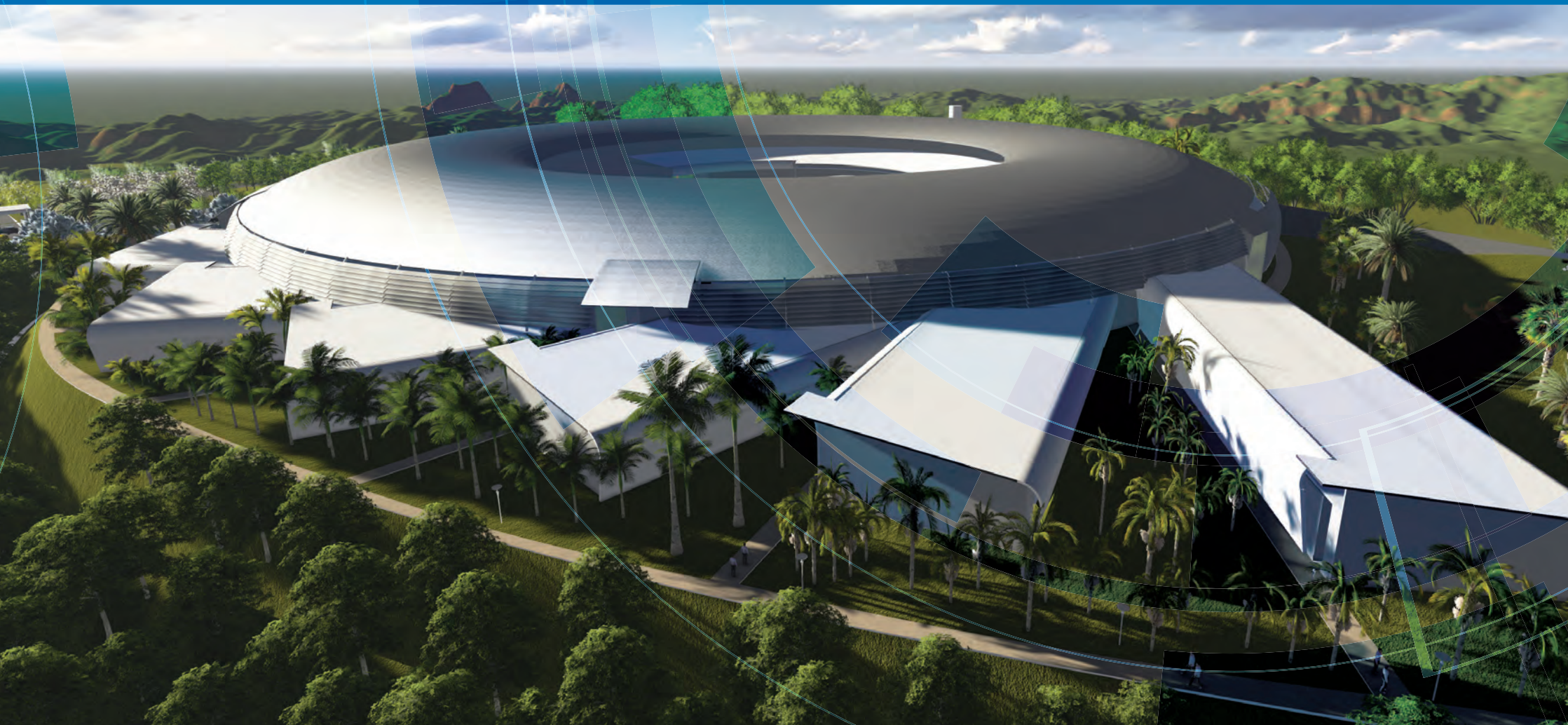




# Projeto Sirius

a nova fonte de luz síncrotron brasileira



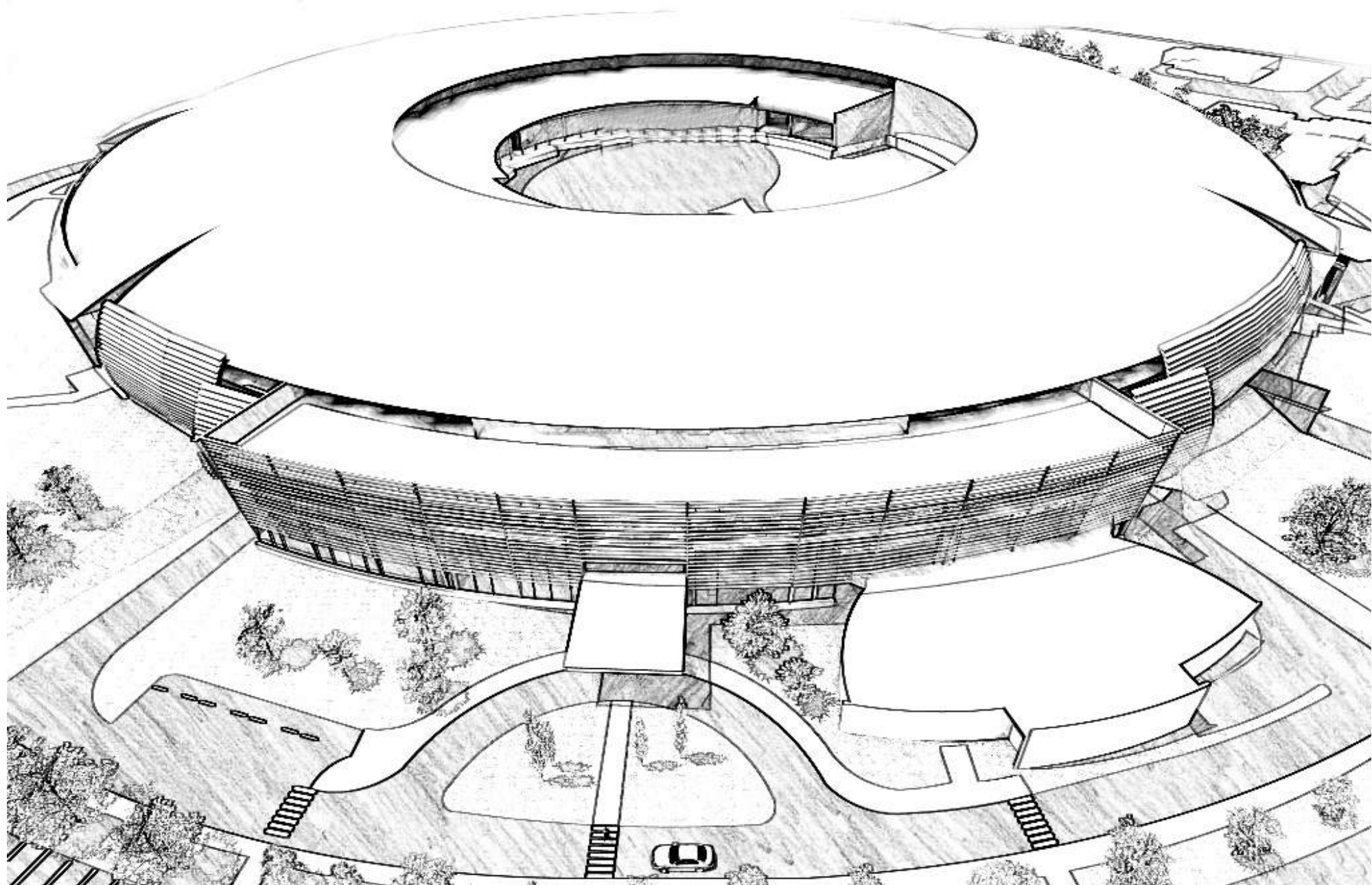
[Inls.cnpem.br/sirius](https://Inls.cnpem.br/sirius)



# Projeto Sirius

a nova fonte de luz síncrotron brasileira









# Índice

<b>Sumário executivo</b>	<b>07</b>
<b>Capítulo 1 - Grandes desafios na economia e no conhecimento</b>	<b>08</b>
CNPEM: ciência, tecnologia e inovação na fronteira do conhecimento	10
Laboratório Nacional de Luz Síncrotron em números	12
Instalações abertas e multidisciplinares	13
Linha do tempo do LNLS	14
Sirius: a estrela mais brilhante	16
Aplicações de uma fonte de luz síncrotron	18
<b>Capítulo 2 - Ferramentas para desvendar a matéria</b>	<b>20</b>
Linha do tempo dos síncrotrons	21
Como funciona uma fonte de luz síncrotron	22
Linhas de luz	27
<b>Capítulo 3 - Sirius: mais brilho para a ciência e tecnologia brasileiras</b>	<b>28</b>
Fonte de luz síncrotron	29
Linhas de luz do Sirius	44
Edificações	62
Gerenciamento e execução	82
<b>Capítulo 4 - Sirius: benefícios para a ciência em áreas estratégicas</b>	<b>96</b>
Agricultura	97
Energia	103
Saúde	114
Referências	121

## Ministério da Ciência, Tecnologia e Inovação

Clélio Campolina Diniz  
*Ministro da Ciência, Tecnologia e Inovação*

Alvaro Toubes Prata  
*Secretário Executivo*

### Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais - CNPEM

#### Conselho de Administração do CNPEM

Pedro Wongtschowski  
*Presidente*

Amir Ordacgi Caldeira

Bernardo Afonso de Almeida Gradin

Edmundo José Correia Aires

Emílio Kazunoli Matsuo

Jailson Bittencourt de Andrade

João Fernando Gomes de Oliveira

José Ellis Ripper Filho

José Fernando Perez

Luis Roberto Pogetti

Mariano Francisco Laplane

Pedro Antonio Arraes Pereira

Reginaldo dos Santos

Rodrigo Villares Portugal

Vanderlei Salvador Bagnato

Rogério Cezar de Cerqueira Leite  
*Presidente Honorário do CNPEM*

Kleber Gomes Franchini  
*Diretor-Geral Pro tempore do CNPEM*

Antonio José Roque da Silva  
*Diretor do LNLS*

#### Estrutura Executiva do Projeto Sirius

Antonio José Roque da Silva  
*Diretor do Projeto*

Antonio Ricardo Droher Rodrigues  
*Coordenador dos Aceleradores*

Harry Westfahl Jr.  
*Coordenador das Linhas de Luz*

Oscar Horácio Vigna Silva  
*Coordenador das Obras Civas*

Cleonice Ywamoto  
Marcelo Moreira Xavier  
Roberta Paschoal Gomes Marino  
*Equipe de Gestão*

#### Edição e Revisão

Luciana Noronha Cintra de Oliveira  
Maria Livia Conceição M. R. Gonçalves  
Viviane de Tella

#### Design Gráfico

William Barbosa

#### Agradecimentos à equipe do LNLS e a todos que colaboraram para a elaboração deste documento

Afonso Haruo Carnielli Mukai, Alexandre Magnus Gomes Carvalho, Alvaro Cerone Rosa, Ana Carolina de Mattos Zeri, Andre Luis Berteli Ambrosio, Bernd Meyer, Carlos Alberto Perez, Claudia Izique, Claudio Pardine, Cleber Rodrigues, Cristiane Barbieri Rodella, Dalton Belchior Abdala, Daniela Coelho de Oliveira, Douglas Galante, Eduardo Miqueles, Fabio Arroyo, Fabio Roberto Zambello, Fatima Sandra Marques Hollanda, Fernando Henrique Cardoso, Fernando Henrique de Sá, Flavio Cesar Vicentin, Florian Edouard P. Meneau, Frederico Alves Lima, Guilherme Franco, Helio Tolentino, James Citadini, James Rezende Piton, Jean Rinkel, Joacir Edmir dos Santos, João Roberto Costa, Julio Criginski Cezar, José Antonio Calzavara Lemos, Leide Passos Cavalcanti, Liu Lin, Lucas Sanfelici, Marco Guarise, Marília Lisboa de Oliveira, Mario Tyago Murakami, Mateus Borba Cardoso, Milton Cesar Rocha, Narcizo Marques de Souza Neto, Natalia Milas, Osmar Roberto Bagnato, Rafael Molena Seraphim, Raul de Oliveira Freitas, Regis Terenzi Neuenschwander, Renato Marcondes, Roberta Santarosa, Roberto Madacki, Roberto Medeiros, Ruy Hanazaki do Amaral Farias, Santiago Jose Alejandro Figueroa, Sergio Rodrigo Marques, Tulio Costa Rizuti da Rocha, Vesna Stanic, Walter Marchesini Junior e Ximenes Rocha Resende.

Campinas, outubro de 2014

# Sumário executivo

Sirius, a nova fonte de luz síncrotron brasileira, será a maior e mais complexa infraestrutura científica já construída no País. É planejada para colocar o Brasil na liderança mundial de geração de luz síncrotron e foi projetada para ter o maior brilho dentre todos os equipamentos na sua classe de energia.

Sirius será composto por um conjunto de aceleradores de elétrons, por estações experimentais, chamadas de linhas de luz, e por um prédio que abrigará todo esse complexo. Com 68.000 m<sup>2</sup>, o prédio estará entre as obras civis mais sofisticadas já construídas no País. As exigências de estabilidade mecânica e térmica são sem precedentes, desafiando a engenharia brasileira. Os aceleradores foram projetados com novos conceitos ainda não utilizados no mundo.

E para que serve toda essa infraestrutura? Serve como ferramenta fundamental em praticamente todas as áreas do conhecimento. Fontes de luz síncrotron são equipamentos de grande porte, geralmente instalados em laboratórios nacionais ou internacionais, abertos para uma grande comunidade de pesquisadores. Esses equipamentos produzem luz de amplo espectro (infravermelho, ultravioleta e raios X) e permitem o estudo da matéria em suas variadas formas. Trata-se da ferramenta experimental com o maior número de aplicações e de maior impacto sobre o conhecimento e desenvolvimento de materiais.

Os desafios estratégicos que o Brasil e o mundo enfrentam, ligados à busca por soluções para problemas nas áreas de energia, saúde, alimentação e meio ambiente, dentre outros, exigem desenvolvimentos científicos e tecnológicos cada vez mais sofisticados. Ações multidisciplinares, que envolvem áreas potencialmente promissoras, como biotecnologia e nanotecnologia, são essenciais para a solução desses desafios.

Os avanços do conhecimento e da inovação para a análise desses problemas demandam soluções na escala dos átomos e das moléculas. O desenvolvimento de materiais mais leves e resistentes, melhores fármacos, equipamentos de iluminação mais eficientes e econômicos, fontes de energia renováveis, equipamentos menos poluentes demanda o conhecimento de como as coisas funcionam na escala atômica.

Investigações nesta escala requerem ferramentas científicas especiais como o síncrotron, que funciona como um grande e sofisticado microscópio e permite enxergar diversos materiais, sejam eles orgânicos ou inorgânicos. O Sirius será construído para disponibilizar para as comunidades acadêmica e industrial brasileiras o melhor que esse tipo de equipamento tem a oferecer.

Todos os países com economias fortes e tecnologicamente avançados, como Estados Unidos, Canadá, França, Inglaterra, Alemanha,

Suécia, China, Japão, Coreia, dentre outros, possuem um ou mais síncrotrons. Esses países têm cada vez mais investido em fontes de luz síncrotron sofisticadas, em uma constante corrida para manter a competitividade dos seus sistemas de inovação.

A fonte Sirius será operada de forma aberta, em um Laboratório Nacional, possibilitando um enorme ganho de escala e permitindo que centenas de pesquisas acadêmicas e industriais sejam realizadas anualmente, por milhares de pesquisadores, nas mais variadas áreas do conhecimento.

O Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), vinculado ao Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM), opera, desde 1997, a primeira fonte de luz síncrotron do Hemisfério Sul, uma máquina de 2ª geração, totalmente projetada e construída no Brasil. O projeto Sirius, da mesma forma, está sendo desenvolvido pelo LNLS de modo a assegurar uma grande participação de empresas nacionais na fabricação de seus componentes.

O projeto Sirius será descrito em detalhes neste documento, assim como vários exemplos de pesquisas realizadas em outros síncrotrons de alto brilho nas áreas estratégicas de agricultura, energia e saúde.

Serão também apresentados os projetos técnico-executivos dos aceleradores, linhas de luz e obras civis, que ilustram a complexidade do projeto e seus exigentes requisitos técnicos. Esses projetos foram validados por um comitê internacional especializado na tecnologia síncrotron, o que demonstra a existência, no País, de competência instalada para projetar e construir tal equipamento.

O cronograma do projeto prevê o primeiro feixe de luz síncrotron para junho de 2017. O custo total, de U\$ 585 milhões, é extremamente competitivo quando comparado com o custo de outros projetos como, por exemplo, o síncrotron sueco MAX-IV – em construção, e semelhante ao Sirius –, de aproximadamente U\$ 650 milhões, e ao recém-concluído síncrotron norte-americano NSLS-II – maior que o Sirius em tamanho, mas com menor brilho e menos linhas de luz no início da operação –, com custo em torno de U\$ 900 milhões.

O esforço realizado nos anos 80 e 90 para construção do primeiro síncrotron brasileiro será comprometido se o País não se atualizar, por meio de um projeto nacional que permita prover a sua comunidade científica e tecnológica de uma fonte de luz de última geração.

Mais importante ainda, os investimentos no Sirius permitirão ao Brasil manter a sua competitividade nas próximas décadas em áreas estratégicas como nanociência, biologia molecular estrutural – base para o desenvolvimento de fármacos – materiais avançados e energias alternativas, dentre várias outras.



# Grandes desafios na economia e no conhecimento



Saúde



Água



Energia



Meio Ambiente



Agricultura



Sociedade

*A evolução sustentável da humanidade exige a solução de vários desafios. O papel da ciência é fundamental para enfrentar esses problemas, que necessitam de uma abordagem multidisciplinar e ferramentas especiais*

A humanidade se depara hoje com um conjunto de grandes desafios cujas soluções são fundamentais para sua evolução sustentável. São necessárias respostas para questões relacionadas a saúde global, água potável, energia, meio ambiente, mudanças climáticas e alimentação para uma população mundial já acima de 7 bilhões e com uma perspectiva de atingir 11 bilhões até o final do século.

Diversas áreas da ciência e tecnologia estão envolvidas na solução desses problemas, com uma abordagem multidisciplinar. São cada vez mais necessárias pesquisas para o desenvolvimento de:

- novos remédios, vacinas e técnicas avançadas de diagnóstico, tratamento e prevenção;
- novas maneiras de obter água potável, como dessalinização, despoluição e saneamento;
- novas fontes de energias renováveis e mecanismos para o consumo mais eficiente de energia;
- processos industriais menos poluentes, materiais recicláveis, remoção de gases ligados ao efeito estufa;
- melhores fertilizantes, alimentos mais nutritivos, aumento de produtividade agrícola.

Esses são somente alguns exemplos de áreas de pesquisa que exigem esforços e o trabalho conjunto de físicos, químicos, biólogos, médicos, engenheiros, agrônomos e outros profissionais para desenvolver melhores materiais e processos. Assim, as soluções para

um futuro sustentável do Brasil e do mundo exigem ações de investimento em recursos humanos qualificados, ciência, tecnologia e inovação e infraestrutura científica.

Os países têm também grandes desafios econômicos. Em um contexto mundial em que a competitividade econômica de um país está cada vez mais atrelada à sua capacidade de gerar conhecimento e tecnologia, o investimento em infraestruturas científicas singulares pode ser determinante. Esta ideia encontra correspondência na declaração do presidente norte-americano Barack Obama, durante discurso proferido na National Academy of Sciences: **“a nation’s potential for scientific discovery is defined by the tools that it makes available to its researchers”**.

Para enfrentar os atuais desafios sociais e econômicos, áreas estratégicas como nanotecnologia, biotecnologia, óleo e gás, energias alternativas, novos materiais e agricultura necessitam cada vez mais de ferramentas que permitam investigar a estrutura da matéria em seu nível mais fundamental, o nível atômico. As novas fronteiras do conhecimento trazem a escala do átomo para a realidade da engenharia, promovendo o desenvolvimento de tecnologias e de novos produtos para o mercado e para a solução dos grandes problemas da humanidade.

O domínio das ferramentas científicas usadas para investigar o nível fundamental da matéria tem impacto direto sobre o nível de inovação e de desenvolvimento de uma nação. Ferramentas como essas

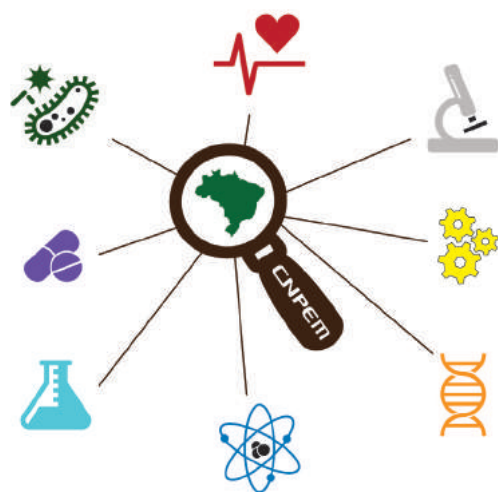
são, portanto, indispensáveis para os países que buscam melhorias sociais e um lugar de destaque na economia mundial.

No contexto brasileiro, é importante que as diretrizes políticas em prol da inovação estimulem a criação de infraestruturas científicas de ponta, que operem de forma aberta e estejam disponíveis para a comunidade acadêmica e para os setores produtivos de agricultura, indústria e serviços, permitindo a análise de materiais nas suas mais variadas formas.

O projeto Sirius é exatamente esse tipo de infraestrutura. Sirius será uma fonte de luz síncrotron de 4ª geração, projetada para ter a melhor performance mundial na sua classe de energia, permitindo ao Brasil atuar de forma competitiva na solução de seus próprios desafios.



*Inter-relação entre evolução do conhecimento, recursos humanos qualificados e infraestruturas científicas – pilares para a solução de grandes desafios científicos e tecnológicos*



*Ferramentas científicas disponíveis hoje para enfrentar os desafios da humanidade. O CNPEM, por meio de seus laboratórios, atua no desenvolvimento de ciência e tecnologia de ponta em busca de soluções para esses problemas*

**Luz síncrotron é um tipo de radiação eletromagnética que permite a observação da estrutura interna dos materiais. Ela é emitida por elétrons em velocidade próxima à da luz quando a sua trajetória é desviada por um campo magnético. Essa emissão ocorre em um amplo espectro, que compreende desde o infravermelho até os raios X.**



*Porta-amostras da estação experimental dedicada à cristalografia de macromoléculas (linha de luz MX2), instalada no síncrotron UVX e atualmente em operação no LCLS*



## CNPEM: ciência, tecnologia e inovação na fronteira do conhecimento



*Vista aérea do campus do Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais, CNPEM*

O Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS) é um dos Laboratórios que integram o Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM), uma Organização Social qualificada pelo Ministério da Ciência, Tecnologia e Inovação (MCTI), voltada para a realização de pesquisas científicas complexas, em áreas do conhecimento que impulsionam o desenvolvimento da economia contemporânea.

Instalado no Polo II de Alta Tecnologia de Campinas, o CNPEM possui quatro laboratórios de referência, abertos à comunidade científica e empresarial: o Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), o Laboratório Nacional de Biociências (LNBio), o Laboratório Nacional de Ciência e Tecnologia do Bioetanol (CTBE) e o Laboratório Nacional de Nanotecnologia (LNNano).

Os laboratórios integrantes do CNPEM cobrem áreas essenciais para o desenvolvimento da pesquisa brasileira. Biotecnologia, nanotecnologia e o fomento à economia verde (por meio do desenvolvimento de combustíveis renováveis) foram considerados “fronteiras para a inovação” pelo Governo Brasileiro, de acordo com o documento “Estratégia Nacional de C,T&I” para o período de 2012 a 2015. Organizado pelo MCTI, o documento aponta as ações eleitas como as mais importantes para a economia.

Os quatro laboratórios nacionais mantêm, ainda, projetos próprios de pesquisa e participam da agenda transversal de investigação coordenada pelo CNPEM, que articula instalações e competências científicas em torno de temas estratégicos. Outro aspecto relevante dos laboratórios nacionais operados pelo CNPEM é que eles criam condições para integrar pesquisadores e centros de pesquisa do Hemisfério Sul, em projetos científicos e tecnológicos promissores, possíveis em ambientes singulares como os encontrados no campus do CNPEM.

Quatro eixos de atuação guiam os objetivos e atividades desenvolvidas no Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais. O 1º eixo refere-se à manutenção e operação de instalações abertas de alta complexidade tecnológica, com a finalidade de atender pesquisadores qualificados e de promover suas produções técnico-científicas.

O 2º eixo está relacionado à missão de ser um centro científico e tecnológico de classe mundial, por meio da realização de projetos e atividades de pesquisa básica e aplicada e do desenvolvimento experimental, definidos internamente ou por diferentes instâncias governamentais. Seu objetivo é a produção científica por meio de publicações, patentes, relatórios técnicos e protótipos, dentre outros.



O 3º eixo refere-se à missão de contribuir para a promoção da inovação nos setores da agricultura, indústria e serviços, por meio de cooperações em pesquisa e desenvolvimento, transferência de tecnologias e materiais, prestação de serviços tecnológicos e fornecimento especializado.

Por fim, o 4º eixo determina a realização de cursos, eventos, treinamentos e outras ações educacionais, a fim de ser um centro de capacitação em conhecimento científico e tecnológico singular no País.

Conheça, a seguir, um pouco dos quatro Laboratórios Nacionais que compõem o CNPEM.

O **Laboratório Nacional de Biociências (LNBio)** dedica-se à pesquisa e inovação nas áreas de biotecnologia e à descoberta e desenvolvimento de fármacos. O Laboratório concentra competências, equipamentos de última geração e um time de pesquisadores de classe mundial voltados à realização de estudos multidisciplinares nas áreas de biologia estrutural, proteômica, genômica, metabolômica, bioensaios, desenvolvimento de organismos geneticamente modificados, dentre outros.

O **Laboratório Nacional de Ciência e Tecnologia do Bioetanol (CTBE)** desenvolve pesquisa e inovação de nível internacional na área de biomassa voltada à produção de energia, em especial do etanol de cana-de-açúcar. O Laboratório possui um ambiente singular no País para o escalonamento de tecnologias, visando a transferência de processos da bancada científica para o setor produtivo, no qual se destaca a Planta Piloto para Desenvolvimento de Processos.

O **Laboratório Nacional de Nanotecnologia (LNNano)** busca, por meio de pesquisa interna, explorar oportunidades oferecidas pela nanotecnologia para atender às necessidades da agricultura, indústria e serviços, em âmbito regional, nacional e internacional. O LNNano atua, também, na criação e desenvolvimento de produtos e processos sustentáveis, por meio de seus cinco laboratórios: Laboratório de Microscopia Eletrônica, de Microfabricação, de Ciência de Superfícies, de Materiais Nanoestruturados e de Caracterização e Processamento de Metais.

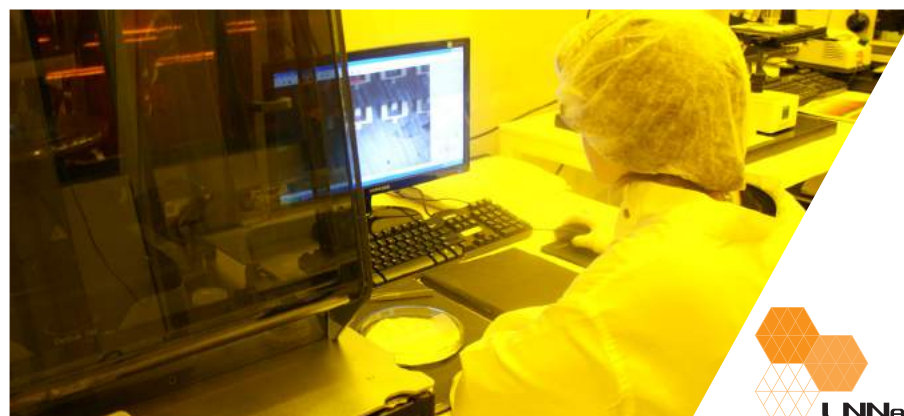
O **Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS)** opera, desde 1997, a única fonte de luz síncrotron da América Latina, aberta ao uso de toda a comunidade acadêmica e industrial. O atual síncrotron brasileiro, chamado UVX, possui hoje 18 linhas de luz – como são chamadas as estações experimentais – cobrindo técnicas de análise experimental a partir de radiação infravermelha, ultravioleta e raios X. O LNLS é o responsável pela construção do Sirius, o novo acelerador brasileiro, de 4ª geração, que será uma das máquinas mais avançadas do mundo para a análise dos mais diversos tipos de materiais, orgânicos e inorgânicos.



*Laboratório Nacional de Biociências (LNBio)*



*Laboratório Nacional de Ciência e Tecnologia do Bioetanol (CTBE)*



*Laboratório Nacional de Nanotecnologia (LNNano)*



*Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS)*



## Laboratório Nacional de Luz Síncrotron em números



*Funcionários do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS) reunidos em torno da atual fonte de luz síncrotron, UVX*

Com instalações abertas, o LNLS atende pesquisadores acadêmicos e industriais de diversos países. Sua idealização como Laboratório Nacional representa um marco no desenho institucional da pesquisa no Brasil, o que viabilizou a construção e a implantação de uma grande instalação de pesquisa, de uso aberto.

Toda a comunidade de ciência e tecnologia do País tem acesso a uma infraestrutura extremamente sofisticada, que pode ser utilizada simultaneamente por vários grupos. Esse modelo implica em um ganho significativo de escala, com impactos econômicos positivos para a ciência.

Entre as vantagens está a eficiência na utilização de sua infraestrutura, já que o laboratório opera 24 horas por dia. Além disso, o modelo possibilita ao LNLS ter uma equipe própria de profissionais qualificados, capazes de fornecer conhecimento técnico para que pesquisadores de todas as áreas tenham acesso a esta ferramenta para suas investigações, mesmo que não tenham conhecimento prévio no uso de fontes síncrotron. Seu molde de funcionamento também permite a manutenção de um ambiente de interação inter e multidisciplinar, que enriquece o aprendizado dos jovens pesquisadores.

***Toda a comunidade de ciência e tecnologia do País tem acesso a uma infraestrutura extremamente sofisticada, que pode ser utilizada simultaneamente por vários grupos***

- Responsável pela criação e operação da primeira fonte de luz síncrotron do Hemisfério Sul

- Batizada de UVX (sigla que representa “do ultravioleta ao raio X”), a fonte de luz foi projetada e construída por brasileiros, durante as décadas de 80 e 90, e inaugurada em 1997

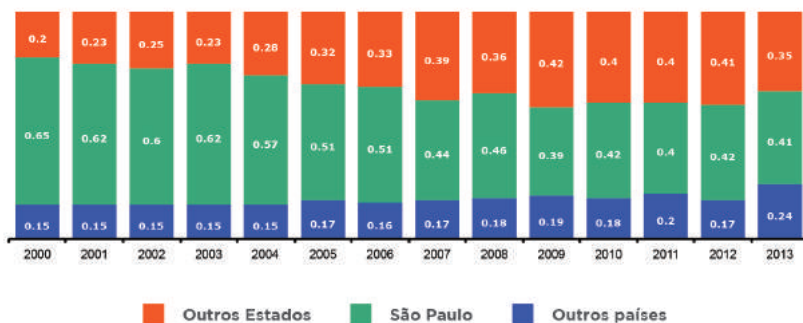
- Ainda hoje, continua sendo a única estrutura do tipo em toda a América Latina



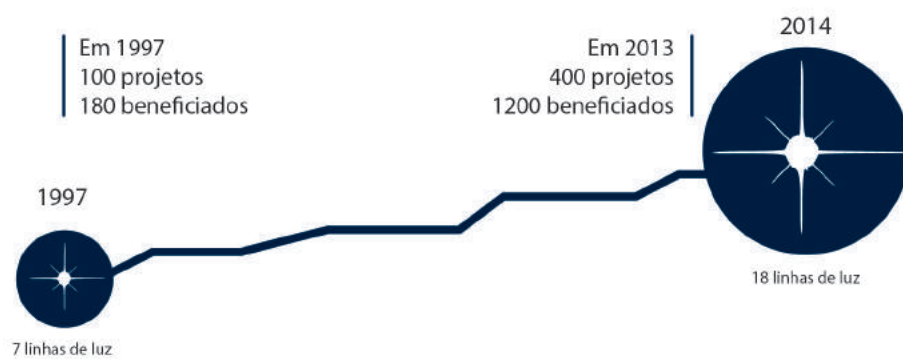
## Instalações abertas e multidisciplinares



24ª Reunião Anual de Usuários do LNLS (RAU), ocorrida em março de 2014



Origem dos projetos de pesquisa realizados no LNLS ao longo dos anos



Crescimento das linhas de luz disponíveis para utilização e número de projetos de pesquisas executados no LNLS

- Hoje o UVX possui 18 estações experimentais – chamadas linhas de luz – que permitem a execução de experimentos utilizando diversas técnicas de análise microscópica da matéria
- Em 1997, ano de inauguração do primeiro síncrotron nacional, o LNLS realizou cerca de 100 projetos de pesquisas, envolvendo 180 beneficiários. Em 2013 foram executadas cerca de 400 projetos de pesquisas, com mais de 1.200 beneficiários

Desde o início, o LNLS foi idealizado como um laboratório nacional, aberto e multidisciplinar, características que guiaram sua estratégia de implantação. Seu projeto conceitual baseou-se em três linhas básicas de desenvolvimento: engenharia, ciência e organização.

Com um projeto de engenharia desafiador, o laboratório foi planejado para atrair pesquisadores e engenheiros, cuja capacitação promovesse o desenvolvimento de campos tecnológicos importantes para o País. Buscou também desenvolver localmente o conhecimento sobre a construção dos aceleradores e das estações experimentais (linhas de luz), com a produção de componentes e equipamentos no Brasil, sempre que possível. A estratégia reduziu o custo da primeira fonte de luz síncrotron construída, além de permitir o domínio do conhecimento para a manutenção e atualização da máquina e da instrumentação científica ligada a ela.

No campo da ciência, o LNLS oferece instalações experimentais de classe mundial, que dão condições para o desenvolvimento de pesquisa básica e aplicada por um grande número de pesquisadores, de diferentes áreas do conhecimento. Foi planejado, ainda, para promover a interação entre pesquisadores de áreas diversas, estimulando o desenvolvimento de pesquisas multidisciplinares.

E, por último, sua organização consolidou no Brasil o conceito de laboratório nacional, com acesso aberto para pesquisadores de outras instituições e composto por uma equipe enxuta de cientistas, que produz ciência de alta qualidade e que promove a atualização das suas instalações.

Como resultado desses esforços em várias frentes, o Brasil foi o primeiro País do Hemisfério Sul a reunir competências técnicas para desenvolver e operar um equipamento científico de grande porte como o síncrotron.

O desenvolvimento de uma máquina com o nível de precisão e tecnologia da fonte de luz síncrotron, bem como de toda a sua instrumentação científica, demonstrou à comunidade brasileira de C&T toda a capacidade gerencial e intelectual do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron e garantiu seu reconhecimento internacional. Com isso, o Brasil entrou na era da *Big Science*.

**Como resultado desses esforços em várias frentes, o Brasil foi o primeiro país do Hemisfério Sul a reunir competências técnicas para desenvolver e operar um equipamento científico de grande porte como o síncrotron**





**1981**

Primeiras discussões sobre criação de um laboratório síncrotron no Brasil, no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF)



**1987**

Equipe se instala em um local temporário, em Campinas, onde são desenvolvidos os primeiros equipamentos do UVX e começa a ser contratada a equipe técnica

**1990**

Primeira Reunião Anual de Usuários (RAU)

**1995**

A construção do prédio do anel é concluída e o síncrotron começa a ser instalado no local

**1985**

Equipe de engenheiros e físicos passa três meses no Stanford Synchrotron Radiation Laboratory (SSRL) e prepara, como treinamento inicial, o primeiro projeto conceitual da fonte de luz UVX

**1989**

O projeto original é revisado. Em dezembro conclui-se a construção de uma parte importante da máquina: o Linac, ou acelerador linear, que emite o primeiro feixe de elétrons

**1992**

A primeira linha de luz, projetada pelo LNLS é instalada para testes no Center for Advanced Microstructures and Devices, da Louisiana State University (EUA)

**1996**

É observada a primeira volta dos elétrons no anel de armazenamento



## Linha do tempo do LNLS



**1998**

Estações experimentais de fluorescência (XRF) e de instrumentação (XRI) são comissionadas

**2003**

É atualizado o sistema de radiofrequência do UVX para que o anel de armazenamento pudesse comportar a instalação de dispositivos de inserção

**2007**

Instalação do primeiro ondulador no UVX e inauguração da primeira linha de luz com dispositivos de inserção – para cristalografia de proteínas

**2012**

Apresentação do 1º projeto do Sirius para o comitê internacional de especialistas, que recomenda um equipamento mais ousado. Ele é redesenhado e chega à menor emitância do mundo

**2014**

Conclusão das obras de terraplanagem e do projeto executivo das edificações do Sirius



**1997**

Fonte UVX é inaugurada para os usuários, com sete linhas de luz. São iniciados os trabalhos de melhoria no sistema de injeção do anel

**2001**

Acelerador injetor, conhecido como Booster, é implantado no síncrotron UVX

**2006**

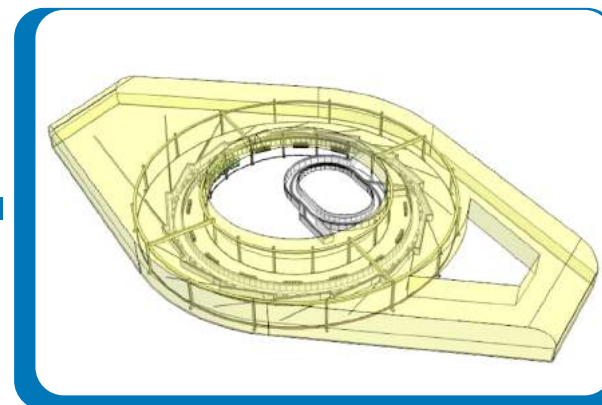
Recomendação no Plano Diretor 2006-2009 da ABTLuS (antiga denominação do CNPEM) para criação de uma força-tarefa para iniciar os estudos de um novo anel de armazenamento de baixa emitância para o LNLS

**2008**

Início dos estudos preliminares para construção da nova fonte de luz síncrotron

**2013**

Extensão do terreno desapropriada pelo Governo do Estado de São Paulo para construção do Sirius





## Sirius: a estrela mais brilhante

***Sirius será uma fonte de luz síncrotron de última geração, desenhada para ter o maior brilho dentro da sua classe de energia***



*Projeto arquitetônico do Sirius*

O atual síncrotron brasileiro, UVX, permite aos usuários fazerem investigações empregando a maioria das técnicas experimentais possíveis em fontes deste nível de tecnologia, com o uso de radiação infravermelha, ultravioleta e de raios X.

Apesar de sua alta confiabilidade e estabilidade, a fonte de luz síncrotron hoje em operação já não atende plenamente às necessidades dos pesquisadores. O número de estações de pesquisa instaladas no espaço físico atual já atingiu seu limite, e os parâmetros técnicos da máquina não permitem a realização de diversos experimentos avançados.

