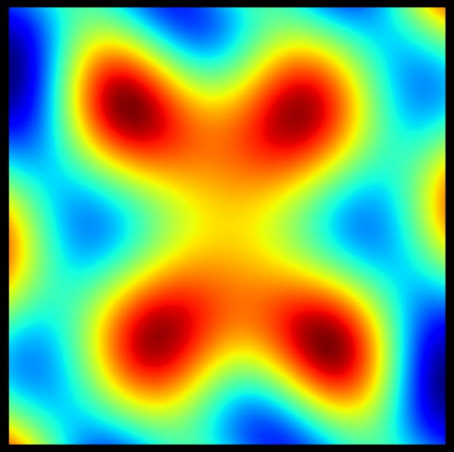
Résolution de la structure par série de Fourier

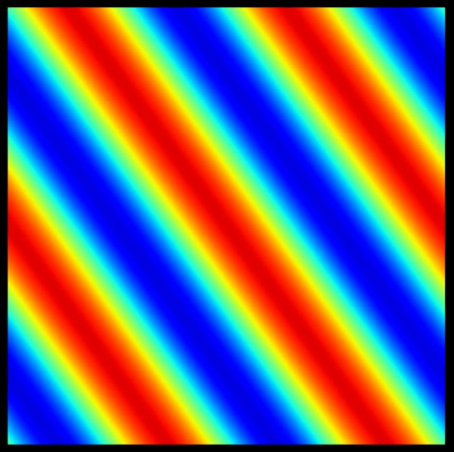




resolution = 4.9 Å

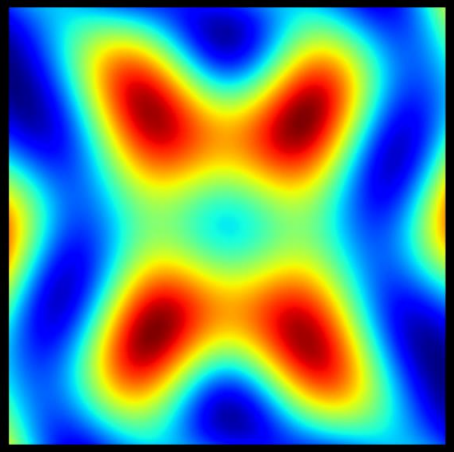
Résolution de la structure par série de Fourier

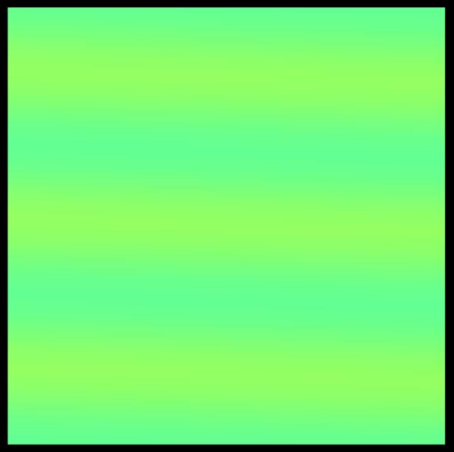




resolution = 4.82 Å

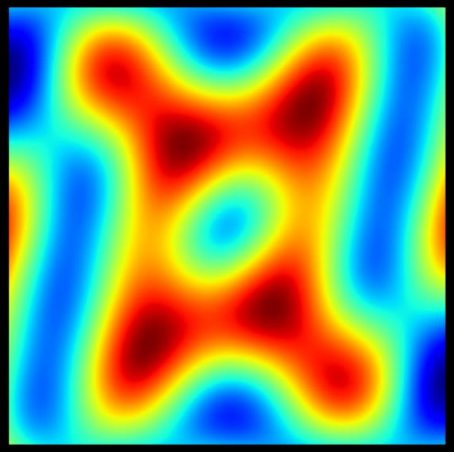
Résolution de la structure par série de Fourier

