



El sincrotró ALBA i les seves aplicacions

Jordi Benach (jbenach@cells.es)

IEC 27 octubre 2010



El sincrotró ALBA

Aplicacions

La radiació electromagnètica = llum







Per observar els detalls d'un objecte, la longitud d'onda de la "llum" ha de ser menor que la mida dels detalls que volem observar,

 λ < menor que els detalls



La font lluminosa ha de ser prou intensa

La llum visible (λ entre 300 nm i 700 nm) és suficient per als objectes usuals: Amb un microscopi podem observar objectes més grans que 1 μ m

Però això no és suficient per a objectes més petits, com molècules o àtoms -> necessitem raigs X ($\lambda \sim 1$ Á ó 0.1 nm)

Degut a que la velocitat de la llum no és infinita, quan una càrrega canvia la seva velocitat, genera una pertorbació en el **camp elèctric**. Com que una càrrega que es mou genera també un **camp magnètic**. El vector de **Poynting és diferent de zero** i es genera un flux d'energia o radiació.







La **potència** total emesa per una càrrega total al ser accelerada.

càrrega accelerada NO relativista





càrrega accelerada relativista

$$P = \frac{e^2}{6 \pi \varepsilon_0 c} \gamma^6 \left[\dot{\beta}^2 - \left(\beta \times \dot{\beta} \right)^2 \right]$$

$$v = 0.99 \cdot c$$

Distribució espacial de la radiació: Concentrada en la direcció frontal

$$\beta = \frac{v}{c} \qquad \dot{\beta} = \frac{a}{c}$$

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} = \frac{E}{E_0}$$

(factor de Lorentz) A ALBA

 $\beta = 0.999999855$

$$\gamma = 5870$$



 $\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$





Neix el concepte de sincrotró



Obtenim raigs X enlloc d'ones de ràdio a causa dels efectes Doppler i relativistes



Alba accelera els electrons a 3 GeV, quan passen per un imant de curvatura de 1 Tesla generen fotons de:

$$E_c = 5.985 \ keV$$
 o

 $\lambda_c = 2.1 \text{\AA}$ (raigs X)

Podem obtenir raigs encara més intensos amb una sèrie d'imants permanents















Polaritzada linealment en el pla de l'òrbita i es pot manipular amb el dispositius d'inserció





Alt flux i brillantor

Ampli rang de longituds d'ona

La polarizació és definida i adjustable

Estructura temporal































Linac: 100 MeV a 3 GHz







Acceleració inicial (Linac)

Per accelerar a altes energies ja no podem fer servir voltatge constant
 Hem d'anar a voltatges d'alta freqüència: 500 MHz – 3 GHz

Sincronitzar el pas dels electrons amb el pic de l'ona del camp elèctric



Cavitat de RF (semblant a un microones)

 $\mathbf{F}(\mathbf{t}) = \mathbf{q} \ \mathbf{E}(\mathbf{t})$



El sincrotró ALBA

Acceleració inicial (Linac): discretitza els electrons





LINAC: de 0.1 a 100 milions de volts en 10 m

v de 60% a 99.998% de c

El sincrotró ALBA ALBA

Acceleració inicial (Linac)









Anell propulsor (Booster)



BOOSTER: 100 MeV a 3 GeV

v de 99.998% a 99.9999855% de c

- Accelerador circular
- RF per augmentar l'energia
- Imants per mantenir els electrons circulant







Anell propulsor (Booster)









Anell d'emmagatzematge



Centenars de bombes iòniques mantenen un buit de 10⁻¹⁰ mbar

B El sincrotró ALBA 32 dipols (1.42 T)

128 quadrupols de 500 mm



120 sextupols de 150 mm,

més de 100 correctors











6 estacions de ràdiofreqüència per a l'anell d'emmagatzament



Anell d'emmagatzematge











> 60 sincrotrons arreu del món !














Aplicacions: 7 línies inicials

Port	Línia (FL)	Tècniques experimentals	Aplicacions científiques
4	MSPD (SCW-30)	Ciència de materials i difracció de pols / Altes pressions	Estructura atòmica de materials, difracció amb resolució temporal
9	MISTRAL (BM)	Microscòpia de raigs X	Tomografia criogènica de mostres biològiques. Espectroscòpia amb resolució espacial.
11	NCD (IVU-21)	Difracció no cristal·lina	Estructura i transformació de fase de fibres biològiques, polímers, macromolècules i solucions.
13	XALOC (IVU-21)	Cristal·lografia macromolecular	Estructura atòmica de proteïnes o ADN o els seus complexos.
22	CLÆSS (MPW-80)	Espetroscòpies d'absorció i d'emissió	Estructura atòmica de materials, difracció amb resolució temporal. Reaccions químiques
24	CIRCE (EU-62)	Microscòpia i espectroscòpia de fotoemissió (PEEM) i a prop de pressions atmosfèriques (NAPP)	Nanociència i visualització de dominis magnètics (PEEM) o química de superfícies (NAPP).
29	BOREAS (EU-71)	Dicroisme magnètic (XMCD/XMLD) i dispersió ressonant	Magnetisme: magnetisme de superfícies i estructura magnètica.