A produção científica de vanguarda demanda o uso de ferramentas atualizadas, que se mostrem competitivas frente a outras instalações científicas semelhantes. No campo da tecnologia de luz síncrotron, as fontes de alto brilho representam o que hoje existe de mais moderno para a observação de materiais orgânicos e inorgânicos.

Assim, para manter a infraestrutura experimental do Brasil competitiva, tanto do ponto de vista dos pesquisadores acadêmicos quanto do ponto de vista de empresas que desenvolvem tecnologia, o LNLS tem

trabalhado, desde 2008, no projeto e desenvolvimento de uma nova fonte de luz, uma das primeiras consideradas de 4ª geração, que atenda as atuais necessidades científicas e tecnológicas dos pesquisadores.

Sirius será uma fonte de luz síncrotron de última geração, desenhada para ter o maior brilho dentro da sua classe de energia. Essa comparação inclui, por exemplo, o síncrotron Soleil, na França, e o Diamond, na Inglaterra. A nova máquina abrirá novos horizontes para técnicas de caracterização de materiais, ampliando a fronteira do conhecimento na área.

O Sirius será composto por um acelerador de elétrons com energia de 3 GeV (giga eletron-volts), que terá 518,4 metros de circunferência e poderá comportar até 40 linhas de luz.

Esses parâmetros permitirão ao novo síncrotron não somente melhorar quantitativamente as características de experimentos que já são feitos hoje na fonte de luz brasileira, reduzindo o tempo de aquisição dos dados e aumentando a precisão dos resultados das medidas, mas irá, principalmente, possibilitar uma

mudança qualitativa para as pesquisas dos usuários. A nova fonte permitirá a realização de experimentos hoje impossíveis no País, aumentando significativamente as suas competências.

O projeto ganha ainda mais importância considerando a expansão do uso de síncrotron pelas mais variadas áreas do conhecimento, que faz com que essa ferramenta seja essencial na superação dos desafios tecnológicos modernos.

**O Sirius terá energia duas vezes maior e uma emitância aproximadamente 360 vezes menor que a do anel atual. Essa combinação fará com que o brilho da luz síncrotron emitida seja, em certas frequências, mais de um bilhão de vezes superior ao que hoje está disponível aos pesquisadores.**

No síncrotron atualmente em operação, a energia do feixe de luz permite analisar apenas a camada superficial de materiais duros e densos, já que os raios X produzidos nessa fonte penetram esses materiais com profundidade de somente alguns micrômetros. Já a alta energia do Sirius permitirá que esses mesmos materiais sejam analisados em profundidades de até alguns centímetros. Isso é fundamental para o estudo de aços e outros metais, além de concreto e de rochas, o que terá impacto positivo em estudos da camada pré-sal, por exemplo.

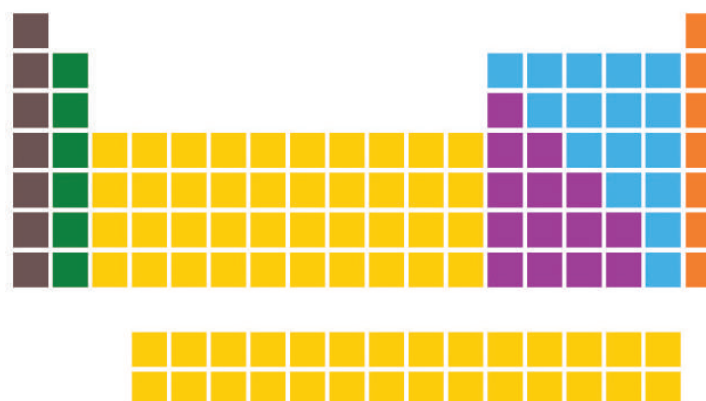
As características da máquina atual brasileira tampouco permitem a investigação de determinados elementos químicos, como é o caso da importante classe das terras raras, que só poderão ser efetivamente estudados com fontes de luz com características como as do Sirius.

A concentração do feixe de raios X em um foco de tamanho reduzido, que pode chegar à ordem do micrômetro e até do nanômetro, será também um diferencial da nova fonte síncrotron. No Sirius poderão ser feitos experimentos em que o feixe de raios X atinge

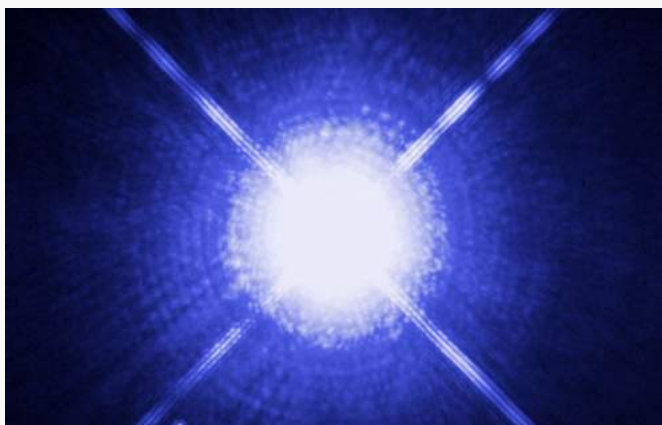
a amostra com intensidade e, ao mesmo tempo, com foco extremamente concentrado, o que terá impacto determinante para experimentos em nanotecnologia e biotecnologia.

Uma das técnicas que tem revolucionado o uso de síncrotron em várias áreas do conhecimento, e que poderá ser feita no Sirius, é a tomografia por raios X com resolução de nanômetros, o que só pode ser realizada em fontes de alto brilho e baixa emitância. Essa tecnologia oferece benefícios para as áreas de metalurgia, geofísica, mineralogia, medicina, agricultura, indústria alimentícia e de cosméticos, polímeros, cimento, materiais avançados e outras.

**Esses avanços irão auxiliar empresas brasileiras que já utilizam a luz síncrotron, como Vale, Braskem, Petrobras e Oxiteno, a solucionar sofisticados desafios tecnológicos.** Permitirão, ainda, ampliar o leque de indústrias que utilizam a luz síncrotron em seus desenvolvimentos.



*Apenas parte dos elementos químicos podem ser identificados no atual síncrotron brasileiro. No Sirius, praticamente todos os elementos da tabela periódica, inclusive terras-raras, poderão ser explorados*



**Sirius, a nova fonte de luz síncrotron brasileira, foi durante muitos anos conhecida como LNLS-II, apelido que carregou até 2010. Para não continuar a confusão entre o nome do laboratório - LNLS - e o da fonte de luz síncrotron, promoveu-se um concurso, aberto aos funcionários do campus do CNPEM, para a escolha de um nome oficial para a futura fonte brasileira. Dentre as diversas propostas recebidas, um comitê julgador interno escolheu o nome Sirius, em referência a uma estrela de grande brilho localizada na constelação de Canis Major. Podendo ser vista de qualquer ponto da Terra, Sirius é a estrela mais brilhante do céu noturno. Assim como a estrela, a fonte de luz síncrotron é a mais brilhante em construção.**



## Aplicações de uma fonte de luz síncrotron



*Localização geográfica das fontes de luz síncrotron em construção e em operação no mundo.  
As fontes de 3ª e 4ª geração utilizam equipamentos mais modernos e precisos, com maior brilho e maior energia*

Fontes de luz síncrotron constituem o exemplo mais sofisticado de infraestrutura de pesquisa aberta e multidisciplinar. Dentre as ferramentas experimentais atualmente conhecidas, o síncrotron é aquela com o maior número de aplicações e de maior impacto sobre o conhecimento e desenvolvimento de materiais, orgânicos e inorgânicos.

A flexibilidade dessa ferramenta permite investigações nas áreas mais diversas, com potencial para a resolução de problemas de praticamente qualquer natureza. Essa é a razão pela qual a tecnologia da luz síncrotron se tornou cada vez mais popular ao redor do mundo. É também o motivo pelo qual os países com economias fortes e baseadas em tecnologia já contam com uma ou mais fontes de luz síncrotron, ou as estão construindo, como retrata o mapa acima.

Para que o avanço científico contribua para o desenvolvimento sustentável a longo prazo, ele deve estar em contato com as necessidades dos diversos ramos produtivos, colaborando com a resolução de seus desafios específicos. Neste sentido, o desenvolvimento científico e tecnológico torna-se um importante aliado no fortalecimento da economia e do bem-estar social de uma nação.

O síncrotron é uma ferramenta-chave para a resolução de questões importantes para o setor produtivo brasileiro. A versati-

lidade de uma fonte de luz síncrotron permite o desenvolvimento de pesquisas em áreas estratégicas, como energia, alimentação, meio ambiente, saúde, defesa e vários outros.

Na agricultura, por exemplo, a luz síncrotron pode ser usada para análise do solo, para o desenvolvimento de fertilizantes mais eficientes e baratos e, ao mesmo tempo, menos agressivos ao meio ambiente e à saúde.

Fontes de luz têm aplicação, também, no mapeamento de nutrientes em espécies vegetais, visando desenvolvimentos no segmento de nutrição e alimentação. Pesquisas na área podem revelar informações sobre a concentração, a biodisponibilidade e a localização de nutrientes. A análise de nanopartículas em vegetais pode, igualmente, fornecer informações sobre a incorporação dessas partículas ao meio ambiente, colaborando para estudos sobre contaminação.

Na área de energia, o uso de síncrotron permite o desenvolvimento de novas tecnologias de exploração de petróleo e gás natural. A ferramenta tem grande potencial para estudos de compreensão das propriedades mecânicas e de transporte de materiais heterogêneos, como aqueles que normalmente abrigam o óleo e o gás. Nesta área, destaca-se o uso do síncrotron para realizar medições em diferentes condições de temperatura e pressão.

**Para que o avanço científico se reflita em desenvolvimento sustentável a longo prazo, ele deve estar em contato com as necessidades dos diversos ramos produtivos, colaborando com a resolução de seus desafios específicos**



*Síncrotron permite desvendar a estrutura fundamental dos mais variados materiais, com impacto direto na indústria, agricultura e serviços*

Síncrotrons têm sido também fundamentais no entendimento e desenvolvimento de materiais e sistemas para células solares, células combustível e baterias, bem como nas pesquisas de novos materiais mais leves e eficientes, como plásticos, vidros e fibras, que podem ser utilizados em aviões, automóveis, motores e muitos outros componentes.

Os síncrotrons de 4ª geração, como o Sirius, podem contribuir para o desenvolvimento de catalisadores por meio do estudo *in situ* e com resolução nanométrica, permitindo produzir materiais mais eficientes e seletivos ao produto químico de interesse.

O desenvolvimento de substâncias catalíticas é essencial, por exemplo, para a conversão de biomassa, área na qual o Brasil já se destaca pela produção de etanol como combustível. Nesse campo, estudos com uso de fontes síncrotron de alto brilho oferecem a possibilidade de o País ampliar o seu destaque, por meio do domínio de tecnologias para a produção de energia limpa e renovável.

Na área da saúde, pesquisas feitas com síncrotron são fundamentais para identificação das estruturas de proteínas e unidades intracelulares complexas, etapa importante no desenvolvimento de novos medicamentos. As técnicas de imagens com resolução espacial nanométrica também têm trazido enormes contribuições na análise de órgãos e tecidos. Outra aplicação é o desenvolvimento de nanopartículas para o diagnóstico de câncer e combate a vírus e bactérias – inclusive aquelas que oferecem resistência a antibióticos.

## Benefícios para o setor produtivo



*Para responder às necessidades da sociedade e da economia atuais as empresas precisam constantemente olhar “através” da estrutura dos materiais, seja para desenvolver novos produtos e processos ou para melhorar os que já existem, tornando-os cada vez mais eficientes e baratos. As fontes de luz síncrotron têm sido aliadas do setor produtivo mundial, auxiliando nestes desafios.*

*Pesquisas feitas com uso de síncrotron já beneficiaram o desenvolvimento de inúmeros produtos e componentes, de fraldas para bebês a turbinas para aeronaves. Elas já foram – e ainda são – usadas no desenvolvimento de baterias mais duráveis, resistentes e baratas para carros elétricos, celulares e laptops e para o desenvolvimento de novos semicondutores, capazes de aumentar a eficiência de células solares orgânicas para a produção de energia elétrica.*

*Na área da saúde, pesquisas em síncrotron foram usadas no desenvolvimento do antiviral Tamiflu, produzido a partir do componente osteltamivir. Beneficiaram, ainda, o desenvolvimento de medicamentos para combate a leucemia, câncer de mama, de próstata, melanoma, aids, diabetes, osteoporose, colesterol alto, disfunções anticorpo-antígeno e gripe.*

*Para citar alguns exemplos: a farmacêutica Abbott desenvolveu o Kaletra, um dos medicamentos mais prescritos para tratamento da aids, e o anticancerígeno Votrient, feito a partir do componente pazopanib. A P&G usou a tecnologia para o desenvolvimento de condicionadores, detergentes, amaciantes, shampoos e cremes faciais, enquanto a Dow Chemical fez pesquisas com síncrotron para o desenvolvimento de materiais para melhorar a absorção de fraldas descartáveis.*

*Entre as maiores empresas dos EUA, de acordo com o ranking da revista Fortune, pelo menos 32 delas utilizam síncrotron em seus produtos. Exxon Mobil, Chevron, General Electric, Ford Motor, HP, GM, IBM, Boeing, Johnson & Johnson, Pfizer, Novartis, Intel e 3M estão entre essas empresas.*



# Ferramentas para desvendar a matéria

Visualizar a estrutura da matéria e compreender seu comportamento sob diferentes condições são os objetivos principais de uma fonte de luz síncrotron. A criação de uma máquina tão complexa é produto de toda uma história de desenvolvimentos de ferramentas que permitiram ao homem observar a matéria com cada vez mais detalhamento, e que são decisivas para o avanço científico.

Um exemplo é o conhecimento hoje disponível sobre os seres vivos. O início do entendimento de que os seres são compostos por células teve que esperar pela invenção e aprimoramento do microscópio ótico composto, ocorridos entre o final do século XV e ao longo do século XVI.

Foram necessários outros séculos – ao longo dos quais foram feitos vários aprimoramentos nos microscópios óticos – para que se começasse a entender os detalhes da estrutura celular. Entretanto, somente com a invenção e posterior utilização dos microscópios eletrônicos na biologia é que foi possível a descoberta de várias organelas intracelulares, como o ribossomo, por exemplo. Ou seja, somente devido à invenção e desenvolvimento de ferramentas especiais é que foi possível obter o avançado entendimento que hoje temos das células. Esse exemplo em particular se aplica em inúmeras outras áreas do conhecimento.

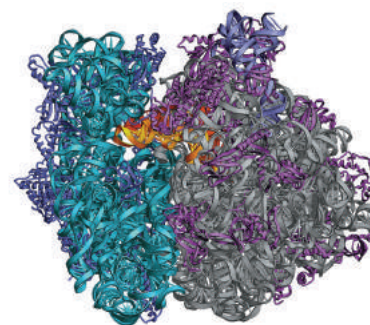
Analisando a matéria de maneira mais fundamental, sabe-se que todos os materiais, orgânicos e inorgânicos, são compostos por átomos. Sabe-se também que todos os átomos são compostos por um núcleo, positivamente carregado, e elétrons, negativamente carregados, que orbitam de maneira estável no entorno do núcleo.

Os distintos materiais são formados por ligações entre esses átomos, e as suas propriedades dependem, portanto, de quais são esses átomos e como eles se organizam no espaço. Por exemplo, dois materiais com propriedades completamente distintas, como o diamante e o grafite, são compostos pelos mesmos átomos de carbono. A única diferença é a distribuição desses átomos no espaço, a chamada estrutura atômica.

A estrutura atômica tem impacto direto na distribuição dos elétrons ao longo do material, ou seja, na sua estrutura eletrônica. As propriedades de um material – por exemplo, se ele será semicondutor ou isolante, rígido ou maleável, opaco ou transparente – dependem da distribuição dos seus elétrons.

As fontes de luz síncrotron foram desenvolvidas exatamente com esta função: desvendar a estrutura atômica e a estrutura eletrônica dos diferentes materiais, com o objetivo de compreender as suas propriedades fundamentais. Hoje, elas são a melhor ferramenta já criada pela ciência com essa finalidade, e estão em constante aprimoramento, para que possam fornecer cada vez mais informações sobre a matéria, com resolução e detalhamento cada vez maior.

## Ribossomo



Fonte: Center for Molecular Biology of RNA, University of California

*Para entender como uma determinada estrutura funciona, é necessário saber quais são os átomos que a compõe e como eles se distribuem no espaço. Usando como exemplo o ribossomo, sabe-se que ele é um tipo de organela celular muito importante para o organismo humano, que faz a leitura do código do DNA e, com isso, produz proteínas para a célula. No entanto, até poucos anos atrás a estrutura completa do ribossomo ainda não havia sido desvendada. Recentemente, esse conhecimento foi atingido por meio de observações feitas em fontes de luz síncrotron, usando a técnica da cristalografia por raios X. Desse modo, os pesquisadores determinaram a estrutura do ribossomo átomo por átomo. A descoberta é relevante não somente pelo conhecimento básico produzido, mas também para o desenvolvimento de novos antibióticos. A contribuição valeu à pesquisadora israelense Ada Yonath, ao indiano Venkatraman Ramakrishnan e ao norte-americano Thomaz Steitz o Prêmio Nobel de Química em 2009.*

## Linha do tempo dos síncrotrons

### Anos 2000

Outros síncrotrons são construídos no Canadá, Austrália, França, Inglaterra, Suécia, China, Suíça, Espanha, Alemanha, EUA, Coreia e Taiwan, dentre outros países. Os equipamentos são projetados para ter cada vez menor emitância, e portanto, maior brilho

### Anos 90

Conforme fica clara a importância do brilho das fontes de luz síncrotron, os novos projetos passam a ser feitos de modo a alcançar menores emitâncias e possibilitar o uso de dispositivos de inserção, principalmente onduladores. São chamados síncrotrons de 3ª geração

### Anos 80

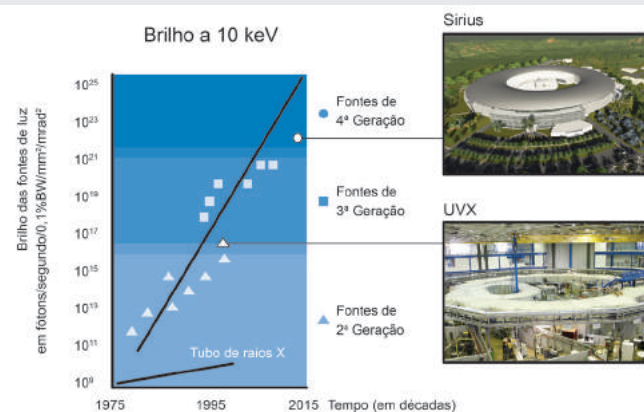
Potencial de uso da luz síncrotron por diferentes áreas de pesquisa faz com que surjam diversas novas fontes de luz, como de Brookhaven (EUA), em 1981; o Synchrotron Radiation Center em Wisconsin (EUA), em 1986; o Photon Factory (Japão), em 1982; o Bessy (Alemanha), em 1982; e o SuperACO, do Lure (França), em 1984

### Anos 70

Começam a surgir fontes de luz baseadas em anéis de armazenamento. No entanto, seus aceleradores não são usados só para luz síncrotron, mas para investigações em física nuclear ou de partículas. Trata-se da 1ª geração de fontes de luz síncrotron

### Anos 60

Ocorrem modificações em aceleradores síncrotron dedicados a pesquisa na área de física nuclear, para permitir um acesso contínuo aos pesquisadores que desejam trabalhar com a radiação síncrotron



Evolução do brilho das fontes de raios X ao longo da história e comparação entre o brilho do UvX, fonte considerada de 2ª geração, e o do Sirius, que está na fronteira do conhecimento e já é considerado uma fonte de 4ª geração

### 2014

Duas máquinas de ultrabaixa emitância (abaixo de 0,3 nm.rad) estão em construção no mundo: o MAX-IV, na Suécia, e o Sirius, no Brasil, ambas com desenhos inovadores da rede magnética. Serão as primeiras fontes síncrotron de 4ª geração baseadas em anéis de armazenamento

### 1993 e 1998

Entre esse período surgem o Elettra, com energia de 2 GeV, na Itália, o ESRF, de 6 GeV, na França, o ALS, de 1,9 GeV, nos EUA, o MAX-II, de 1,5 GeV, na Suécia, o APS, de 7 GeV, nos EUA, o Spring8, de 8 GeV, no Japão, BessyII, de 1,7 GeV, na Alemanha e o UVX, de 1,37 GeV, no Brasil

### 1981

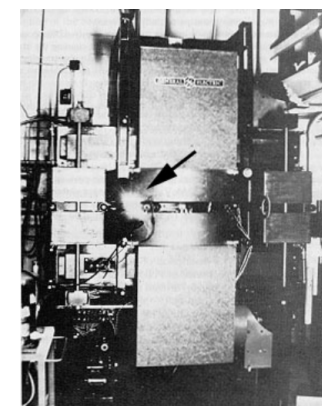
Começa a operar, no Reino Unido, o primeiro síncrotron de 2ª geração, projetado exclusivamente para produzir essa radiação: o Synchrotron Radiation Source (SRS), com energia de 2 GeV

### 1956

Ocorrem os primeiros experimentos de espectroscopia na região de ultravioleta, no síncrotron de 320 MeV de Cornell (EUA)

### 1947

Primeira observação visual da radiação emitida por elétrons em um acelerador síncrotron de 70 MeV ocorre em um laboratório da GE, confirmando as previsões teóricas existentes sobre a radiação síncrotron





## Como funciona uma fonte de luz síncrotron

Fontes de luz síncrotron são equipamentos planejados para produzir um tipo de radiação de alto brilho e amplo espectro, que compreende o infravermelho, ultravioleta e os raios X, conhecida como luz síncrotron.

Capaz de penetrar a matéria e revelar características sobre a sua estrutura molecular e atômica, a luz síncrotron é usada como uma ferramenta de estudo, que auxilia os pesquisadores a compreender a natureza microscópica de materiais orgânicos e inorgânicos.

Isso faz com que as fontes de luz tenham aplicações em praticamente todas as áreas do conhecimento científico e tecnológico, como farmacologia, química, física, engenharia dos materiais, biotecnologia, nanotecnologia, agricultura, oceanografia, medicina, geologia e geofísica, petróleo e gás, paleontologia e muitos outros campos.

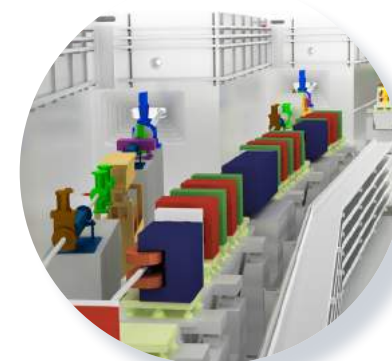


### 3) Booster

É um acelerador circular com a função de aumentar a energia do feixe vindo do Linac até a energia de operação da fonte de luz. Nele os campos magnéticos dos ímãs são incrementados sincronizadamente, enquanto interagem com um cavidade de radiofrequência que lhes fornece energia a cada volta

### 4) Anel de Armazenamento

Ao ser depositado neste anel principal, o feixe de elétrons é mantido em órbitas estáveis com o auxílio de ímãs. Neste local os elétrons passam por dipolos, wigglers e onduladores, usados para curvar a trajetória dos elétrons, "forçando-os" a produzir luz síncrotron



### 1) Canhão de Elétrons

Neste equipamento o feixe de elétrons é emitido a partir de um cátodo e começa a ser acelerado por campos eletrostáticos para, em seguida, ser injetado no Linac



### 5) Luz Síncrotron

Quando os elétrons com alta energia e em alta velocidade têm sua trajetória desviada por campos magnéticos, eles produzem um tipo de radiação de amplo espectro magnético e alto brilho, conhecida como luz síncrotron

### 2) Linac

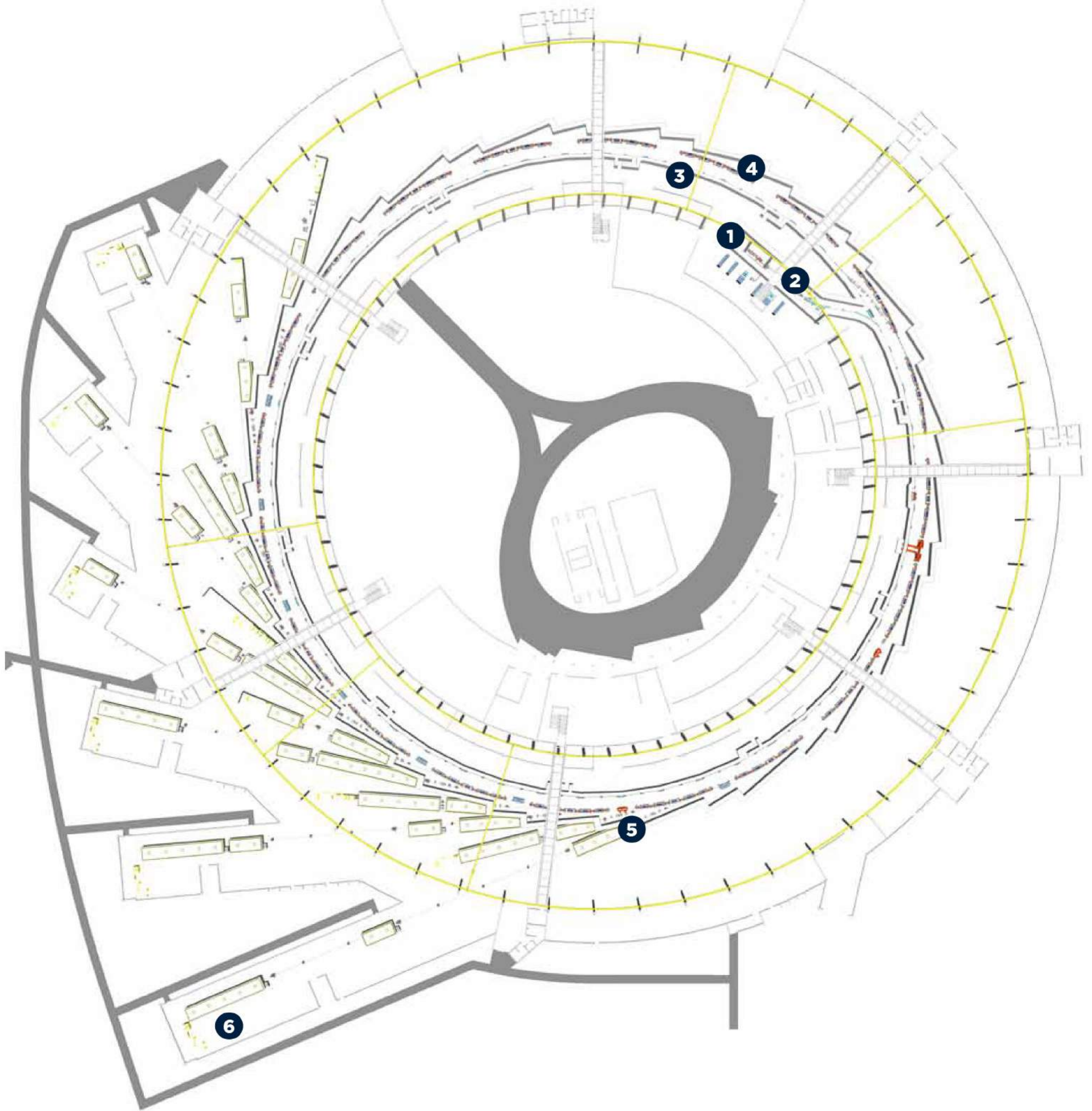
Acelerador linear a partir de onde o feixe de elétrons, proveniente do canhão, começa a ganhar energia, ao ser acelerado até uma velocidade próxima à da luz



### 6) Linhas de Luz

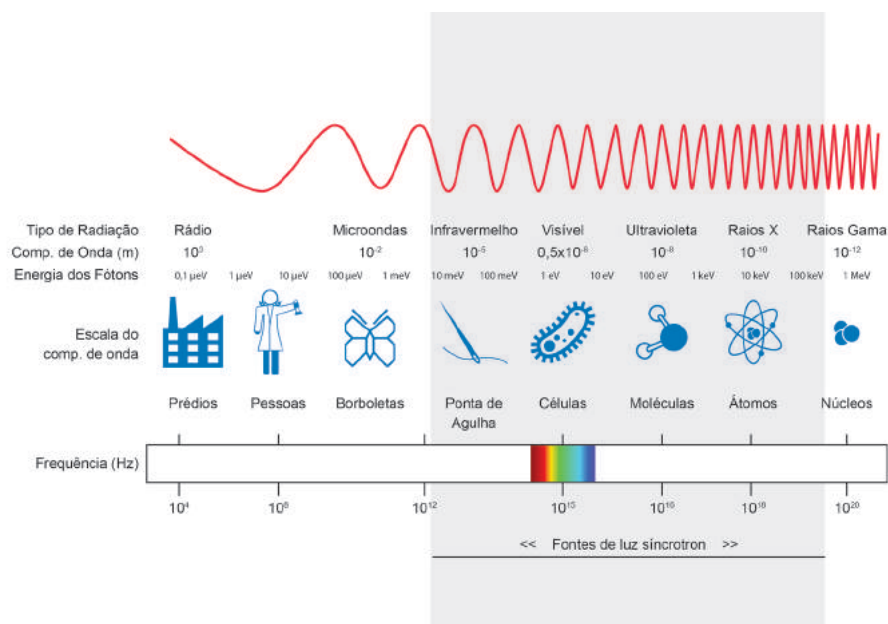
Estações experimentais para onde o feixe de luz síncrotron é conduzido e direcionado até as amostras, de forma a revelar informações sobre o material analisado. As fontes de síncrotron normalmente comportam diversas linhas de luz, e nelas são realizados experimentos usando diferentes técnicas, como espectroscopia do infravermelho ao raio X, espalhamento de raios X, cristalografia, tomografia e outras







# Luz síncrotron



*Luz síncrotron é radiação eletromagnética emitida por partículas carregadas ultrarrelativísticas aceleradas por um campo magnético. Essa emissão ocorre em um amplo espectro, que compreende desde o infravermelho até os raios X*

*Luz nada mais é do que radiação eletromagnética. A luz visível corresponde a uma pequena fração do espectro eletromagnético que pode ser percebida por olhos humanos. No entanto, a totalidade deste espectro é composta por ondas com diferentes frequências. A luz síncrotron é um tipo de radiação que se estende por uma faixa ampla do espectro eletromagnético, cobrindo desde o infravermelho até os raios X de alto brilho.*

*Para obter luz síncrotron é necessário desviar, com o uso de campos magnéticos, a trajetória de partículas carregadas em velocidade próxima à da luz. A produção de luz síncrotron em um acelerador de elétrons possibilita a execução de diferentes técnicas de estudo e observação da matéria, permitindo medições com resolução espacial de nanômetros. Com ela é possível também acompanhar a evolução temporal de processos que ocorrem em frações de segundo.*

*Pelo fato de se estender por uma ampla faixa do espectro eletromagnético, a radiação síncrotron permite aos pesquisadores utilizar os comprimentos de onda mais adequados para suas observações. Isso faz do síncrotron uma ferramenta extremamente versátil, que permite o estudo da matéria nas suas mais variadas formas. Essas características gerais da radiação síncrotron, aliadas ao poder de penetração dos raios X de alta energia, permitem o estudo de inúmeros fenômenos e propriedades no interior dos materiais.*

Para gerar radiação síncrotron de forma controlada é necessário manter partículas com carga elétrica viajando em velocidades próximas à da luz. A luz síncrotron é produzida quando a trajetória dessas partículas é desviada, em geral por campos magnéticos.

A aceleração e o curvamento da trajetória das partículas só é possível com o uso de um conjunto de aceleradores de partículas. Assim, uma instalação para uso de luz síncrotron tem, como núcleo gerador, uma infraestrutura sofisticada de aceleradores. Na maioria das vezes, as fontes de luz são compostas por três estruturas de aceleração: um acelerador linear (Linac), um acelerador injetor (conhecido como Booster) e um anel de armazenamento.

Quase todas as fontes de luz síncrotron utilizam como partículas carregadas, elétrons. Eles são gerados por meio de um canhão de elétrons e, em seguida, começam a ser acelerados por um conjunto de estruturas que compõem o Linac, ou acelerador linear. Quando chegam ao final do Linac, esses elétrons já ganharam energia suficiente para atingir velocidades próximas à da luz (velocidade relativística). Eles são, então, conduzidos ao acelerador injetor, conhecido como Booster, por meio de uma linha de transporte composta por eletroímãs.

O Booster tem o papel de aumentar a energia dos elétrons desde o nível de energia do Linac até a energia de operação do anel de armazenamento. Ao entrarem no Booster, os elétrons são acelerados por cavidades de radiofrequência e, quando atingem seu nível de energia final, são injetados no anel de armazenamento por meio de outra linha de transporte. Uma vez no anel de armazenamento, os elétrons são mantidos em órbitas estáveis com o auxílio de um conjunto de ímãs que compõem a chamada rede magnética.

Para que todo este conjunto funcione são necessários, além da rede magnética, vários outros subsistemas como cavidades de radiofrequência (que aceleram os elétrons e repõem a energia perdida pelos mesmos na emissão de radiação), câmaras de ultra-alto vácuo, fontes de alta potência ultraestáveis, sistemas de controle e diagnóstico rápidos e suportes mecânicos de alta estabilidade. Todos esses sistemas demandam desenvolvimentos de alta tecnologia em várias áreas de engenharia.

A rede magnética de uma fonte de luz síncrotron é composta, basicamente, de três tipos de ímãs: dipolos, quadrupolos e sextupolos. Os dipolos têm como papel principal gerar um campo magnético defletor em uma região determinada do

espaço, de forma que os elétrons façam as curvas necessárias para que se mantenham na trajetória de referência dentro do anel de armazenamento.

A radiação síncrotron é emitida na passagem dos elétrons pelos dipolos. Dessa forma, os dipolos são locais naturais para saída de linhas de luz. Síncrotrons que usam prioritariamente linhas de luz de dipolos são chamados de síncrotrons de 2ª geração. Esse é o caso da fonte de luz síncrotron brasileira, atualmente em operação no LNLS.

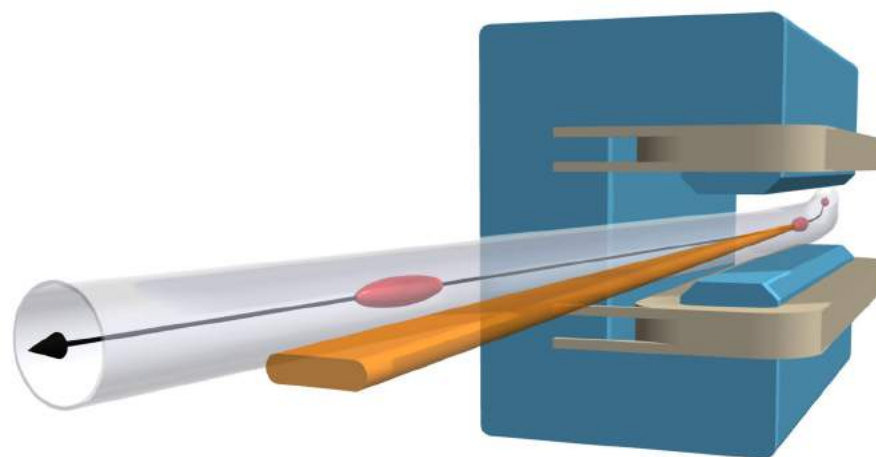
Os ímãs da rede magnética formam células básicas que compõem os superperíodos. Um anel de armazenamento é formado por diversos superperíodos, compostos por seções em arco, conectadas entre si por trechos retos longos. Os trechos retos são especialmente projetados para acomodar os dispositivos de inserção, ou seja, estruturas que provocam oscilações na trajetória do feixe. Essas oscilações são produzidas por campos magnéticos gerados por uma sucessão de polos magnéticos alternados. Há emissão de luz síncrotron a cada oscilação da trajetória. Nos síncrotrons de 3ª e 4ª geração a radiação é emitida preferencialmente através desses dispositivos.

Existem dois tipos básicos de dispositivos de inserção: os wigglers e os onduladores. A diferença principal entre eles é, basicamente, dada pela amplitude das oscilações de órbita dos elétrons e pela abertura angular da radiação emitida. Nos wigglers o desvio angular das oscilações de órbita é muito maior que a abertura da radiação, e não há interferência entre a radiação emitida por cada polo.

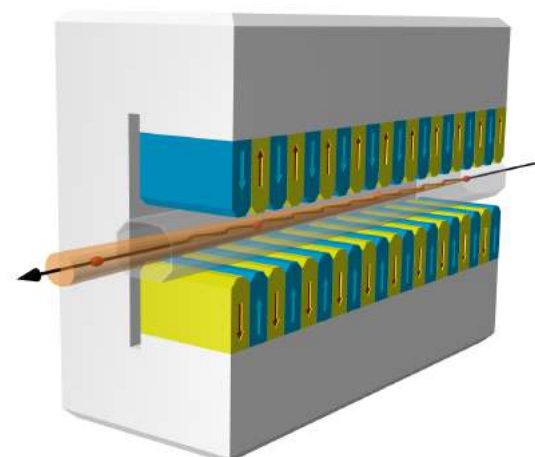
Entretanto, como há  $N$  polos, ocorre um ganho de intensidade por um fator  $N$  quando comparado com emissão de um dipolo. Além disso, o valor do campo magnético pode ser modificado localmente sem alterar a órbita global dos elétrons. Com isso, valores mais altos de campo podem ser usados, resultando em energia mais altas para a radiação emitida.

Já nos onduladores, o desvio da órbita é semelhante à abertura angular da radiação emitida. Com isso, ocorre um processo de interferência entre as ondas emitidas a partir de cada polo e o espectro emitido consiste de linhas nas frequências em que há interferência construtiva. A intensidade da radiação dessas linhas, quando comparada a de um dipolo, tem um aumento de  $N^2$ . Devido a esse significativo ganho na intensidade da luz produzida, e também em seu brilho, onduladores são hoje os dispositivos preferenciais para uso em síncrotrons de 3ª e 4ª geração. Esse será o modelo principal a ser aplicado no Sirius.