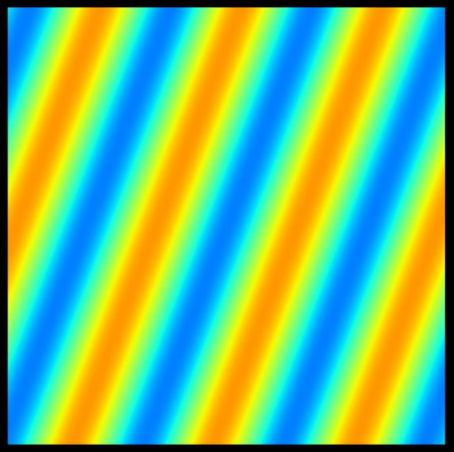


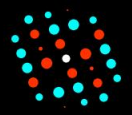


resolution = 4.06 Å

Résolution de la structure par série de Fourier

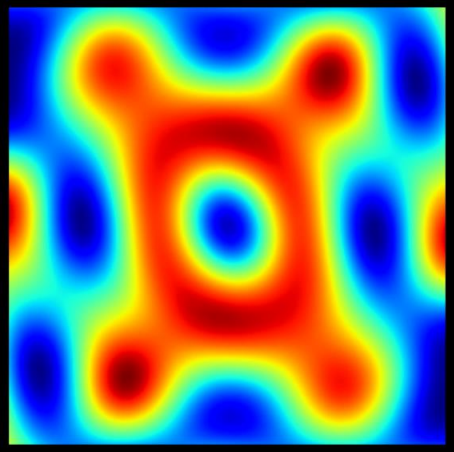


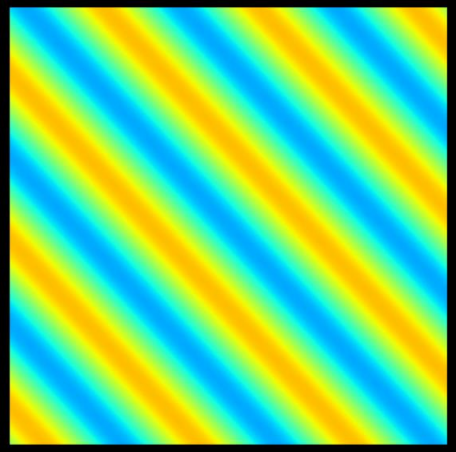


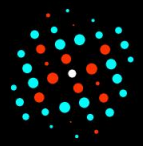


resolution = 3.59 Å

Résolution de la structure par série de Fourier

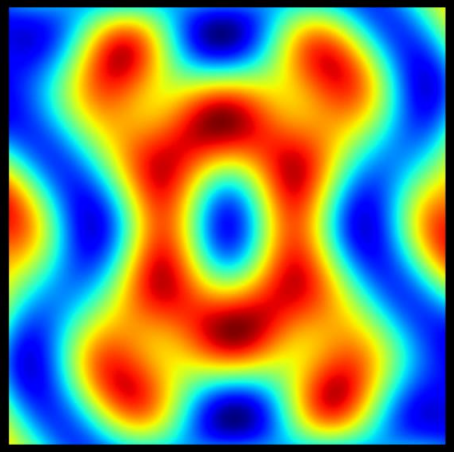


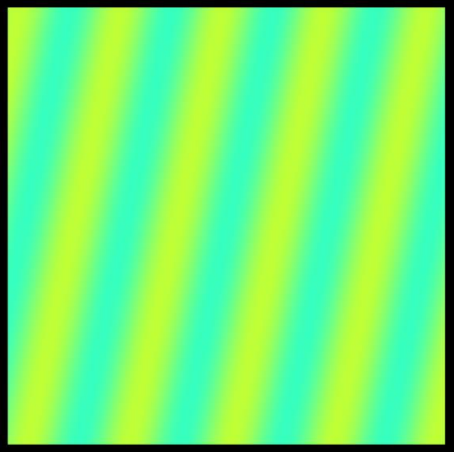


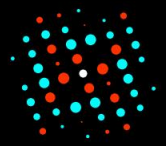


resolution = 3.1 Å

Résolution de la structure par série de Fourier

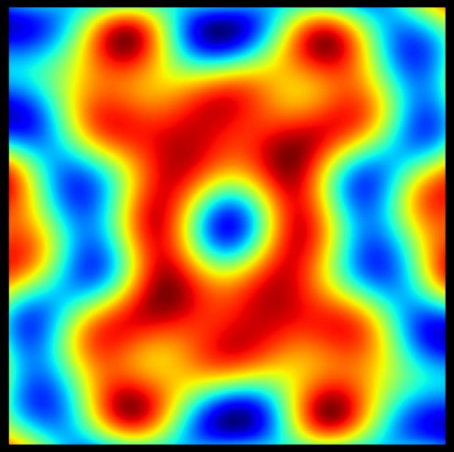


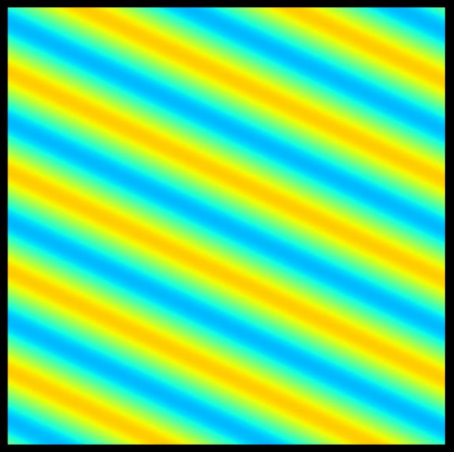


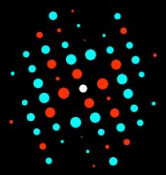


resolution = 2.72 Å

Résolution de la structure par série de Fourier

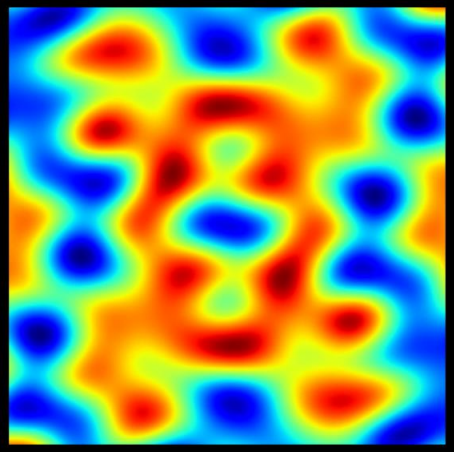


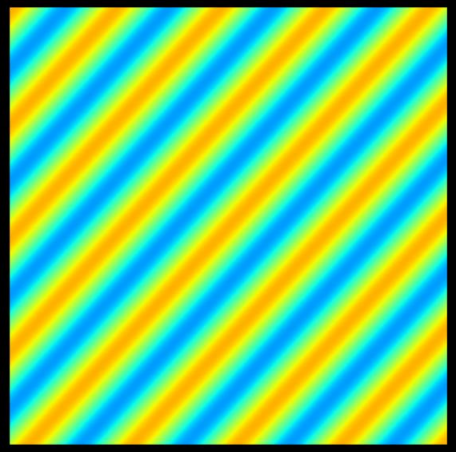


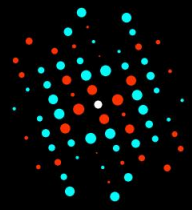


resolution = 2.45 Å

Résolution de la structure par série de Fourier

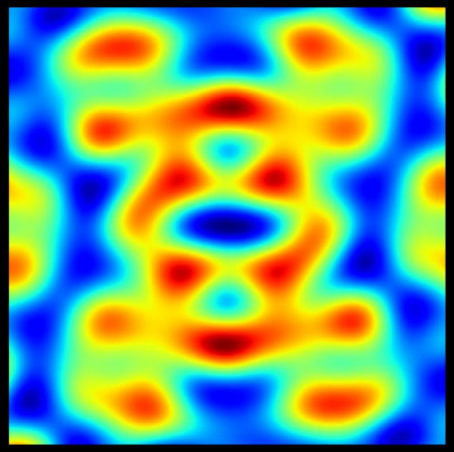


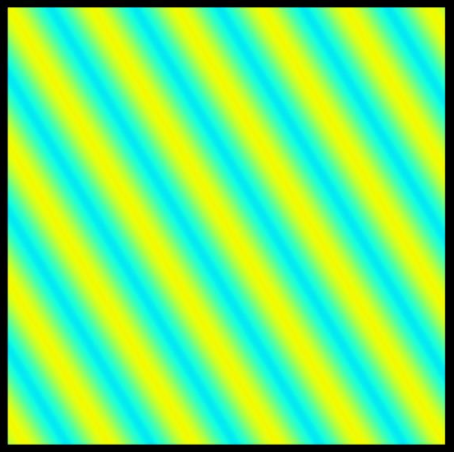


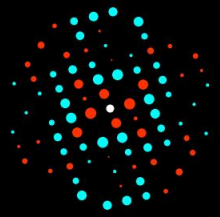


resolution = 2.09 Å

Résolution de la structure par série de Fourier

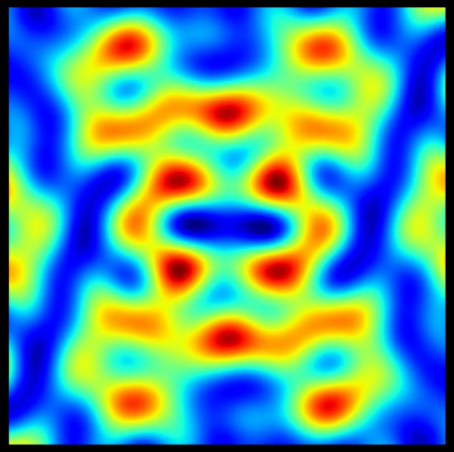


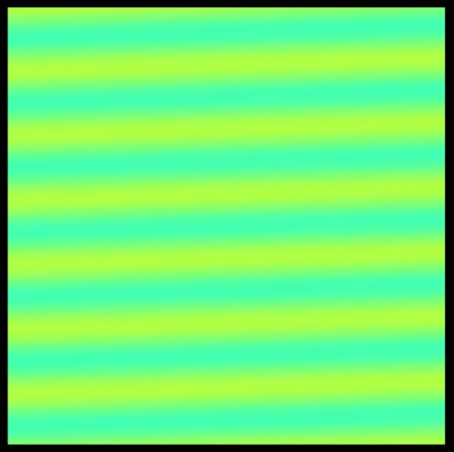


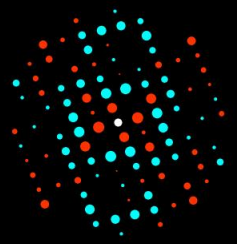


resolution = 1.96 Å

Résolution de la structure par série de Fourier

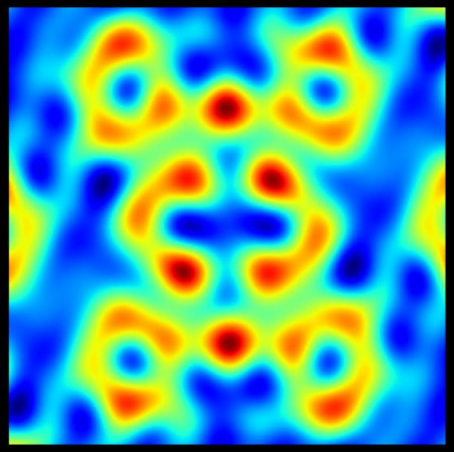