Aplicacions: Difracció de pols

La tècnica que emprem en aquesta línea és la difracció de raigs X





Aplicacions: Difracció de pols

Estudi d'una bateria de Li_{1-x}Mn₂O₄

- Estructura tipus "spinel" de Li_{1-x}Mn₂O₄ (vàries valències: Mn³/Mn⁴⁺) i que inclou altres fases.
- Li₁₋₀ bateria buida (descarregada), el Li és al càtode
- Li₁₋₁ bateria plena (carregada), el Li és a l'ànode
- Preguntes:
 - Què passa amb l'estructura de la bateria durant la càrrega/descàrrega?

- Hi ha degradació de l'estructura interna de la bateria durant varis cicles de càrrega/descàrrega?

- Hi ha fases que destrueixen la matriu de la bateria (la matriu és l'encarregada d'emmagatzemar els electrons) i que per tant s'han d'evitar/suprimir?

- Reversibilitat? Estudis de "doping" o dopatge, estequiometria.

- La mesura de difracció de pols es realitza en transmissió amb una cel.la (que conté la bateria) dissenyada específicament per a l'experiment. Absorció d'alta energia, 10-15 minuts per patró de difracció.
- Podríem fer el mateix amb bateries comercials?



El procés de càrrega i descàrrega d'una bateria Li-ió



Aplicacions: Difracció de pols

Difractograma *in situ* de Li_{1-x}Mn₂O₄ en la cel·la



Design and performance of an electrochemical in-situ cell for high resolution full-pattern X-ray powder diffraction C. Baehtz, Th. Buhrmester, N.N. Bramnik, K. Nikolowski, H. Ehrenberg Solid State Ionics 176 (2005) 1647 – 1652

























































Aplicacions: Difracció de pols

Seqüència de fases (A,B,C) en Li_xMn₂O₄

- L'estudi demostra que hi ha una fase (C) que s'ha d'evitar (amb dopatge) per a que la bateria funcioni òptimament





Aplicacions: Microscòpia de raigs X



Reconstrucció tomogràfica de raigs X de partícules del virus vaccinia mesurades amb una placa de zona de 25 nm. (a) Tall oblic extret d'un tomograma. La barra d'escala representa 1 μ m. (b) Talls centrals de subvolums extrets del tomograma, cadascun conté una partícula viral diferent. Detalls de l'interior del virus son visibles. La barra representa 300 nm.

Carrascosa JL, Chichón FJ, Pereiro E, Rodríguez MJ, Fernández JJ, Esteban M, Heim S, Guttmann P, Schneider G. J Struct Biol. 2009 Nov;168(2):234-9.



Aplicacions: Difracció no cristal.lina

Canvis estructurals causats a una proteïna per un lligand





Nature Methods - 1, 188 - 189 (2004) PROTEIN BIOCHEMISTRY X-ray vision reveals conformational changes Michael Eisenstein

Aplicacions: Difracció no cristal.lina



Estudi dels músculs



La difracció de raigs X a baixos angles ens proporciona informació a baixa resolució, amb la qual podem reconstruir el moviment a nivell atòmic de les proteïnes que formen els músculs.

Juanhuix J, Bordas J, Campmany J, Svensson A, Bassford ML, Narayanan T. Biophys J. 2001 Mar;80(3):1429-41.





 $\frac{1}{V}\sum_{hkl}F(hkl)\exp[-2\pi i(hx+ky+lz)] = \rho(xyz)$



densitat electrònica de la macromolècula

centenars d'imatges de difracció



imatge tridimensional de la macromolècula

Amb l'estructura 3D de les macromolècules podem estudiar la vida a nivell atòmic/molecular





Exemple: replicació de l'ADN









ABBOTT's Aluviran (Lopinavir®) Inhibidor proteasa VIH

Aluviran (núvol blau)

Proteasa del VIH



SHAM et al. ANTIMICROBIAL AGENTS AND CHEMOTHERAPY, Dec. 1998, p. 3218–3224

^a Values represent the mean of at least three determinations.
Soques del VIH resistent a l'Aluviran



NOVARTIS's Aliskiren (Tekturna®): inhibidor renina

Molts medicaments controlen la pressió arterial interferint l'activitat de l'angiotensina o la secreció d'aldosterona Aliskiren és el primer medicament que inhibeix directament la renina

Però si s'usen sovint, el cos augmenta la producció de renina.

Renin-angiotensin-aldosterone system



Inicialment, a partir del substrat endogen de la renina que és un pèptid (**D-R-V-Y-I-H-P-F-H-L-V-I-H-** ...) es desenvolupa el compost CGP38560 com a possible fàrmac inhibidor de la renina.



Però CGP38560 és retirat de la fase d'assaigs clínics per que:

- l'absorció oral és molt baixa (< 1%)
- la secreció biliar (o expulsió del cos) és massa ràpida (el compost té una vida mitja de només 7 min en el cos).