***O conjunto de todos os componentes resulta na emissão de radiação de alto brilho, que permite a descrição quantitativa sobre quais tipos de átomos e de moléculas constituem um dado material, seus estados químicos, organização espacial, propriedades magnéticas, etc. Um diferencial das fontes de luz síncrotron é que elas permitem a obtenção dessas informações in situ e em função do tempo***

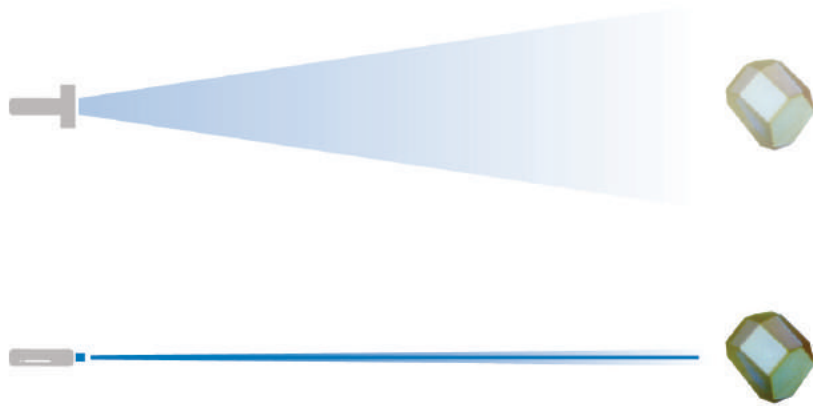


*Emissão de radiação síncrotron por um dipolo magnético*



*Ilustração de um ondulador, que hoje corresponde à principal maneira de se obter luz síncrotron em instalações de 3ª e 4ª geração, como o Sirius*

## Brilho e emitância



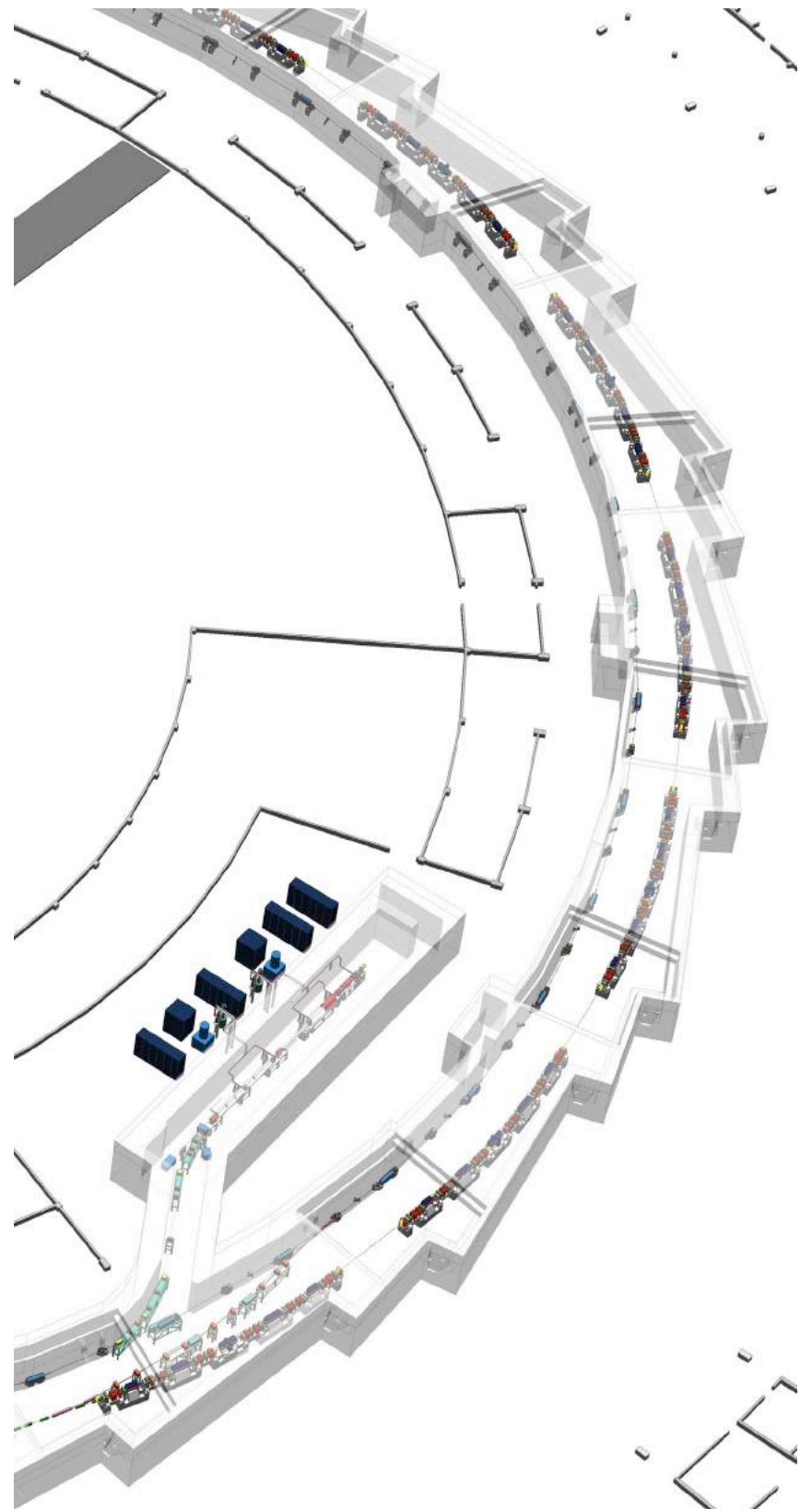
A emitância de uma fonte de luz sícrotron é o produto do tamanho e da divergência angular do feixe de elétrons. Quanto menor for a emitância, maior é o brilho da fonte

A qualidade de uma fonte de luz é caracterizada pelo seu brilho, que pode ser definido como o número de fótons emitidos pela fonte em uma determinada faixa espectral de energia, por unidade de tempo, por unidade de tamanho e divergência angular da fonte. Quanto maior o brilho, melhor será a qualidade da fonte de luz. O feixe de elétrons de uma fonte de alto brilho emite muitos fótons por segundo em uma faixa estreita de energia, possui dimensões pequenas e é bastante colimado.

Se compararmos, por exemplo, a emissão de uma lanterna com a de uma ponteira a laser, com a mesma taxa de fótons, vemos que para examinar um objeto ou parte de um objeto pequeno será muito mais eficiente a iluminação a partir da ponteira a laser, cujo brilho é muito maior (ver figura acima).

Um ingrediente-chave para aumentar o brilho de uma fonte de luz sícrotron é, portanto, a emitância do feixe de elétrons, que é a medida do tamanho e da divergência deste feixe. Quanto menor a emitância, maior será o brilho da fonte de luz. A emitância natural de equilíbrio é determinada pelo balanço entre o amortecimento radiativo e a excitação quântica das oscilações das partículas, ambas causadas pela emissão de fótons. A emitância, que é uma constante característica da máquina e depende apenas da configuração da rede magnética do anel de armazenamento, é um dos principais parâmetros de uma fonte de luz sícrotron.

A redução da emitância é uma das formas mais efetivas para aumentar o brilho das fontes de luz, por isso a busca constante por fontes de emitância cada vez menores. Esse é um dos objetivos no projeto e construção de novos sícrotrons. O Sirius está sendo projetado para ter uma das menores emitâncias do mundo atualmente.



Vista parcial do modelo 3D dos aceleradores do Sirius, onde podem ser vistos os superperíodos do anel de armazenamento, compostos pela rede magnética e por trechos retos



## Linhas de luz

Uma vez que a radiação eletromagnética é emitida, ela precisa ser coletada e condicionada de forma apropriada para ser utilizada pelos pesquisadores. Isso é feito nas chamadas linhas de luz. Elas são estações experimentais instaladas ao redor da fonte de luz, e é para onde a luz síncrotron produzida nos aceleradores é continuamente guiada. É também nas linhas de luz que a radiação passa pelas amostras a serem analisadas, possibilitando as medições experimentais.

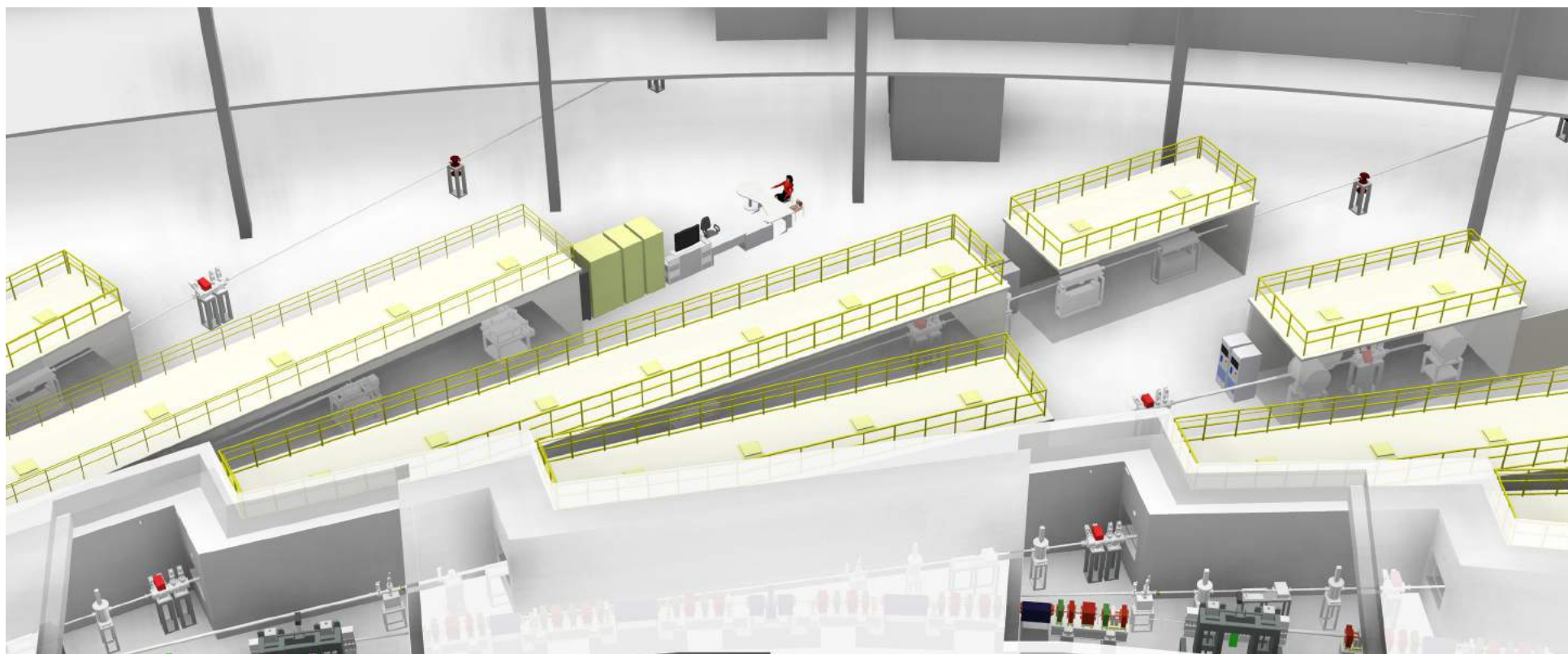
Porém, antes de chegar à amostra, a radiação síncrotron tem seu espectro eletromagnético “filtrado” de acordo com a técnica experimental a ser adotada. Esta filtragem, feita por dispositivos chamados monocromadores, permite a seleção do comprimento de onda desejado, seja ele característico da radiação infravermelha, ultravioleta ou raios X.

Uma linha de luz normalmente é composta por vários componentes, como espelhos, monocromadores, fendas, detectores e outros, distribuídos em diferentes unidades, ou cabanas. Essas cabanas têm como objetivo garantir a segurança do trabalho e prover estabilidade aos componentes da linha de luz. Para uma máquina como o Sirius, os quesitos de estabilidade mecânica e térmica para os componentes das linhas de luz são tão rígidos quanto para os sistemas dos aceleradores.

O conjunto de todos esses componentes permite uma descrição quantitativa sobre quais tipos de átomos e de moléculas constituem um dado material, seus estados químicos, sua organização espacial, suas propriedades magnéticas, etc. Um diferencial das fontes síncrotron é que elas permitem a obtenção dessas informações *in situ* e em função do tempo.

Ou seja, em uma linha de luz síncrotron é possível observar o modo como as características microscópicas de um material se alteram quando este é submetido a certas condições extremas de temperatura, tensão, pressão, ambientes corrosivos e campos elétricos e magnéticos. Esta habilidade é uma das principais vantagens da radiação síncrotron, quando comparadas com outras tecnologias de melhor resolução, como a microscopia eletrônica.

As linhas de luz são os locais onde o objetivo final do uso da luz síncrotron é realizado. São elas que recebem os pesquisadores para a execução dos seus experimentos. Desta forma, quanto maior o número de linhas de luz em operação, maior é o ganho de escala no investimento em um acelerador síncrotron, pois maior é o número de experimentos que podem ser realizados ao mesmo tempo a partir da mesma infraestrutura básica.



Modelo 3D das linhas de luz do Sirius e seus componentes



# Sirius: mais brilho para a ciência e tecnologia brasileiras

A qualidade de uma fonte de luz síncrotron é determinada pelo seu brilho, já que algumas aplicações científicas e métodos experimentais só podem ser realizados em fontes de luz com alto brilho e coerência. Assim, há uma busca constante pela construção de síncrotrons cada vez mais brilhantes, dentre os quais o Sirius se destaca por ser projetado para ter o maior brilho do mundo entre as fontes com sua faixa de energia.

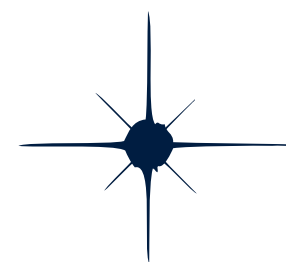
A forma mais eficiente para se alcançar um alto brilho é por meio de uma baixa emitância do feixe de elétrons, provendo condições para que o feixe permaneça focalizado e colimado. Sirius está sendo projetado para ter uma emitância de apenas 0,28 nm.rad, o que pode ser considerado como “ultrabaixa emitância”. Sirius, assim como o MAX-IV, da Suécia, serão as primeiras fontes de luz síncrotron consideradas de 4ª geração. Isso impõe ao projeto enormes desafios técnicos e de engenharia que só podem ser suplantados graças aos recentes desenvolvimentos em tecnologia de aceleradores.

**Sirius é um projeto de física e engenharia com características singulares, no Brasil e no mundo. Ele apresenta desafios em várias áreas, desde sofisticados cálculos matemáticos para a definição dos parâmetros dos aceleradores até o projeto de diferentes componentes mecânicos e eletrônicos com requisitos restritos de tolerância e fabricação.** Isso inclui a construção do seu prédio, que exige alta estabilidade com relação a vibrações mecânicas e variações de temperatura.

É importante destacar que todas as especificações do projeto, bem como os seus principais desenvolvimentos tecnológicos, com características inovadoras em nível mundial, estão sendo realizados pelo próprio LNLS.

A seguir serão apresentados, com um pouco mais de detalhamento, os três principais componentes do Sirius:

- 1) Fonte de luz
- 2) Linhas de luz
- 3) Edificações



## A tecnologia do Sirius em números

*Energia dos elétrons: 3 GeV*

*Circunferência do anel: 518,4 m*

*Diâmetro do anel: 165 metros*

*Número de linhas de luz comportadas: 40*

*Emitância: 0,28 nm.rad*

*Área do prédio: 68000 m<sup>2</sup>*

*Mais de 1350 magnetos*

*Radiofrequência: cavidades supercondutoras, mais de 500 kW em 500 MHz*

*Vácuo: mais de 1 km de câmaras de vácuo e mais de 1300 componentes*

*Sistema de controle: 8000 pontos de controle e mais de 400 computadores*

*Túnel: mais de 500 metros com temperatura controlada em +/- 0,1°C*

*Linac: quatro estruturas aceleradoras, 90 MW pulsados em 3 GHz*

*Sincronismo: Cerca de 800 sinais distribuídos*

*Diagnóstico: Mais de 250 monitores de posição*

*Proteção radiológica: 1 km de blindagem de concreto com 0,8 a 1,5 m de espessura e 3 m de altura*

*Intertravamento: 4000 pontos de monitoração*

*Fontes de corrente: cerca de 900 fontes e mais de 40 km de cabos de alimentação*

*Infraestrutura: 700 km de cabos elétricos*

*Terraplanagem: Movimentados 220 mil m<sup>3</sup> de terra com compactação mínima de 98%*

## Fonte de luz síncrotron

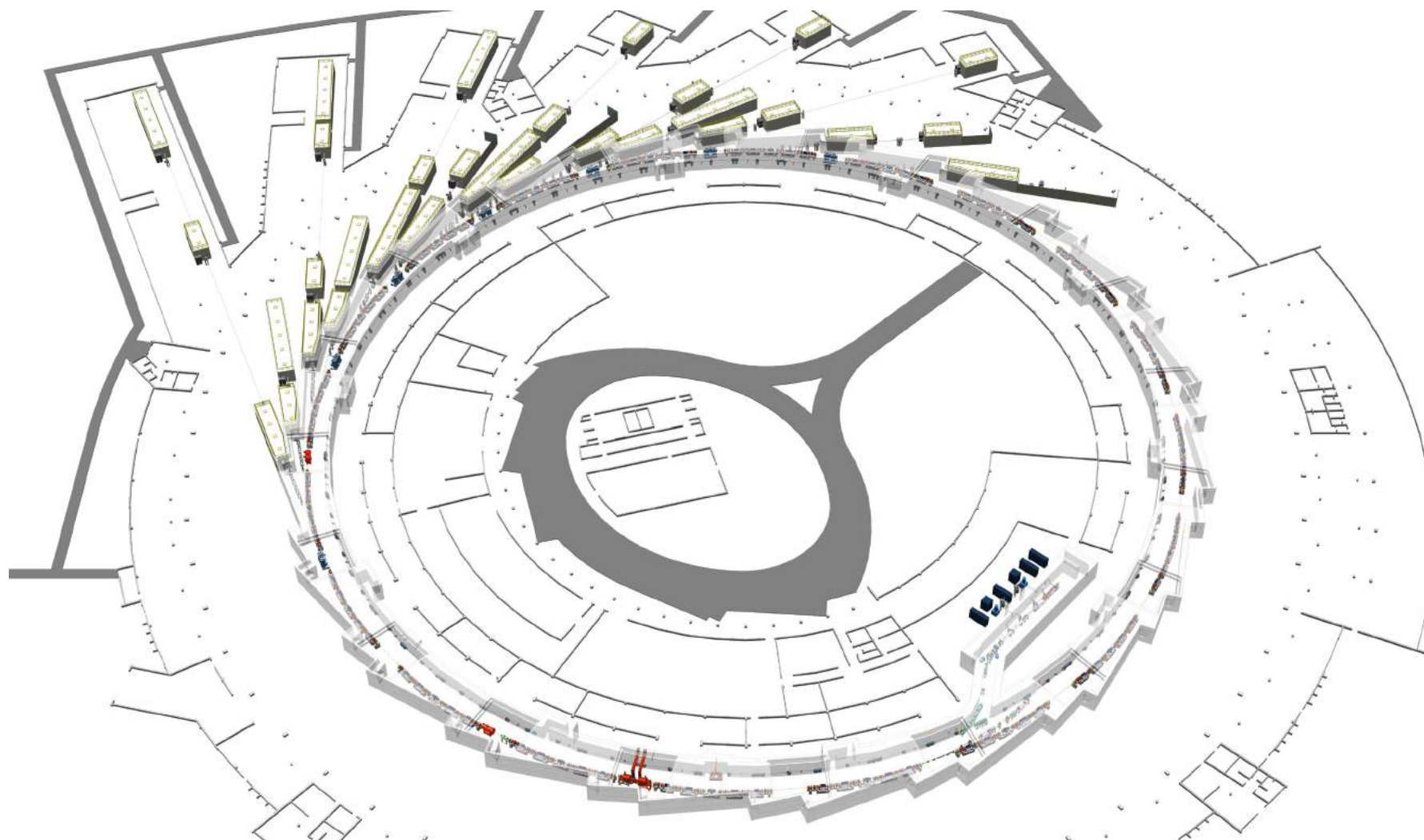
Para produzir luz síncrotron é necessário o uso de aceleradores de partículas, capazes de produzir e controlar o movimento de partículas carregadas de alta energia e quase na velocidade da luz (ultrarrelativísticas). Considerando que há uma forte dependência entre a potência de luz emitida e a massa da partícula acelerada, os elétrons, por serem leves, são ideais para esse fim. Uma fonte de luz síncrotron é composta por dois componentes principais:

a) O anel de armazenamento, que é o acelerador principal, responsável pelo armazenamento dos elétrons que irão, de fato, produzir a luz síncrotron. Em torno deste acelerador são instaladas as estações experimentais (linhas de luz);

b) O sistema injetor, responsável por gerar o feixe de elétrons que será armazenado no anel principal.

O anel de armazenamento da fonte de luz síncrotron Sirius é projetado para operar na energia de 3 GeV. O sistema injetor inclui

dois outros aceleradores: um acelerador linear (Linac) de 150 MeV, e um síncrotron injetor (Booster) com energia final de 3 GeV, além de linhas de transporte que levam o feixe de elétrons do Linac para o Booster e dele para o anel. O anel de armazenamento e o Booster são concêntricos e localizados no mesmo túnel circular. Com 518,4 metros de circunferência, o anel de armazenamento será instalado no perímetro maior do túnel, enquanto o Booster de 496,8 metros será instalado no perímetro menor. O Linac ficará em um túnel próprio de 32 metros de comprimento, conectado à parte interna do túnel. O anel possui 20 setores, ou superperíodos, sendo cada setor composto por um trecho em arco onde se localizam os magnetos e um trecho reto longo, destinado aos dispositivos de inserção e aos sistemas de injeção e radiofrequência da máquina. As linhas de luz estão dispostas no hall experimental, ao redor do anel de armazenamento.



Layout da fonte de luz Sirius. O hall experimental será capaz de acomodar linhas de luz de até 150 m de comprimento



### O anel de armazenamento do Sirius

Para construir uma fonte de luz síncrotron é preciso prover condições de estabilidade para que um feixe ultrarrelativístico de elétrons fique armazenado por várias horas emitindo luz. O anel de armazenamento é um tipo de acelerador circular otimizado para manter um feixe de partículas armazenado por longos períodos.

De forma simplificada, o acelerador é composto por uma rede magnética que deflete e focaliza os elétrons; uma câmara de ultra-alto vácuo que delimita a região de trânsito dos elétrons e permite que o feixe permaneça armazenado em um ambiente desobstruído; cavidades de radiofrequência, utilizadas para repor a energia perdida pelos elétrons na forma de radiação; e um conjunto de sistemas auxiliares que permitem que o acelerador como um todo funcione.

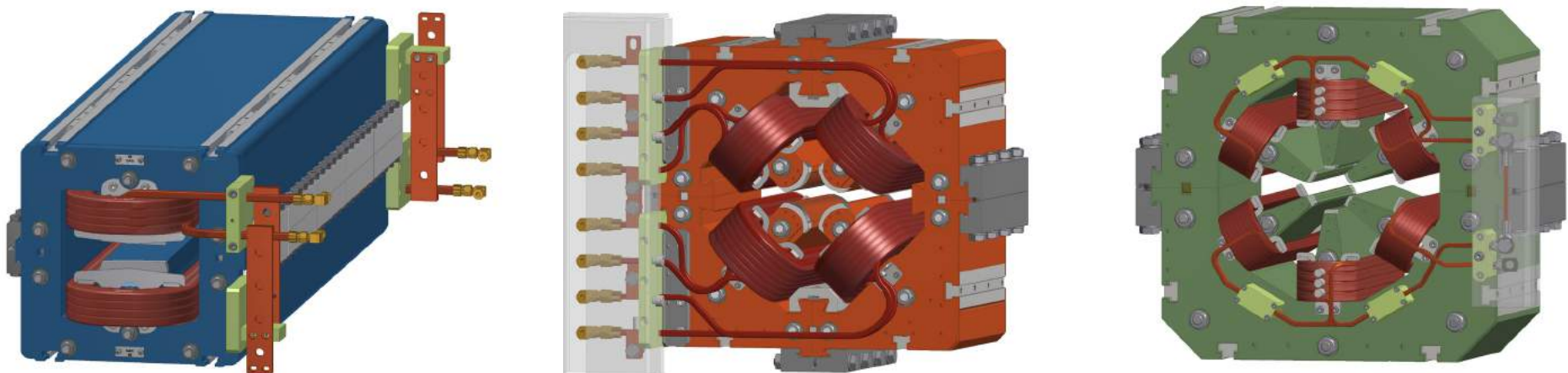
Os principais sistemas que compõem um anel de armazenamento são descritos a seguir.

**Rede magnética:** A rede magnética é o conjunto de elementos magnéticos responsáveis por defletir e focalizar o feixe de elétrons, definindo uma órbita nominal fechada e uma região de estabilidade em seu entorno. Para permanecerem armazenados, os elétrons per-

correm trajetórias dentro dessa região estável, oscilando em torno da órbita nominal determinada pela rede. Tipicamente, em uma fonte como o Sirius, o feixe armazenado possui cerca de  $10^{12}$  elétrons.

O dipolo é o elemento responsável pela deflexão da trajetória dos elétrons, definindo a órbita de referência em torno da qual os elétrons permanecerão armazenados. Os quadrupolos são responsáveis pela focalização do feixe e o sextupolo é utilizado para corrigir a aberração cromática resultante da ação dos quadrupolos sobre um feixe com dispersão de energia finita.

A rede magnética é uma combinação meticulosamente projetada de dipolos, quadrupolos e sextupolos que tem um impacto direto sobre as características do feixe de elétrons e da luz produzida. No Sirius, vários desses ímãs possuem funções combinadas. Os elementos da rede possuem configurações de campo otimizadas para as funções que desempenham e a qualidade com que esses ímãs são produzidos e, posteriormente, alinhados na montagem do acelerador, são determinantes para a qualidade final da fonte. Nas fontes de alto brilho, como o Sirius, as redes magnéticas são projetadas para que possam acomodar outros elementos magnéticos, denominados dispositivos de inserção, destinados a ampliar o perfil de emissão da máquina.



*Projeto dos ímãs para o Booster do Sirius. Da esquerda para a direita: dipolo, quadrupolo e sextupolo*

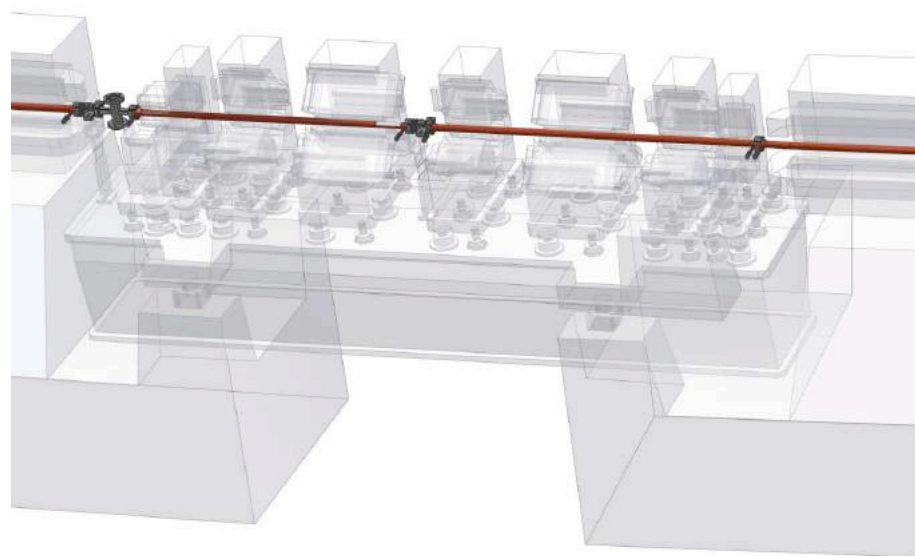
Várias configurações para a rede magnética do Sirius foram analisadas ao longo dos últimos anos. A rede escolhida é composta por 20 células magnéticas de cinco deflexões cada, conhecidas como rede 5BA. Com esta rede a emitância natural do Sirius atingirá o valor de 0,28 nm.rad para uma energia dos elétrons de 3 GeV. A título de comparação, esse valor é cerca de 360 vezes menor do que a emitância do UVX, o anel de 1,37 GeV atualmente em operação no LNSL. Este valor de emitância fará do Sirius uma das fontes de luz síncrotron de maior brilho no mundo.

Dentre as redes magnéticas estudadas, a rede 5BA foi a que apresentou o melhor compromisso em termos de baixa emitância e grande número de seções retas para dispositivos de inserção, considerando a circunferência máxima do anel. A necessidade de controlar a dispersão produzida pelos dipolos de forma a reduzir a emitância da rede faz com que máquinas de baixa emitância sejam intrinsecamente longas. A circunferência do anel conterá 20 trechos retos com comprimentos alternados de 6 e de 7 metros, que serão utilizados, na sua maioria, para instalação dos dispositivos de inserção. Dois trechos serão usados para instalação dos sistemas de injeção e das cavidades de radiofrequência.

A rede 5BA proporcionará uma ótica com bom desempenho frente aos efeitos danosos de não-linearidades da dinâmica dos elétrons. A ótica da rede apresenta-se também estável frente aos efeitos dos dispositivos de inserção e aos erros realistas de alinhamento e campo magnético, que são possíveis de serem atingidos, apesar de exigirem técnicas de alinhamento e produção de magnetos no estado da arte.

Um grande número de dipolos requer, entretanto, forças de focalização quadrupolares e sextupolares bastante fortes para o controle da dispersão e cromaticidade da rede, o que, por sua vez, aumenta as não linearidades que tendem a reduzir a região de estabilidade do movimento dos elétrons. Outras dificuldades técnicas surgem com as forças de focalização fortes: as tolerâncias para erros ficam mais rígidas, exigindo níveis de precisão altos para o projeto e fabricação dos magnetos e para os sistemas de alinhamento e suporte dos mesmos; o espaçamento entre os magnetos fica bastante reduzido, dificultando o projeto mecânico dos equipamentos que devem ser colocados entre estes magnetos; a distância entre os polos dos magnetos deve ser reduzida, deixando pouco espaço para as câmaras de vácuo, o que obriga uma abordagem totalmente diferente para o sistema de vácuo.

**A emitância natural do Sirius atingirá o valor de 0,28 nm.rad para uma energia dos elétrons de 3 GeV. Esse valor é cerca de 360 vezes menor do que a emitância do UVX, o anel de 1,37 GeV atualmente em operação no LNSL**



*O projeto mecânico dos componentes é dificultado pelo espaço reduzido entre os magnetos e pela distância entre os polos dos ímãs, o que limita o espaço para as câmaras de vácuo (em vermelho)*

Até recentemente essas dificuldades técnicas eram o principal empecilho para o desenvolvimento de fontes de luz baseadas em células de múltiplas deflexões. No entanto, avanços recentes na tecnologia de aceleradores encorajaram as primeiras equipes a proporem o uso deste tipo de célula magnética, dentre as quais encontra-se a equipe do Sirius no Brasil.

Além do número de dipolos por célula, vários outros parâmetros foram otimizados para reduzir a emitância. Em cada célula da rede 5BA cinco dipolos de baixo campo, de 0,58 Tesla, são responsáveis pelas deflexões produzidas no feixe de elétrons. Uma inovação na rede do Sirius é a introdução de ímãs permanentes de alto campo – 2 Teslas – no meio do dipolo central da célula 5BA. Além de contribuir para a redução da emitância em aproximadamente 10%, esses dipolos de alto campo também irão produzir raios X duros com fótons de energia crítica em 12 keV, o que significa que os dipolos produzirão fluxo de fótons utilizável até cerca de 50 keV.

Os fótons serão produzidos com uma pequena abertura angular horizontal, decorrente do fato dos dipolos serem curtos, e apenas nas regiões com possíveis saídas de luz. Esta configuração minimiza a potência total da radiação dipolar emitida pelo feixe. A combinação de dipolos com campos magnéticos baixos e insertos de alto campo apenas nas posições das saídas de luz – para gerar raios X duros – é um aspecto inovador do projeto, que não só reduz a potência total de radiofrequência (RF) necessária, como também diminui a necessidade de refrigeração das câmaras de vácuo. A figura abaixo mostra um desenho esquemático de uma célula do Sirius 5BA acromática, com o dipolo de alto campo BC (*superbend*) no meio do dipolo central, formando o conjunto B3-BC-B3.

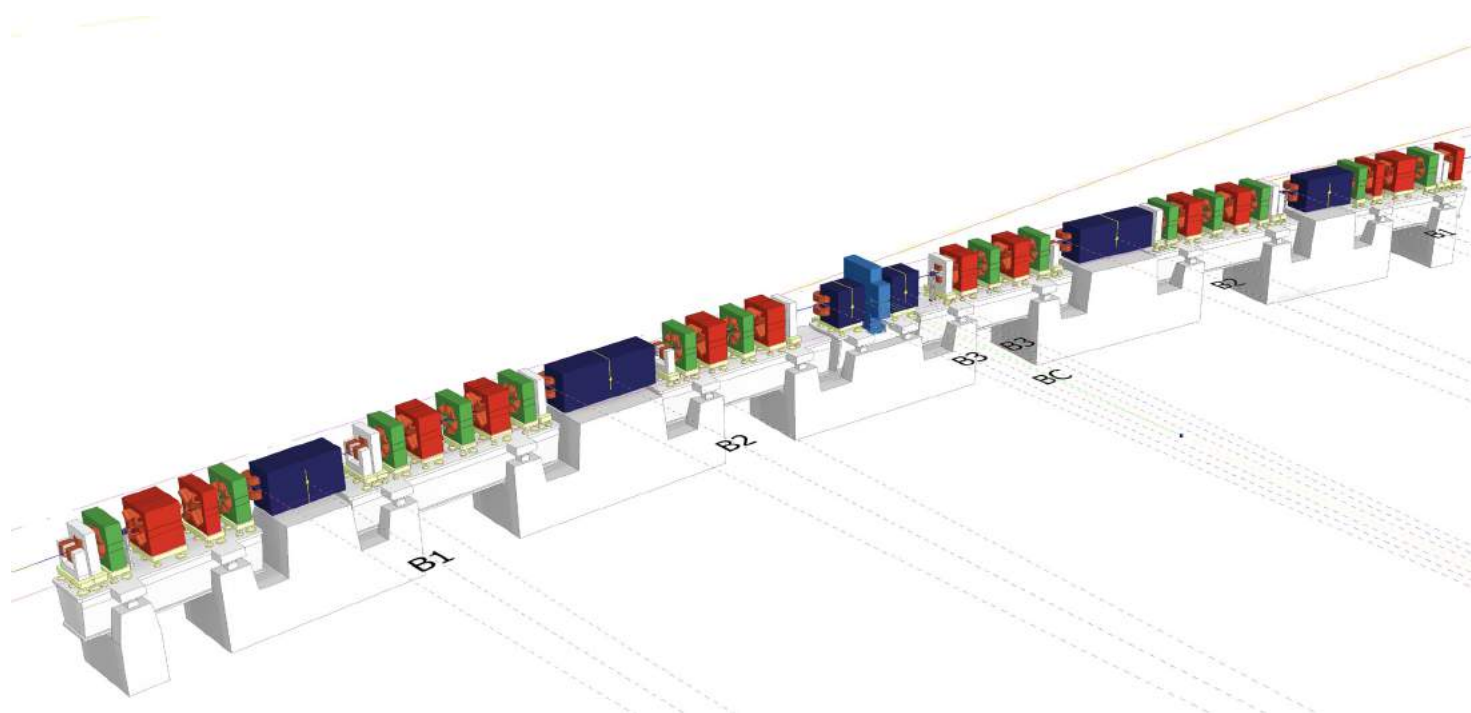
Os principais elementos da rede magnética do anel de armazenamento do Sirius são 120 dipolos de baixo campo (0,58 Tesla), 20 dipolos delgados de alto campo (2 Teslas), 260 quadrupolos, 280 sextupolos, 160 corretoras horizontais lentas, 80 corretoras horizontais rápidas, 120 corretoras verticais lentas e 80 corretoras verticais rápidas.

No Sirius a maioria dos magnetos serão do tipo eletroímã, no qual o campo magnético é gerado através da passagem de uma corrente elétrica em bobinas enroladas ao redor dos polos de um

núcleo magnético. Somente o dipolo delgado de alto campo será confeccionado a partir de ímãs permanentes, utilizando um material de alta magnetização, o neodímio-ferro-boro (NdFeB). Nos eletroímãs a qualidade do campo magnético é dominada pela homogeneidade do núcleo magnético e pela precisão mecânica dos polos. Além disso, a precisão e estabilidade das fontes de corrente também são de extrema importância para determinar a qualidade do campo magnético.

**Em uma fonte de alto brilho como o Sirius, as forças de focalização magnética necessárias são extremamente fortes e as tolerâncias para estabilidade e precisão são extremamente rígidas. Isso requer cuidados especiais no projeto magnético e mecânico dos magnetos.** Em particular, o raio inscrito dos polos magnéticos dos quadrupolos e sextupolos deve ser reduzido para que as fortes forças de focalização sejam atingidas com a tecnologia de eletroímãs convencionais (não supercondutores).

Uma consequência disto é a necessidade de redução do diâmetro das câmaras de vácuo, com implicações para o sistema de vácuo, será mostrada em seguida. Além de reduzir a emitância do feixe de elétrons, a especificação da posição e da configuração de campo



*Disposição do arco 5BA modificada, mostrando o dipolo de alto campo BC, de 2 Tesla (azul escuro no centro do dipolo central B3-BC-B3). À esquerda e à direita do arco ficam as seções retas, de 7 metros e 6 metros, respectivamente. Os quadrupolos são representados em vermelho e os sextupolos, em verde*



magnético dos vários componentes da rede busca também otimizar a *aceitância transversal* e longitudinal da rede. A *aceitância transversal* é a região no espaço de fases, definido pela posição e inclinação das trajetórias com relação à órbita nominal, em que o movimento dos elétrons é estável. A *aceitância longitudinal* corresponde à região onde os desvios em energia e fase são estáveis. As aceitâncias dependem da abertura física da câmara de vácuo e da dinâmica dos elétrons na rede magnética na presença de erros de campo.