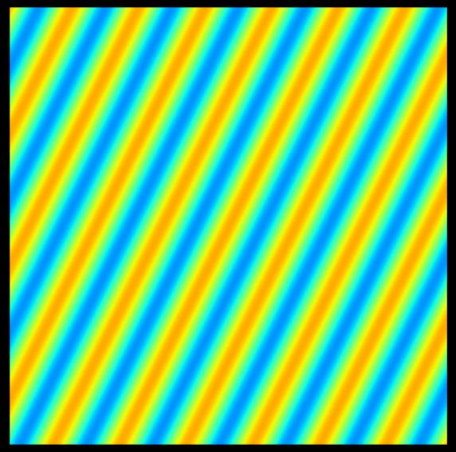


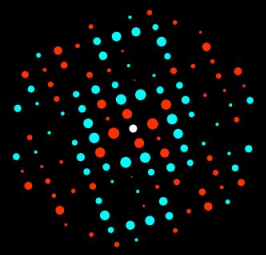


resolution = 1.76 Å

Résolution de la structure par série de Fourier

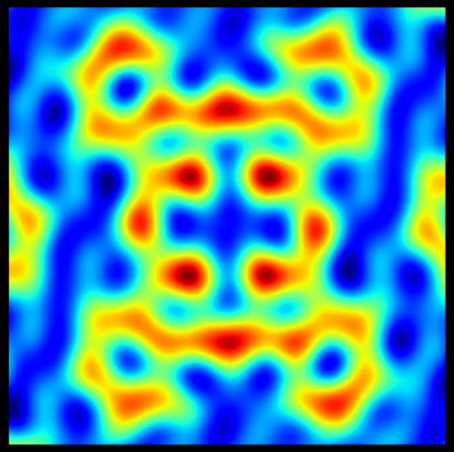


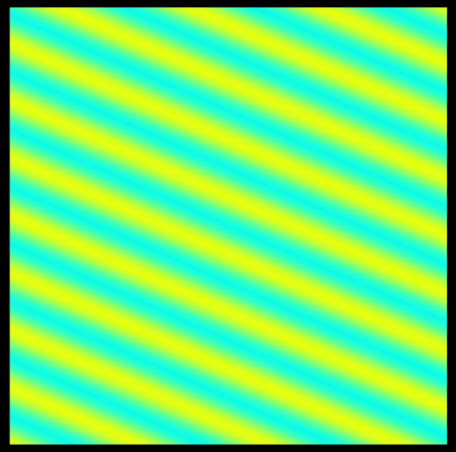


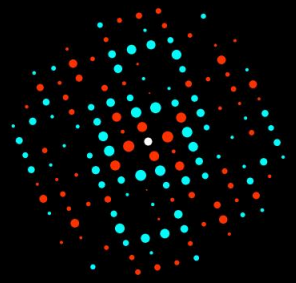


resolution = 1.62 Å

Résolution de la structure par série de Fourier

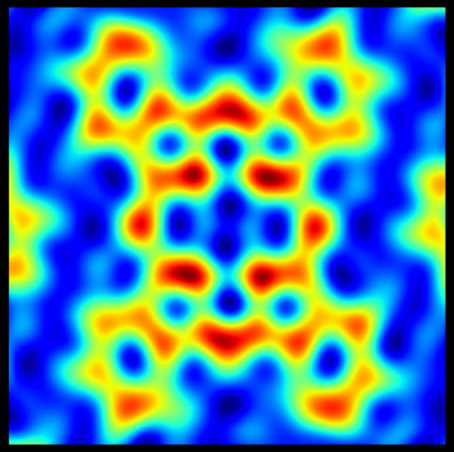


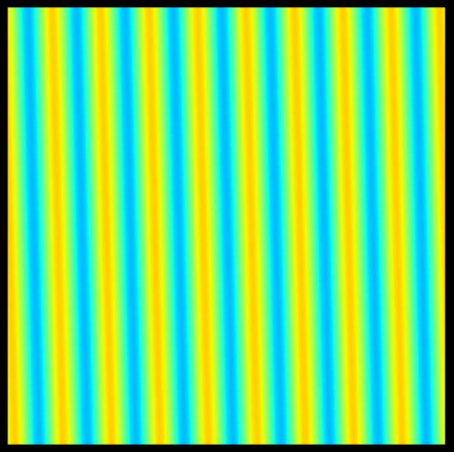


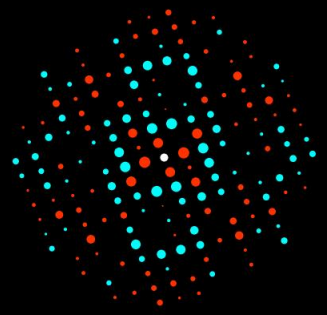


resolution = 1.43 Å

Résolution de la structure par série de Fourier

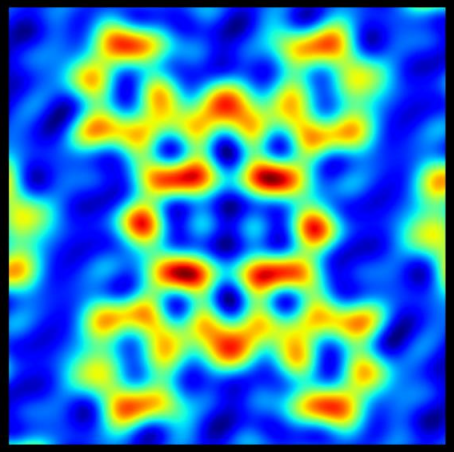


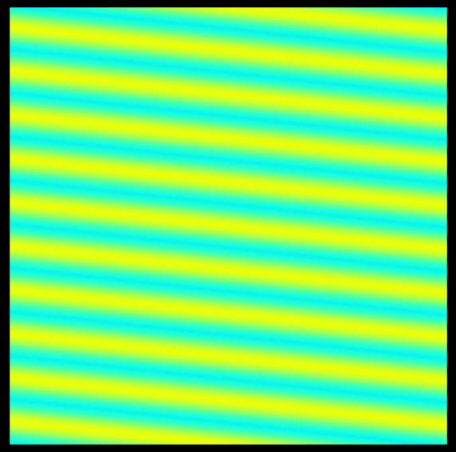


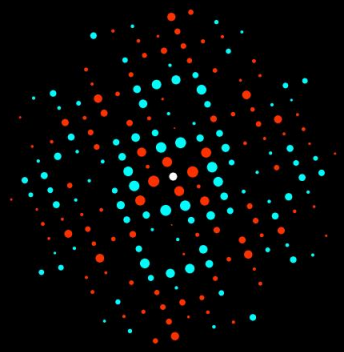


resolution = 1.32 Å

Résolution de la structure par série de Fourier

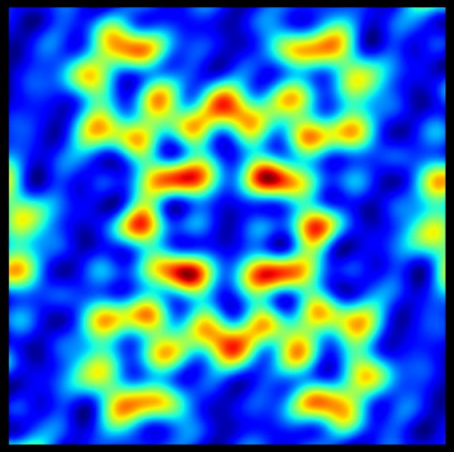


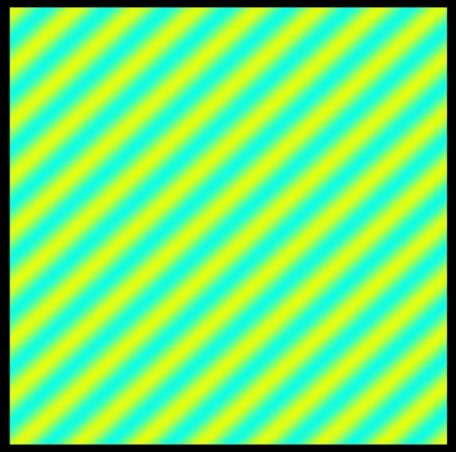


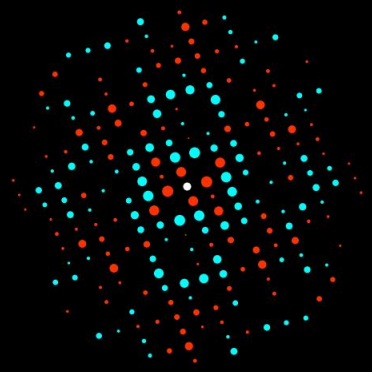


resolution = 1.18 Å

Résolution de la structure par série de Fourier

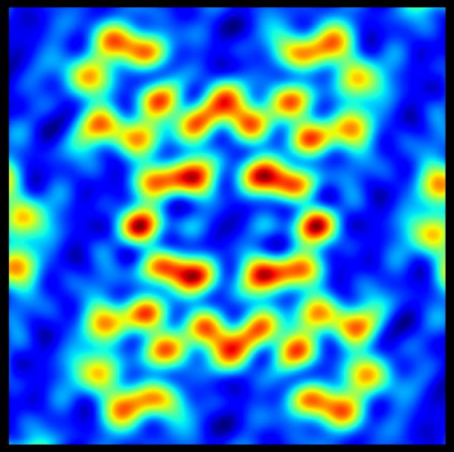


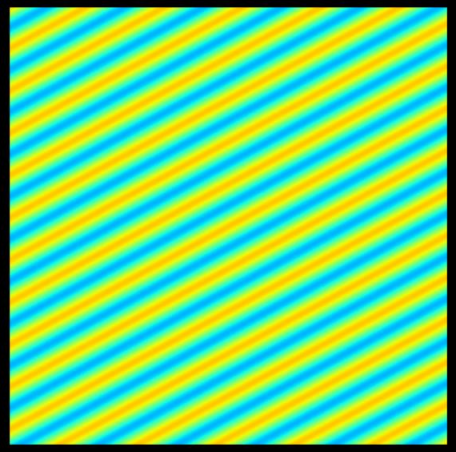


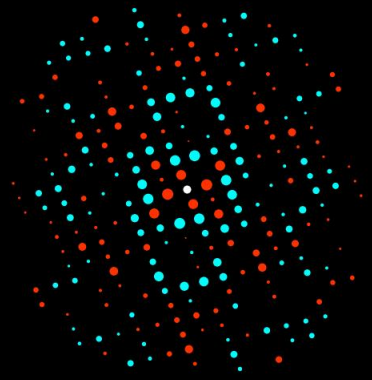


resolution = 1.1 Å

Résolution de la structure par série de Fourier

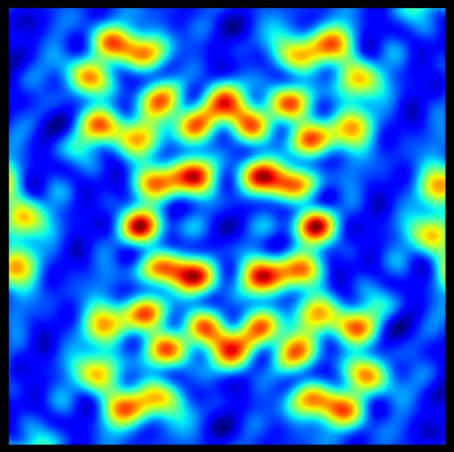


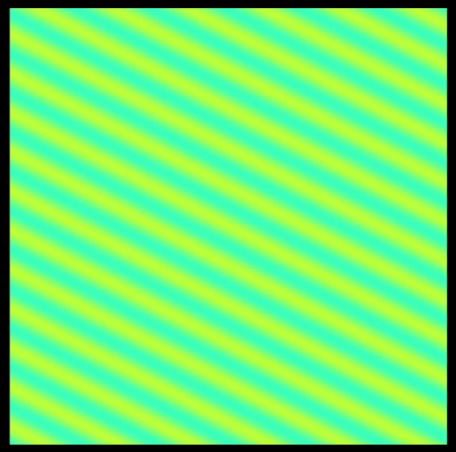


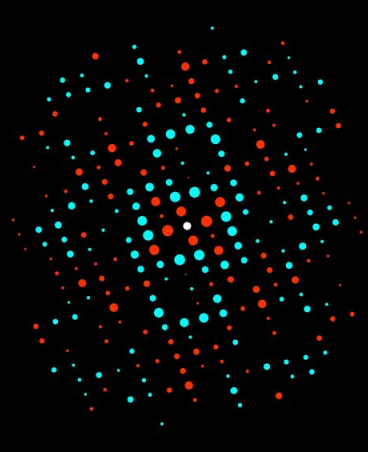


resolution = 1.01 Å

Résolution de la structure par série de Fourier

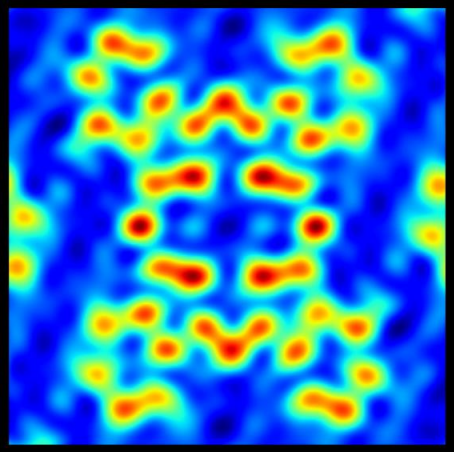


