

A Radiação de Sincrotrão e sua Utilização

Uma síntese de perspectivas; acções em Portugal

MARIA TERESA RAMOS

Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa

É hoje bem conhecido e aceite que a radiação de sincrotrão teve um enorme impacto em áreas das Ciências da natureza como a Medicina, Biologia, Bioquímica e Biofísica e também em Química, Química-Física, Ciências dos Materiais, Física Atómica, Molecular e do Estado Sólido, Catálise, etc.

A radiação de sincrotrão é radiação electro-magnética emitida por partículas carregadas, electrões ou positrões, acelerados a velocidades próximas da da luz. É produzida em anéis aceleradores com diâmetros que variam desde 30 m a cerca de 300 m e onde a energia a que as partículas são aceleradas varia de 600 MeV a 6 GeV, respectivamente, obtendo-se nestas últimas radiação emitida de menores comprimentos de onde que nas primeiras.

Nas últimas décadas, cientistas de todo o mundo desenvolveram técnicas experimentais baseadas na radiação produzida em sincrotrões, aproveitando as suas características únicas:

— Um espectro contínuo e muito intenso, desde o infravermelho até à zona dos raios X.

— Um alto grau de colimação; a divergência do feixe é tipicamente de 0.1 a 1 mm por metro.

— Polarização linear da radiação no plano do acelerador e elíptica acima e abaixo desse plano.

— Brilho (fluxo emitido por unidade de área e de ângulo sólido) muito elevado.

— Radiação pulsada, permitindo intervalos para medições com duração de 100 picosegundos.

Com radiação de sincrotrão é possível realizar estudos de Espectroscopia de raios X, como espectroscopia de absorção X, XAS, e com considerável desenvolvimento devido às características específicas desta radiação, estudos de EXAFS, XANES, SEXAFS, REFLEXAFS. Assim, têm sido realizadas análises de novos materiais como vidros e materiais cerâmicos, minerais e materiais compostos, semicondutores e também supercondutores, estudos de coordenação de compostos metálicos não cristalinos, de características técnicas de superfícies, de filmes finos, etc.

No âmbito da Física Atómica e Molecular também a radiação de sincrotrão trouxe enormes vantagens, permitindo a análise de estruturas finas até então não possíveis de detectar em instrumentos laboratoriais.

A natureza pulsada da radiação de sincrotrão permitiu realizar estudos de topografia de raios X de processos periódicos que foram sincronizados com os impulsos da radiação incidente — uma técnica designada por estroboscopia; tem importantes aplicações em estudos de monocristais de materiais utilizados na indústria electrónica.

Experiências de Espectroscopia de fotoemissão, fluorescência e de fotoelectrão são usadas para analisar a estrutura electrónica de átomos, moléculas, sólidos e superfícies. As características especiais de polarização, intensidade, brilho e variabilidade de energia do feixe, permitindo uma particular sensibilidade a superfícies, tornam a radiação de sincrotrão especialmente vocacionada para este tipo de estudos.

Difracção de raios X é uma técnica muito usada e com aplicação de importância única na determinação das coordenadas dos átomos que existem em malhas unitárias, que por repetição a três dimensões formam cristais, ou seja em estudos estruturais. Para este tipo de determinações, a elevada intensidade e colimação do feixe da radiação de sincrotrão são de importância ímpar. Em particular, estudos estruturais de moléculas complexas com muitos átomos, como proteínas, enzimas e vírus só são possíveis, nalguns casos, com radiação de sincrotrão. Por outro lado foi também possível obter difracção de microcristais, estendendo assim a possibilidade deste tipo de estudos a compostos difíceis de cristalizar. A observação da difracção magnética de raios X em materiais magnéticos — que só as características da radiação de sincrotrão tornam possível — deve o seu impacto ao facto de permitir a observação de materiais altamente absorventes para os neutrões e a separação das contribuições orbital e de spin para o momento magnético.

Uma das conquistas mais espectaculares da radiação de sincrotrão é, no entanto, a utilização da natureza pulsada da radiação para efectuar estudos em tempo real. Aplicações envolvem o método de tempo de vôo (time of flight) e também estudos de fluorescência resolvidos no tempo, sendo possível seguir reacções químicas, caracterizando intermediários instáveis e com tempo de vida muito curto. Estudos em tempo real em sólidos cristalinos ou em fibras, músculos ou outras amostras de interesse biológico, por exemplo, só são viáveis devido à natureza pulsada da radiação de sincrotrão.

Nesta altura, há na Europa, em funcionamento, sete instalações de radiação de sincrotrão: uma na Dinamarca, uma em França, três na Alemanha, uma em Itália, uma na Suíça, uma na Grã-Bretanha e duas na URSS, estando sete em fase de construção, uma em França (instalação Europeia), uma em Itália, duas na Holanda, e três na ex-URSS.