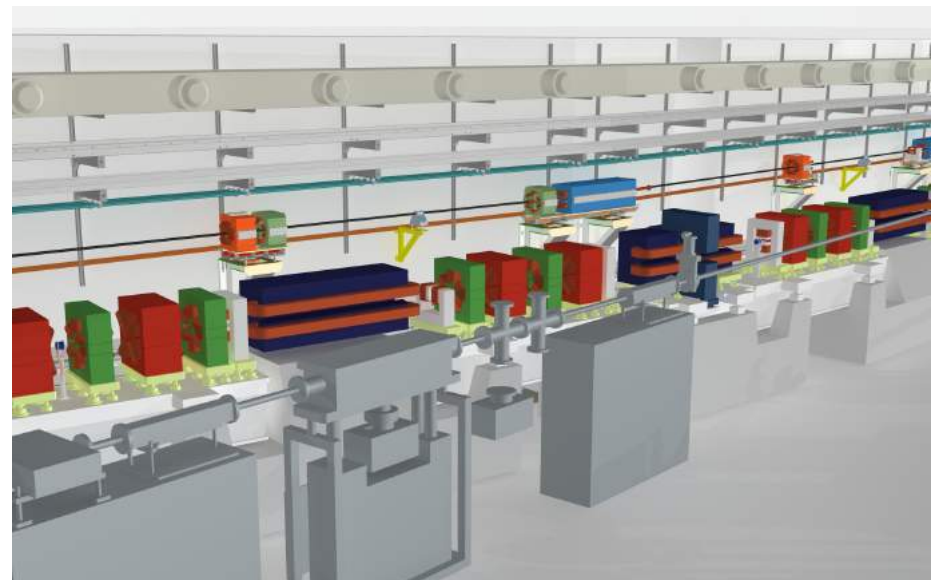
A especificação da rede magnética é a etapa mais importante do projeto da fonte de luz. A evolução das fontes de luz no sentido da menor emitância e do maior brilho se dá pela inovação nos projetos de redes magnéticas e pelos desenvolvimentos tecnológicos que esses projetos suscitam. É a rede magnética que determina as características do feixe de elétrons e, conseqüentemente, da luz produzida. Por essa razão, é extremamente importante que haja uma grande conformidade entre a rede projetada e a realizada, o que impõe tolerâncias rígidas no que se refere a erros de construção, posicionamento e excitação dos componentes da rede. As grandes dificuldades referentes à rede magnética do anel de armazenamento são:

- Pouca tolerância com relação a erros de campo nos principais componentes (dipolos, quadrupolos e sextupolos), o que impõe dificuldades nos projetos magnético e mecânico dos magnetos, e na construção e posicionamento desses componentes;
- A focalização muito forte de quadrupolos e sextupolos, e o uso de magnetos com funções combinadas dificultam o projeto e construção desses elementos;
- Tolerâncias rígidas sobre as fontes de corrente que excitam os vários magnetos da rede, demandando alta estabilidade de curto e longo prazo, alta acurácia e alta resolução nos ajustes de corrente;

A rede magnética do anel possuirá 1.120 elementos, alimentados por cerca de 880 fontes de corrente. As fontes de corrente possuirão regulação e controle digital e os vários modelos possuem potência nominal variável entre 100 W (corretores de órbita) e 125 kW (dipolos). A alta estabilidade, da ordem de 20 partes por milhão (ppm), exigida de fontes com alta potência de saída não é trivial de ser conseguida.

**Sistema de posicionamento e estabilização mecânicos dos componentes:** Um dos maiores desafios do Sirius é a estabilidade. O objetivo é fazer um feixe de elétrons, que em alguns

**Um dos maiores desafios do Sirius é a estabilidade. O objetivo é fazer um feixe de elétrons, que em alguns trechos do acelerador tem apenas 1,5 micrômetro de tamanho vertical, percorrer uma trajetória de 500 metros de circunferência, dando 600.000 voltas por segundo, sem que ele oscile mais do que 150 nanômetros**



*Projeto detalhado do túnel dos aceleradores, onde pode ser visto um trecho do anel de armazenamento (em primeiro plano), a saída para uma linha de luz (em cinza) e um trecho do Booster (ao fundo)*

trechos do acelerador tem apenas 1,5 micrômetro de tamanho vertical (as células vermelhas do sangue humano possuem entre 6 e 7 micrômetros de diâmetro), percorrer uma trajetória de 500 metros de circunferência, dando 600.000 voltas por segundo, sem que ele oscile mais do que 1/10 do seu tamanho (o que equivale a cerca de 150 nanômetros).

O que determina a qualidade da "pista" vista pelos elétrons é o campo magnético gerado pelos 1120 eletroímãs que formarão o anel de armazenamento. Qualquer vibração mecânica de um desses magnetos ou qualquer variação da corrente que gera o campo irá afetar a trajetória dos elétrons. Além disso, alguns desses magnetos, mais especificamente os quadrupolos, funcionam como lentes magnéticas e possuem um fator amplificador. Um micrômetro de deslocamento de um desses magnetos pode levar a até 50 micrômetros de deslocamento do feixe, arruinando a estabilidade e a resolução dos experimentos.

A necessidade de alta estabilidade mecânica dos vários elementos da rede magnética faz com que os projetos dos suportes desses elementos, comumente chamados de “berços”, tenham que ser realizados com extremo cuidado para evitar ressonâncias mecânicas que possam prejudicar o desempenho da fonte de luz.

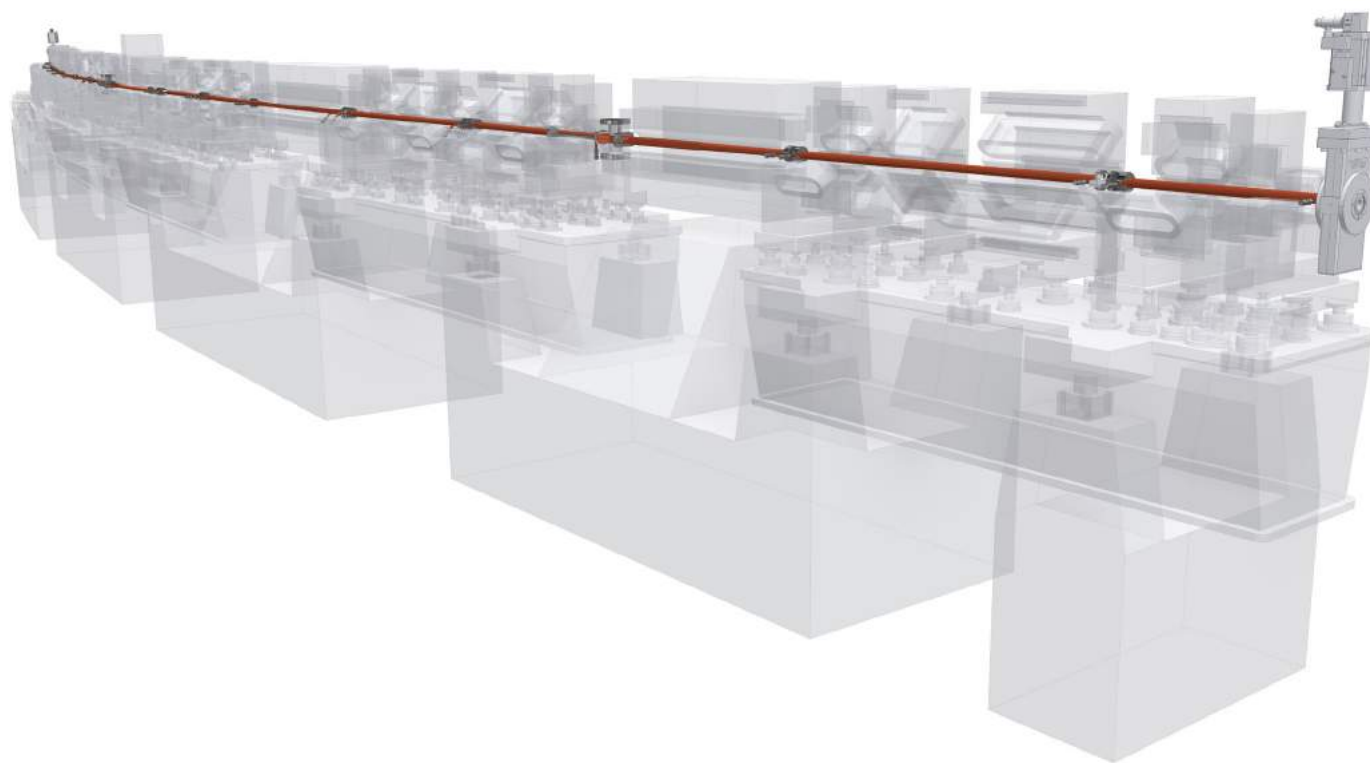
A pequena tolerância a vibrações em geral faz com que o projeto do piso onde serão assentados os aceleradores e as linhas de luz seja bastante complexo. Esta tem sido uma área de intensos estudos nos vários laboratórios síncrotron, na medida em que as máquinas progridem para emitâncias cada vez mais baixas e requisitos de estabilidade mecânica cada vez mais rígidos. O piso é uma fração considerável do custo dos aceleradores, todo o prédio que acomoda a fonte tem que ser projetado de forma a minimizar a possibilidade de vibrações produzidas por ruídos culturais internos (pessoas caminhando, equipamentos e motores ligados etc.) e externo (tráfego nas vizinhanças), e pela interação com o meio ambiente (vento).

**Assim, como a estabilidade mecânica da rede magnética é inseparável da estabilidade do piso e dos suportes, estes elementos demandam extremo cuidado no projeto e construção e estão na fronteira do que hoje é possível atingir.** O posiciona-

mento dos componentes dos aceleradores sobre essas bases será feita utilizando a mais moderna instrumentação para geodesia de precisão.

**Sistema de vácuo:** O sistema de vácuo delimita o ambiente em que o feixe de elétrons trafega sob efeito dos campos eletromagnéticos. Este ambiente deve ser praticamente livre de moléculas de gás, pois colisões entre o feixe de elétrons e moléculas de gás podem levar à perda de elétrons armazenados e a uma rápida queda na corrente do feixe. Quanto melhor o vácuo, ou seja, quanto menor a pressão de gás residual, menor a probabilidade de perda de elétrons por colisão com moléculas de gás.

A pressão média ao longo do ambiente de vácuo de mais de 500 metros de comprimento para o anel de armazenamento do Sirius deve ser menor que 1 ntorr ( $<10^{-7}$  Pa), um trilhão de vezes menor que a pressão atmosférica. Este valor corresponde ao que se convencionou chamar de ultra-alto vácuo e requer várias técnicas especiais para sua produção. O ambiente de vácuo é fisicamente delimitado pelas câmaras de vácuo, que são caracterizadas principalmente pelo material em que são confeccionadas e por suas dimensões geométricas.



*Simulação da câmara de vácuo do Sirius, que delimita a região de trânsito dos elétrons, já acomodada na rede magnética do Sirius*

A necessidade de focalização forte dos magnetos obriga a utilização de câmaras de vácuo de dimensões reduzidas. No anel de armazenamento do Sirius a câmara de vácuo na região dos quadrupolos e sextupolos será cilíndrica, com o raio da região livre para os elétrons de 12 mm, valor consideravelmente menor que os valores usualmente utilizados nas fontes de luz síncrotron atuais. O raio da câmara de vácuo do anel UVX, por exemplo, é de 30 mm.

O tamanho reduzido da câmara de vácuo traz várias consequências, entre as quais está a necessidade de bombeamento distribuído com a tecnologia NEG (*Non evaporable getters*). **O NEG é um filme fino depositado sobre a superfície interna das câmaras de vácuo com capacidade de aprisionar gases, proporcionando um efeito de bombeamento de vácuo. A tecnologia para deposição destes filmes foi estabelecida e testada no LNLS, após acordo com o CERN (Organização Europeia para a Pesquisa Nuclear).**

Outra consequência do tamanho reduzido é o aumento da interação entre os elétrons e as paredes da câmara de vácuo, o que pode provocar instabilidades coletivas no feixe armazenado. Os campos eletromagnéticos induzidos pela interação do feixe com a parede da câmara de vácuo podem realimentar o movimento do próprio feixe, causando perda de elétrons. Em função disso o material a ser utiliza-

do nas câmaras de vácuo será o cobre, já que a alta condutividade elétrica do cobre diminui esse tipo de interação. Para isso foi necessário desenvolver vários processos de união e solda de cobre com cobre e com outros materiais compatíveis com ultra-alto vácuo.

Os grandes desafios no que diz respeito ao sistema de vácuo do anel de armazenamento são:

- A rede magnética é muito densa em componentes, o que dificulta o projeto dos componentes de vácuo em função do reduzido espaço disponível para acomodá-los;
- A deposição de NEG será feita em câmaras com geometrias complexas, como as câmaras de dipolos com saída para linhas de luz. Para todas as câmaras as superfícies devem ser limpas e com baixa rugosidade (menor que 500 nanômetros);
- É necessário o projeto cuidadoso dos elementos da câmara de vácuo, de modo a minimizar a impedância para o feixe e aumentar o limiar de corrente que pode ser armazenado na máquina sem que instabilidades sejam produzidas no feixe pela interação com as paredes da câmara.

Além dos trechos retos cilíndricos, a câmara de vácuo inclui uma série de componentes cuidadosamente projetados, como *bellows*, flanges, monitores de posição do feixe, estações



Filme NEG depositado na parede interna de um segmento da câmara de vácuo projetada para o Sirius



Teste de processo de solda de cobre para as câmaras de vácuo do anel de armazenamento



**Dentre os maiores desafios do sistema de diagnóstico está o projeto e fabricação dos monitores de posição do feixe de elétrons, já que a medida de posição do feixe deve ter precisão de décimos de micrômetros**

de bombeamento localizado, câmaras cerâmicas e câmaras com saídas para linhas de luz.

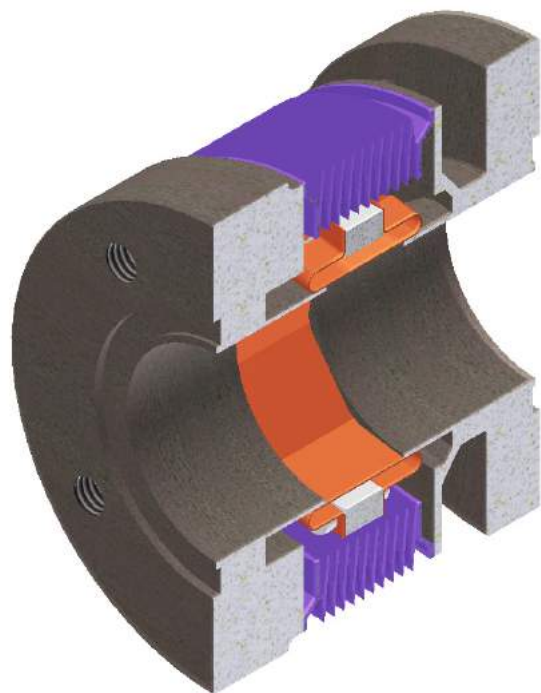
Para todos esses componentes, o processo de fabricação envolve várias etapas de brasagens, soldas e limpeza para ultra-alto vácuo. O sistema inclui também um grande número de monitores de vácuo, analisadores de gás residual e bombas iônicas localizadas em pontos críticos. No total, a câmara de vácuo do anel de armazenamento é formada por mais de 1000 componentes.

**Sistemas de diagnóstico e realimentação:** Os elementos e sistemas de diagnóstico e *feedback* são responsáveis por moni-

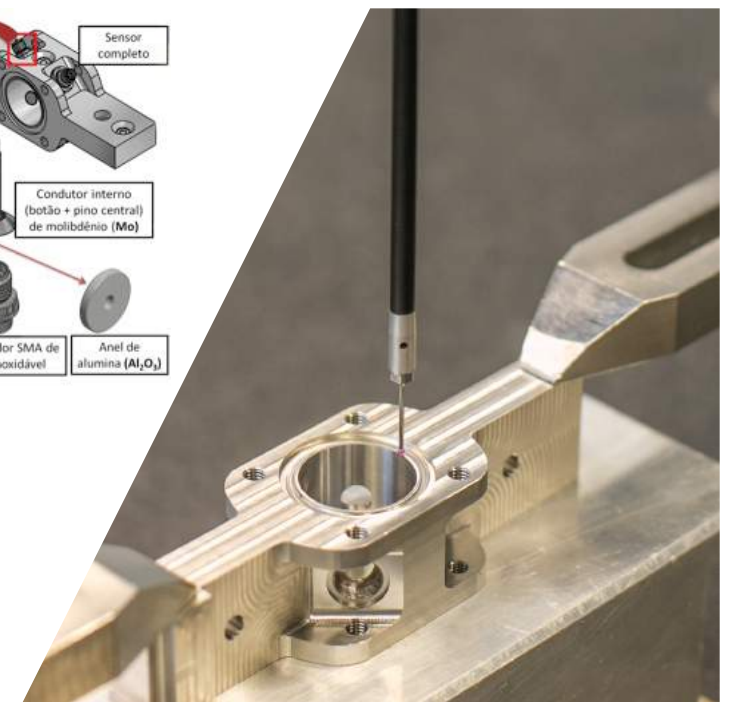
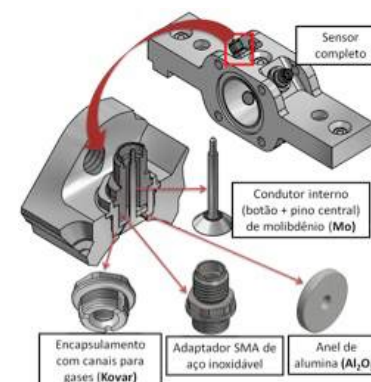
torar e corrigir dinamicamente parâmetros dos feixes de elétrons e de fótons nas diversas partes do complexo de aceleradores e linhas de luz, e são essenciais para garantir uma alta estabilidade e confiabilidade da fonte de luz síncrotron. Grandezas como intensidade, posição e dimensões tridimensionais do feixe de elétrons e de fótons são monitoradas e corrigidas se necessário.

Diversos equipamentos de monitoração, diagnóstico e correção de parâmetros da fonte de luz fazem parte destes sistemas dentre os quais destacam-se os monitores de posição do feixe de elétrons, os monitores de posição do feixe de fótons, monitores de corrente do feixe, monitores de frequências de oscilação do feixe e os atuadores para correção de desvios de órbita e frequências de oscilação.

Dentre os maiores desafios do sistema de diagnóstico está o projeto e a fabricação dos monitores de posição do feixe de elétrons, já que a medida de posição do feixe deve ter precisão de décimos de micrômetros e a medida não pode perturbar o feixe estocado. Se a interação entre o monitor e o feixe não for controlada há problemas sérios de superaquecimento e, portanto, de distorções das medidas podem ocorrer. A eletrônica dos monitores deve ter resolução temporal para medidas de



O bellow é um dos componentes da câmara de vácuo que deve ser projetado com tolerâncias dimensionais extremamente exigentes



Modelamento (à esquerda) e protótipo do monitor de posição do anel de armazenamento, durante medição tridimensional

posição dos pacotes a cada volta no anel (medidas de posição volta-a-volta), o que significa cerca de 500 mil medidas precisas de posição a cada segundo.

As especificações de estabilidade da fonte de luz síncrotron demandam um monitor de posição que apresente níveis de estabilidade abaixo de 10% das dimensões do feixe a ser monitorado, ou seja, o monitor pode se mover, seja lenta ou rapidamente, menos de 100 nm, o que significa estabilidade melhor que 0,0001 mm. Variações térmicas da ordem de 1 décimo de grau ou vibrações mecânicas do solo e das partes mecânicas próximas ao monitor podem facilmente deteriorar sua estabilidade mecânica.

O sistema de diagnóstico inclui, portanto, alguns grandes desafios:

- O projeto e a construção dos monitores de posição do feixe de elétrons estão na fronteira do que é feito atualmente em fontes de luz; **a combinação de usinagem de precisão, soldas e brasagens para atingir precisões da ordem de 20 micrômetros colocam esse projeto no limite do que essas tecnologias podem atingir;**

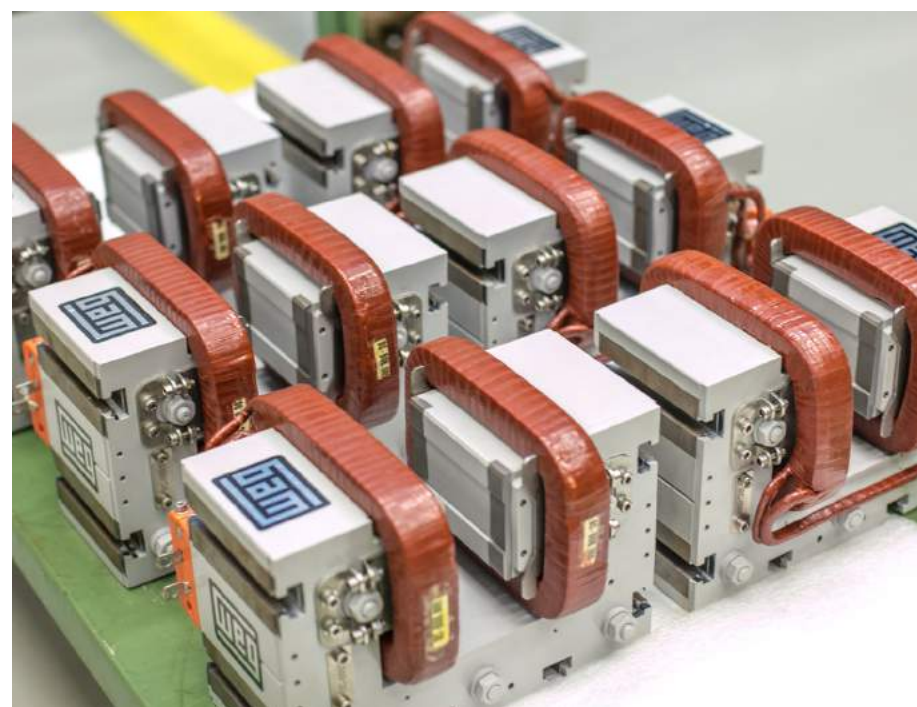
- As eletrônicas digitais de medida de posição estão sendo desenvolvidas no LNLS e devem ser capazes de processar os

sinais eletromagnéticos produzidos pelos sensores e fornecer a posição do feixe com alta resolução e baixíssimo ruído para uma grande faixa de correntes de operação.

Para manter a estabilidade do feixe dentro das tolerâncias existem dois sistemas de correção de órbita dedicados a compensar variações de longo e curto prazo. Esses sistemas utilizam as medidas de posição fornecidas pelos monitores de posição e atuam sobre conjuntos de magnetos (corretores) de modo a minimizar as distorções na órbita do feixe. As variações de curto prazo estão a cargo do sistema de correção de órbita rápido, que opera em uma taxa de 10 mil correções por segundo e deve ser capaz de atenuar flutuações de até 1 kHz na órbita do feixe. Esse sistema demanda características especiais para fontes, magnetos, sistema de controle e para o próprio sistema de diagnóstico de modo a poder operar dentro das especificações. O desenvolvimento deste sistema está sendo realizado no próprio LNLS e é outro grande desafio do projeto. Outro sistema de realimentação muito importante é o que suprime instabilidades do feixe, atuando sobre cada um dos 864 pacotes de elétrons individualmente. Cada pacote percorre uma volta no anel de armazenamento em 1,7 microssegundos. Este sistema utiliza sensores e atuadores especialmente desenhados para esse fim.

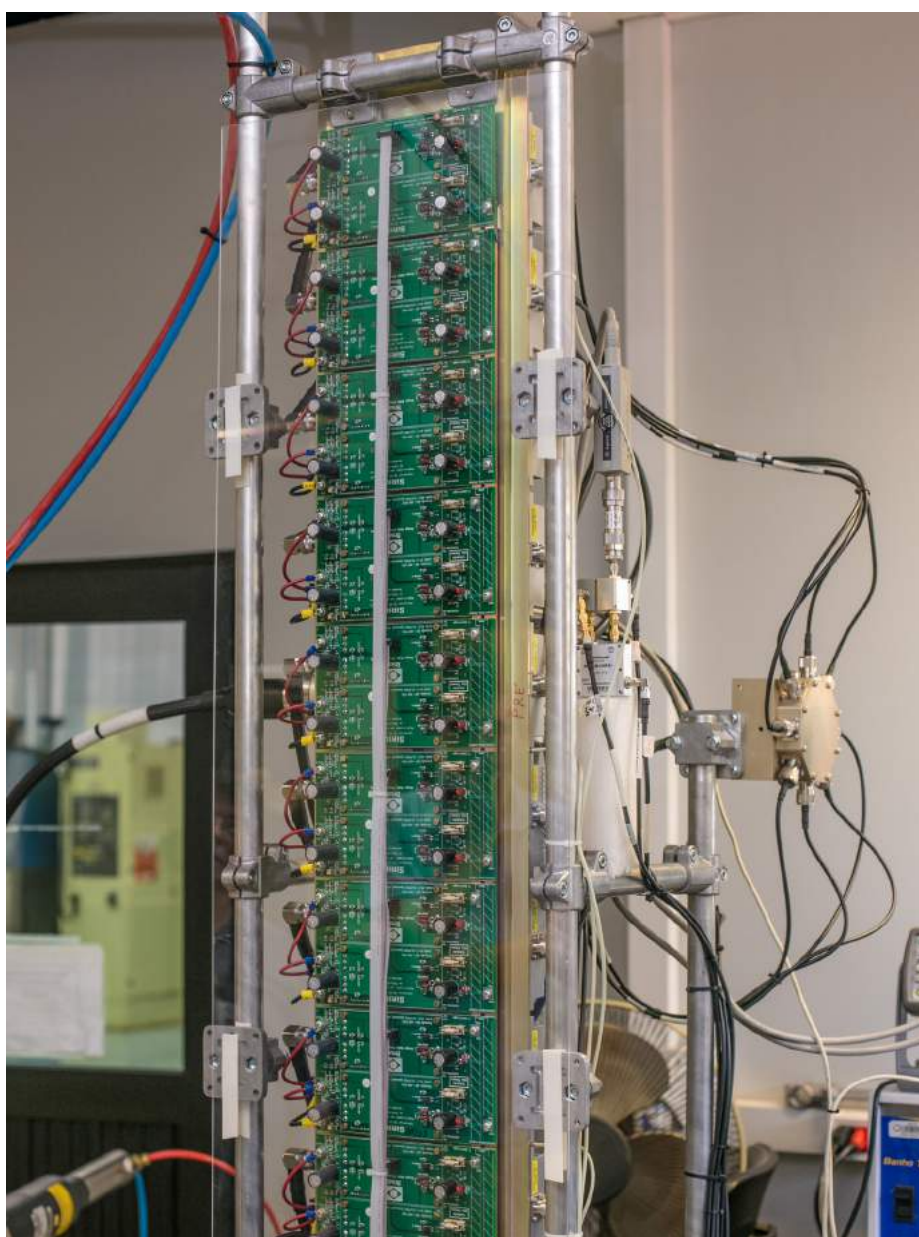
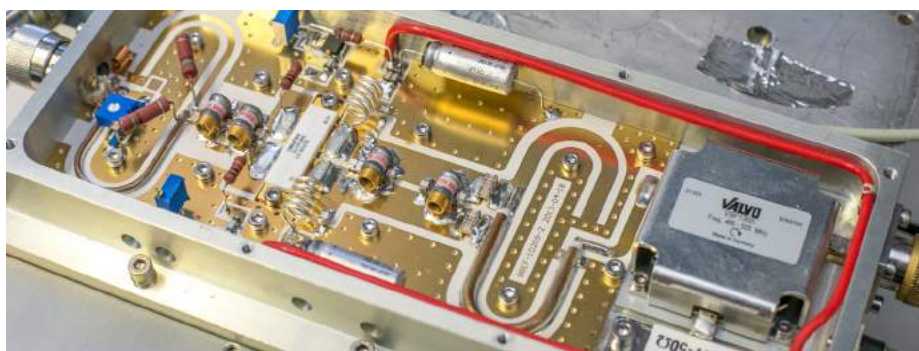


*Placa eletrônica digital para medição de posicionamento, desenvolvida no LNLS*



*Lote-piloto do dipolo corretor de órbita, projetado para o Booster e fabricado pela empresa WEG*





Protótipo de uma seção de 5 kW do amplificador de estado sólido, parte do sistema de radiofrequência. No detalhe, módulo amplificador de 600 W em 500 MHz

Para monitorar o feixe de luz entregue aos usuários da fonte, estão sendo desenvolvidos monitores de raios X, que utilizam a própria luz síncrotron e que são posicionados nas saídas das linhas de luz. Por fim, um outro grande desafio em termos de diagnóstico do feixe é o sistema de medida da emitância. Por ser muito pequena, a medida da emitância do Sirius está na fronteira do conhecimento. Uma linha de diagnóstico do feixe está sendo especialmente projetada para este fim.

A confiabilidade e o projeto adequado dos sistemas de diagnóstico e realimentação são fundamentais, não só para o comissionamento rápido da máquina, como também para a operação da fonte de luz de maneira segura, confiável e estável.

**Sistema de radiofrequência:** No anel de armazenamento o sistema de *radiofrequência* (ou sistema de RF) repõe a energia perdida pelo feixe de elétrons. A perda principal ocorre devido à emissão de luz síncrotron, mas perdas parasíticas, principalmente devido à interação do feixe com a câmara de vácuo e outros elementos do anel, também devem ser repostas.

Os principais elementos do sistema de RF são as cavidades de RF, estruturas metálicas que confinam campos eletromagnéticos oscilando na faixa de micro-ondas, cujo modo fundamental de ressonância possui um campo elétrico oscilante longitudinal, na direção de propagação dos elétrons. As cavidades de RF são parte da câmara de vácuo do anel. Ao atravessar a cavidade na fase correta de oscilação do campo elétrico o feixe recebe a energia necessária para repor a que foi perdida ao longo de sua trajetória.

Acochado às cavidades existe um sistema de RF de baixa e alta potência, que inclui circuitos de controle, amplificadores de potência e linhas de transmissão. A potência total de RF necessária inclui também perdas nas próprias cavidades de aceleração, nos guias de onda e componentes da linha de transmissão entre o gerador e as cavidades. Além da frequência de operação, um outro parâmetro importante do sistema de RF é a tensão de pico disponível nas cavidades, já que esta afeta a aceitância longitudinal e o tempo de vida do feixe.

O sistema de RF do anel de armazenamento inclui duas cavidades supercondutoras operando em 500 MHz, cada uma delas alimentada por um conjunto de amplificadores de estado sólido capazes de entregar até 240 kW de potência.



Dentre os desafios envolvidos na construção do sistema de RF estão:

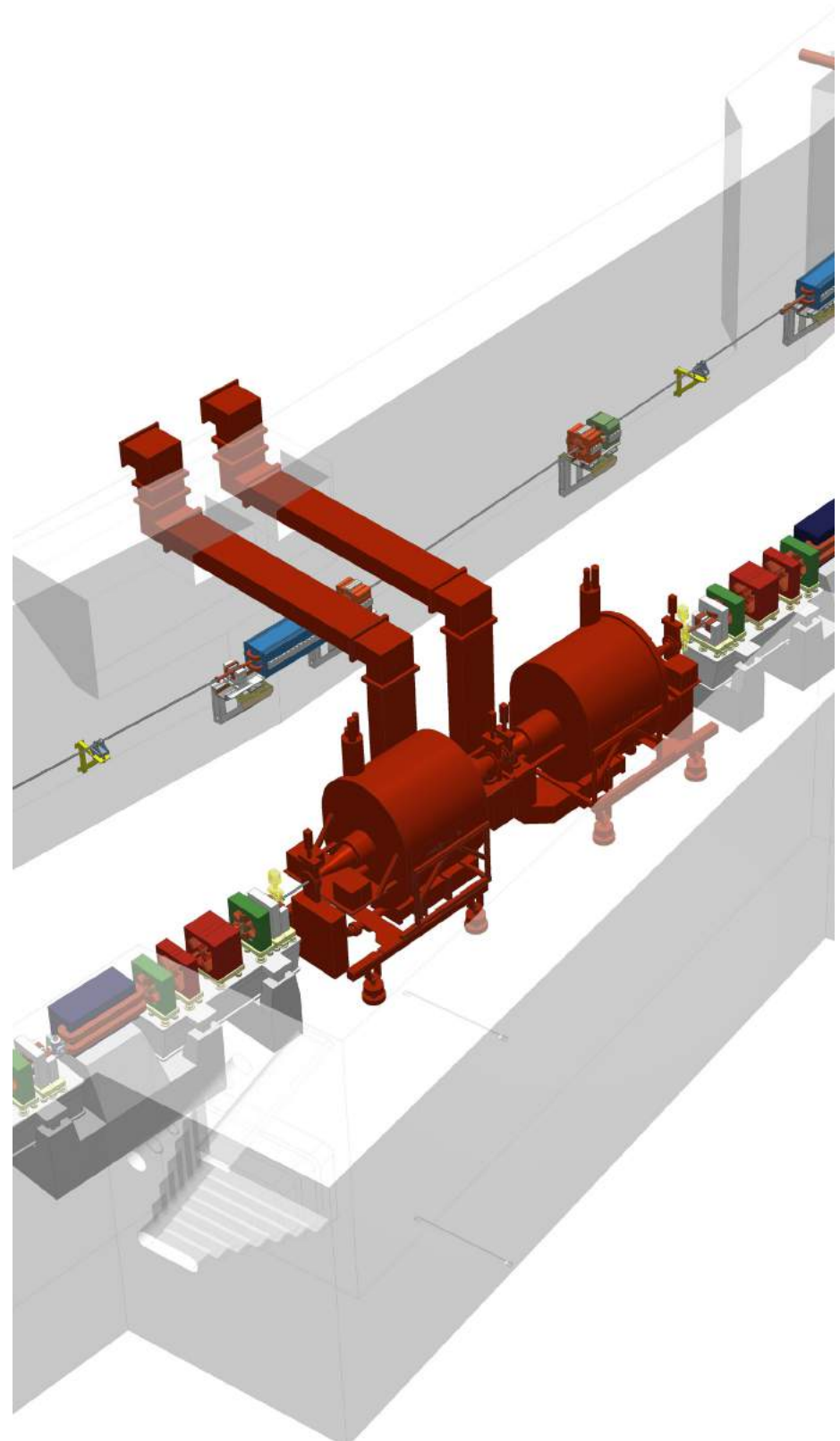
- Construção no LNLS de dois amplificadores de 240 kW, cada um deles combinando a saída de 4 amplificadores de 60 kW;
- As tolerâncias para os circuitos de controle do sinal de RF nas cavidades são bastante exigentes devido às pequenas dimensões do feixe de elétrons;

**Cada cavidade supercondutora fica alojada em um criostato, imersa em hélio líquido a uma temperatura de 4,5 K (o equivalente a -268,65°C).** A operação dessas cavidades requer a instalação de uma complexa planta criogênica para recuperação e liquefação de hélio. Este sistema inclui uma série de equipamentos, tais como o liquefator, um reservatório de 4000 litros, compressores, linhas de transferência de alta isolamento térmica e controle de pressão e nível de hélio nas cavidades.

**Sistema de injeção pulsada:** O sistema de injeção pulsada é responsável pelo processo que permite que o feixe proveniente do injetor seja inserido no anel de armazenamento. Nesse processo, o feixe injetado deve se somar ao feixe que já está armazenado no anel. A corrente produzida pelo injetor é apenas uma fração pequena da corrente almejada, sendo necessários vários pulsos do injetor para atingir a corrente final de operação.



*Protótipo do kicker de ejeção do Booster, fabricado no LNLS*



*No centro da imagem: duas cavidades supercondutoras projetadas para o sistema de radiofrequência do Sirius*

Durante a operação normal do anel, o sistema injetor repõe a corrente perdida naturalmente em função do tempo de vida finito do feixe, mantendo a corrente armazenada praticamente constante. Este modo de operação é conhecido como *injeção top-up* e requer que o processo de injeção seja bastante preciso para não perturbar o feixe já estocado no anel. Isso é conseguido com o uso de magnetos pulsados conhecidos como *septa* e *kickers*. Os *septa* são posicionados na região em que a câmara de vácuo da linha de transporte que traz o feixe do injetor tangencia e se acopla à câmara de vácuo do anel.

O *septum* produz um campo magnético pulsado que é intenso na região da linha de transporte e cai a zero em uma distância muito curta para não afetar o feixe estocado durante o pulso de injeção. Já os *kickers* produzem uma deflexão localizada do feixe estocado para que a órbita passe perto do feixe injetado somente durante o processo de injeção. Para que a distorção de órbita produzida pelos quatro *kickers* de injeção fique localizada ao ponto de injeção, o perfil do campo pulsado produzido por cada um deles deve ser idêntico e a sincronização dos pulsos muito precisa, ambos obedecendo tolerâncias rígidas.

Esses componentes serão produzidos no próprio LNLS, e as maiores dificuldades envolvidas na sua produção são as fontes de alta tensão (*kickers*) e alta corrente (*septa*), que atingem altos valores de pico, e as câmaras de vácuo cerâmica dos *kickers*.

O mecanismo de injeção requer um sistema responsável pela sincronização dos vários equipamentos que fazem parte do sistema de injeção como um todo. **Esse sistema deve ser capaz de gerar e distribuir sinais com resolução temporal muito menor do que 1 nanossegundo, configuráveis pulso-a-pulso**, com jitter inferior a 1 picossegundo rms, sinais que serão utilizados para disparar eventos tanto na fonte, quanto nas linhas de luz.

**Sistema de controle:** O sistema de controle permite que todos os outros sistemas trabalhem dentro dos parâmetros desejados, sendo responsável pelo envio, leitura e controle dos mais diversos parâmetros dos equipamentos que compõem a fonte. É uma rede de comunicação que interliga todos os sistemas e equipamentos e disponibiliza controle e parâmetros aos programas de alto nível que controlam a operação da fonte.

O sistema combina comunicação Ethernet de alto desempenho com redes seriais RS485 de alta velocidade e processamento distribuído utilizando protocolos comerciais e proprietários. Interfaces de controle microprocessadas com conversores de alta

resolução estão sendo desenvolvidas para reduzir ou eliminar o tráfego de dados analógicos. O sistema de controle é integrado aos sistemas de sincronismo, diagnóstico e *feedback*. A topologia da rede foi concebida de forma a atender à alta capacidade de transmissão demandada por alguns desses sistemas.