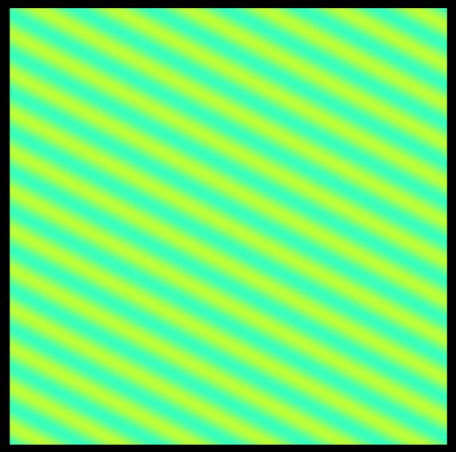


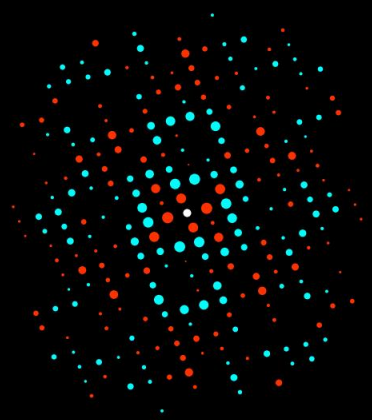


resolution = 0.95 Å

Résolution de la structure par série de Fourier







resolution = 0.95 Å

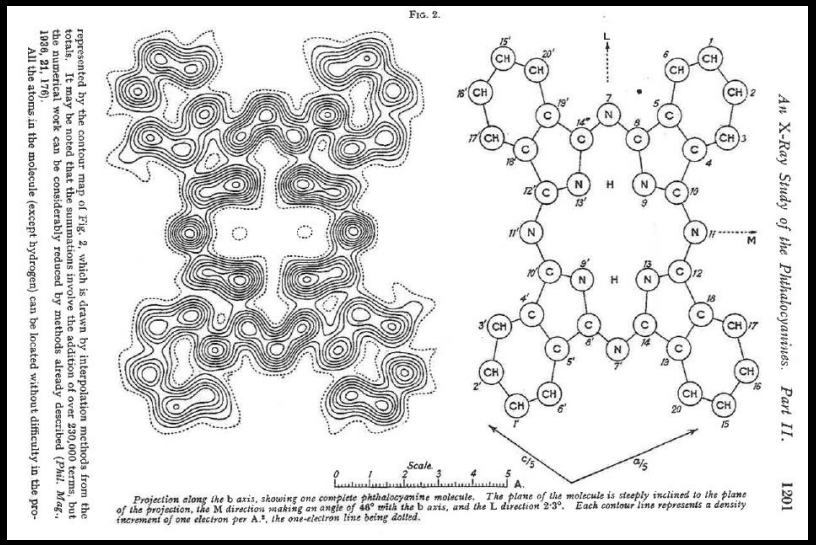


FIG. 2.

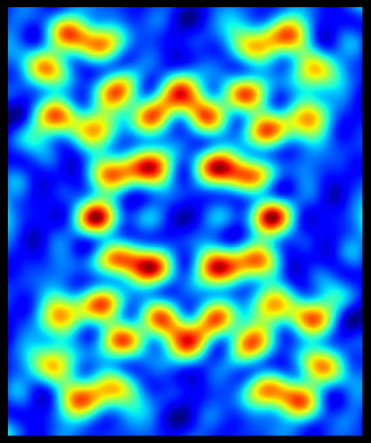
An X-Ray Study of the Phthalocyanines. Part II. 1201

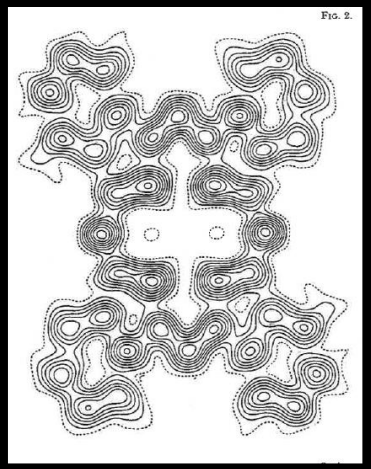
represented by the contour map of Fig. 2, which is drawn by interpolation methods from the totals. It may be noted that the summations involve the addition of over 230,000 terms, but the numerical work can be considerably reduced by methods already described (*Phil. Mag.*, 1938, **21**, 176).

All the atoms in the molecule (except hydrogen) can be located without difficulty in the pro-

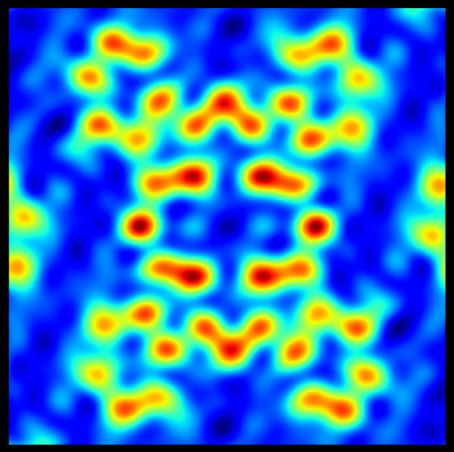
Projection along the b axis, showing one complete phthalocyanine molecule. The plane of the molecule is steeply inclined to the plane of the projection, the M direction making an angle of 48° with the b axis, and the L direction 2·3°. Each contour line represents a density increment of one electron per A.³, the one-electron line being dotted.

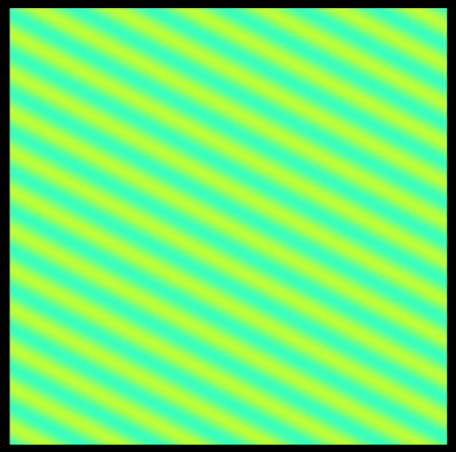
Résolution de la structure par série de Fourier

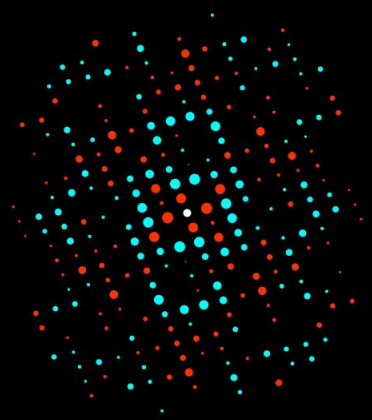




Résolution de la structure par série de Fourier







resolution = 0.95 Å

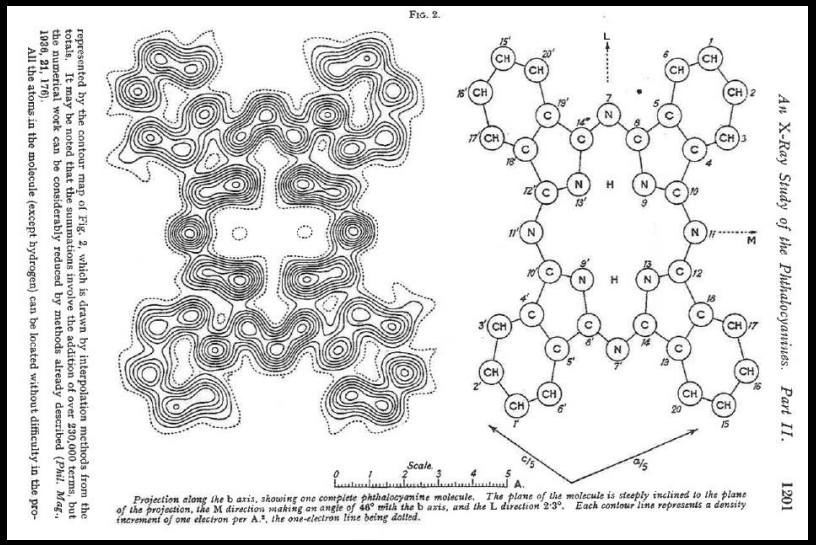


FIG. 2.