Interacció i conformació de CGP38560 amb la renina

Per a trobar un nou compost/medicament es va utilitzar el modelatge 3D i "docking", i es va poder identificar el complex reninainhibidor més estable.



A partir de l'estructura 3D se n'obtenen les característiques que ha de tenir un nou possible medicament/inhibidor de la renina.



Enzyme	IС ₅₀ (пм)	<u> </u>
Renin Cathepsin D Cathepsin E Pepsin HIV-1 peptidase	0.6 5000 >10 000 >10 000 >10 000	

Després d'optimitzar el compost, s'obté el medicament Tekturna:



Tekturna©: Tractament hipertensió FDA aprovat el 2007 \$50 millions en 2008 (Trading Markets, 2009)

Cohen NC. Chem Biol Drug Des 2007; 70: 557-565









Els raigs X poden analitzar els materials capa per capa:





Exemple d'EXAFS





Automoció: medi ambient



Aglomeració és la responsable principal de la desactivació dels convertidors catal·lítics (TWC)



Estudi dinàmic i *in situ* via l'absorció de raigs X en fluorescència



Y. Nagai *et al.*, *Angew. Chem., Int. Ed.,* 47, 9306 (2008). Y. Nagai *et al.*, *Catalysis Today* (2009).

Indústria petroquímica: epoxidació de propil.lè



Medi ambient: partícules d'urani alliberat a Xernòbil







canals - productes de fisió volàtils



Salbu et al., JER 64, 167-173 (2003).





Medi ambient: fito-remediació o extracció de la contaminació del sol



Stanford Synchrotron Radiation Laboratory



Art: conservació d'un manuscrit de l'any 1769



L'anàlisi per microfluorescència permet distingir les diferents tintes utilitzades. Aquesta informaci és valuosa per establir el mètode de conservació dels documents històrics.



Aplicacions: Microscòpia i espectroscòpia de fotoemissió



Aplicacions: Microscòpia i espectroscòpia de fotoemissió

Com podem fabricar un transistor d'espín?

- lectors de discs durs molt més petits i segurs
- utilitzar l'espín electrònic per a guardar informació (MRAM) enlloc de la càrrega

Transicions de fase en films de MnAs sobre GaAs (100): α -hexagonal ferromagnètic a β -ortoròmbic paramagnètic fase per sobre de 40°C



Aplicacions: Microscòpia i espectroscòpia de fotoemissió

Medi ambient: com es comporten les gotes del mar? d'on surt la pluja àcida? com podem estudiar la química de l'atmosfera?









Quan es forma una gota, s'ha detectat que els ions bromur es concentren fins a 3 vegades que en la dissolució (exemple: gotes produïdes per una ona al mar).



Els raigs X polaritzats es poden utilitzar per a caracteritzar materials magnètics i els seus dominis.

Els materials ferromagnètics es caracteritzen amb llum poralitzada circularment (dreta o esquerra) i els antiferromagnètics amb llum polaritzada linerarment (horitzontal o vertical).

raigs X polaritzats

Elliptically and Circularly Polarized Light Waves



Circular Dichroism - Ferromagnets

Photon Energy (eV)

Linear Dichroism - Antiferromagnets



Spin and Orbital Moments: X-Ray Magnetic Circular Dichroism



La magnetoresistència gegant



La informació avui en dia l'escribim amb bits magnètics

<section-header>

Els discs durs estan basats en la

magnetoresistència gegant

(Photo: IBM hard disk drive)



SYNCHROTRON X-RAYS USED FOR MAGNETIC ANALYSIS AND IMAGING IN NANOTECNOLOGY: XMCD SPECTROSCOPY AND XMCD-MICROSCOPY (X-PEEM) (Stohr, Sholl et al, ALS, Berkeley)



El somni de la nanotecnologia són els bits atòmics.



Com funcionen els capçals dels discs durs?

Direct observation of the alignment of ferromagnetic spins by antiferromagnetic spins

F. Nolting*, A. Scholl*, J. Stöhr \dagger , J. W. Seo \ddagger , J. Fompeyrine\$, H. Siegwart\$, J.-P. Locquet\$, S. Anders*, J. Lüning \dagger , E. E. Fullerton \dagger , M. F. Toney \dagger , M. R. Scheinfein \parallel & H. A. Padmore*

Nature, 405 (2000), 767.

Figure 1 Images and local spectra from the antiferromagnetic and ferromagnetic layers for 1.2-nm Co on LaFeO₃/SrTiO₃(001). **a**, Fe L-edge XMLD image; **b**, Co L-edge XMCD image. The contrast in the images arises from antiferromagnetic domains in LaFeO₃ (**a**) and ferromagnetic domains in Co (**b**) with in-plane orientations of the antiferromagnetic axis and ferromagnetic spins as indicated below the images. The spectra shown underneath were recorded in the indicated areas and illustrate the origin of the intensity contrast in the PEEM images.

Capa LaFeO₃ XMLD Fe L₃

Capa Co XMCD Co L₃/L₂

800





Gràcies!