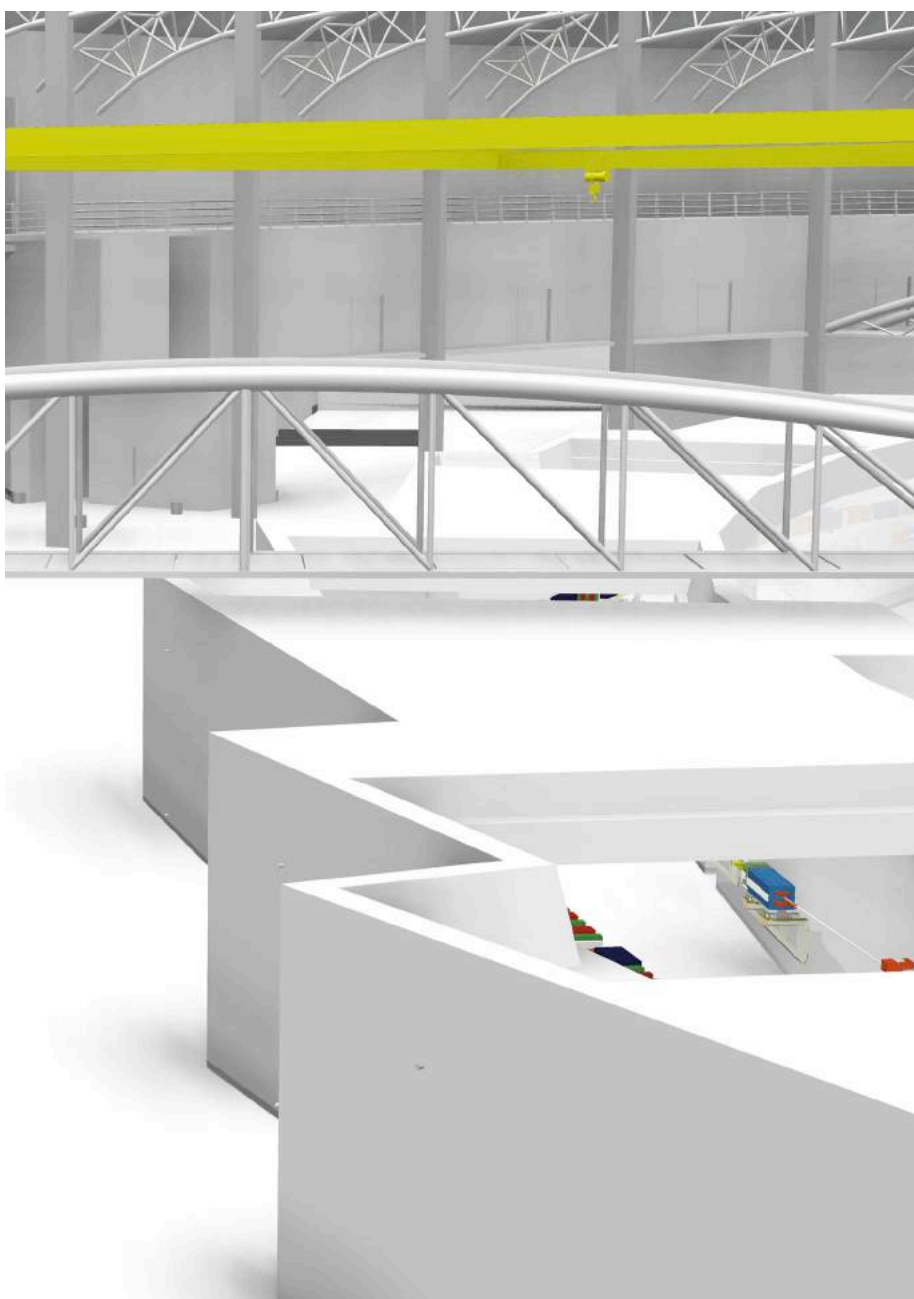
**O sistema de controle proposto é altamente distribuído e deve incluir em torno de oito mil pontos de controle, com cerca de duas mil interfaces microprocessadas ligadas a cerca de 400 computadores e a um conjunto de switches de até 1 Gb por segundo.** A espinha dorsal do sistema opera em 10 Gbps, com comunicação via fibra ótica, redundância, e um conjunto de workstations para gerenciamento do sistema. É um sistema complexo e os grandes desafios associados a esse sistema são:

- Conseguir tempos de resposta de poucos microssegundos nos diversos subsistemas, dentro do necessário para uma operação estável e confiável dos aceleradores, o que implica em sistemas de comunicação rápidos e sem os gargalos admissíveis em sistemas de comunicação digital convencionais;
- Necessidade de desenvolver eletrônicas customizadas, com conversores de alta resolução não disponíveis no mercado convencional, gerenciadores de comunicação digital e serial com alta velocidade e protocolos proprietários de comunicação com alta eficiência.

O sistema de controle será desenvolvido e implementado com o uso do ambiente de programação e desenvolvimento EPICS (*Experimental Physics and Industrial Control System*), padrão de sistemas de controle utilizado em vários outros laboratórios.

O sistema de controle de alto nível é o conjunto de programas que compõem a interface com os operadores da fonte de luz. Todos os procedimentos que são parte da rotina de operação são automatizados por meio dos programas de operação. O sistema de controle inclui também ferramentas para análise de dados de parâmetros da máquina e para registro de eventos de operação.

**Proteção radiológica:** O sistema de proteção radiológica tem por objetivo garantir a segurança de todas as pessoas que terão acesso às dependências do Sirius, garantindo níveis de dose abaixo de valores estabelecidos para áreas caracterizadas como livres. O programa de proteção radiológica é desenvolvido em conformidade com as normas brasileiras estabelecidas pelo CNEN (Comissão Nacional de Energia Nuclear), assim como com padrões internacionais de proteção radiológica. Os tipos de radiação considerados são *bremsstrahlung*, nêutrons, ativação induzida e radiação síncrotron.



*Simulação tridimensional da blindagem de concreto com espessuras de 0,8 a 1,5 metro, que contornará os aceleradores*

**As tolerâncias estabelecidas são de até 40 micrômetros para erros de alinhamento dos magnetos, até 0,2 miliradianos para erros de rotação e até 0,05% para erros de excitação dos magnetos**

O projeto do sistema de proteção radiológica minimiza os danos causados por todas estas fontes. Para isso, são feitos cálculos de dimensionamento de blindagem, com o objetivo de antecipar todas as situações de operação e possíveis falhas de equipamentos. **Em todo o seu perímetro, o túnel dos aceleradores possuirá uma blindagem de concreto com espessura variável entre 80 centímetros e 1,5 metro.** As aberturas na blindagem para a passagem de cabos e guias de onda e para acesso ao túnel são consideradas nas simulações.

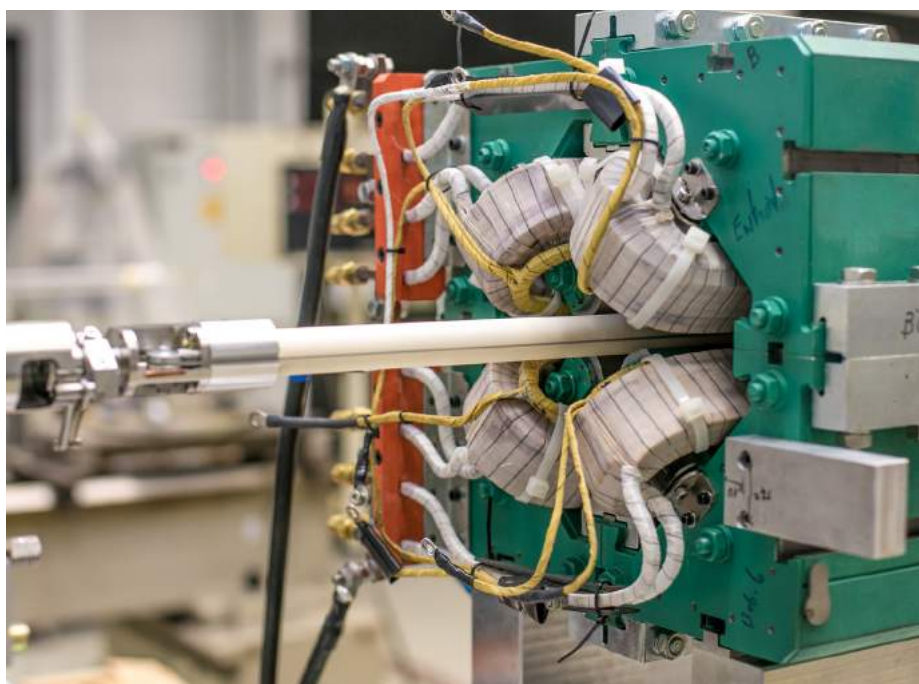
**Sistemas auxiliares:** Comuns a todos esses componentes da fonte existem sistemas periféricos que compõem uma infraestrutura básica necessária para o funcionamento adequado da instalação. Essa infraestrutura inclui um sistema de condicionamento de ar que mantém a temperatura do túnel dos aceleradores altamente estável, dentro dos padrões exigidos pela estabilidade do feixe, e a temperatura do hall experimental controlada.

A infraestrutura inclui também um sistema hidráulico com água desmineralizada com temperatura e qualidade controladas, responsável pela refrigeração e controle de temperatura de um grande número de componentes de vários sistemas, com impacto sobre a estabilidade do feixe. Há, ainda, um sistema de ar comprimido para acionamento de válvulas pneumáticas, uma infraestrutura elétrica cuidadosamente dimensionada e um sistema criogênico para a operação das cavidades supercondutoras e para refrigeração de componentes nas linhas de luz, todos com impacto sobre a confiabilidade da fonte.

Outro sistema importante é o de intertravamento, dividido em sistema de proteção pessoal e sistema de proteção da máquina. O primeiro sistema protege pessoas de todos os riscos mapeados no prédio do Sirius, especialmente referentes à radiação ionizante. O grande desafio está no mapeamento destas áreas de risco, na determinação dos diversos graus de risco de cada setor, e na definição do tempo necessário para liberação de acesso às áreas protegidas.

O sistema de proteção da máquina tem o propósito de proteger os componentes do próprio acelerador contra sobrecorrente, curtos-circuitos, vazamentos e outros eventos danosos. **Juntos, esses sistemas terão cerca de 4 mil pontos de monitoração ao longo dos 518,4 metros de túnel dos aceleradores.** O tempo de resposta do sistema (< 10ms) e as grandes distâncias entre os pontos de monitoramento e o de atuação são desafios a serem superados com uma arquitetura confiável e eficaz.





*Bancada de caracterização dos ímãs, onde é medida a qualidade do campo magnético desses componentes*

### **Especificação de tolerâncias de erros e correção da ótica**

A construção dos equipamentos dos aceleradores e sua montagem final no túnel deve ocorrer observando-se as tolerâncias para erros dos mais diversos tipos. O alto brilho da fonte de luz e a alta estabilidade do feixe de fótons exigem campos magnéticos de alta qualidade e estabilidade.

A partir de simulações numéricas, em que o efeito de erros sobre a ótica é modelado, pode-se definir diversos tipos de tolerâncias para que o desempenho da fonte de luz seja preservado. Os erros simulados incluem excitação dos campos por *ripple* nas fontes de alimentação, variação de temperatura, alinhamento de posição e ângulo dos vários tipos de ímãs e qualidade (composição multipolar) dos campos magnéticos.

Nas simulações são considerados tanto erros sistemáticos quanto erros aleatórios. A especificação das tolerâncias a erros está intimamente associada à especificação dos sistemas de correção e amortecimento dos efeitos destes erros sobre o feixe. No entanto, esses efeitos nem sempre podem ser totalmente compensados por sistemas de correção.

**Para o Sirius, os sistemas de correção e realimentação especificados estão no estado da arte do ponto de vista da tecnologia hoje disponível.** Os erros imprevistos de ali-

nhamento e excitação do campo magnético podem causar perturbações na dinâmica dos elétrons que, mesmo compensados pelos sistemas de correção de órbita e sintonia, podem afetar tanto a eficiência do processo de injeção como a estabilidade do feixe armazenado.

As tolerâncias estabelecidas são de até 40 micrômetros para erros de alinhamento dos magnetos, até 0,2 miliradianos para erros de rotação e até 0,05% para erros de excitação dos magnetos.

O anel de armazenamento do Sirius terá dois sistemas de correção de órbita, operando com taxas de correção bastante distintas, que serão baseados na leitura de 200 monitores de posição de feixe.

A correção da órbita será efetivada através de 160 corretoras de órbita lentas horizontais e 120 verticais, além de 80 corretoras rápidas em cada plano. Estes números são suficientes para garantir que as distorções de órbita serão efetivamente corrigidas em um amplo espectro de frequências, desde as variações lentas de temperatura, até as rápidas, causadas por movimentação de dispositivos de inserção. Isso garantirá que a estabilidade de posição do feixe de elétrons será melhor que 10% do tamanho do feixe (que em alguns pontos, equivale a 150 nanômetros) nas posições das fontes de luz, valor essencial para se atingir a estabilidade exigida pelos experimentos nas linhas de luz.

Apesar disso, ainda existirão perturbações que não serão efetivamente atenuadas por nenhum deles, em especial as perturbações com frequência acima de 1 kHz. Nesses casos, as amplitudes destas perturbações devem ser limitadas para que seu efeito sobre o deslocamento do feixe seja menor que a tolerância de 10% do tamanho do feixe. Para que isso ocorra no Sirius, a estabilidade das fontes de alimentação dos dipolos e quadrupolos deve ser melhor que 20 ppm (partes por milhão) e as amplitudes de vibração destes magnetos devem ser menores que o equivalente a 6 nanômetros.

### **O injetor do Sirius**

O injetor do Sirius é responsável pela produção do feixe de elétrons e sua aceleração até a energia de operação do anel de armazenamento, que será de 3 GeV. O injetor inclui um acelerador linear (Linac), o Booster ou síncrotron injetor e duas linhas de transporte, que são duas pequenas redes magnéticas utilizadas para transferir o feixe de elétrons de um acelerador para outro.

Um sistema importante do processo de injeção, que concatena todos os eventos relacionados com a injeção, é o sistema de

sincronismo. O primeiro componente do injetor, o Linac, opera de forma pulsada, produzindo trens de pulsos de elétrons com duração entre 1 e 300 ns, a uma taxa de até 10 Hz. O Booster projetado para o Sirius deve operar em uma taxa de 2 Hz, baixa o bastante para que a mesma tecnologia de ímãs, fontes, vácuo e controle aplicável ao anel possa ser utilizada, o que simplifica o projeto dos componentes. Esta será, portanto, a taxa de operação do injetor.

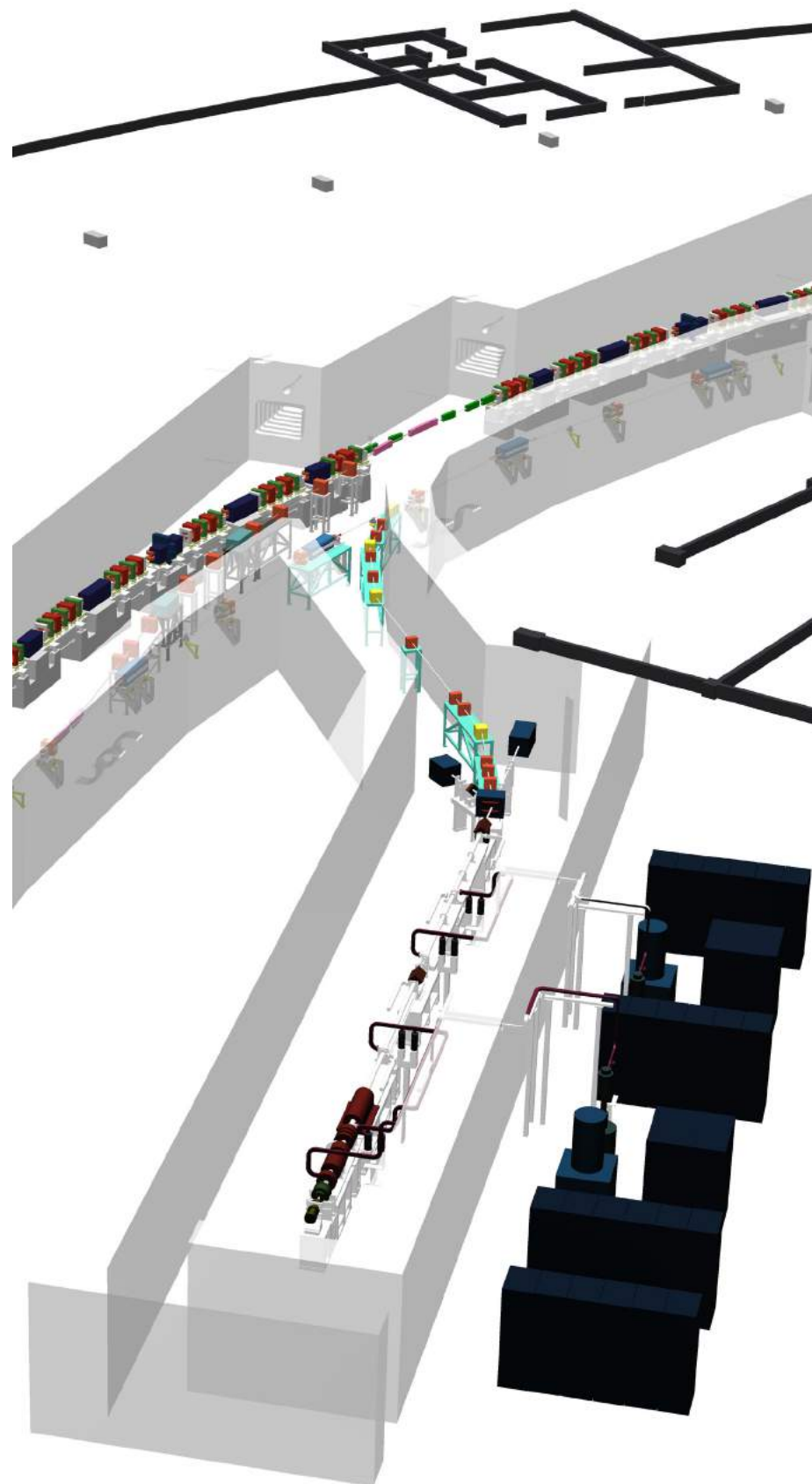
Duas vezes por segundo, um pulso de corrente será produzido pelo Linac e injetado no Booster. Em seguida, será acelerado no Booster até a energia final e ejetado para a segunda linha de transporte, sendo finalmente injetado no anel. Em todo esse processo, uma série de elementos pulsados trabalham de forma sincronizada para efetuar de forma otimizada a transferência do feixe de uma máquina para outra.

Os componentes do injetor possuem a mesma estrutura básica do anel de armazenamento. Possuem redes magnéticas distintas e interligadas pelos caminhos de vácuo percorridos pelos elétrons do Linac até o anel, com tolerâncias específicas de posicionamento e alinhamento, além de fontes de alimentação, elementos de diagnóstico e sistemas de intertravamento e controle. O Linac e o Booster possuem o seu próprio sistema de radiofrequência, completamente distintos. As linhas de transporte são basicamente constituídas por uma rede magnética, câmaras de vácuo, diagnóstico de feixe, além dos *septa* pulsados.

**O Booster é um acelerador com quase 500 metros de circunferência, com uma rede magnética composta por 210 magnetos alimentados por cerca de 60 fontes de corrente, algumas delas de grande porte, como as duas fontes de 300 kW dos dipolos. Os quase 500 metros de câmara de vácuo possuem cerca de 200 trechos de câmaras de aço inoxidável, 50 monitores de posição, 150 estações de bombeamento com bombas iônicas e uma centena de bellows, entre outros componentes.**

O sistema de radiofrequência utilizará uma cavidade de cobre de cinco células, alimentada por um amplificador de estado sólido de 45 kW. A peculiaridade do Booster é a sua operação em modo ciclado, o que torna o projeto das fontes de corrente dos dipolos bastante desafiador.

Como Sirius deve operar em modo de injeção *top-up*, em que a corrente de operação do anel é mantida aproximadamente constante ao longo de todo o período de feixe para usuários, o injetor deve ter alta confiabilidade e alta disponibilidade para operar de forma quase contínua.



*Modelo 3D do projeto do Linac (acelerador linear) seguido pela linha de transporte para o Booster*



## Linhas de luz do Sirius

Em um anel de armazenamento síncrotron, as linhas de luz são as estações experimentais onde os materiais são analisados. Elas são como microscópios complexos que condicionam e focalizam a radiação síncrotron, para que ela ilumine as amostras dos materiais em estudo e permita a observação de seus aspectos microscópicos.

O primeiro síncrotron brasileiro, UVX, opera hoje com 18 linhas de luz, abertas a toda comunidade acadêmica e industrial. Nelas, a maioria das técnicas experimentais compatíveis com síncrotrons de 2ª geração pode ser realizada. No entanto, esse número de linhas de luz vem crescendo desde 1997 e praticamente atingiu seu limite de expansão. Além disso, há limitações do anel UVX que não permitem a realização de experimentos mais avançados, compatíveis apenas com síncrotrons de 3ª e 4ª geração. Uma delas é a baixa energia do UVX, que limita a capacidade de penetração da luz síncrotron nos materiais. A outra é seu baixo brilho, consequência da sua alta emitância (de 100 nm.rad, enquanto a emitância do Sirius será de apenas 0,28 nm.rad).

O brilho de um síncrotron determina a qualidade das análises realizadas nas suas linhas de luz. O mapeamento químico e cristalográfico de materiais com resolução nanométrica, por exemplo, é feito com a iluminação de regiões nanométricas das amostras com luz síncrotron. A intensidade dessa iluminação, que define a qualidade do mapeamento obtido, é proporcional à área da região iluminada e ao brilho da fonte. Por isso, para reduzir a área iluminada e enxergar detalhes mais finos, mantendo a qualidade da imagem, é necessário um alto brilho. Da mesma forma, para fazer imagens tridimensionais de materiais com melhor contraste e resolução temporal, algumas linhas de luz utilizam apenas a parte do feixe que é transversalmente coerente (ou seja, semelhante a um laser). Essa fração é proporcional ao brilho da fonte e ao quadrado do comprimento de onda. Assim, para se obter uma iluminação coerente intensa com raios X (comprimento de onda pequeno) é necessário um alto brilho.

O baixo brilho do atual síncrotron impede que tenhamos hoje no Brasil, por exemplo, linhas de luz de micro e nanofoco e linhas de imagem por difração coerente, importantes para o desenvolvimento das áreas de biotecnologia e nanotecnologia. Isso também impede que a comunidade de usuários acadêmicos e industriais do LNLS realize experimentos de alta complexidade em áreas como arqueologia e paleontologia, passando por medicina, biologia e agricultura, ou mesmo nas áreas em que o síncrotron tradicionalmente é bastante empregado, como física, química e ciência dos materiais. O Sirius terá linhas de luz projetadas para esses tipos de análises.



Visão do hall experimental do anel UVX (área superior) mostrando algumas de suas linhas de luz (área inferior)



## Componentes básicos das linhas de luz

Os requisitos técnicos de uma linha de luz dependem das características do feixe de luz que serão necessárias para iluminar as amostras nas análises que se pretende realizar (tais como resolução de energia, tamanho e divergência), bem como da sua interação com o sistema de detecção. Cada linha de luz é composta por quatro sistemas principais: a fonte de radiação, o *front-end*, a ótica e a estação experimental (com seus detectores e porta-amostras), além de um conjunto de elementos de infraestrutura.

No Sirius, o planejamento e construção de toda essa infraestrutura traz grandes desafios. As cabanas óticas e experimentais, por exemplo, devem ser classificadas como salas limpas de classe 1000, com alta proteção radiológica. **Além disso, a tecnologia da informação usada representa o que há de mais avançado em transferência e armazenamento de dados, já que algumas das linhas de luz produzirão dados experimentais a uma taxa de cerca de 10 GB/s.** Isso impõe desafios para o tráfego de dados na rede, escrita e leitura digitais e armazenamento eficiente de dados. O projeto civil do prédio e das linhas também contempla esses aspectos desafiadores. A seguir, será apresentada uma breve explicação da função de cada um desses elementos, com destaque para os principais desafios tecnológicos envolvidos em seu projeto e construção.

**Fontes de radiação:** É o componente que acelera elétrons utilizando campos magnéticos estáticos intensos (da ordem de 1T) de forma a produzir radiação eletromagnética. Esse componente pode ser um dipolo magnético do próprio anel de armazenamento, um *wiggler* ou um ondulator. No anel de armazenamento o feixe de elétrons é mantido circulando em velocidades muito próximas à da luz e com o menor tamanho e divergência

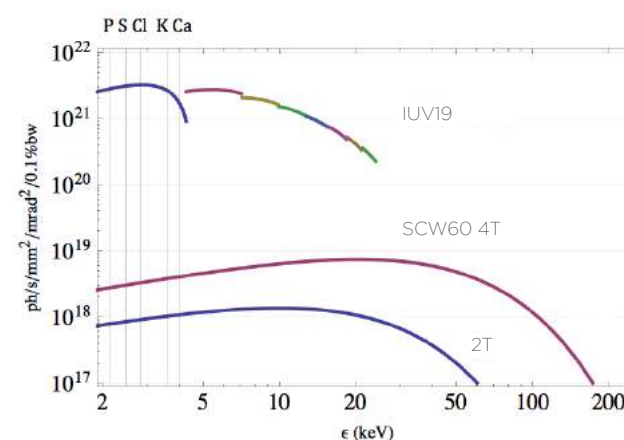
$\epsilon_h = 280 \text{ pm.rad}$	<b>Sessão reta (6m)</b> Baixo beta	<b>Sessão reta (7m)</b> Alto beta	<b>Superbend de 2T</b>
$\epsilon_v = 2.8 \text{ pm.rad}$			
$\sigma_h [\mu\text{m}] \times \sigma_v [\mu\text{m}]$	33,5 x 1,4	68,3 x 3	10,3 x 3,7
$\sigma'_h [\mu\text{rad}] \times \sigma'_v [\mu\text{rad}]$	8,3 x 1,9	4,1 x 0,9	27,1 x 0,76

Característica do feixe de elétrons nos pontos do anel onde estarão as fontes de radiação.  $\sigma_v$  é o tamanho e  $\sigma'_v$  é a divergência do feixe de elétrons na vertical, ambos rms. Já  $\sigma_h$  é o tamanho e  $\sigma'_h$  é a divergência do feixe de elétrons na horizontal (rms).  $\epsilon_v$  ( $\sigma_v \times \sigma'_v$ ) é a sua emitância vertical e  $\epsilon_h$  ( $\sigma_h \times \sigma'_h$ ) é a sua emitância horizontal

possíveis, ou seja, menor emitância. Com isso, campos magnéticos de 1 T a 4 T, provenientes de onduladores, *wigglers* ou dipolos, fazem com que a força de Lorentz acelere os elétrons com intensidades equivalentes a campos elétricos da ordem de centenas de milhões de Volts por metro, ou seja, dezenas de vezes maior do que se conseguiria acelerando os elétrons com campos elétricos estáticos.

No Sirius as fontes de radiação serão bastante diversificadas, já que suas linhas de luz cobrirão desde o infravermelho (em energias da ordem de 1 meV) até os raios X duros (chegando a energias de 100 keV). As características de tamanho e divergência da fonte são função do tamanho e divergência do feixe de elétrons nos pontos onde se encontram as fontes de radiação, conforme mostra a tabela à esquerda. Já o espectro e a polarização da fonte são função da geometria dos campos magnéticos usados para acelerar os elétrons.

Conforme foi descrito na seção que descreve os aceleradores do Sirius, os dipolos de 2T (*superbends*), localizados no centro de cada um dos 20 superperíodos (5BA) da rede magnética, servem como excelentes fontes de raios X duros, com brilho relativamente alto, uma vez que a energia crítica desses dipolos é de 12 keV. O brilho comparativo das 3 possíveis fontes de raios X do Sirius está apresentado na figura abaixo. Note que o brilho dos dipolos de 2 T na faixa de raios X é bastante alto, ficando acima dos  $10^{17} \text{ ph/s/mm}^2/\text{mrad}^2/0,1\%bw$ , com um fluxo acima  $10^{12} \text{ ph/s/mrad}/0,1\%bw$  até 50 keV. Isso se deve principalmente ao pequeno tamanho da fonte nos dipolos (uma das menores do mundo), de cerca de  $10 \times 4 \mu\text{m}^2$ .

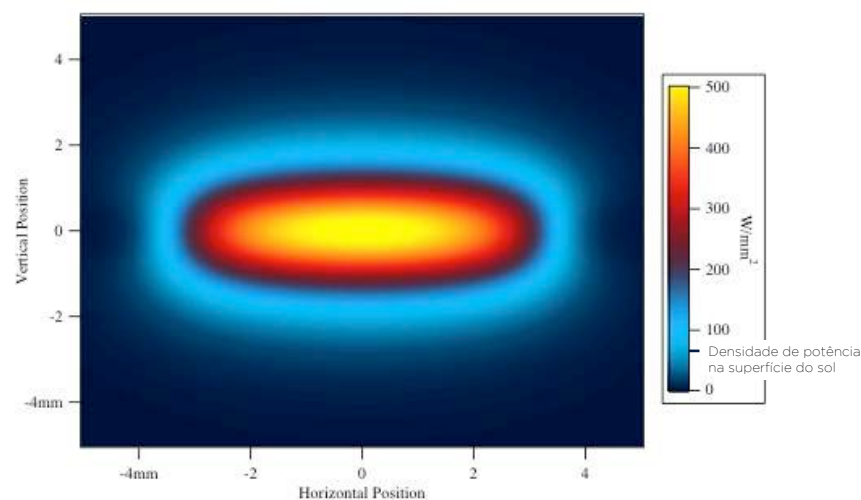


Brilho das fontes de raios X do Sirius: IUUV19: onduladores de raios X em vácuo, SCW60: wiggler de 4T e 2T: dipolos de 2 T. A posição das bordas K de absorção de elementos químicos importantes estão apresentadas no canto superior da figura

O ondulador de raios X simulado na figura anterior é do tipo em vácuo, IVU19, com um período de 19 mm e com *gap* mínimo de 5 mm. Os campos magnéticos chegam a uma amplitude de 1,3 T neste dispositivo de inserção. Já o *wiggler* simulado na mesma figura, e que deverá ser usado no Sirius, é o dispositivo superconductor SCW60, que está hoje instalado na linha XDS do anel UVX. Este wiggler pode chegar a até 4,1 T de campo magnético, com 17 períodos de 60 mm.

**Front-end:** É o primeiro conjunto de componentes, ainda dentro da blindagem, que separa a câmara de vácuo do anel do restante da linha de luz. Suas principais funcionalidades são:

- Limitar o leque de radiação síncrotron emitida pela fonte, de acordo com a faixa de energia utilizada na linha de luz, por meio de máscaras refrigeradas;
- Dissipar a carga térmica do feixe não utilizado e garantir que o feixe não atinja elementos não protegidos ou superfícies não refrigeradas;
- Bloquear rapidamente o feixe de luz síncrotron, quando necessário, e conter o feixe de *Bremsstrahlung* (radiação gama);
- Manter a integridade do vácuo do anel de armazenamento;
- Monitorar a posição e direção de propagação do feixe dos fótons e fornecer essas informações para a sistema de correção de órbita dos elétrons;
- Garantir a segurança pessoal (com a redundância necessária) por meio de sistemas de controle durante o comissionamento e as fases de operação.



*Distribuição espacial de potência do ondulador IVU19 das linhas de raios X de alto brilho do Sirius a 10 m da fonte. Ela pode chegar a quase 10 vezes a densidade de potência da superfície do sol*

**Os maiores desafios técnicos deste elemento da linha de luz são garantir que a estabilidade do feixe de fótons seja de 1  $\mu\text{m}$  em posicionamento (ou seja, 100 vezes menor que um fio de cabelo) e de 1 arcseg (ou seja, 1 milésimo de grau) em direção, além de dissipar a carga térmica gerada pelo feixe.**

Com os onduladores IVU19, por exemplo, a potência total irradiada chega a 8 kW e a densidade de potência a 10 m da fonte chega a mais de 0,5 kW/mm<sup>2</sup> na região mais intensa do cone de radiação – isso é quase 10 vezes a densidade de potência na superfície do sol. No entanto, a maior parte desta potência não é usada na linha de luz e todo o excedente deve ser dissipado de forma apropriada.

Na simulação apresentada na figura, por exemplo, apenas uma região de cerca de 0,5 mm ao redor do centro é a parte aproveitável para a linha de luz (representando uma potência de cerca de 100 W). No entanto, não existe um material que resista a essas densidades de potência por incidência direta. A estratégia, então, é utilizar uma superfície inclinada em 1° a até 3° em relação ao feixe, feita de uma liga Glidcop® (cobre e alumina), que é mais resistente que o cobre e possui ótima condutividade térmica. Dessa forma, a potência é distribuída em uma superfície maior e o calor gerado é dissipado por canais de refrigeração a água.

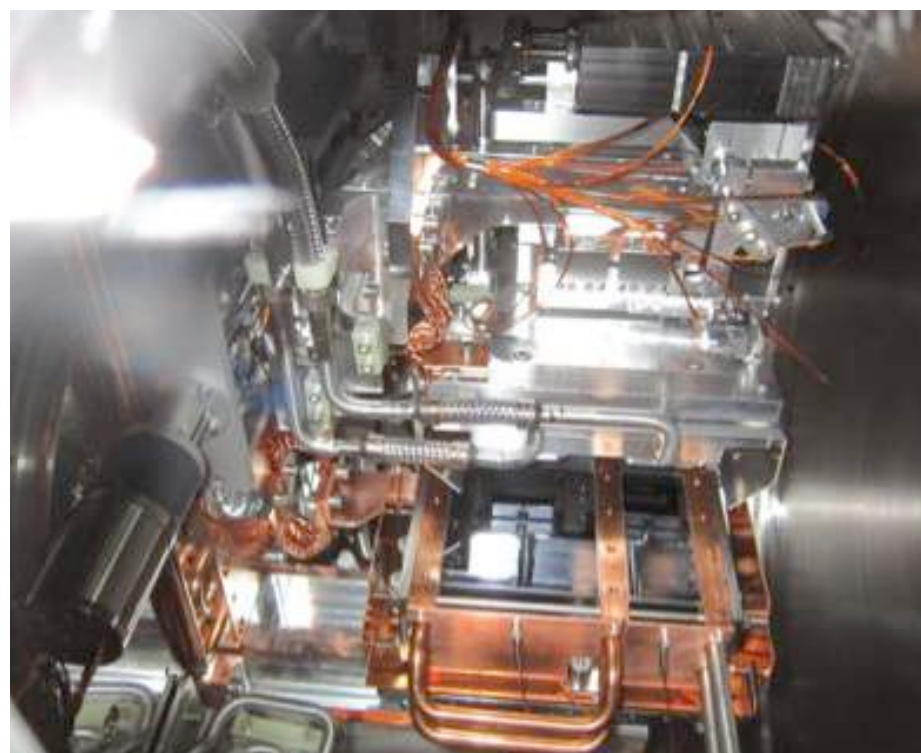
Já o bloqueio da radiação gama, produzida no anel de armazenamento, é feito com a interposição de uma grande massa de metal pesado, com 140 kg, em frente ao feixe. Como trata-se de um equipamento de proteção pessoal, o aspecto mais importante do seu projeto é a confiabilidade. O uso de sistemas à prova de falhas, especialmente as válvulas e os sensores que detectam a posição “fechado”, é indispensável. Além disso, como o acelerador de partículas e as estações experimentais são equipamentos extremamente sensíveis a vibrações, o bloqueador de raios gama e seu suporte devem ser projetados para reduzir a indução de impactos ou vibrações em seu entorno.

**Ótica:** A parte óptica da linha de luz “molda” o feixe de fótons para entregá-lo na forma requerida pelo experimento. As principais funcionalidades da parte óptica são colimação e focalização (espelhos) do feixe e seleção de energia (monocromadores). Esses componentes ficam protegidos em cabanas de proteção radiológica e passam por um controle preciso de temperatura, umidade e particulados.

**Monocromadores:** Como o próprio nome diz, este elemento filtra uma região cromática do espectro da fonte, e opera baseado no princípio de difração da radiação eletromagnética. Nas linhas de luz do Sirius serão usados três tipos de monocromadores:

- monocromadores com grades, para raios X moles
- monocromadores com cristais duplos, para raios X duros
- monocromador com cristais em transmissão, para raios X de alta energia

A maioria das linhas de luz no Sirius terá monocromadores de cristais duplos. O primeiro cristal (tipicamente de Si) absorve quase toda potência filtrada pelo *front-end* e, como o ângulo de incidência do feixe sobre este cristal é relativamente alto (até cerca de 60°), a densidade de potência absorvida na sua superfície pode chegar a quase 100 W/mm<sup>2</sup>, como no caso do ondulador IVU19. Esse cristal precisa ser refrigerado com nitrogênio líquido para não se deformar e degradar a qualidade do feixe monocromático. **A seleção de energia monocromática é feita com vários movimentos de translação e rotação dos cristais, que devem ter precisões melhores que 1 µm e 0,1 arcseg, respectivamente.** Finalmente, todos os elementos do monocromador devem ser mantidos em um ambiente de ultra-alto vácuo e livre de vibrações.

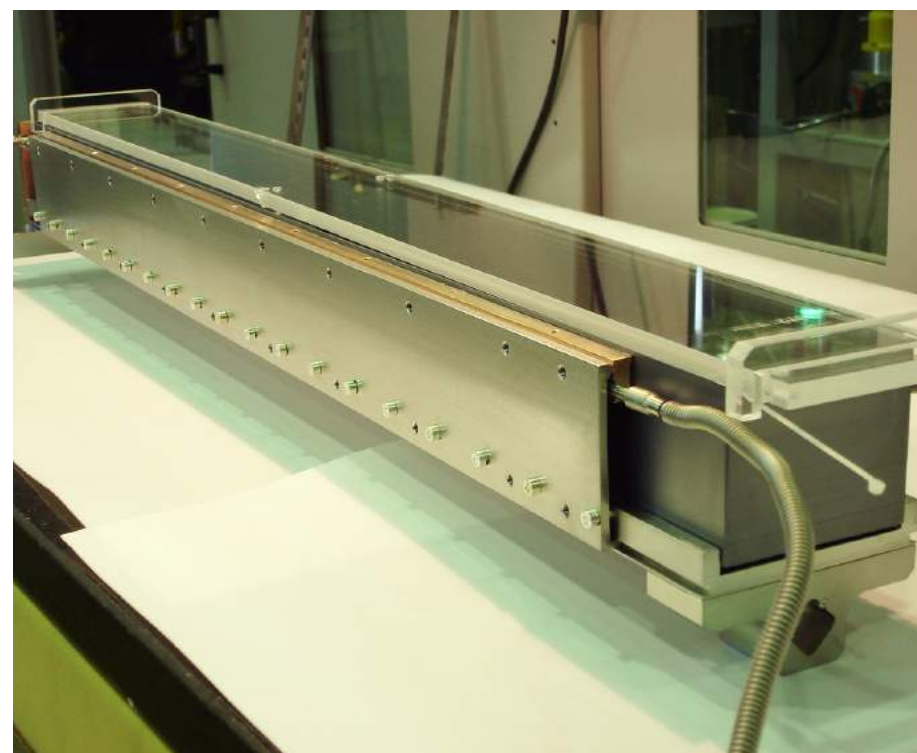


*Exemplo de montagem interna de um monocromador refrigerado a N<sub>2</sub> líquido, instalado na linha XDS do anel UVX do LNL*

**Espelhos:** Quando é ressaltada a baixa emitância de um síncrotron de 4ª geração como o Sirius, há que se diferenciar a emitância dos elétrons no anel de armazenamento da emitância do feixe de fótons que será usado na linha de luz. Embora essas duas quantidades estejam intimamente ligadas, é a última que realmente importa para a análise de materiais.

Ao longo de uma linha de luz são empregados elementos óticos que curvam os feixes de luz síncrotron, alterando seu tamanho e divergência, de tal forma que seu produto (a emitância), em teoria, permaneça constante. O objetivo final é que, como em um microscópio ou em um telescópio, estes elementos moldem geometricamente o feixe de luz síncrotron para as condições requeridas no experimento (como tamanho e divergência do foco).

Contudo, imperfeições nesses elementos óticos fazem com que a emitância final do feixe de fótons fique sempre maior do que a inicialmente gerada pela fonte de radiação. O controle preciso das imperfeições dos elementos óticos é um dos maiores desafios para a construção de linhas de luz em síncrotrons de 4ª geração com alto brilho.