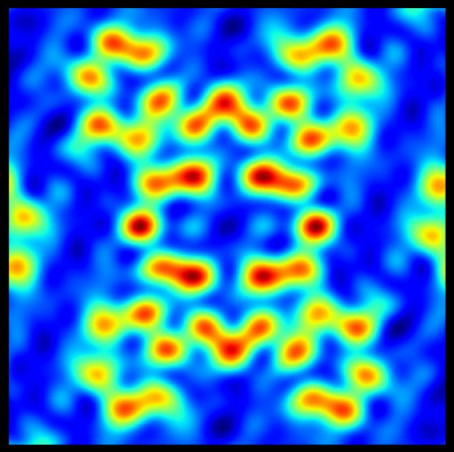
An X-Ray Study of the Phthalocyanines. Part II. 1201

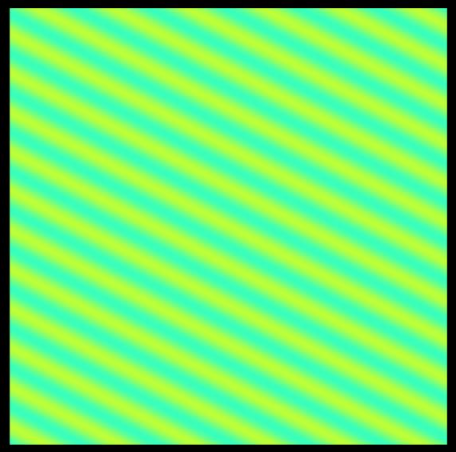
represented by the contour map of Fig. 2, which is drawn by interpolation methods from the totals. It may be noted that the summations involve the addition of over 230,000 terms, but the numerical work can be considerably reduced by methods already described (*Phil. Mag.*, 1938, **21**, 176).

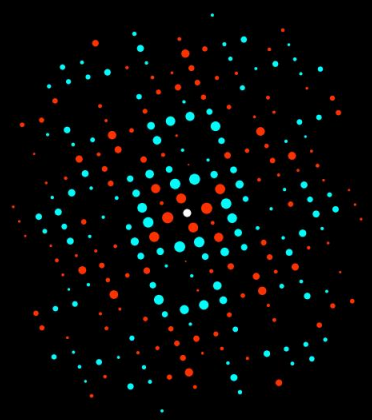
All the atoms in the molecule (except hydrogen) can be located without difficulty in the pro-

Projection along the b axis, showing one complete phthalocyanine molecule. The plane of the molecule is steeply inclined to the plane of the projection, the M direction making an angle of 48° with the b axis, and the L direction 2·3°. Each contour line represents a density increment of one electron per A.³, the one-electron line being dotted.

Résolution de la structure par série de Fourier







resolution = 0.95 Å

La molécule est inclinée

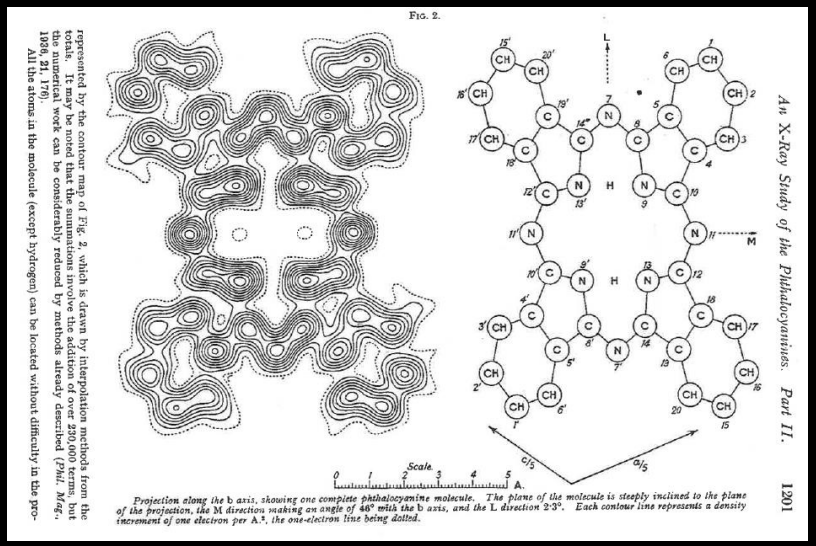


FIG. 2.

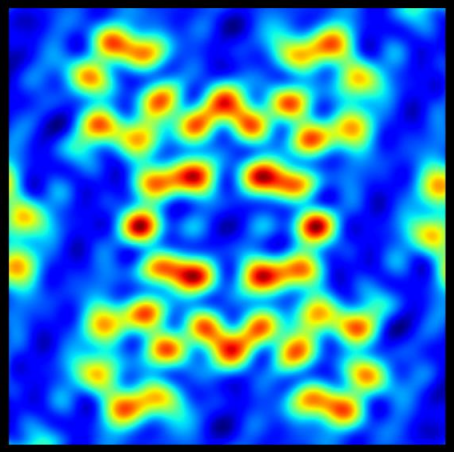
An X-Ray Study of the Phthalocyanines. Part II. 1201

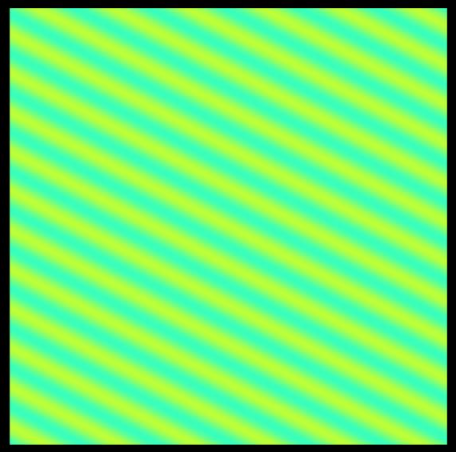
represented by the contour map of Fig. 2, which is drawn by interpolation methods from the totals. It may be noted that the summations involve the addition of over 230,000 terms, but the numerical work can be considerably reduced by methods already described (*Phil. Mag.*, 1938, **21**, 176).

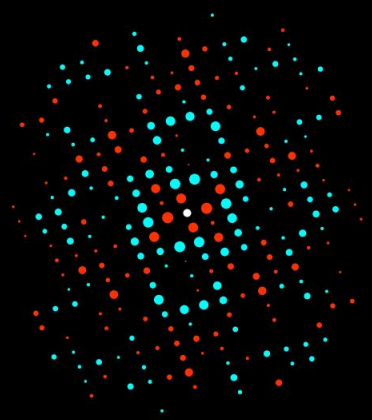
All the atoms in the molecule (except hydrogen) can be located without difficulty in the pro-

Projection along the b axis, showing one complete phthalocyanine molecule. The plane of the molecule is steeply inclined to the plane of the projection, the M direction making an angle of 48° with the b axis, and the L direction 2·3°. Each contour line represents a density increment of one electron per Å.³, the one-electron line being dotted.