Quatro das instalações em funcionamento pleno, Daresbury na Grã-Bretanha, BESSY e

HASYLAB na Alemanha e LURE na França, estão envolvidas num projecto subsidiado pela CEE, um projecto sobre grandes instalações — LSI. Este projecto tem como objectivos melhorar as condições instrumentais nas respectivas instalações, *promovendo e financiando integralmente o acesso de grupos de novos utilizadores*, sobretudo de países periféricos como Portugal. No nosso País o número de projectos, 10, e investigadores, 20, envolvendo radiação de sincrotrão é ainda extremamente reduzido, sobretudo quando comparado com Espanha, por exemplo, onde há já mais de 200 investigadores utilizadores desta radiação.

É finalidade deste artigo sensibilizar e despertar em mais investigadores portugueses o interesse e a formalização de projectos que possam ser submetidos aos directores das quatro referidas instalações. A descrição acima dada não pretendeu ser exaustiva, mas apenas exemplificativa, de algumas das áreas e técnicas que usam com enorme vantagem a radiação de sincrotrão.

Há já, a nível nacional, uma comissão representativa dos utilizadores portugueses, constituída por:

Prof.^a Maria Teresa Ramos, Centro de Física Atómica da FCUL, Complexo II, Av. Gama Pinto, 2, 1699 Lisboa Codex, telef. 01-7950790, fax 01-7965622.

Prof. Luís Alte da Veiga, Departamento de Física da Universidade de Coimbra, 3000 Coimbra, telef. 039-23675.

Prof.^a Maria Arménia Carrondo, IST, Lisboa e CTQB, R. da Quinta Grande, 6, 2780 Oeiras, telef. 01-4426146, fax 01-4428766.

A Prof.^a M. A. Carrondo é também a representante portuguesa numa Comissão nomeada pela DGXII, para apreciação e acompanhamento do projecto LSI.

Os investigadores que pretendam obter informações sobre o acesso a este projecto deverão contactar um dos elementos desta

comissão, ou então dirigir-se directamente aos directores das quatro instalações acima referidas:

Prof. R. Gomes
Director o LURE
LURE
Bâtiment 209 D
Université Paris-Sud
91405 ORSAY Cedex
FRANCE

Prof. Dr. W. Gudat
Director BESSY
BESSY I
Lentzeallee 100
D-1000 BERLIN 33
GERMANY

Prof. G. Materlik
Director DESY-HASYLAB
Notkestr. 85
D-2000 Hamburg 52
GERMANY

Prof. J. Bordas
Head SRS Daresbury
Science & Engineering Research Council
SERC
Daresbury Laboratory
Warrington, Cheshire, WA4 4AD
U.K.

Lista de Projectos Portugueses e respectivos responsáveis

Ciências de Materiais

- «Structural difference between bridging and terminal anionic species in fluoride and oxide glasses» - BESSY (desde Setembro 1990).
- «Structural characterization of inorganic glasses by EXAFS and NEXAFS» - LURE (desde Setembro 1990).
Prof. Rui Almeida, Complexo I, IST, Lisboa.
- «Chemical bonding in minerals» - BESSY (since May 1990).
- «Coordination of Titanium in Composites» - LURE (desde Setembro 1990).
Prof. M. O. Figueiredo, IICT, Lisboa.
- «Analysis of the structure of glasses and glasses ceramics containing rare-earth oxides» - Daresbury (desde Setembro 1990).

- «Kinetics of nucleation of crystalline phase in glasses containing magnetic ions» - HASYLAB (desde 1992).

Prof. S. K. Mendiratta, Univ. Aveiro.

- «Photon and neutron scattering from magnetic materials» - Daresbury (desde Setembro 1990).

Prof. M. J. Almeida and M. M. R. Costa, Univ. Coimbra.

Análise Elementar por Espectroscopia de Raios X

- «X-ray Fluorescence analysis of high technology metals on natural materials» - LURE (desde Março 1990).

Prof. M. T. Ramos, FC, Univ. Lisboa.

Física Atómica e Molecular

- «Determination of the Auger α_2 parameters for the krypton transitions $M_{45}N_1$, N_{23} , 3p_1 and 3p_2 » - BESSY (desde 1991).

Prof. J. P. Ribeiro, FC, Univ. Lisboa.

- «Inner shell excitation and soft X-rays induced dynamics of isolated molecules. Experiment and theory» - LURE (desde 1991).

Prof. I. Nenner, LURE e L. F. Aurélio Ferreira, FC, UL, Lisboa.

- «The structure of the first coordination shell of the yttrium ion in concentrated aqueous solutions of YBr_3 and YCl_3 » - LURE (desde 1990).

Prof. M. Alves Marques, Complexo II, IST, Lisboa.

Cristalografia de Proteínas

- «Structural studies of iron-sulphur proteins» - Daresbury (desde Setembro 1990).

- «Three-dimensional structures of some cytochromes c_3 » - DESY/HASYLAB (desde 1992).

Prof. M. A. Carrondo, CTQB, IST, Lisboa.

- «Structural studies of mutants of human transthyretin» - Daresbury (desde 1991).

Prof. A. M. Damas, Instituto Abel Salazar, Porto.

Cristalografia de Micro-cristais

- «Structural studies of unidimensional conductors» (desde 1991).

Prof. M. T. Duarte, CQE, IST, Lisboa.