*Espelho cilíndrico da linha de Wiggler de 2 T, para cristalografia de proteínas, instalada no síncrotron UVX*



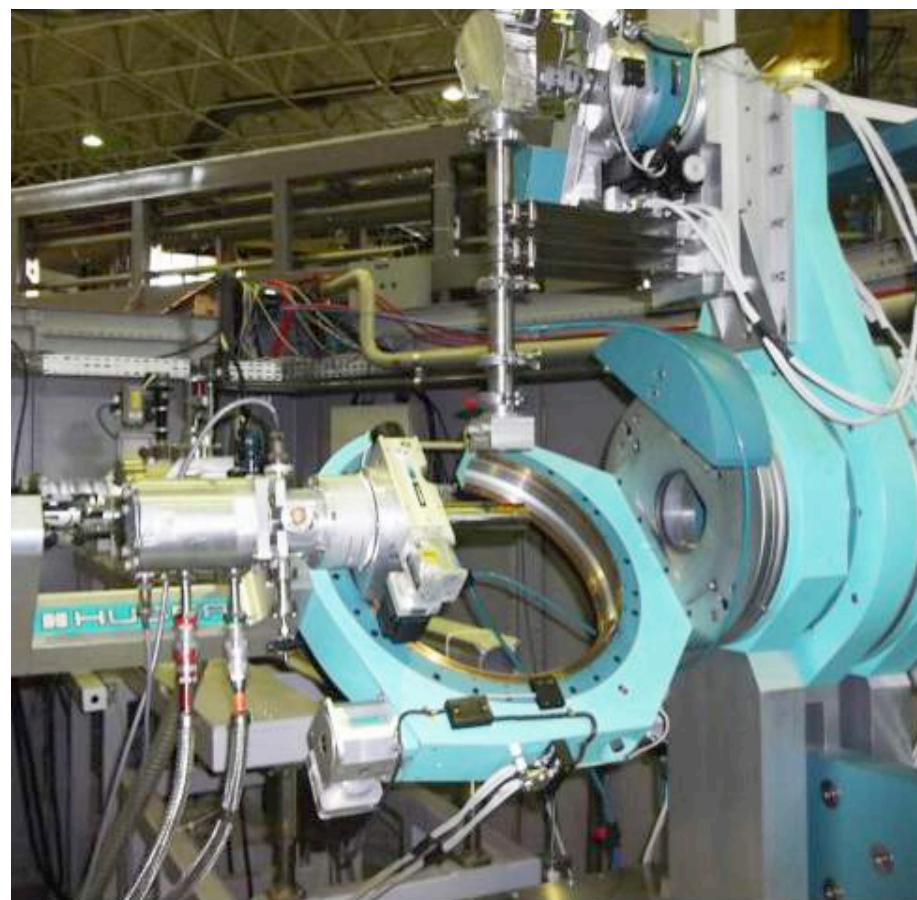
No Sirius, boa parte destes elementos óticos serão espelhos planos ou curvos. Na faixa espectral de raios X, superfícies metálicas planas sofrem o fenômeno de reflexão total quando os ângulos de incidências rasantes são menores que um certo ângulo crítico (da ordem de décimos de um grau). Neste caso, devem ser corrigidas as imperfeições na planicidade e rugosidade destas superfícies. **A baixa emitância do Sirius impõe limites extremamente desafiadores quanto a imperfeições. A rugosidade dos espelhos deverá ser menor que 0,1 nm e a sua planicidade, melhor que 0,01", ou seja, de milionésimos de grau.** Não obstante, o LNLS tem unido esforços com indústrias nacionais experientes na área de ótica para produzir dispositivos dentro dessas especificações técnicas restritivas. Ademais, os subprodutos desses desenvolvimentos poderão trazer importantes benefícios tecnológicos para o segmento aeroespacial.

**Estação experimental:** Parte da linha de luz onde as amostras são propriamente analisadas. Trata-se de um ambiente isolado, dotado de proteção radiológica e controle preciso de temperatura, umidade e particulados. É a parte mais dinâmica de uma linha de luz, pois a cada novo experimento são definidas condições específicas para o condicionamento das amostras (que podem estar em diferentes estados físicos) e para os sistemas de detecção, visando a observação de diferentes aspectos da interação da luz síncrotron com a matéria.

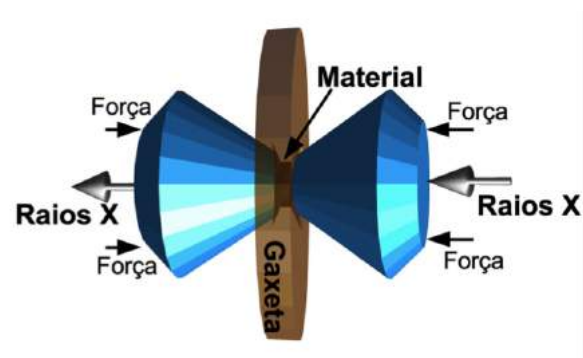
**Sistemas de posicionamento e ambientes de amostras:** Esses sistemas são usados para possibilitar o posicionamento das amostras frente ao feixe de luz, muitas vezes com resolução sub-micrométrica. Fazem parte desses sistemas fornos e criostatos para condicionamento de temperatura, dispositivos para deformação ou aplicação de altas pressões e de campos elétricos e/ou magnéticos e de demais condições a que podem ser submetidas as amostras nos experimentos em condições *in situ* ou até *operando*. Os sistemas incluem, ainda, robôs destinados à troca automática de amostras, usados em linhas de "high-throughput".

A simulação de ambientes que possuem condições extremas é uma parte importante e desafiadora dos experimentos em síncrotron e, em geral, o ponto de vantagem em relação a outras técnicas de investigação microscópica. Um exemplo bastante ilustrativo desses desafios é a simulação de ambientes de altas pressões, em que materiais são comprimidos até que seus espaçamentos interatômicos sejam reduzidos por até a metade e as

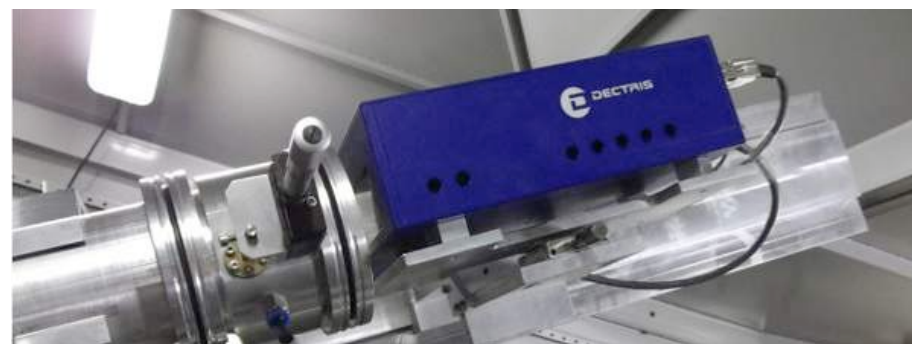
densidades aumentem em mais de uma ordem de grandeza. Nessas densidades, as mudanças na estrutura eletrônica começam a influenciar as noções básicas de interações químicas e ligações atômicas. Por exemplo, elétrons que são essencialmente localizados se tornam delocalizados, transformando materiais isolantes em condutores, uma transição que pode introduzir novos fenômenos físicos em condições extremas. Um método usado para realizar experimentos em altas pressões é colocar a amostra entre duas bigornas de diamante com uma ponta de área muito pequena. A uma dada força exercida sobre a bigorna, quanto menor a área da sua ponta, que deve ser transparente aos raios X, maior será a pressão aplicada sobre a amostra. Para isso, focalizações de feixes sub-micrométricos são importantes para que possam atravessar estas pontas. **Com os últimos desenvolvimentos deste tipo de instrumentação é possível alcançar pressões e temperaturas mais altas que as encontradas no centro da Terra (365 GPa e 5500°C) usando células de bigornas de diamante** (ou DAC, do inglês *Diamond Anvil Cell*).



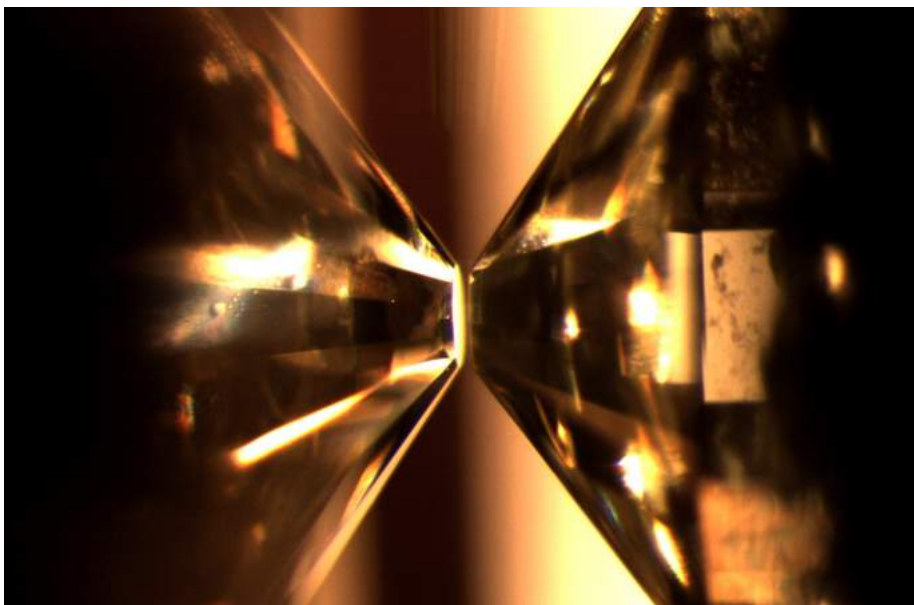
*Criostato instalado na linha de luz XPD, do síncrotron brasileiro UVX*



Modelo de montagem das células de bigorna de diamante (Diamond Anvil Cell)



Detector Pilatus instalado na linha de luz XRD2, do síncrotron brasileiro UVX



Diamond Anvil Cell (DAC), componente com o qual é possível alcançar pressões e temperaturas extremamente altas

**Detecutores:** Incluem os detectores de área do tipo CCD ou contadores de fótons; difratômetros para posicionamento de detectores; cintiladores de múltiplos canais, fotodiodos, câmaras de ionização, etc. Esses dispositivos analisam de forma quantitativa o resultado da interação entre a radiação síncrotron e os átomos do material em estudo, seja por difração, absorção ou fluorescência.

De forma genérica, o detector ideal deve ter muitos pixels ( $10^9$  pixels) com resolução espacial da ordem de  $1 \mu\text{m}$ , associada a uma resolução em energia de  $1 \text{ eV}$  e resolução temporal de  $1 \text{ fentosegundo}$  ( $10^{-15}$  segundo). Além disso, ele precisa contar os fótons a um fluxo muito alto ( $10^9$  fótons/pixel/s) e ser eficiente em uma larga faixa de energia, idealmente de  $100 \text{ eV}$  a até  $100 \text{ keV}$ . Infelizmente, não existe um detector que reúna todas essas

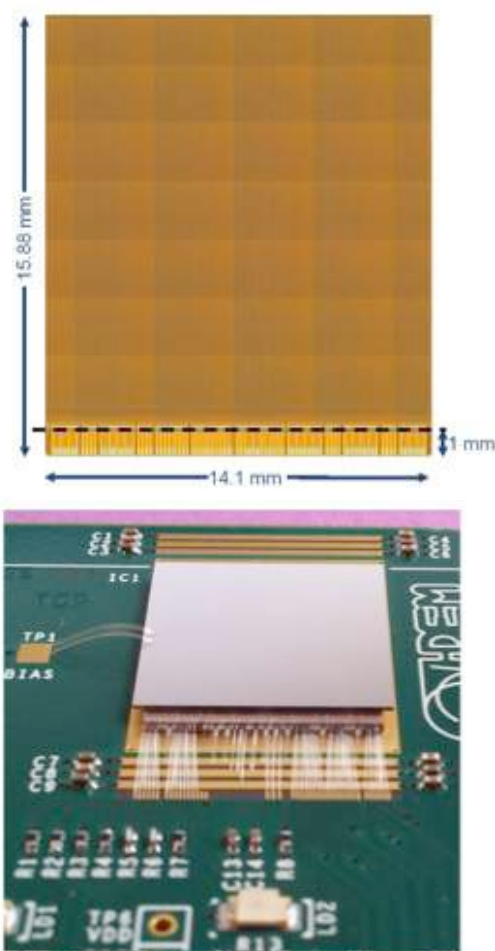
características, de modo que os desenvolvimentos de cada um devem ser adaptados às suas aplicações específicas.

Para a espectroscopia de fluorescência por raios X, por exemplo, o detector mais avançado é o Maia, desenvolvido por uma colaboração entre a CSIRO (Common Wealth Scientific and Industrial Research Organization), na Austrália, e o Brookhaven National Laboratory (BNL), nos Estados Unidos. Esse sistema, quando combinado com um feixe de raios X de foco nanométrico, é capaz de produzir, em tempo real, imagens elementares quantitativas em alta definição, com detalhes microscópicos ou nanoscópicos. Exemplos desse tipo de imagens serão apresentados no capítulo 4.

Os detectores de área baseados em pixel híbrido, como o Pilatus, XPAD e os detectores da família Medipix, desenvolvidos no CERN por meio de um acordo de colaboração do qual o LNLS faz parte, serão utilizados para satisfazer as exigências de detecção de várias linhas de luz do Sirius. Esses equipamentos possuem as melhores relações sinal/ruído e velocidade de leitura disponíveis hoje. O chip CMOS do Medipix3RX, por exemplo, possui ainda um modo de operação espectrométrico, capaz de separar até oito bandas de energia.

**Existe hoje no Brasil uma oportunidade excepcional para o desenvolvimento de expertise na área de detectores híbridos, visando atender as exigências das linhas de luz do Sirius. Futuramente, essa experiência poderá resultar em desenvolvimentos para as áreas médica, industrial e educacional.** Os detectores híbridos têm, ainda, a possibilidade de ser adaptados a várias faixas de energia de feixe, usando sensores de Si para energias abaixo de  $20 \text{ keV}$  ou sensores feitos em semicondutores de maior absorção, como o CdTe ou Ge, para aplicações com energias maiores, como será usado em uma das linhas do Sirius.

A principal limitação dos detectores híbridos é a seu limite de contagem – que normalmente vai de  $10^5$  a até  $10^6$  fótons/pixel/s – causado pelo fenômeno de empilhamento dos sinais gerados pelos fótons. Uma nova geração de detectores de silício, desenvolvida para aplicações de alto fluxo em aceleradores lineares, está sendo projetada para uso nos lasers de elétrons livres XFEL (European X-ray Free Electron Laser), em Hamburgo, por meio do projeto AGIPD (Adaptive Gain Integrating Pixel Detector), e LCLS (SLAC Linear Coherent Light Source), em Stanford, por meio do projeto XAMPS (X-ray Active Matrix Pixel Sensor). Esse desenvolvimento também está previsto para as linha de alto fluxo do Sirius.



Adaptado de Ballabriga et al, 2013. À esquerda, foto do chip Medipix3RX e à direita o mesmo chip conectado a um sensor de Si que converte os raios X em cargas elétricas que são lidas diretamente no chip. O uso de sensores baseados em elementos químicos permitirá imagens de tomografia de alta resolução e contraste em altas energias

### As 13 primeiras linhas de luz do Sirius

O Sirius será um dos primeiros síncrotrons de 4ª geração a serem construídos no mundo e terá o maior brilho dentre as fontes de luz na faixa de energia que vai dos raios X moles aos raios X duros com até 20 keV. Seu maior nível de brilho estará na faixa de raios X “tender” (entre 2 – 8 keV), chegando próximo ao limite do que hoje é possível alcançar nos chamados *ultimate storage rings*. Embora essa faixa de energia seja relativamente pouco explorada na maior parte dos síncrotrons modernos, no Sirius ela será amplamente utilizada por se tratar de um importante nicho estratégico para o País.

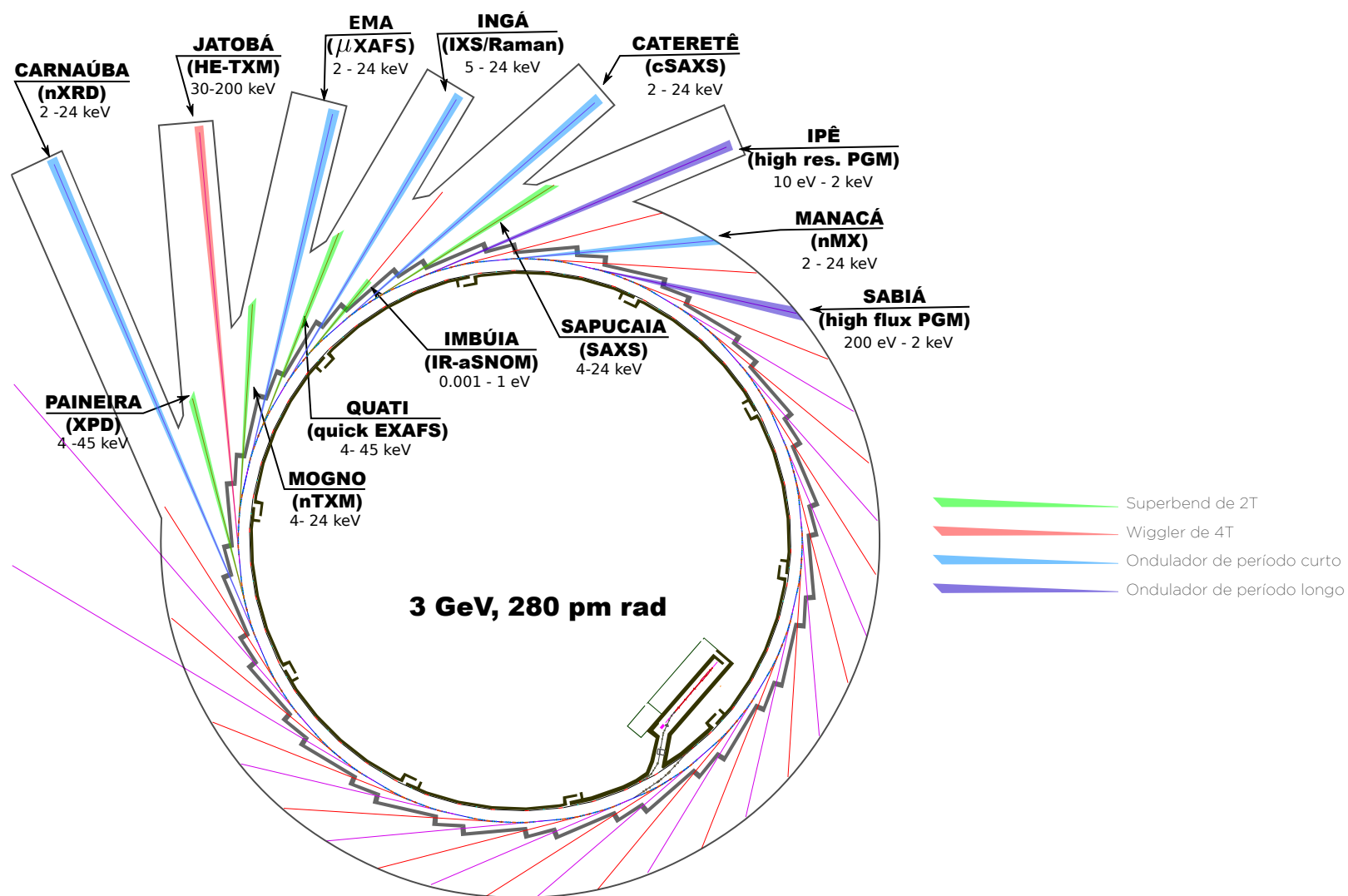
Sete das treze linhas do Sirius estão sendo projetadas para ter altíssimo brilho, utilizando onduladores como fonte de radiação. O brilho que poderá ser obtido nessas linhas será uma ou duas ordens de grandeza maior que o dos mais modernos síncrotrons no mundo. Além disso, a faixa de energia que será coberta por elas possibilita a análise de elementos químicos importantes para áreas estratégicas para o Brasil, como agricultura, óleo e gás, energias renováveis e saúde.

Para a realização de experimentos de tomografia em materiais importantes, como aço, cimento e rochas (como as existentes na camada pré-sal), será utilizado um *wiggler* de alto campo magnético, que fornecerá raios X de altíssimas energias, até cerca de 200 keV. Isso viabilizará experimentos de tomografia de raios X de objetos mais extensos, em tempos menores do que os requeridos hoje e com uma resolução espacial muito maior.

Além das oito linhas baseadas em dispositivos de inserção, mencionadas acima, o Sirius terá também cinco linhas dedicadas a técnicas convencionais, baseadas nos dipolos de 2T. Mesmo nessas linhas o brilho e o espectro de energia dos raios X emitidos serão significativamente superiores aos do atual síncrotron. Isso permitirá experimentos mais rápidos e com maior resolução temporal.

Essas treze linhas de luz permitirão que sejam feitos estudos sem precedentes no Brasil, em praticamente todas as áreas do conhecimento, sejam eles de interesse acadêmico ou industrial. A seguir, será apresentada uma breve descrição das características de cada uma das primeiras 13 linhas de luz do Sirius.





Linha de Luz do Sirius	Principal técnica experimental
Carnaúba	Nanodifração de raios X
Ema	Microespectroscopia de raios X
Ingá	Espalhamento Inelástico de raios X
Cateretê	Espalhamento coerente de raios X
Manacá	Cristalografia de macromoléculas com microfoco
Ipê	Espectroscopia de UV e raios X moles de alta resolução
Sabiá	Espectroscopia de UV e raios X moles de alto fluxo
Quati	Espectroscopia de raios X com resolução temporal
Paineira	Difração de raios X
Sapucaia	Espalhamento de raios X a baixos ângulos
Imbúia	Micro e nano espectroscopia de infravermelho
Mogno	Microtomografia de raios X
Jatobá	Tomografia e difração de raios X de alta energia

As primeiras 13 linhas de luz que serão construídas no Sirius. As linhas em azul são de onduladores em vácuo, IVU19, as em violeta são as baseadas em onduladores EPU50, as em vermelho no wiggler SCW60 e as em verde, nos superbends de 2T do anel

## Linha de nanodifração de raios X Carnaúba

Esta linha de luz será principalmente dedicada à difração e ao espalhamento de raios X utilizando fótons coerentes com focalização nanométrica, bem como à espectroscopia de absorção e de emissão de raios X. Ela será a linha mais longa do Sirius, com mais de 140 metros de distância entre a fonte e a amostra. Este comprimento é necessário para atingir um tamanho de foco de cerca de 50 nm, com uma distância de trabalho da ordem de 0,6 metros, crucial para experimentos que envolvam amostras em ambientes complexos, como fornos, criostatos ou células de alta pressão.

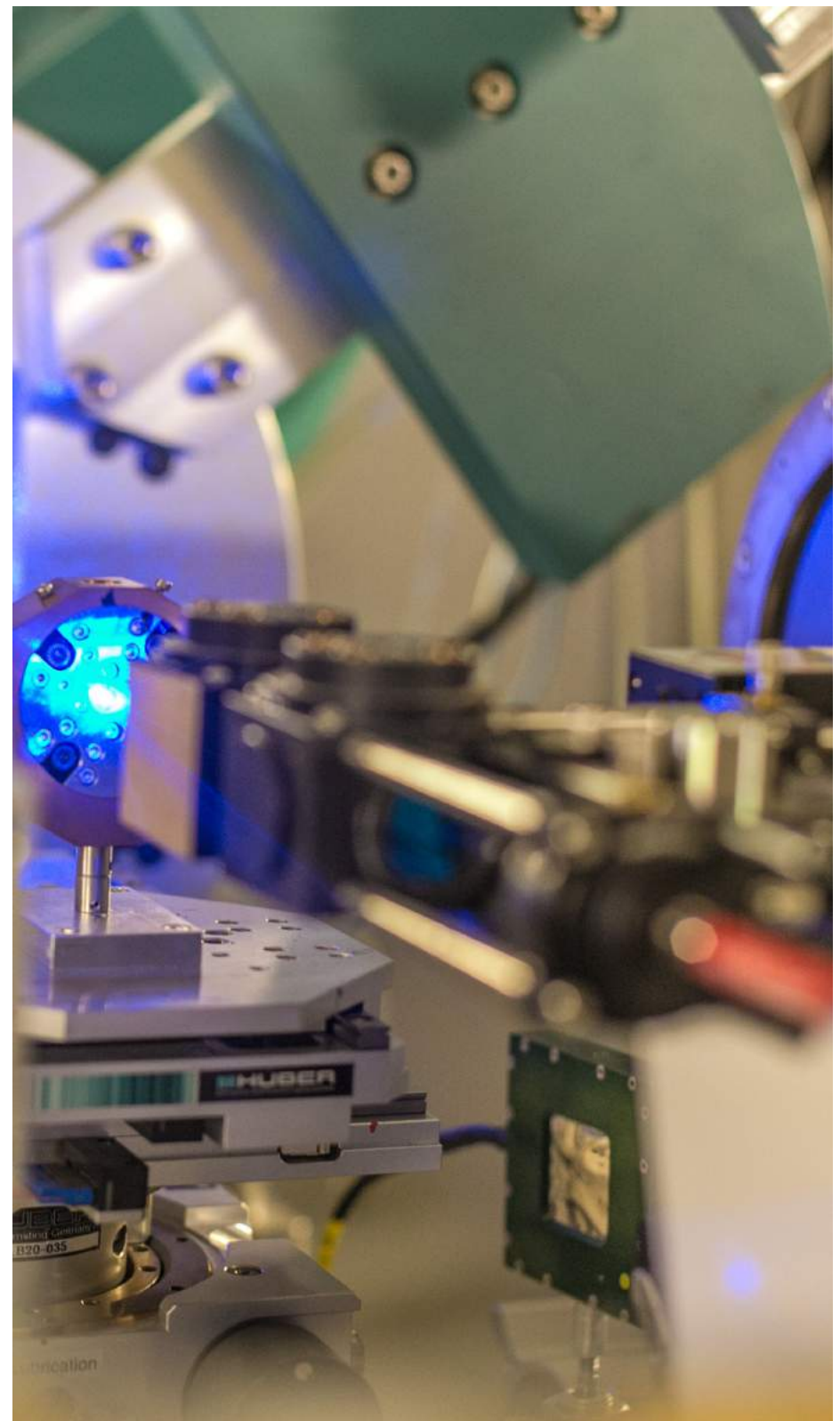
A Carnaúba cobrirá a faixa de energia de 2 keV (para alcançar a borda-K de fósforo e enxofre) a 24 keV. Vários tipos de análises de materiais nano-estruturados serão possíveis, permitindo obter mapas 2D e 3D com resolução nanométrica de composição e estrutura (imagens com contraste de espectroscopia e difração), por meio de varreduras do feixe de luz síncrotron. Algumas das principais áreas beneficiadas por estas técnicas serão:

- Ciência de materiais (catalisadores, magnetismo, semicondutores);
- Nanotecnologia (saúde, informação);
- Ciência ambiental (geociência, matérias em pressões extremas, petrologia);
- Ciência da vida (aplicações médicas e biológicas).

Em particular, o projeto ótico desta linha de luz está sendo feito para aproveitar a baixa emitância do Sirius, permitindo que o feixe na amostra seja, ao mesmo tempo, nanométrico e relativamente de baixa divergência, com grande profundidade de foco. Este último é um aspecto importante para a técnica de difração. Algumas das técnicas que poderão ser exploradas nesta linha serão:

- CDI – Imagem com difração de raios X coerente;
- Ptychografia de Bragg;
- Tomografia de varredura com contraste elementar;
- Espalhamento, difração, absorção e emissão de raios X com nanofoco.

Faixa de energia (keV)	2-24
Resolução de energia ( $\Delta E/E$ )	$10^{-4}$ - $10^{-5}$
Conteúdo de harmônicos	$< 10^{-5}$
Varredura de energia	Sim
Tamanho do feixe ( $\mu\text{m}$ )	0,05 x 0,05
Divergência do feixe (mrad)	$< 2$
Modo de imagem	Varredura
Modos de coerência	$\sim 1$



*Set up de um experimento de difração em alta pressão realizado na linha XDS, do síncrotron brasileiro UVX. No Sirius poderão ser atingidas pressões muito mais altas nas linhas Ema, Carnaúba e Jatobá*

## Linha de microespectroscopia de raios X Ema

As principais características desta linha de luz serão a habilidade em fazer micro espectroscopia em uma ampla faixa de energia com diferentes ambientes de amostras em condições extremas de pressão, campo magnético e temperatura. Será uma linha de luz complementar à Carnaúba, porém mais otimizada para feixes focalizados a tamanhos micrométricos. Isto permitirá um maior fluxo em uma faixa de tamanho de foco muito importante para áreas como ciências ambientais e ciências dos materiais em geral.

Para a maioria dos experimentos em alta pressão, o feixe de raios X ilumina a amostra através de diamantes utilizados para aplicar a pressão. Como pressão é definida pela razão força/área, quanto menor a área da ponta do diamante maior será a pressão aplicada para uma mesma força. Portanto, para alcançar pressões mais altas é necessário utilizar um feixe de raios X com tamanhos micrométricos ou até nanométricos.

Assim como a Carnaúba essa linha cobrirá a faixa de energia entre 2 keV até 24 keV. Com alto brilho sem precedentes, obtidos através de uma faixa de energia planejada, será possível estudar reações químicas envolvendo elementos tais como enxofre, fósforo, cloro, potássio e cálcio com alta resolução espacial e temporal.

A estabilidade e a velocidade de varredura do monocromador, em sincronia com o ondulator em vácuo, são portanto pontos-chaves desta linha, pois determinam as suas capacidades espectroscópicas diferenciadas.

Dentre as diversas técnicas que serão disponíveis nesta linha, o mapeamento quantitativo em 3D de composição elementar de vários materiais, como os exemplificados no capítulo 4, será um dos seus diferenciais. Além disso, graças às características desta linha de alto fluxo e resolução de energia da ordem de 1 eV, outras técnicas experimentais também poderão ser exploradas, como:

- $\mu$ XANES,  $\mu$ EXAFS,  $\mu$ XRF, XMCD, XMLD;
- Mapeamento de espectroscopia de raios X em micro escala;
- Espectroscopia de raios X resolvida em ângulo.

Faixa de energia (keV)	2-24
Resolução de energia ( $\Delta E/E$ )	$10^{-4}$ - $10^{-5}$
Conteúdo de Harmônicos	$<10^{-5}$
Varredura de energia	Sim
Tamanho do feixe ( $\mu\text{m}$ )	1 x 1
Divergência do feixe (mrad)	$<1$
Modo de imagem	Varredura
Modos de coerência	$\sim 3$

## Linha de espalhamento inelástico de raios X Ingá

Técnicas convencionais de difração e espalhamento de raios X, pressupõem que a energia dos fótons espalhados é igual à dos fótons incidentes, o dito espalhamento elástico. A linha Ingá explorará a caracterização de materiais por espalhamento inelástico (IXS), como por exemplo, interações entre fótons e matéria com mudança de energia (ou momento) dos fótons espalhados. Tais mudanças fornecem informações mais ricas sobre os materiais. Por exemplo, se a mudança de energia é de alguns meV é possível sondar vibrações coletivas da rede cristalina (os fônons). Nos casos em que a transferência de energia é mais alta, por volta de 100 eV, pode se sondar excitações eletrônicas de elementos leves como C, N, O com raios X duros (10-20 keV). Todos esses experimentos podem ser combinados com instrumentações para simular ambientes de altas pressões, como as empregadas na linha de micro-espectroscopia (Ema) e técnicas de sincronização com laser para estudo da evolução temporal dos primeiros instantes de fenômenos físicos, químicos e biológicos, entre outros. Isso permitirá a investigação espectroscópica de borda de absorção de elementos leves em ambientes de alta pressão ou a evolução temporal de excitações elementares.

Experimentos de espalhamento inelástico demandam bastante intensidade de raios X. Portanto, dois onduladores em série serão usados para gerar um alto fluxo de fótons na amostra.

Alem disso, a Ingá será capaz de operar em dois modos focalizantes. O primeiro será dotado de capacidade de micro-foco e varredura, com tamanho de feixe da ordem de  $10 \mu\text{m} \times 10 \mu\text{m}$ , sendo dedicado a quaisquer experimentos de IXS que necessitem de micro-focalização, como por exemplo mapeamento por espalhamento Raman. O segundo modo possuirá um foco tipo linha de  $10 \mu\text{m} \times 1 \mu\text{m}$ , dedicado a experimentos de tomografia direta com contraste de elementos leves por espalhamento Raman de raios X. Algumas das técnicas experimentais exploradas nesta linha serão:

- Espectroscopia de emissão ressonante de raios X;
- Espalhamento Raman de raios X;
- Tomografia direta com contraste de elementos leves;
- Espectroscopia de raios X ultrarrápida.

Faixa de energia (keV)	5-24
Resolução de energia ( $\Delta E/E$ )	$10^{-5}$ - $10^{-6}$
Conteúdo de Harmônicos	$<10^{-5}$
Varredura de energia	Sim
Tamanho do feixe ( $\mu\text{m}$ )	10 x 10
Divergência do feixe (mrad)	$<0,1$
Modo de imagem	Tomografia Direta



### **Linha de espalhamento coerente de raios X Cateretê**

A linha de luz Cateretê será otimizada para realizar imagem por difração coerente de raios X (CDI) e espectroscopia de correlação de fótons por raios X (XPCS). A técnica de CDI permite a obtenção de imagens tridimensionais de células e bactérias em meio líquido, com resolução de cerca de 30 nm e contraste (quantitativo) dado pela densidade eletrônica do material. Já a técnica de XPCS permite investigar as propriedades dinâmicas da matéria por meio da análise das correlações temporais dos fótons espalhados de forma quase elástica. Ela é, de certa forma, semelhante ao espalhamento de luz dinâmico (DLS, de *Dynamic Light Scattering*), porém com raios X. Ao contrário do DLS, o XPCS permite penetrar materiais opacos a luz e sondar escalas nanométricas, mais compatíveis com as dinâmicas de nano-domínios e nano-objetos. Paralelamente, o alto fluxo desta linha permitirá também experimentos de espalhamento de raios X a baixo ângulo com resolução temporal (TR-SAXS).

As técnicas exploradas nesta linha utilizam a fração de radiação coerente que poderá ser extraída dos onduladores em vácuo no Sirius.

Os experimentos de CDI utilizarão o primeiro e terceiro harmônicos do ondulador (com fluxo coerente de até  $10^{13}$  fótons/s), enquanto o XPCS utilizará o quinto harmônico, entre 7 e 9 keV, região ótima de energia para estudo de materiais coloidais. Em ambos casos, o feixe que iluminará a amostra será uma onda plana.

Entre as suas aplicações, é possível destacar que esta linha será otimizada para estudar efeitos biológicos de importância primária para a medicina e a biologia. Estes efeitos estão relacionados com a descoberta de novos medicamentos, evolução e proliferação celular, assim como desenvolvimentos patológicos e tratamentos. Além disso, será possível investigar a dinâmica mesoscópica de fenômenos biológicos, assim como problemas de indústrias alimentícia, farmacêutica e cosmética e de organizações nanométricas nas áreas de óleo, catalisadores e polímeros, essenciais para a exploração da camada pré-sal.

Faixa de energia (keV)	3-24
Resolução de energia ( $\Delta E/E$ )	$10^{-4}$
Conteúdo de Harmônicos	$<10^{-4}$
Varredura de energia	Não
Tamanho do feixe ( $\mu\text{m}$ )	40 x 40
Divergência do feixe (mrad)	$< 0,01$
Modo de imagem	Por speckle
Modos de coerência	1

### **Linha de cristalografia de macromoléculas com microfoco Manacá**

A primeira linha de cristalografia de macromoléculas do Sirius será otimizada para alto fluxo e foco sub-micrométrico dedicada aos estudos das estruturas tridimensionais de macromoléculas, em particular arranjos complexos como vírus, proteínas de membranas e proteínas modulares.

O uso de feixes de luz síncrotron com foco micrométrico em cristalografia de proteínas está se tornando a melhor opção para o estudo de microcristais de proteínas de membranas e complexos de proteínas grandes e flexíveis e de difícil cristalização. Mesmo nos experimentos com cristais maiores, o feixe micrométrico permite analisar toda a área do cristal e identificar regiões mais uniformes e ordenadas que resultam em dados com maior resolução e qualidade. Além disso, o micro-feixe permite reduzir o dano causado pela radiação aos frágeis micro-cristais de proteínas. Entretanto, a divergência do feixe deve permanecer abaixo da mosaicidade de qualquer cristal de interesse, para isso a divergência do feixe no foco deve permanecer abaixo de 0,5 mrad. Tal divergência permite que sejam resolvidos picos de difração de cristais com células unitárias de até 1000 Å, dependendo das estratégias experimentais de coleta.

Graças ao alto brilho do Sirius, na região de energia em torno de 12 keV, na qual os experimentos serão feitos, o fluxo estimado da linha Manacá no foco nanométrico será da ordem de  $10^{13}$  ph/s. E, assim como as linhas Carnaúba e Ema, esta linha também cobrirá uma ampla faixa de energias, chegando até a energias próximas da borda K do enxofre. Em princípio, como a maioria das proteínas nativas contém átomos de enxofre (na metionina e cisteína), a técnica de SAD (difração anômala com comprimento de onda único) pelo enxofre oferece a possibilidade de uma determinação direta de estrutura.

Além de toda infraestrutura para preparação e condicionamento dos cristais de proteínas, a estação experimental será equipada com um goniômetro tipo kappa que permite melhor alinhamento dos cristais e distintas orientações cristalográficas, possibilitando obter coletas de alta resolução em certas condições experimentais.