Résolution de la structure par série de Fourier







resolution = 0.95 Å

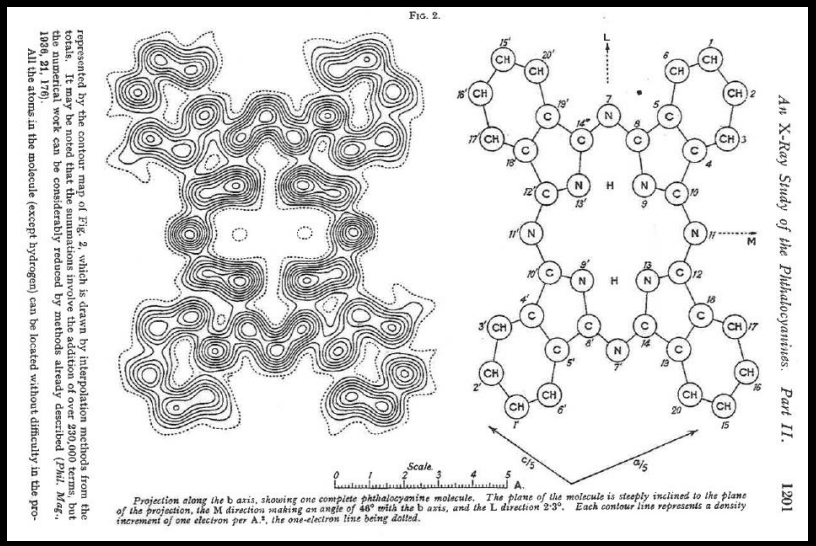


FIG. 2.

Projection along the b axis, showing one complete phthalocyanine molecule. The plane of the molecule is steeply inclined to the plane of the projection, the M direction making an angle of 48° with the b axis, and the L direction 2·3°. Each contour line represents a density increment of one electron per A.^{3}, the one-electron line being dotted.

represented by the contour map of Fig. 2, which is drawn by interpolation methods from the totals. It may be noted that the summations involve the addition of over 230,000 terms, but the numerical work can be considerably reduced by methods already described (*Phil. Mag.*, 1938, **21**, 176).

All the atoms in the molecule (except hydrogen) can be located without difficulty in the pro-

An X-Ray Study of the Phthalocyanines. Part II. 1201

La molécule est inclinée

Le problème est tri-dimensionnel !

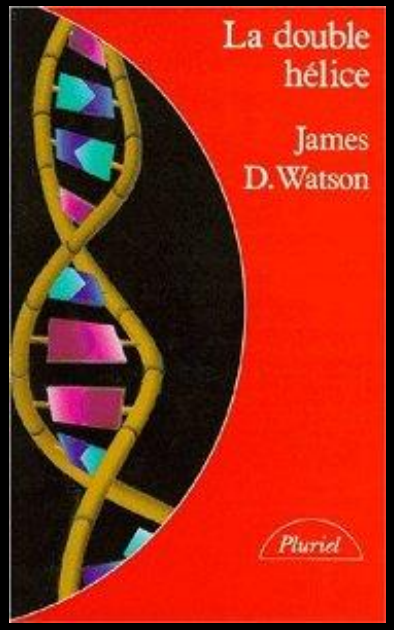
La structure de l'ADN - 1953

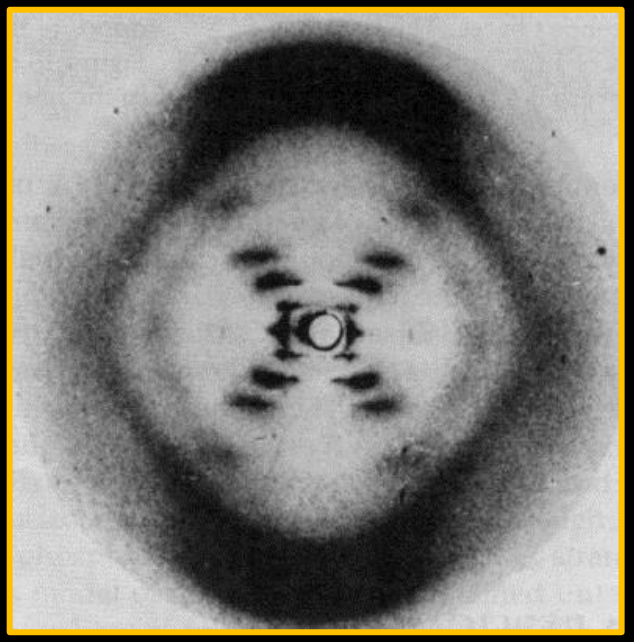
James Watson, Francis Crick (Cavendish lab.), Maurice Wilkins et Rosalind Franklin (King's college)
Les trois premiers auront le prix Nobel de physiologie ou médecine (1962)

La structure de l'ADN - 1953

James Watson, Francis Crick (Cavendish lab.), Maurice Wilkins et Rosalind Franklin (King's college)
Les trois premiers auront le prix Nobel de physiologie ou médecine (1962)

Dès que je vis cette image, je restais bouche bée et mon pouls s'accéléra... La croix noire des réflexions qui dominait dans l'image ne pouvait provenir que d'une structure hélicoïdale...

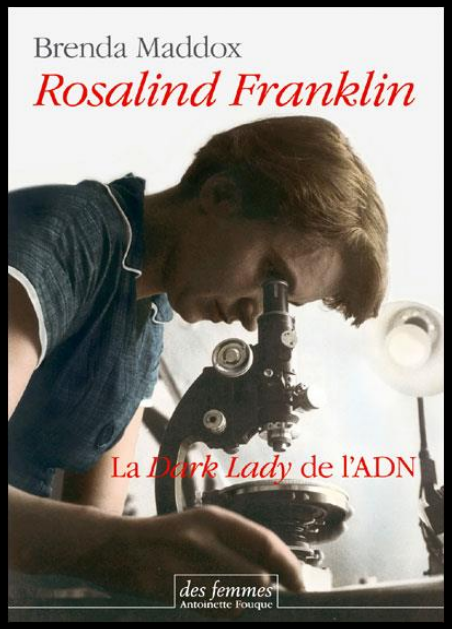


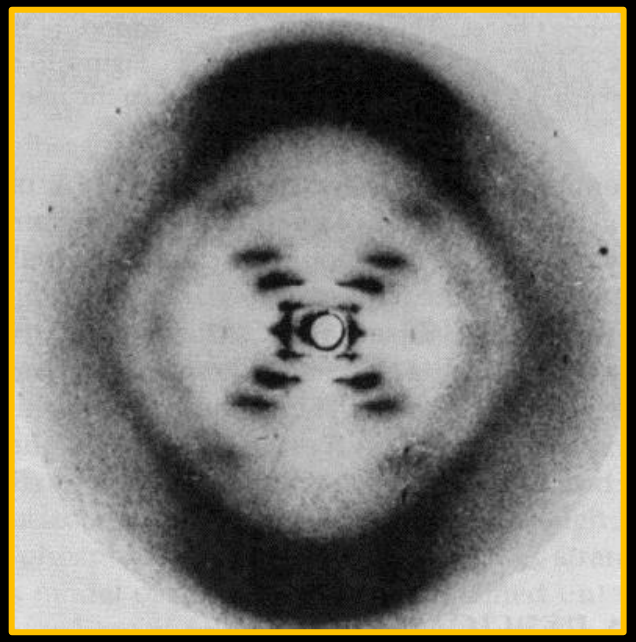


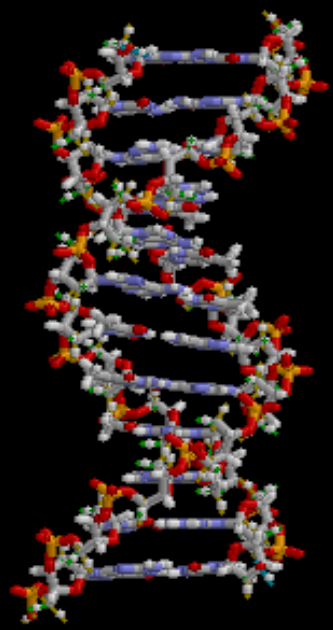
La structure de l'ADN - 1953

James Watson, Francis Crick (Cavendish lab.), Maurice Wilkins et Rosalind Franklin (King's college)
Les trois premiers auront le prix Nobel de physiologie ou médecine (1962)

Dès que je vis cette image, je restais bouche bée et mon pouls s'accéléra... La croix noire des réflexions qui dominait dans l'image ne pouvait provenir que d'une structure hélicoïdale...