Faixa de energia (keV)	2-24
Resolução de energia ( $\Delta E/E$ )	$10^{-4}$
Conteúdo de Harmônicos	$<10^{-4}$
Varredura de energia	Não
Tamanho do feixe ( $\mu\text{m}$ )	0,5 x 0,5
Divergência do feixe (mrad)	$< 0,5$
Modo de imagem	Por <i>speckle</i>
Modos de coerência	1

## Linha de espectroscopia de UV e raios X moles de alta resolução Ipê

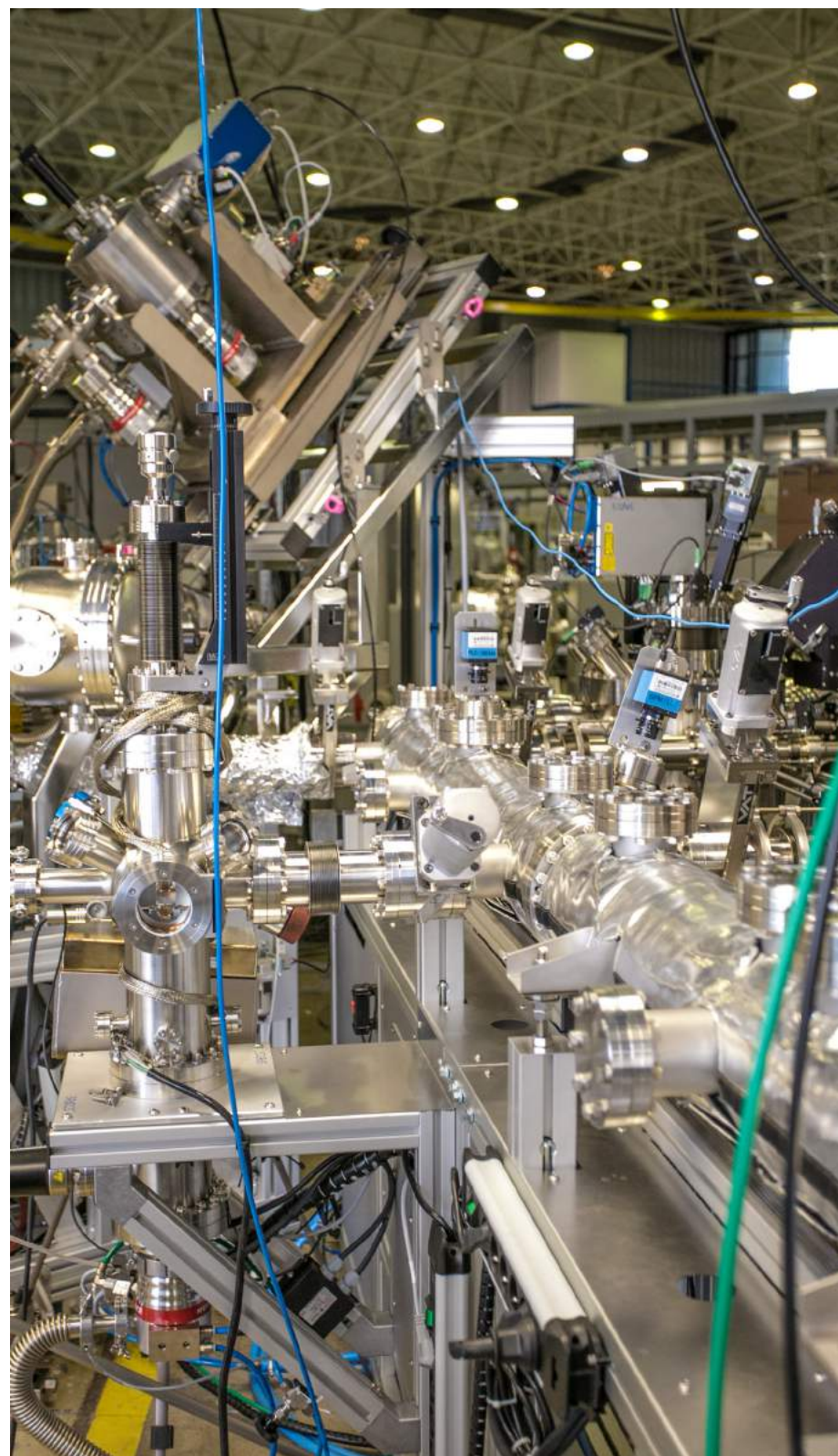
A espectroscopia dos elétrons mais “ativos” nos materiais, feita por meio da interação de radiação ultravioleta e raios X moles com esses elétrons, é a ferramenta experimental mais importante na pesquisa da física da matéria condensada, área de origem dos princípios que regem o funcionamento dos dispositivos eletrônicos modernos. Análises como estas permitem compreender certas propriedades intrínsecas dos elétrons nos materiais que podem levá-los a transportar correntes elétricas de forma, às vezes, surpreendente. É o caso dos supercondutores, capazes de transportar correntes elétricas sem resistência, ou mesmo dos grafenos, que poderão ser usados em circuitos integrados com frequências de até 500 GHz - quase cem vezes maior que a tecnologia atual baseada em silício.

A linha Ipê terá duas estações experimentais que permitirão modos complementares de espectroscopia, uma por fotoelétrons, o ARPES (do inglês, *Angle Resolved Photo Electron Spectroscopy*) e outra por espalhamento inelástico ressonante, o RIXS (do inglês, *Resonant Inelastic X-Ray Scattering*). Enquanto ARPES mede as propriedades dos elétrons em seus estados quânticos ocupados, o RIXS mede estas propriedades nos estados quânticos desocupados. A estação experimental de ARPES já se encontra em comissionamento na linha PGM do UVX e será transferida para a Ipê.

Esta linha de luz será baseada em um ondulador que permite controle da polarização da radiação (circular, horizontal e vertical), essencial para este tipo de espectroscopia. Ao contrário das linhas de raios X, a monocromatização nesta linha será baseada em grades de difração planas, que dispersam cromaticamente a radiação do ondulador e permitem a seleção monocromática espacialmente por meio de fendas.

Um dos fatores essenciais para as espectroscopias ARPES e RIXS é uma alta resolução de energia, que depende da grade de difração, do tamanho da fonte e da ótica de focalização da linha. Na faixa de energia da Ipê, o tamanho do feixe de elétrons praticamente não tem influência sobre o tamanho da fonte de radiação pois se está próximo ao limite de difração, tanto na direção vertical quanto horizontal. Isso permitirá atingir um alto poder de resolução com alto fluxo. O tamanho do foco natural nesta linha poderá ser alterado para se atingir nanofoco por meio do uso de lentes difrativas de Fresnel.

Faixa de energia (eV)	20-1000
Resolução de energia ( $\Delta E/E$ )	$10^{-5}$ - $10^{-4}$
Conteúdo de Harmônicos	$<10^{-5}$
Tamanho do feixe ( $\mu\text{m}$ )	100 x 100
Divergência do feixe (mrad)	1



Estação experimental de ARPES instalada na linha PGM, do anel UVX, e que será transferida para a linha Ipê, no Sirius



### Linha de espectroscopia de UV e raios X moles de alto fluxo Sabiá

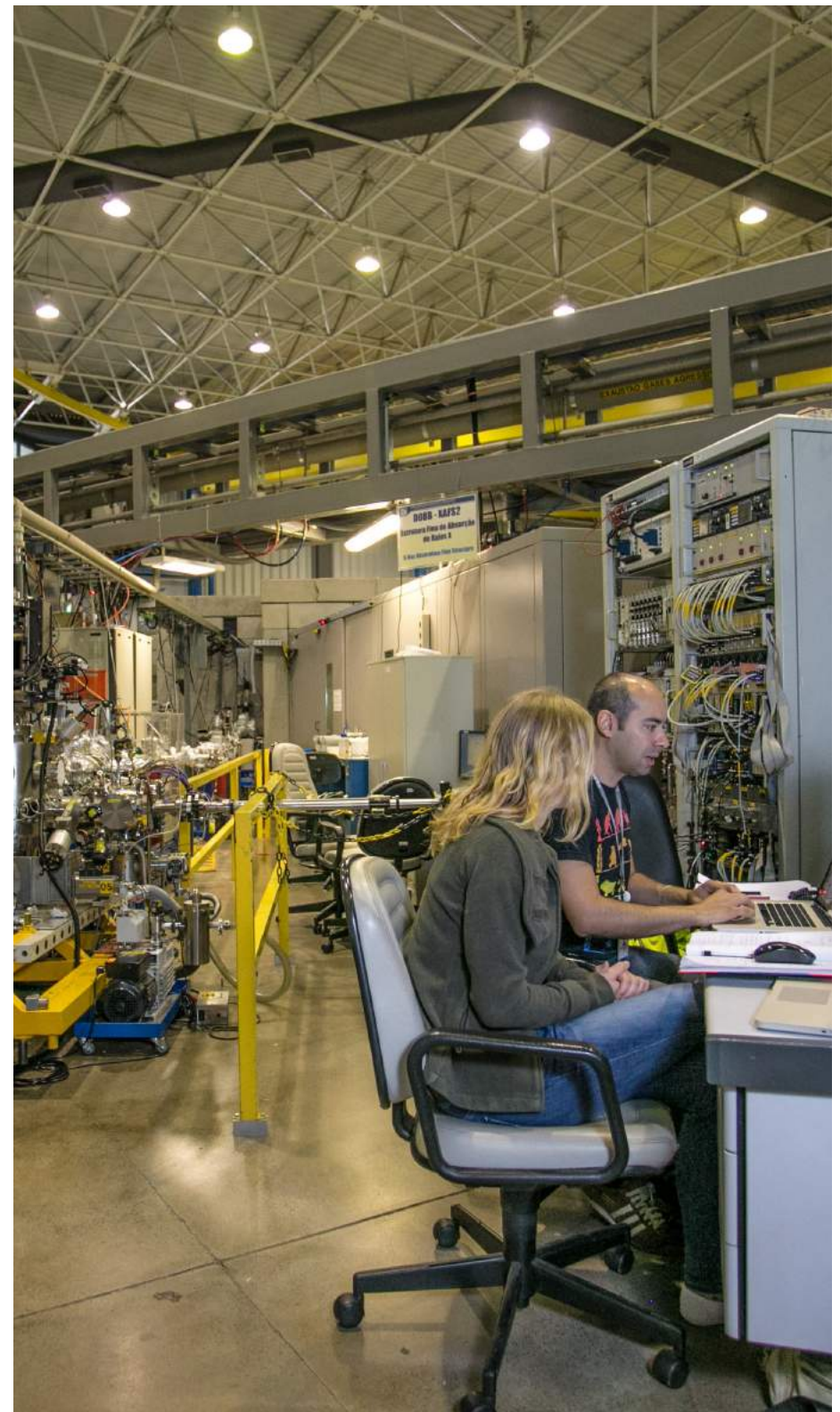
Assim como na linha Ipê, esta linha trabalhará na faixa de raios X moles utilizando onduladores com controle de polarização e monocromador de grades planas. As principais análises possíveis nesta linha serão de espectro-microscopia (microscopia com contraste químico) e dicroísmo, em uma faixa de energia que corresponde às bordas L de absorção de metais de transição 3d, como manganês, ferro, cobalto, e níquel e às bordas K de absorção de elementos leves como carbono, nitrogênio e oxigênio. Com o feixe síncrotron nesta faixa de energias é possível excitar transições eletrônicas para estados de valência, próximos às bordas de absorção destes elementos, que são sensíveis aos seus ambientes químicos. Este tipo de estudo da estrutura eletrônica e química dos materiais é conhecido como NEXAFS (do inglês, *Near-Edge X-ray Absorption Fine Structure*).

Na linha Sabiá será privilegiado um fluxo de fótons mais alto, em detrimento de uma resolução de energia não tão grande quanto a da linha Ipê. Para isso, o projeto ótico visará um número reduzido de espelhos planos e plano-elípticos e grades mais otimizadas para alta eficiência.

Uma das estações experimentais desta linha de luz será dedicada à microscopia por emissão de fotoelétrons, PEEM, (do inglês, *Photoelectron Emission Microscopy*) e à microscopia de transmissão por varredura, STXM, (do inglês, *Scanning Transmission X-Ray Microscopy*). Ambas as técnicas de microscopia permitem a obtenção de imagens com excelente contraste químico e com resolução nanométrica. Há uma gama enorme de materiais que podem ser analisados com este tipo de microscopia, nas áreas de catálise, polímeros e geociências, por exemplo. A segunda estação experimental permitirá o estudo de espectroscopia de absorção em materiais magnéticos utilizando espectroscopia de absorção em diversos modos como:

- Dicroísmo Circular Magnético (XMCD);
- Dicroísmo Linear Natural ou Magnético (XLD, XMLD);
- Espalhamento Magnético Ressonante (XRMS).

Faixa de energia (eV)	250-2500
Resolução de energia ( $\Delta E/E$ )	$10^{-4}$
Varredura de energia	Sim
Tamanho do feixe ( $\mu\text{m}$ )	50 x 50
Divergência do feixe (mrad)	2



Pesquisadores fazem observações usando a técnica de absorção de raios X, disponível na linha de luz XAFS2, do síncrotron UVX



### Linha de espectroscopia de raios X com resolução temporal Quati

A proposta principal desta linha de luz é a realização de experimentos de espectroscopia de absorção de raios X de alta qualidade com resolução temporal e *in situ*. A linha Quati permitirá a realização de medidas na escala temporal de milissegundos, o que possibilita a análise espectroscópica em tempo real de uma enorme variedade de processos físicos e químicos, como sínteses de materiais, estudos de nanopartículas e principalmente catalisadores.

As principais técnicas experimentais que serão desenvolvidas nesta linha são as espectroscopias de raios X, em tempo real, nos modos de XANES (*X-Ray Absorption Near Edge Structure*) e EXAFS (*Extended X-Ray Absorption Fine Structure*). Com o alto brilho alcançado nesta linha, adicionado a um rápido monocromador, será possível adquirir alta qualidade de espectros de XANES e EXAFS para estudos cinéticos em tempo e condições experimentais reais. Os usuários serão capazes de estudar estrutura de materiais e catalisadores em altas temperaturas, sob fluxo ou pressão de gases em condições *operando*.

O grande diferencial desta linha está no seu monocromador que será capaz de fazer varreduras de energia de poucos milissegundos por análise, o que implica em um monocromador rápido e estável, com uma eletrônica rápida e sincronizada. A linha operará com foco pequeno ( $40 \times 40 \mu\text{m}^2$ ) no caso de celas capilares usadas em experimentos de catalisadores em condições *in situ*, ou com foco grande ( $1 \times 1 \text{ mm}^2$ ) para experimentos em geral com materiais heterogêneos e principalmente materiais sensíveis que podem ser destruídos pelo feixe concentrado.

A combinação de técnicas complementares, como espectrometria de massas, Raman e FTIR (espectroscopia de infravermelho por transformação Fourier), na mesma estação experimental permitirá que sejam estudados vários aspectos de um material em um só experimento. Isso impede erros nas medidas devido à mudança de equipamentos ou de montagem, e aumenta a confiabilidade do experimento, principalmente no acompanhamento da cinética de catálise em condições reais, utilizadas pela indústria.

Faixa de energia (keV)	4-45
Resolução de energia ( $\Delta E/E$ )	$10^{-5}$ - $10^{-4}$
Conteúdo de Harmônicos	$<10^{-5}$
Varredura de energia	15-100 ms/scan
Tamanho do feixe ( $\mu\text{m}$ )	$40 \times 40$ ( $1 \times 1 \text{ mm}^2$ )
Divergência do feixe (mrad)	1



Pesquisadores fazem observações experimentais no sincrotron brasileiro UVX

## Linha de micro e nanoespectroscopia de infravermelho Imbúia

Espectroscopia de infravermelho (FTIR) é uma das mais estabelecidas técnicas para a análise de compostos orgânicos e inorgânicos. Esta faixa energética do espectro eletromagnético contém os níveis de energia associados às vibrações e rotações moleculares. Tais modos vibracionais e rotacionais são assinaturas particulares dos grupos funcionais das moléculas e permitem a aplicação da FTIR na análise composicional de praticamente qualquer material. No entanto, muitas propriedades e funções dos materiais são definidas por distintas fases (estruturais ou químicas) em domínios e interfaces na escala de nanômetros a poucos microns. Neste contexto, ferramentas para análise de materiais via microscopia e nanoscopia de FTIR são essenciais para a realização de pesquisa de fronteira em novos materiais assim como no entendimento de materiais naturais.

A Imbúia será dedicada à realização de experimentos de micro e nano-FTIR na faixa de IR médio. Para isso, a sua ótica coletará a radiação de borda gerada em um dos trechos retos do acelerador Sirius, que será dividida em duas estações experimentais.

A primeira estação experimental (Imbúia  $\mu$ FTIR) será equipada com um espectro-microscópio de IR que atuará com focalização dentro do limite de difração, com resolução espacial típica de 4  $\mu$ m. A segunda estação (Imbúia nano-FTIR, já instalada no UVX e em comissionamento) será equipada com um microscópio de campo próximo que pode chegar a resoluções espaciais muito além do limite de difração, tipicamente de 30 nm. Atualmente, apenas 2 laboratórios síncrotron reportaram experimentos de nano-FTIR em uma linha de luz, o que fará da estação Imbúia nano-FTIR uma das poucas estações do gênero disponíveis para a comunidade mundial de FTIR e de ciência de nanomateriais. Nestas duas estações, estarão disponíveis as seguintes técnicas:

- $\mu$ FTIR em modos de transmissão e reflexão;
- $\mu$ FTIR no modo ATR (*Attenuated Total Reflectance*);
- Micro-tomografia espectral de IR;
- Nano-FTIR e imagem espectral via a-SNOM;
- Nano-imagem com contraste de fase óptica via a-SNOM.

Faixa de energia (eV)	0,02-1
Resolução de energia (eV)	0,01
Varredura de energia	FTIR
Tamanho do feixe ( $\mu$ m)	2 x 2 (30x30)
Divergência do feixe (mrad)	1



*Microscópio de a-SNOM para medidas de nano-FTIR, atualmente em comissionamento no anel UVX*



### **Linha de Microtomografia de raios X Mogno**

A linha de tomografia com resolução micro e nanométrica permitirá explorar as propriedades singulares do feixe de luz síncrotron, produzido nos *superbends*, para obter imagens tridimensionais de materiais variados, de forma rápida, não invasiva, quantitativa e de alta resolução.

As grandes vantagens da tomografia de raios X com luz síncrotron de alto brilho são melhor contraste de imagem e maior resolução espacial e temporal. Mais ainda, é possível uma análise de densidade quantitativa e identificação de materiais bem distintos, já que o efeito de *beam hardening*, presente nos tomógrafos convencionais, é eliminado com a monocromaticidade do feixe. A detecção de detalhes inferiores a 1  $\mu\text{m}$  em amostras de tamanho milimétrico são, de certa forma, rotina, mesmo na linha IMX1 de tomografia do anel UVX. No entanto, os ganhos em energia (hoje limitada a 14 keV na IMX1, mas que chegará a 45 keV na linha Mogno), no fluxo na amostra (mais de mil vezes superior) e no tamanho da fonte (quase cem vezes menor) levarão as análises por tomografia a um patamar mundialmente competitivo.

A ótica desta linha será uma das mais simples do Sirius. O principal elemento consiste em um monocromador de multicamadas que permite uma banda passante maior (1%), porém ainda monocromática. Esta tecnologia já é empregada em algumas linhas do UVX e permite um ganho de fluxo de quase 100 vezes, em relação aos monocromadores de cristais de Si. O monocromador será instalado como primeiro elemento ótico da linha, visando coletar cerca de 1-2 mrad de radiação na direção horizontal, que será colimada por uma curvatura sagital na segunda multicamada. A estação experimental será transladada ao longo da cabana experimental para controlar a iluminação vertical do feixe. Vários detectores baseados em detecção direta, como o Medipix, ou detecção indireta, como CCDs, estarão disponíveis, cobrindo campos de visão desde 0,5 mm x 0,5 mm até 30 mm x 30 mm, para resoluções da ordem de 0,25  $\mu\text{m}$  x 0,25  $\mu\text{m}$  até 15  $\mu\text{m}$  x 15  $\mu\text{m}$  respectivamente.

Com o tamanho extremamente pequeno da fonte do dipolo (25  $\mu\text{m}$  x 10  $\mu\text{m}$ , FWHM), além do contraste por absorção, os métodos de contraste de fase poderão ser amplamente empregados, com boa coerência da fonte.

Faixa de energia (keV)	6-45
Resolução de energia ( $\Delta E/E$ )	$10^{-2}$
Conteúdo de harmônicos	-
Varredura de energia	Não
Tamanho do feixe (mm)	30(h) x 2(v)
Divergência do feixe (mrad)	0,0(h) x 0,3(v)

### **Linha de espalhamento de raios X a baixos ângulos Sapucaia**

A linha de luz Sapucaia cobrirá uma grande variedade de campos de pesquisa em física, química e biologia, além de aspectos industriais. Com as técnicas disponíveis nesta linha, será possível obter informações sobre forma, organização e dinâmica de partículas e inhomogeneidades das amostras, desde poucos  $\text{\AA}$  até alguns  $\mu\text{m}$ . Elas permitirão responder diversas questões relacionados a ciências da vida (aplicações biológicas e médicas), biologia estrutural (proteínas, lipídios, macromoléculas) e um vasto campo de ciências dos materiais, incluindo nanotecnologia, polímeros, catálise, reologia e ciências ambientais.

A principal técnica desta linha, o espalhamento de raios X a baixos ângulos (SAXS) em solução, é uma técnica complementar à cristalografia de proteínas, como da linha Manacá, e permite compreender mecanismos biológicos fundamentais por meio da determinação de estruturas complexas de proteínas, sem a necessidade de cristalização das macromoléculas.

Assim como na linha Paineira, o projeto ótico visa obter um feixe de raios X com baixa divergência, alto fluxo e energia de 4 a 24 keV. A ótica da linha de luz será otimizada para 12 keV (energia crítica do *superbend*) e a expectativa de fluxo na amostra é de  $10^{12}$ ph/s.

Nesta linha, a baixa divergência é fundamental para que o tamanho do feixe seja constante a qualquer distância do detector de área, que poderá ficar a até 10 metros da amostra. Considerando um tamanho estimado em 100  $\mu\text{m}$  do foco, então um  $q_{\text{min}} = 1.5 \cdot 10^{-4} \text{\AA}^{-1}$  em 10 m deve ser alcançável, o que corresponde a escalas de até 4  $\mu\text{m}$ , possibilitando experimentos em SAXS em ângulos ultrabaixos (o chamado USAXS).

O compromisso entre o tamanho e a divergência do feixe na posição do detector será cuidadosamente projetado, a partir da posição dos elementos óticos. Além disso, uma abordagem inovadora, combinando SAXS/WAXS e técnicas de espectroscopia (XANES, UV-vis e Raman), será desenvolvida para resolver processos e estruturas científicas fundamentais.

Faixa de energia (keV)	4-24
Resolução de energia ( $\Delta E/E$ )	$10^{-4}$
Conteúdo de Harmônicos	$<10^{-4}$
Varredura de energia	Sim
Tamanho do feixe ( $\mu\text{m}$ )	100 x 100
Divergência do feixe (mrad)	$<0,05$



## Linha de difração de raios X Paineira

Esta linha de luz será otimizada para as técnicas de difração de pó, difração de monocristais e espectroscopia, visando principalmente a caracterização estrutural de materiais policristalinos (como cerâmicas, fármacos, minerais, óleo e gás, catalisadores, etc.). A técnica de difração de pó, é complementar a técnica de micro e nanodifração, como a da linha Carnaúba.

Diferente da técnica de microdifração, na qual a determinação da célula unitária é bastante direta pelo padrão de difração de cristais micrométricos, a difração de pó é amplamente utilizada para determinar a estrutura cristalina de materiais que apresentam dificuldade na obtenção de monocristais, seja porque eles não são estáveis ou suficientes ou porque são intrinsecamente policristalinos. Técnicas experimentais e métodos computacionais de análise de dados mais recentes permitem a determinação da estrutura de materiais cada vez mais complexos pela difração de pó.

Uma aplicação importante da Paineira, que será complementar a linha Quati, será o estudo *in situ* de formação de novas fases cristalográficas durante o curso de reações químicas. Por exemplo, será possível acompanhar as mudanças de estrutura cristalina nas reações entre sólidos e gases ou líquidos, recorrentes na pesquisa de novos catalisadores.

A ótica desta linha de luz está sendo projetada para se aproveitar a baixa emitância das fontes de *superbend* e produzir um feixe com baixa divergência, na direção vertical. Na direção horizontal ele será mais divergente, permitindo que haja suficiente estatística de orientação aleatória dos grânulos do pó, auxiliada pela rotação da amostra dentro de um capilar.

A estação experimental dedicada à difração de pó, já instalada e em operação no anel UVX do LNLS, é totalmente automatizada e permite a realização de experimentos em dezenas e centenas de amostras em poucas horas. Este tipo de infraestrutura é também muito importante para indústria farmacêutica, considerada padrão de referência (*gold standard test*) na identificação e quantificação de formas sólidas dos fármacos, por exemplo, polimorfos, solventes, hidratos, co-cristais e amorfos.

Faixa de energia (keV)	4-45
Resolução de energia ( $\Delta E/E$ )	$10^{-4}$
Conteúdo de harmônicos	$<10^{-4}$
Varredura de energia	Sim
Tamanho do feixe ( $\mu\text{m}$ )	100 x 100
Divergência do feixe (mrad)	$< 0,05(v) \times 0,5(h)$



Estação experimental para difração de pó hoje instalada no anel UVX e que será empregada na linha Paineira



### Linha de tomografia e difração de raios X de alta energia Jatobá

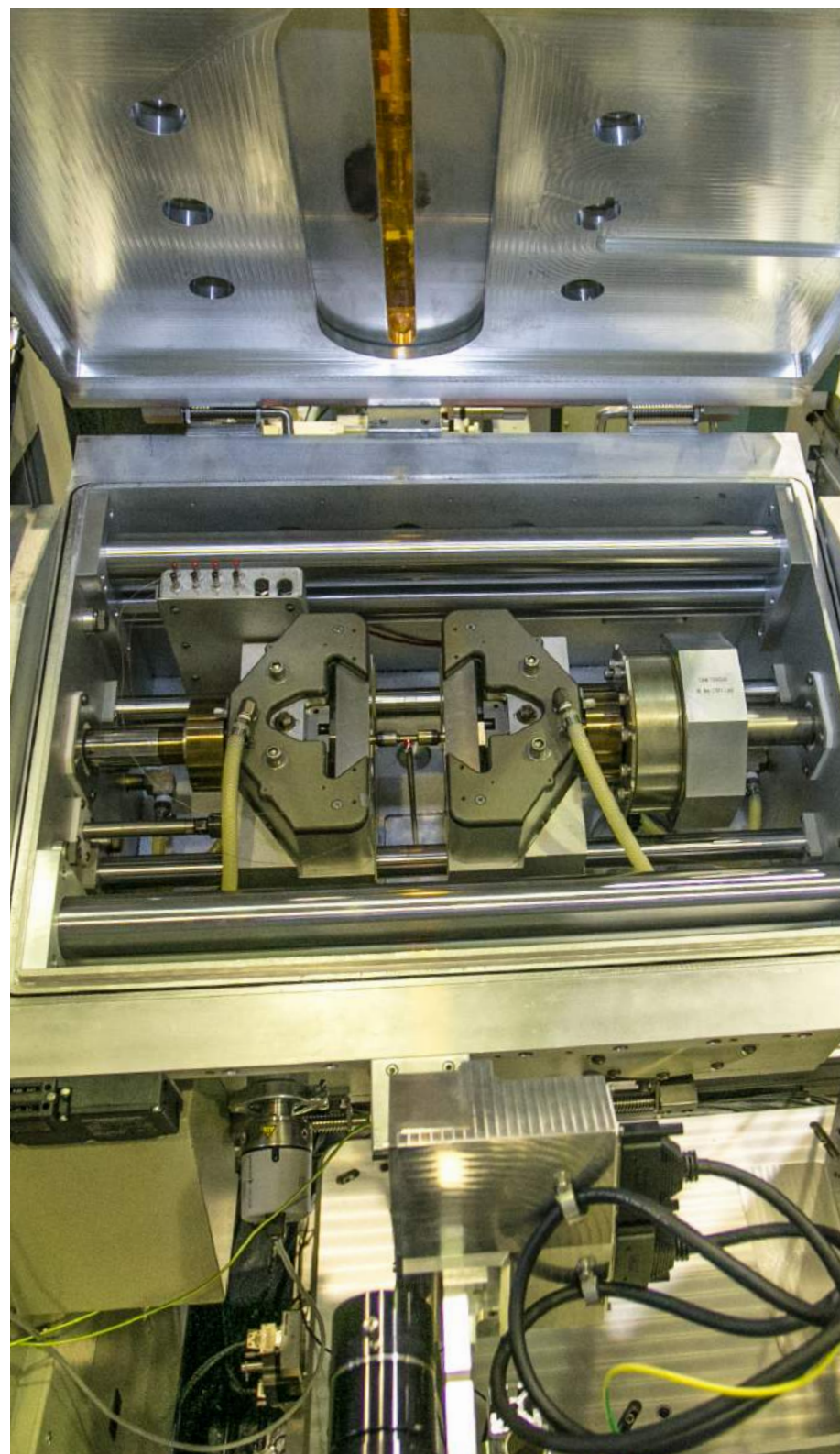
Esta será a única linha do Sirius que cobrirá parte da faixa de energia conhecida por *HEX-rays* (do inglês, *High-Energy X-Rays*), que vão de 80-1000 keV. Ela será baseada em um *wiggler* supercondutor, capaz de gerar campos magnéticos com amplitude de até 4 T. Em princípio, com este dispositivo a linha Jatobá cobrirá a faixa de energias de 30-200 keV, o que permitirá uma grande penetração dos raios X em qualquer tipo de material, chegando a centímetros em materiais como o aço e milímetros em materiais contendo chumbo.

Duas principais estações experimentais serão disponíveis para realização de experimentos de investigação estrutural de materiais como metais, rochas, cerâmicas e concreto. Uma das estações ficará dedicada a difração de raios X de alta energia com simulação termomecânica *in situ*. Esta estação está instalada no UVX e vem sendo usada para análise de modificações estruturais superficiais em aço e outros materiais estruturais. Há penetração dos raios X produzidos no UVX chega a apenas alguns microns da superfície nestes materiais. Na linha Jatobá, este mesmo experimento poderá sondar todo o volume. A segunda estação experimental será semelhante a da linha Mogno para tomografia de raios X. A grande diferença é que nesta linha poderão ser estudadas amostras de materiais mais espessos e mais pesados.

Para obter o feixe de energia colimado e monocromático nestas duas estações experimentais, esta linha utilizará lentes refrativas de raios X e monocromadores de Si por transmissão. As altas energias envolvidas impõem requisitos técnicos de refrigeração e proteção radiológica bastante desafiadores em todos os elementos da linha.

Um dos exemplos mais importantes de análises que poderão ser feitas nesta linha é a tomografia de rochas carbonáticas do pré-sal. Com a alta energia da linha e com detectores de alta resolução especialmente projetados (como o Medipix3RX será), poderão ser feitas imagens tridimensionais de rochas com alguns centímetros em questão de minutos, com resolução de 40  $\mu\text{m}$ . Isto permitirá, inclusive, observar em tempo real a dinâmica de percolação de fluídos sob pressão, um problema importante para a recuperação avançada de petróleo.

Faixa de energia (keV)	30-200
Resolução de energia ( $\Delta E/E$ )	$10^{-3}$
Conteúdo de harmônicos	-
Varredura de energia	Não
Tamanho do feixe ( $\mu\text{m}$ )	100(h) x 10(v) - (0,1x0,1)
Divergência do feixe (mrad)	0,0(h) x 0,3(v)



Detalhe da estação de simulação termomecânica em operação no anel UVX



## Edificações



***Aceleradores de elétrons com as dimensões e especificações técnicas previstas para a nova fonte de luz Sirius, juntamente com as particularidades técnicas de suas 40 linhas de luz, demandam prédios e instalações de alto desempenho***

*Simulação 3D do edifício do Sirius já implantado no novo terreno, junto ao CNPEM*

Aceleradores de elétrons com as dimensões e especificações técnicas previstas para a nova fonte de luz Sirius, juntamente com as particularidades técnicas de suas 40 linhas de luz, demandam prédios e instalações de alto desempenho. São consideradas edificações de “missão crítica”, nas quais características como estabilidade (dimensional, térmica e vibracional), disponibilidade e viabilidade de manutenção são imprescindíveis.

Acrescenta-se a essas particularidades a necessidade de garantir a segurança dos usuários, funcionários e visitantes, principalmente no quesito de proteção radiológica. Deve-se também propiciar um ambiente de trabalho adequado à prática da pesquisa científica, com conforto térmico e acústico e a acuidade visual adequados, além da perfeita integração das pessoas aos ambientes de trabalho e de convívio.

### **Projeto conceitual**

O projeto conceitual do Sirius foi desenvolvido em conjunto com um escritório de arquitetura, contratado para esta etapa. Para esse trabalho, a equipe valeu-se de toda a experiência ganha pelos

envolvidos durante visitas e da análise de relatórios e projetos de laboratórios similares espalhados pelo mundo.

Assim, neste projeto foram incorporados diversos conceitos observados nas instalações de referência, como:

1) A internalização dos laboratórios de apoio e escritórios de pesquisadores, técnicos e engenheiros, de forma a aproximar o pesquisador do objeto final de seu trabalho, assim como os demais envolvidos com a pesquisa e a manutenção ou aprimoramento da fonte de luz e suas instalações.

2) A disposição das áreas de apoio em torno do hall onde se localizam as linhas de luz e aceleradores. Com isso, cria-se uma barreira térmica entre o exterior do prédio e o hall, importante para a manutenção da estabilidade térmica nesse último ambiente, considerado um aspecto crítico.

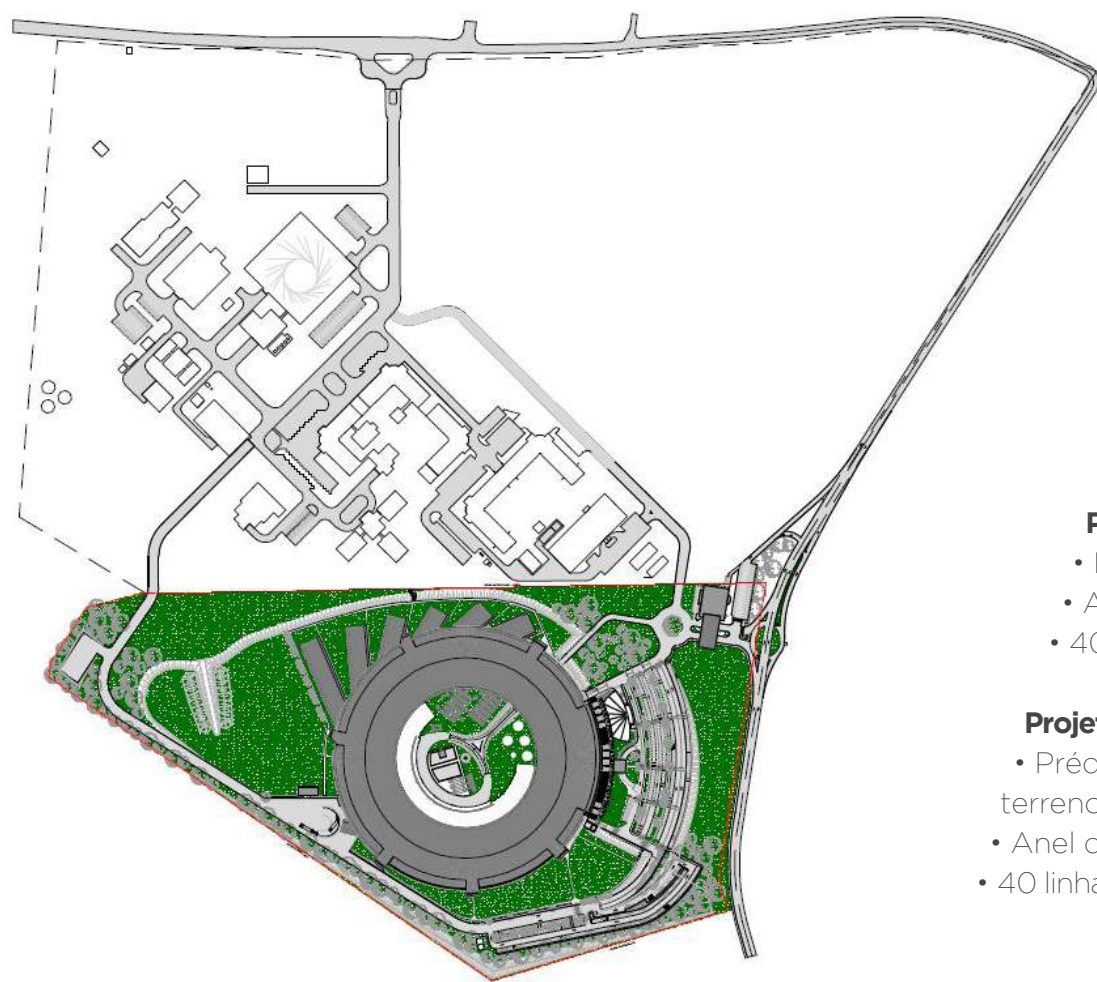
3) A utilização do pátio interno para alocar as casas de máquinas, reservatórios e demais equipamentos que compõem a central de utilidades da edificação. Desta forma, simultaneamente ao aproveita-



mento de espaço, obtém-se uma redução de custo (operacional e de instalação) por meio da redução das distâncias entre produção e consumo. Por outro lado, sabe-se que essa solução, por aproximar as fontes de vibração das linhas de luz e dos aceleradores, pode afetar os seus respectivos desempenhos, e que

durante o projeto executivo seria necessário abordar esse problema com muita atenção.

4) A possibilidade de instalação futura de linhas de luz extralongas (com nanofoco) e de suas estações experimentais de forma independente ao prédio dos aceleradores.



### **Evolução do projeto civil do Sirius**

#### **Primeiro plano diretor - 2008**

- Prédio principal de 12 mil m<sup>2</sup> para abrigar os aceleradores e prédio anexo de 11 mil m<sup>2</sup> para laboratórios e escritórios
- Anel de armazenamento: Circunferência de 332 m
- 32 linhas de luz (30 linhas de luz de 48 m e duas linhas de até 100 m)

#### **Projeto conceitual - 2011**

- Prédio de 42 mil m<sup>2</sup> para abrigar aceleradores e escritórios
- Anel de armazenamento: Circunferência de 480 m
- 40 linhas de luz (uma linha de luz longa)

#### **Projeto executivo - 2014**

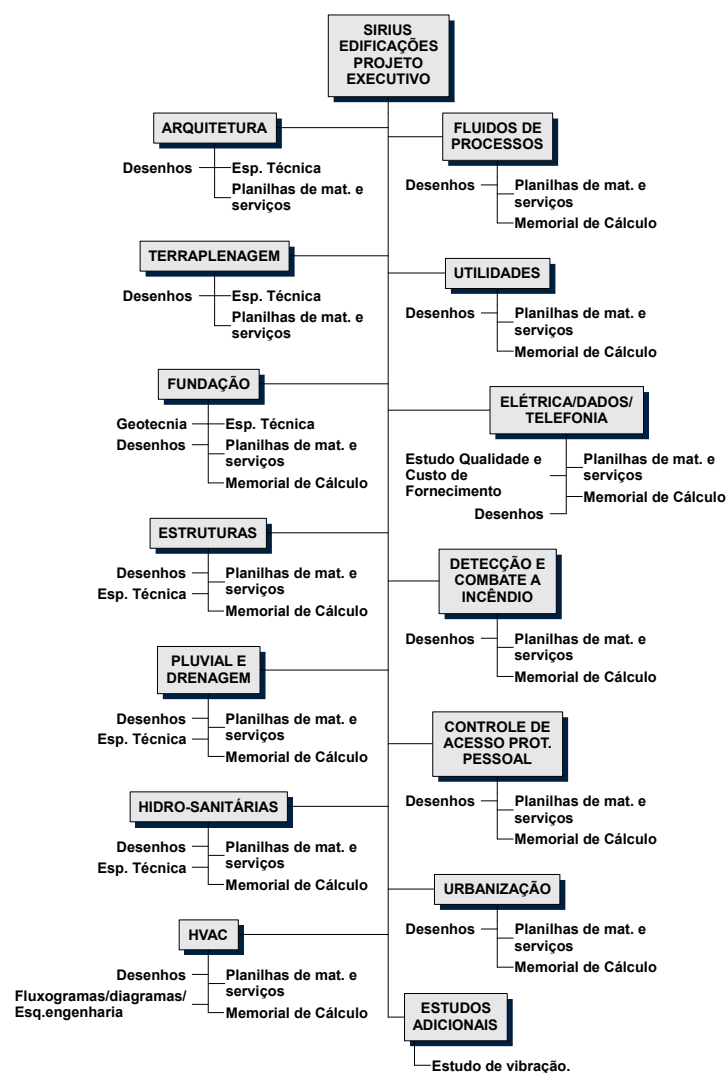
- Prédio de 68 mil m<sup>2</sup> a ser instalado em um novo terreno, de 150 mil m<sup>2</sup>
- Anel de armazenamento: Circunferência de 518 m
- 40 linhas de luz (seis linhas longas, de até 150 m)

*Vista aérea do campus do CNPEM e da área para implantação do Sirius*

## Projeto executivo

Em setembro de 2012 iniciaram-se os trabalhos de elaboração do projeto executivo da edificação do Sirius. A contratação da empresa encarregada do trabalho foi baseada no projeto conceitual já elaborado e previa um edifício com aproximadamente 42 mil metros quadrados de área construída, capaz de abrigar um anel de armazenamento de 480 metros de circunferência.