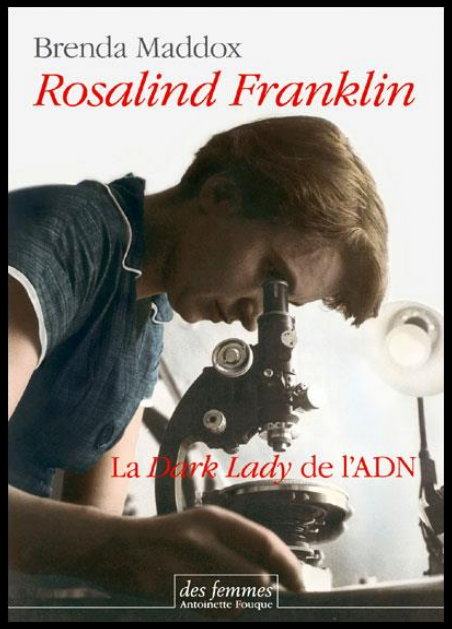


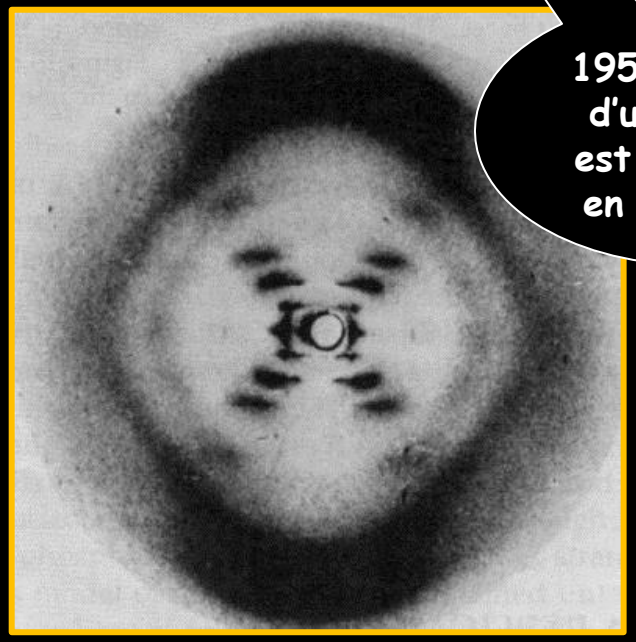


La structure de l'ADN - 1953

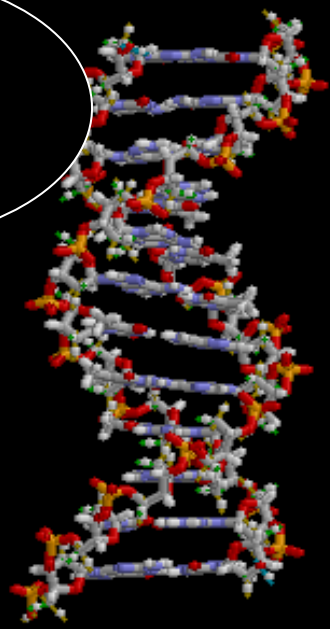
James Watson, Francis Crick (Cavendish lab.), Maurice Wilkins et Rosalind Franklin (King's college)
Les trois premiers auront le prix Nobel de physiologie ou médecine (1962)

Dès que je vis cette image, je restais bouche bée et mon pouls s'accéléra... La croix noire des réflexions qui dominait dans l'image ne pouvait provenir d'une structure hélicoïdale...





1952 : La TF d'une hélice est une croix en pointillé !



MOLECULAR STRUCTURE OF NUCLEIC ACIDS

A Structure for Deoxyribose Nucleic Acid

WE wish to suggest a structure for the salt of deoxyribose nucleic acid (D.N.A.). This structure has novel features which are of considerable biological interest.

We are much indebted to Dr. Jerry Donohue for constant advice and criticism, especially on interatomic distances. We have also been stimulated by a knowledge of the general nature of the unpublished experimental results and ideas of Dr. M. H. F. Wilkins, Dr. R. E. Franklin and their co-workers at King's College, London. One of us (J. D. W.) has been aided by a fellowship from the National Foundation for Infantile Paralysis.

J. D. WATSON
F. H. C. CRICK

Medical Research Council Unit for the
Study of the Molecular Structure of
Biological Systems,
Cavendish Laboratory, Cambridge.

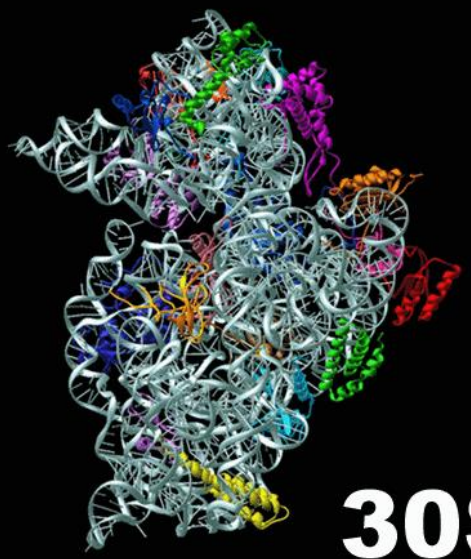
April 2.

La structure du ribosome – 2000

Venkatraman Ramakrishnan, Thomas A. Steitz, Ada E. Yonath (Nobel chimie 2009)

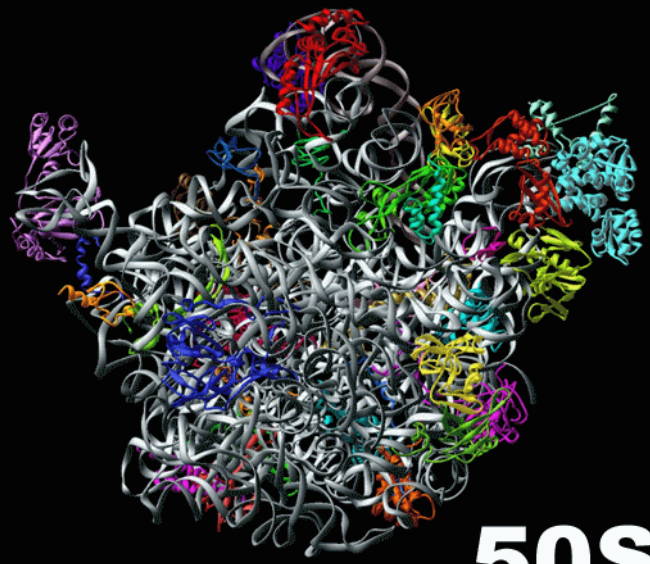
Synthétiser les protéines en décodant l'information
contenue dans l'ARN messager

1,4 10^6 daltons



30S

2,8.10^6 daltons

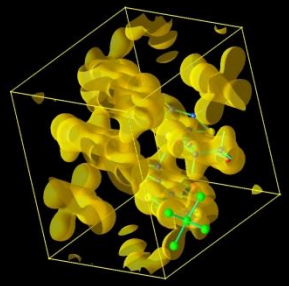


50S

Conclusion

Les outils mathématiques de Fourier sont utilisés **partout** !

Transmission du signal, voix, images, vidéos
Microscopes et télescopes
Imagerie médicale (Scanner, IRM)
et bien sur cristallographie

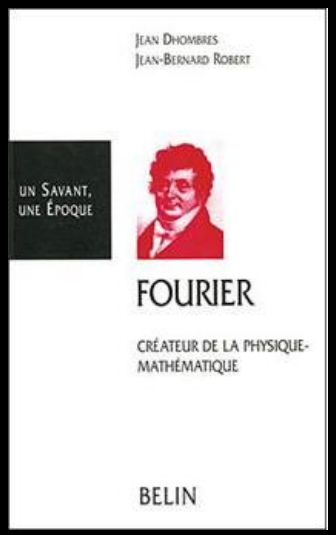


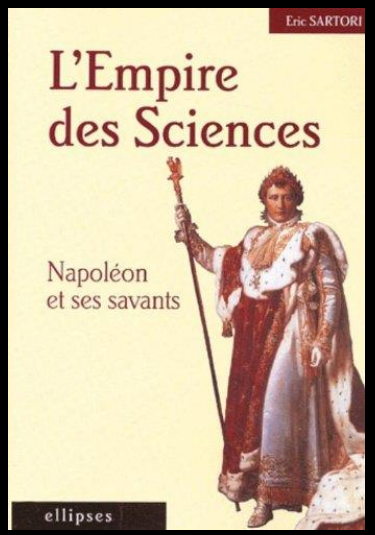
Fourier a mis à l'honneur
les mathématiciens qui s'inspirent de
problèmes posés par la nature
pour faire des mathématiques

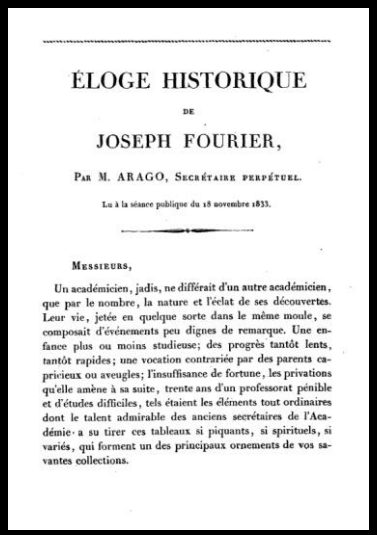
Ses séries ont inspiré les mathématiciens
jusqu'à nos jours !

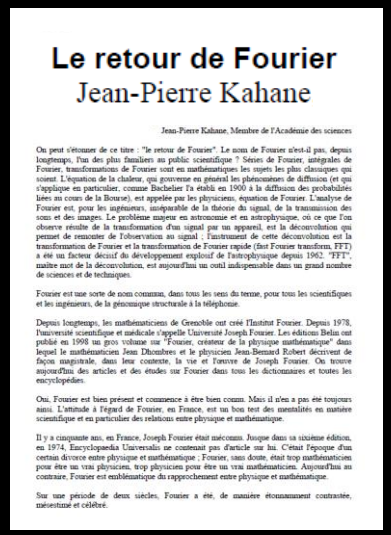
Merci de votre attention !

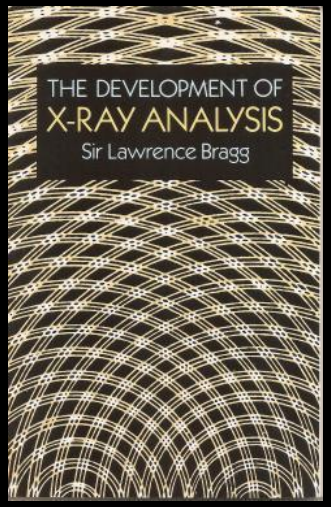
Bibliographie : Fourier, diffraction

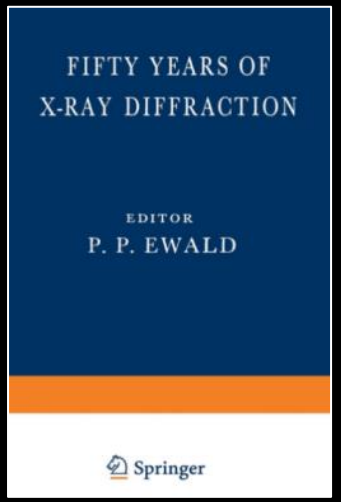


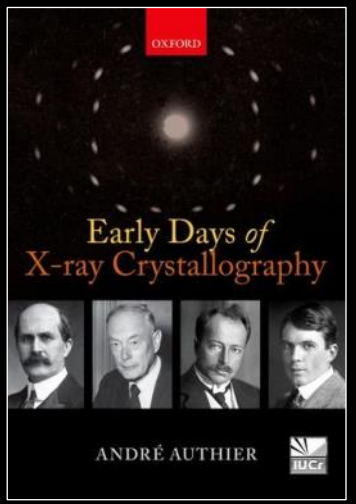


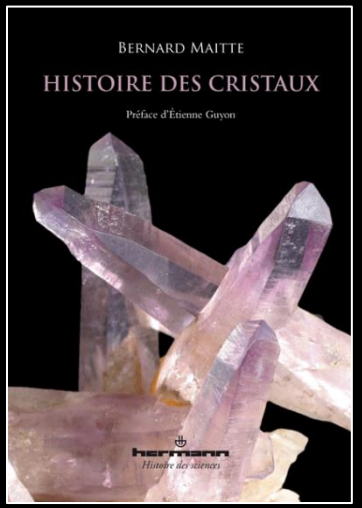




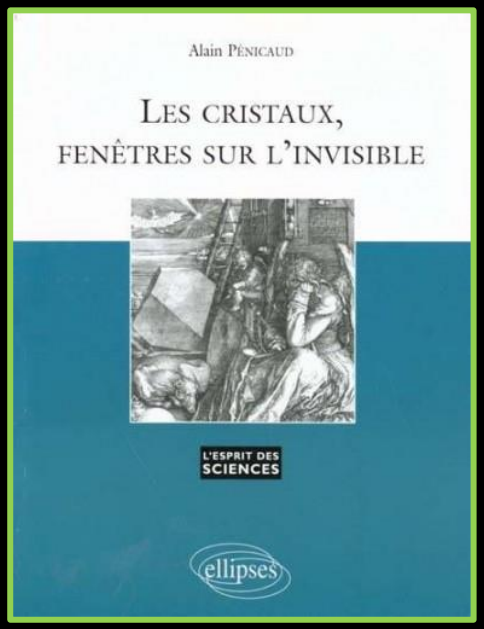


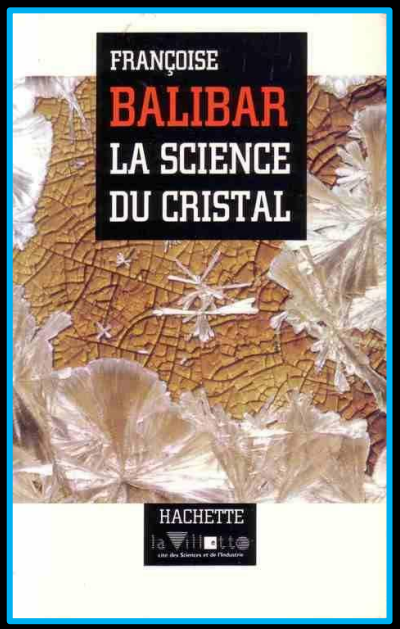


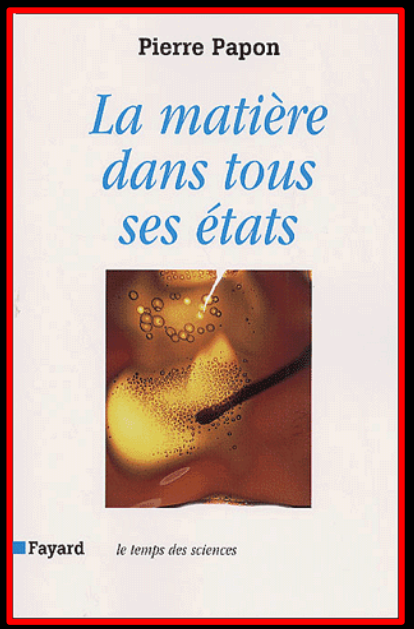
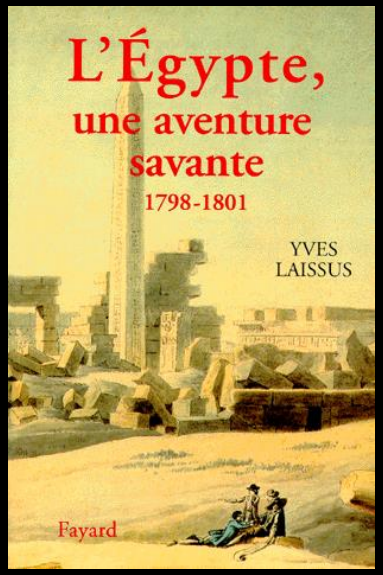
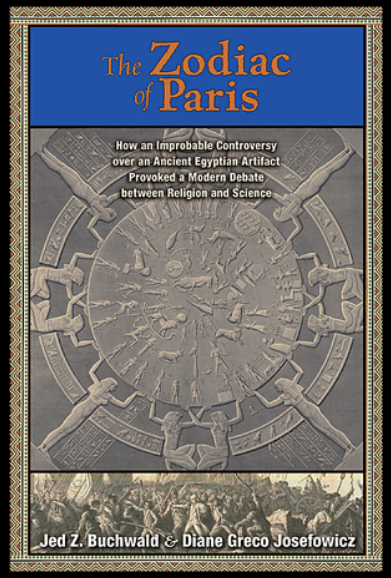
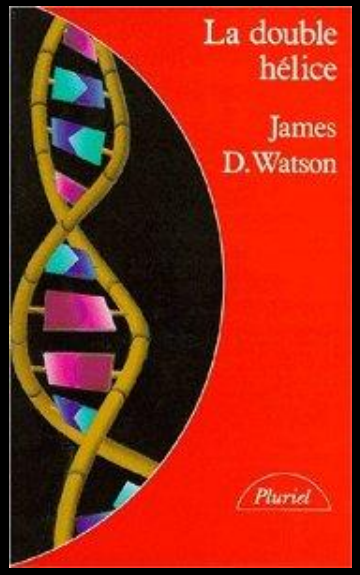
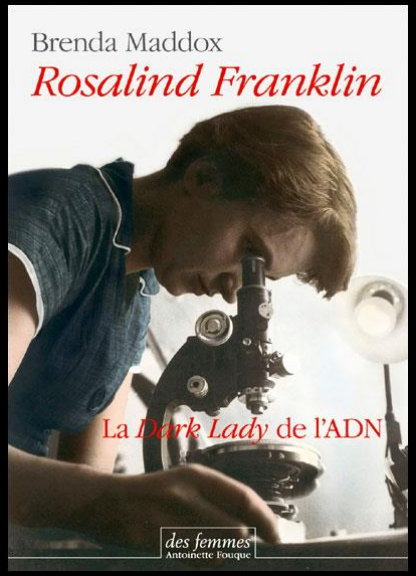
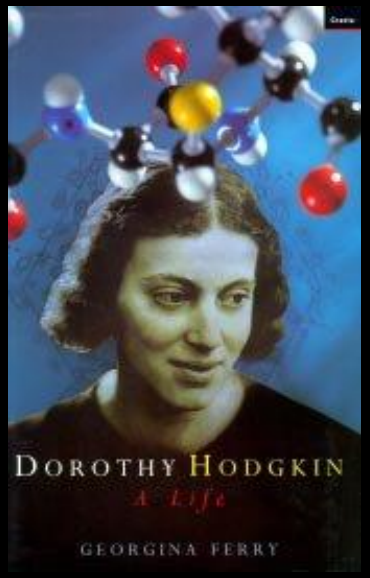




Bibliographie : cristallographie







Bibliographie : sujets spécialisés