As atribuições técnicas da empresa encarregada foram definidas de acordo com a especificação elaborada pela equipe de engenharia do LNLS. Neste documento estavam descritas todas as entregas a serem feitas pela contratada à cada uma das disciplinas integrantes do projeto, assim como as especificações de desempenho e premissas de construção e funcionamento do edifício e de suas instalações.



Entregáveis por disciplina do projeto executivo solicitados na especificação técnica

**Conhecendo o subsolo:** Para a elaboração do projeto foram realizadas sondagens e estudos dos níveis de ruído culturais presentes no solo. Essas informações foram utilizadas como base para discussões em workshops específicos e serviram também para balizar as empresas que concorreram para contratação do projeto executivo.

**O processo de reconhecimento do terreno incluiu a realização de mapeamento geofísico e de sondagens (à percussão e mistas). A primeira técnica de sondagem forneceu uma amostra do perfil de resistência do solo e a segunda, com perfuração rotativa, permitiu ter uma ideia da composição estratificada do solo e do seu substrato rochoso, perfurado em até 20 metros de profundidade.**

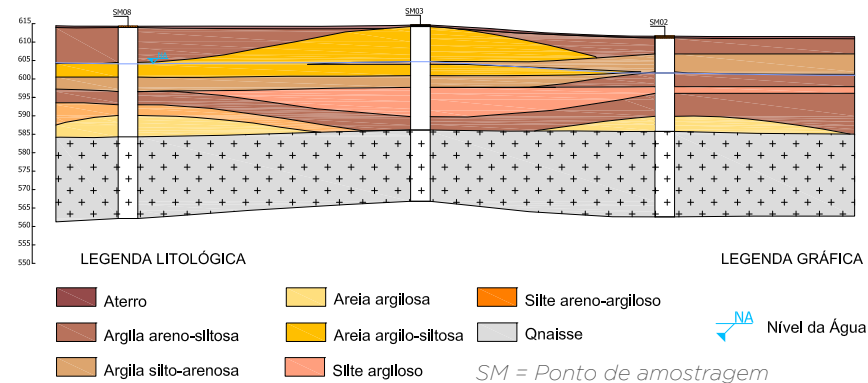
O levantamento geofísico valeu-se de três técnicas:

- MASW (*Multichannel Analyses of Surface Waves*) para determinar os parâmetros técnicos do terreno até uma profundidade aproximada de 40 m.

- HVSR (*Horizontal to Vertical Spectral Ratio*) para determinar as frequências características do local.

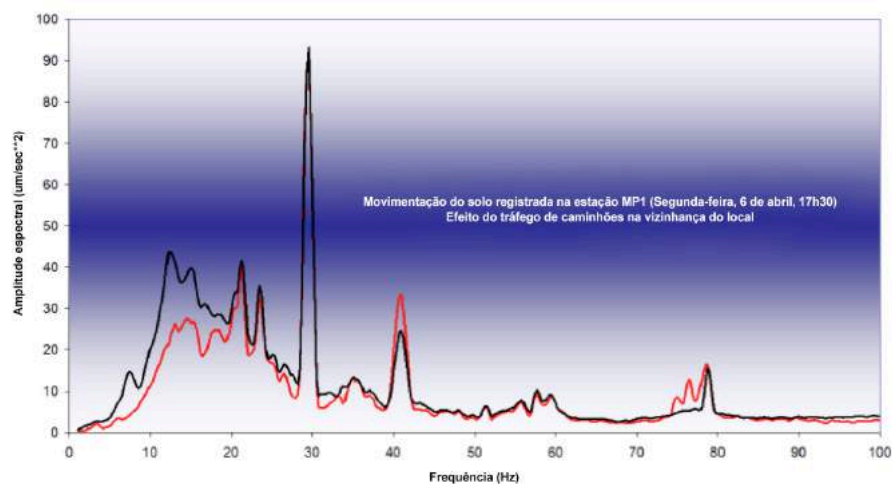
- Sísmica à refração: a partir da medida do tempo de propagação de uma onda sísmica gerada em um ponto da superfície e da medição simultânea de diversos outros pontos, é possível determinar, complementarmente às duas técnicas anteriores, a provável composição litológica, grau de fraturas, geometria das primeiras camadas de subsolo e a profundidade do substrato rochoso.

Outro aspecto estudado do terreno no qual se planejava implantar a fonte de luz, relaciona-se com o comportamento do solo em resposta às perturbações do seu entorno. **Para isso pequenas bases de concreto foram cravadas em cinco pontos distintos do terreno, e sobre elas foram instalados sismógrafos.** A coleta dos dados ao longo do tempo permitiu conhecer o perfil de vibrações existente na época e correlacioná-lo às suas principais causas.

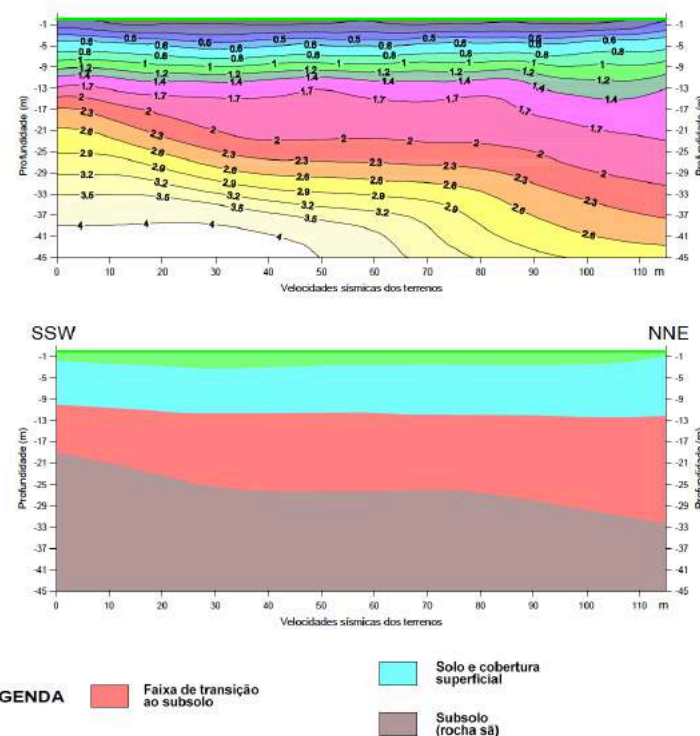


Exemplo de perfil do solo obtido por sondagem mista





Resultado do levantamento de vibrações de terreno. O traço preto do espectro indica a influência do trânsito de caminhões na vizinhança do campus (8 a 20 Hz). Em 30 Hz nota-se a ação dos equipamentos em funcionamento nas instalações do CNPEM



Exemplo de um perfil sísmico de terreno obtido pelo levantamento geofísico



**LEGENDA**

R1-F  
Posição de início (I) e fim (F) dos perfis sísmicos e seu número de identificação

MASW/HVSR-3  
Posição da prova MASW curta associada com HVSR e seu número de identificação

MASW L-2  
Posição de centro da prova MASW comprida e seu número de identificação

PESQUISA GEOFÍSICA		
Campinas (SP)		
CNPEM		
Sísmica de Refração/MASW/HVSR		
LOCALIZAÇÃO DAS PROVAS GEOFÍSICAS		
Anexo 1	Maio 2012	EEG

Localização das provas para levantamento geofísico no campus do CNPEM. A existência da vegetação contribuiu para impedir a implantação do prédio nesta área

**Estudos do piso:** Os trabalhos iniciais do projeto executivo incluíram o levantamento de dados e discussões sobre a estabilidade dimensional e de vibrações do piso crítico. Concomitantemente foram desenvolvidos os projetos para execução dos pisos-protótipos e estacas de testes, considerados imprescindíveis para o desenvolvimento do projeto. Dois conceitos de fundação também foram testados, e forneceram subsídios para a determinação das fundações e estruturas, tanto do piso crítico quanto do edifício que o abrigaria.

A construção dos pisos-protótipos e estacas de teste foi realizada nos primeiros cinco meses de 2013. Consistiu na construção de dois pisos com dimensões superficiais e espessuras idênticas, diferentes nas suas fundações. O primeiro protótipo, chamado de Diamond, por replicar o conceito de fundação adotado pelo síncrotron inglês com esse nome, apoiava a laje que compõe o piso em estacas com 15 metros de profundidade, mantendo contudo a face inferior da laje afastada em cinco centímetros da superfície do solo.

Com isso, todo o carregamento é transferido para o solo através do atrito das estacas, enquanto a folga (*gap*) entre a laje e o solo possibilita reduzir as vibrações transmitidas para o piso pela superfície do solo.

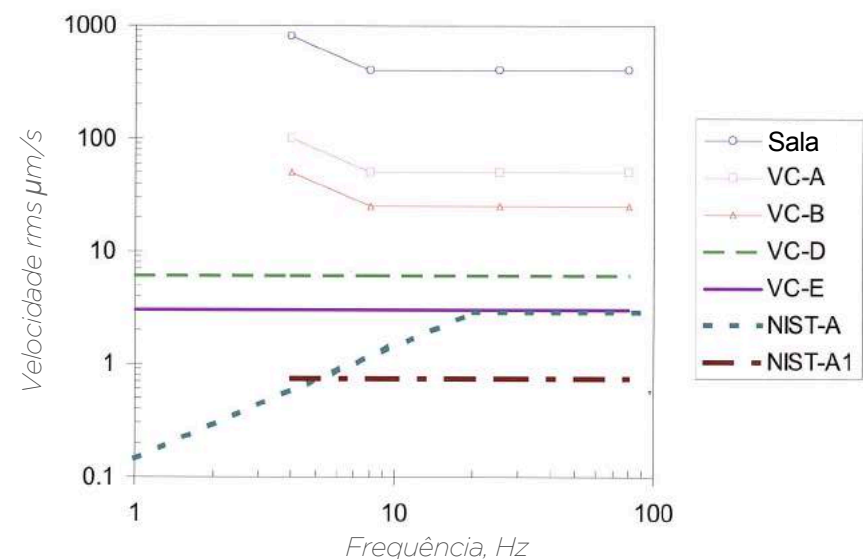
Deformações máximas admissíveis	< 0,25 mm/10 m/ano	
	< 0,05 mm/10 m/mês	
	< 0,01 mm/10 m/dia	
	< 0,001 mm /10 m/hora	
Deformação diferencial máxima em toda a superfície	< 2,5 mm/ano	
Deformação do solo para carregamentos		
Tipo de carga	No ponto de aplicação	a 2 metros
Carga estática de 500 kgf	< 0,006 mm	≤ 0,001 mm
Carga dinâmica de 100 kgf	-	≤ 0,001 mm

Especificações técnicas para deformações de piso crítico solicitadas para o projeto executivo. Foram realçadas as deformações relativas de maior exigência

Ambiente	Temperatura [°C]		Umidade [%]	Observações
	Set point	Variação		
Hall experimental	24	± 0,5	40-60	
Túnel do anel de armazenamento	24	± 0,1	50 (máx.)	Baixas velocidades de ar
Túneis do booster e do Linac	24	± 0,5	Máx. 60	
Área serviço	24	± 0,5	40-60	Mesmo ambiente do hall experimental
Área de serviço (cabanas de fontes)	18	± 1,0	50 (máx.)	Compartimentado
Fontes do Booster/Linac	24	± 0,5	50 (máx.)	
Laboratórios de apoio	24	± 1,0	40-60	
Sala de controle	24	± 0,5	40-60	
Auditórios / Seminários / Convívios	25	± 2,0	50-70	
Escritórios	25	± 2,0	50-70	

Tensão da eletricidade e de alimentação	11,4 kV	Atual (Estudos indicarão viabilidade)
Potência nominal da subestação de entrada de EE	14 MVA	Estimado
Potência de refrigeração instalada	2500 TR	Estimado
Água potável (ver população)	Máx. 500	
Telefonia (ver dados)	-	VOIP
Dados - velocidade	21 GB	Categoria 6 - interligar ao anel óptico existente no campus
Dados - pontos de rede	3000	Estimado
Impedância de aterramento elétrico	≤ 0,2 Ω	

Especificação térmica e de utilidades para o projeto executivo



Especificação de desempenho para vibrações do piso crítico (Curva NIST-A). Nela a preocupação recai sobre as frequências abaixo de 20Hz

O outro protótipo recebeu a denominação de “Max-Modificado” por adotar um princípio de fundação semelhante ao da fonte de luz MAX-IV, em construção na Suécia. Esse piso é “depositado” sobre um leito de solo com suas características de resistência à compressão alteradas pela mistura de cimento ao próprio solo. As duas principais diferenças em relação ao projeto sueco foram a substituição da cal pelo cimento, como elemento de enrijecimento, e o uso de estacas sob a camada modificada como garantia contra recalques de todo o conjunto.

Para cada piso, afastado lateralmente um do outro, foram construídos três blocos de concreto, suportados de formas distintas:

- 1) Em estaca com toda a lateral em contato com o solo;
- 2) Em estaca parcialmente isolada do solo;
- 3) Em fundação direta (sapata).

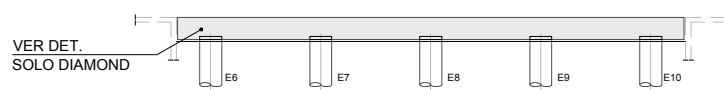
Esses blocos, simulando os possíveis tipos de fundação da edificação, foram excitados com *shakers*. A vibração transmitida para a superfície dos pisos foi medida por acelerômetros. **Dessa forma foi possível avaliar comparativamente a resposta de cada piso em uma faixa de frequência de 0 a 100 Hz e com diversas energias de excitação, além de comparar o desempenho de cada tipo de fundação para mitigar as vibrações transferidas.**

Outro aspecto cuja determinação foi importante para o modelamento dinâmico das fundações e estruturas foram os parâmetros da interação estaca-solo. Com essa finalidade, foram construídas e

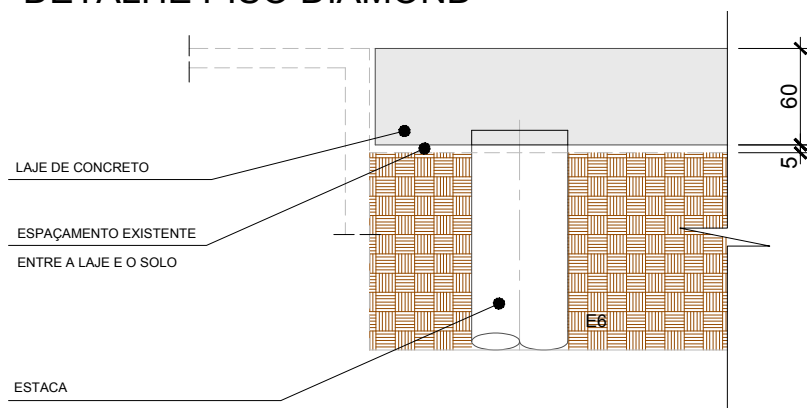


## CORTE A-A

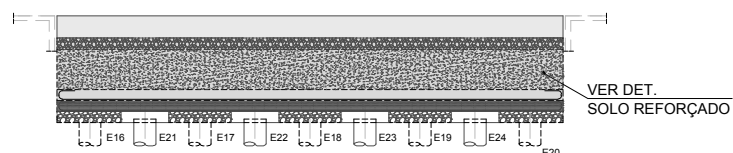
ESC.: 3/5ESC.



## DETALHE PISO DIAMOND



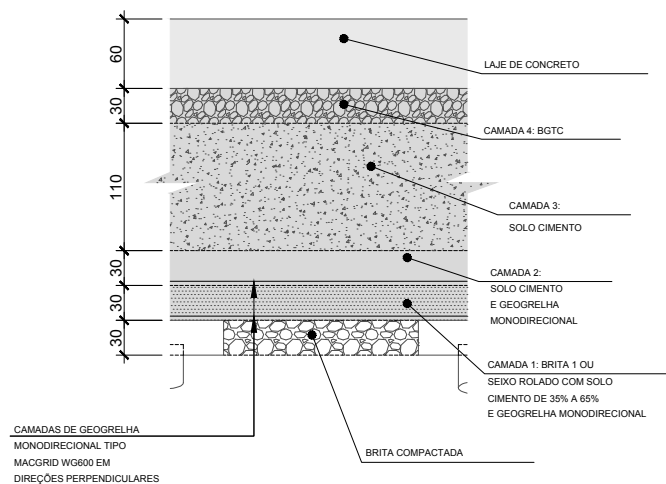
Desenho esquemático do piso tipo Diamond. Abaixo, detalhe da separação entre solo e fundo da laje do piso



## PISO C ALTERADO

### DETALHE DO SOLO REFORÇADO

ESC.: 3/5ESC.



Desenho esquemático do piso tipo MAX - Modificado

instrumentadas estacas para testes diversos, adjacentes aos pisos protótipos. Nesse local foram realizados ensaios de propagação de vibração em função da profundidade das estacas e das suas condições de carregamento vertical e lateral.

Em abril de 2013, uma equipe formada por engenheiros do LNLS e da empresa responsável pelo projeto executivo visitaram três laboratório: Diamond (Inglaterra), Max-lab (Suécia) e Desy (Alemanha), onde apresentaram o projeto Sirius e participaram de discussões relacionadas, principalmente, às questões de estabilidade e particularidades deste tipo de edificação.

Deste intercâmbio derivaram algumas alterações no projeto, entre elas a necessidade de se criar uma área para circulação das tubulações e instalações elétricas pelo perímetro interno do prédio, denominada galeria de instalações. Porém, a maior mudança ocorreu em alguns conceitos do projeto de estrutura, relacionados com a mitigação de vibrações, seja nas diversas fontes ou na sua propagação.

O projeto foi considerado finalizado em março de 2014. No entanto, desde abril de 2013, o LNLS fez contato com construtoras, apresentando o projeto em sua correspondente etapa de maneira a prospectar futuros interessados na construção. Entre as empresas que manifestaram interesse, foi feita uma pré-qualificação, baseada em aspectos técnicos, financeiros, fiscais e trabalhistas. Para as qualificadas, foi entregue o projeto pré-executivo para a familiarização, pré-desenvolvimentos dos seus parceiros e fornecedores e elaboração de plano de ataque e orçamento prévio.

## O terreno

O edifício que abrigará a nova fonte de luz síncrotron será instalado em terreno contíguo ao campus do CNPEM, que está localizado no Polo II de Alta Tecnologia do Município de Campinas. Aos 380 mil metros quadrados existentes será incorporada área de 150 mil metros quadrados, proveniente de um terreno desapropriado pelo Governo do Estado de São Paulo para construção do Sirius.

Com a obtenção de nova área para implantação do projeto, em 2012 estabeleceu-se um novo plano diretor que considerava a integração da nova fonte e seu terreno ao campus atual. Neste novo terreno foi realizada a terraplanagem e implantado o sistema de drenagem provisório, durante o 2º semestre de 2013 e começo de 2014.

Valendo-se da terraplanagem de compensação, na qual o volume de terreno cortado é o aplicado para aterro, minimizou-se a necessidade de importação ou exportação de terra. **Aproximadamente 220 mil metros cúbicos de terra foram movimentados nesta operação, com grau de compactação mínimo de 98%.**

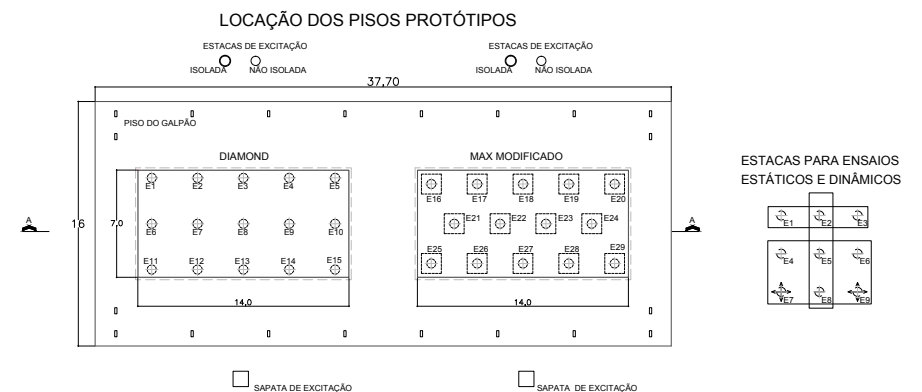
O sistema de drenagem implantado é composto por 1220 metros lineares de tubulações, 30 caixas separadoras e um tanque de retardo com capacidade para 26 mil metros cúbicos. Este sistema garante a conservação do terreno por durante todo o período das obras. Evita também a sobrecarga de água e o assoreamento da rede pluvial pública. Do total, apenas 420 metros de tubulação permanecerão nas instalações definitivas. Os 800 metros restantes têm a finalidade de garantir a estabilidade do solo durante toda a fase de construção e serão substituídos pelo sistema de drenagem previsto no projeto final.



*Estacas-testes para determinação de parâmetros da interação estaca-solo. Vista da montagem com instrumentação para testes de carga horizontal*



*Instalação de sensores de nível micrométricos para investigação de deformações em piso-protótipo*



*Disposição dos pisos-protótipos com estacas e sapatas de excitação. À direita: disposição das estacas de teste*

Para a supressão da vegetação existente, de acordo com a legislação ambiental vigente, obteve-se junto à Prefeitura Municipal de Campinas a licença mediante compensação, já implantada e em fase de acompanhamento. A compensação dos 92 exemplares suprimidos consistiu no plantio e acompanhamento de 1760 mudas de 30 espécies diferentes, e foi realizada na reserva legal existente no campus do CNPEM. O objetivo do plantio é enriquecer a atual vegetação caracterizada como cerrado regenerado.

### **A implantação**

A implantação no novo terreno prevê a construção do edifício principal, uma nova portaria, subestação de alta tensão, estacionamentos e sistema viário que se integrará ao do campus. O projeto conta com 438 vagas para automóveis, das quais 11 serão voltadas para portadores de necessidade especiais, além de bicicletários e 92 vagas para motocicletas.

Toda a pavimentação terá capeamento asfáltico em detrimento de sistemas permeáveis. A razão dessa medida é reduzir a possibilidade de vibrações nos aceleradores e linhas de luz originadas na circulação de veículos. A impermeabilização, ao final da implantação, alcançará 48% do terreno, restando 77.438 metros quadrados de área permeável, que será recoberta por vegetação conforme projeto paisagístico.





*Área de implantação do edifício do Sirius após conclusão da terraplanagem do terreno*



*Tanque de retardo provisório de águas pluviais*



*Obras de terraplanagem em execução*



## As edificações

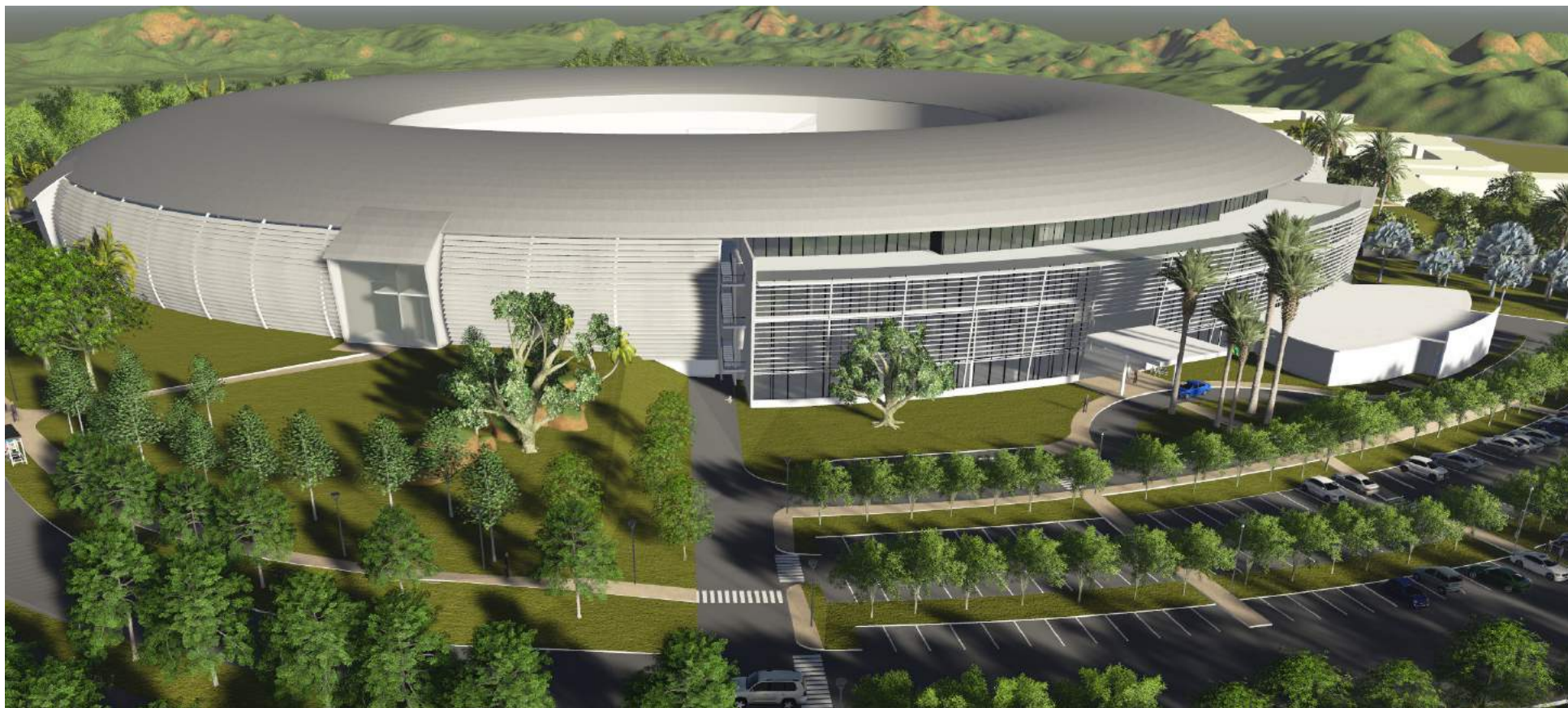
**Prédio principal:** Com 68 mil metros quadrados de área construída, o prédio principal terá quatro pavimentos (níveis 610, 614, 619 e 620) com capacidade para até 620 pessoas, entre funcionários e visitantes. Ele abrigará os três aceleradores de elétrons e as possíveis 40 linhas de luz, seis das quais são consideradas longas, com comprimentos variando de 100 a 150 metros. A edificação e sua implantação são pensadas de maneira que seja possível, ainda, construir duas futuras linhas com estações experimentais a até 250 metros de distância.

Além da área experimental, este prédio possui em seu interior áreas destinadas a utilidades e às fontes dos aceleradores. Em seu entorno haverá laboratórios de apoio, *data centers*, sala de operação e controle, áreas de convívio e escritórios.

**Portaria:** Com a inclusão do novo terreno ao campus, o acréscimo considerável de área construída e o crescimento da população fixa e circulante, surgiu a necessidade de construção de uma nova portaria, capaz de atender as novas demandas na recepção de visitantes, usuários e prestadores de serviços.

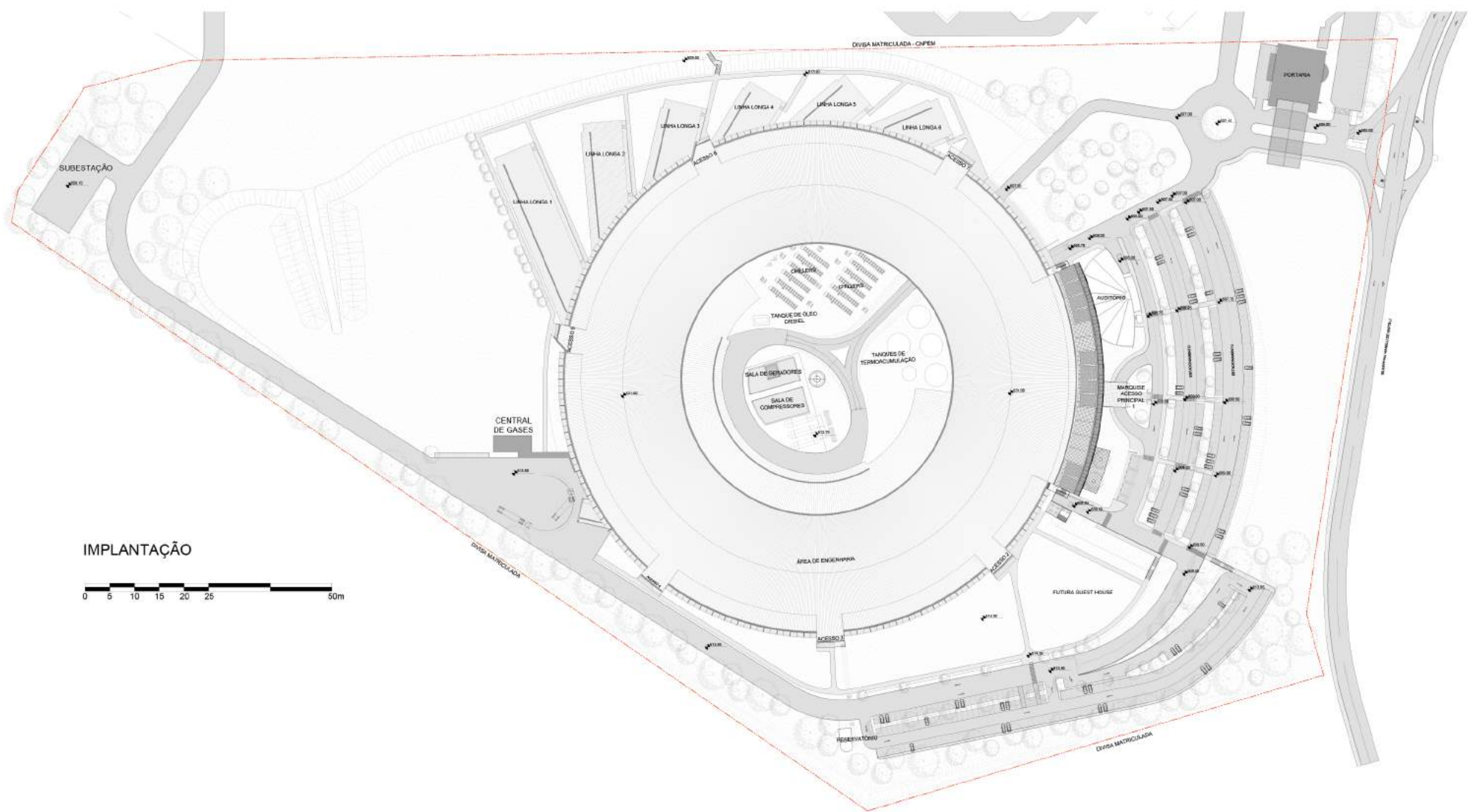
Com área construída de 625 metros quadrados, a nova portaria receberá, além das atribuições-padrão, o Serviço de Apoio ao Usuário, responsável por fornecer orientação e treinamentos preliminares necessários ao aproveitamento otimizado das instalações e serviços dos Laboratórios Nacionais. Para isso, a portaria contará com escritórios, sala de reunião e pequeno auditório para tornar produtivas as atividades de treinamento. Nestas instalações também será possível realizar apresentações introdutórias a grupos de até 60 visitantes.

**Subestação de alta tensão:** Dois fatores principais determinaram a necessidade de alterar a forma de conexão com a rede de energia elétrica: o aumento esperado da demanda e a necessidade de instalações de alta disponibilidade. Com um salto na demanda de energia previsto dos atuais 3 MVA para 15 MVA quando em plena operação, tornou-se imperativa a implantação de uma subestação em 138 kV, em substituição à atual conexão em média tensão (11,4 kV). As tratativas com a concessionária local estão em andamento para a implantação de um ramal de conexão, enquanto o projeto da subestação está em fase de elaboração.



*Simulação 3D da fachada do edifício do Sirius*





**IMPLANTAÇÃO**



*Implantação geral do Sirius*

### Uma edificação diferenciada

O formato predominantemente circular do edifício do Sirius é resultado da geometria do acelerador principal (anel de armazenamento), onde os elétrons são armazenados e a luz síncrotron é produzida. A partir do centro da circunferência distinguem-se 5 faixas principais e concêntricas:

- Pátio interno
- Área de engenharia
- Blindagem dos aceleradores
- Hall experimental
- Área de apoio

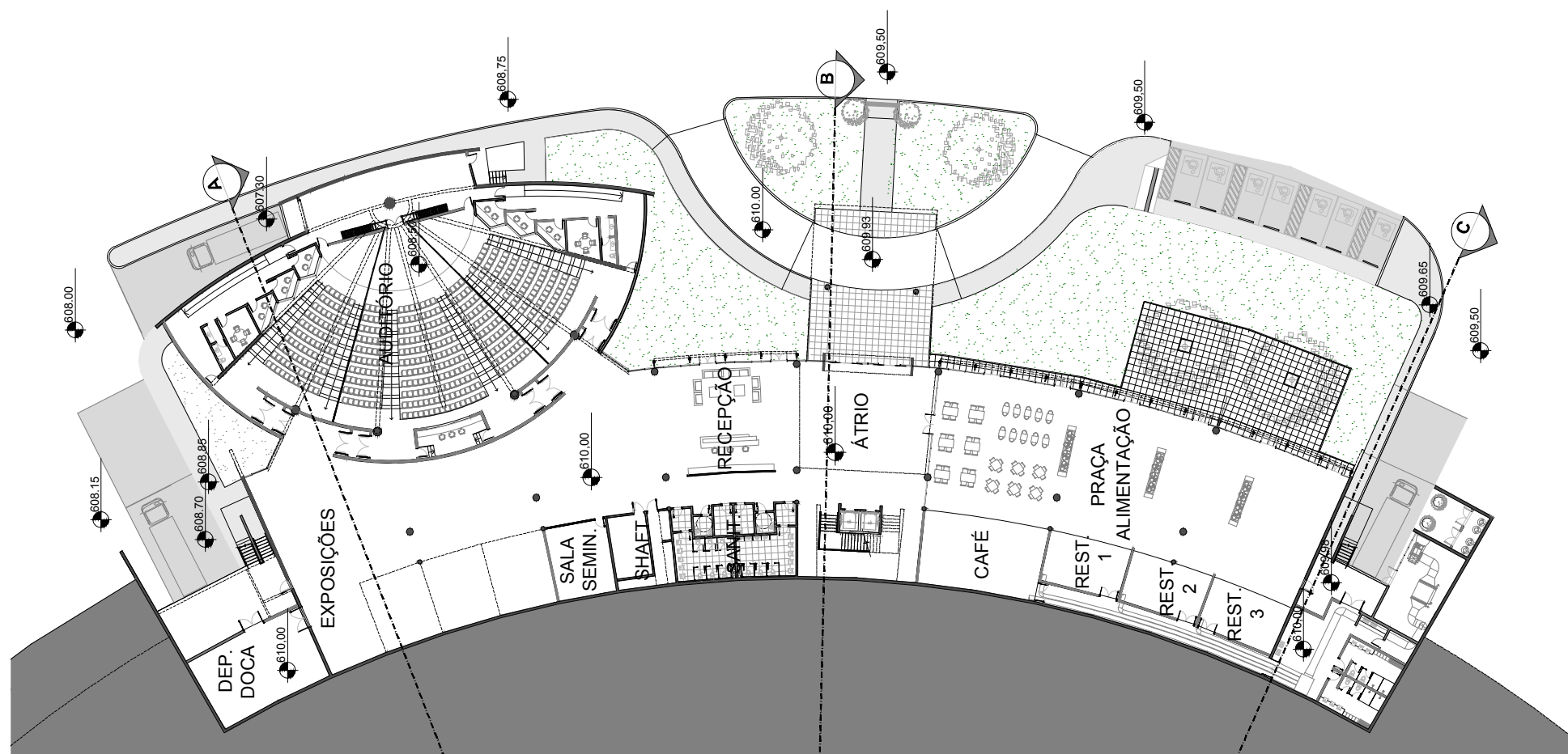
**Pátio interno:** A área recebe as instalações não abrigadas como *chillers*, reservatórios de água gelada para termoacumulação, tanques de armazenamento de gás hélio e óleo diesel. Nela ainda está situado o marco geodésico central, utilizado como referência na malha de alinhamento dos aceleradores e linhas

de luz. Nesse pátio situa-se também a edificação que abrigará a central de geração de energia elétrica para operação em regime de emergência e a central de recuperação de hélio utilizado nos dispositivos supercondutores dos aceleradores.

Um túnel sob a edificação principal permite o acesso ao pátio de veículos de grande porte, tornando possível a implantação modular dos equipamentos e instalações desta área.

**Área de engenharia:** Abrigará duas casas de bombas, central de ar comprimido, subestação abaixadora de média para baixa tensão, sala de UPSs (*no-breaks*), sala de amplificadores de radiofrequência, moduladores para o Linac (acelerador linear), salas de apoio e manutenção. Contará também com uma segunda sala de operação e controle dos aceleradores para ocasiões especiais como manutenção, *start-up* e comissionamentos.

Circundando externamente a área de engenharia, a galeria de instalações terá três pavimentos:



Detalhe da planta do nível 610, onde ficará localizada a entrada do prédio



- Térreo – Destinado às salas de equipamentos de HVAC (ar condicionado) e salas para as principais fontes de corrente dos dipolos do anel de armazenamento e do Booster.

- Primeiro e segundo pavimentos – Destinados a *pipe-racks* para distribuição das utilidades direcionadas principalmente aos aceleradores. Entre elas podemos citar, como, eletricidade, dados, água para resfriamento e combate a incêndio, ar comprimido e gases.

**Blindagem dos aceleradores:** Construída sobre um piso monolítico de concreto com 90 centímetros de espessura, suas paredes e coberturas espessas, também em concreto, abrigarão os três aceleradores (Linac, Booster e anel de armazenamento) e linhas de transporte, proporcionando a devida estabilidade dimensional e mecânica aos equipamentos, garantindo que a área

externa esteja livre de radiação durante a operação dos aceleradores. **Toda a blindagem será construída sem juntas de dilatação e constituirá, ao término da concretagem, em uma peça única com mais de 500 metros de comprimento médio.**

A blindagem principal terá 20 aberturas em seu teto, as quais permitirão a movimentação de qualquer componente dos aceleradores com o uso de pontes rolantes com capacidade para 20 toneladas, instaladas sobre a região das blindagens e hall experimental. Tais aberturas serão cobertas por vigas de concreto em duas camadas, com 50 centímetros cada uma, que poderão ser removidas sempre que houver necessidade.

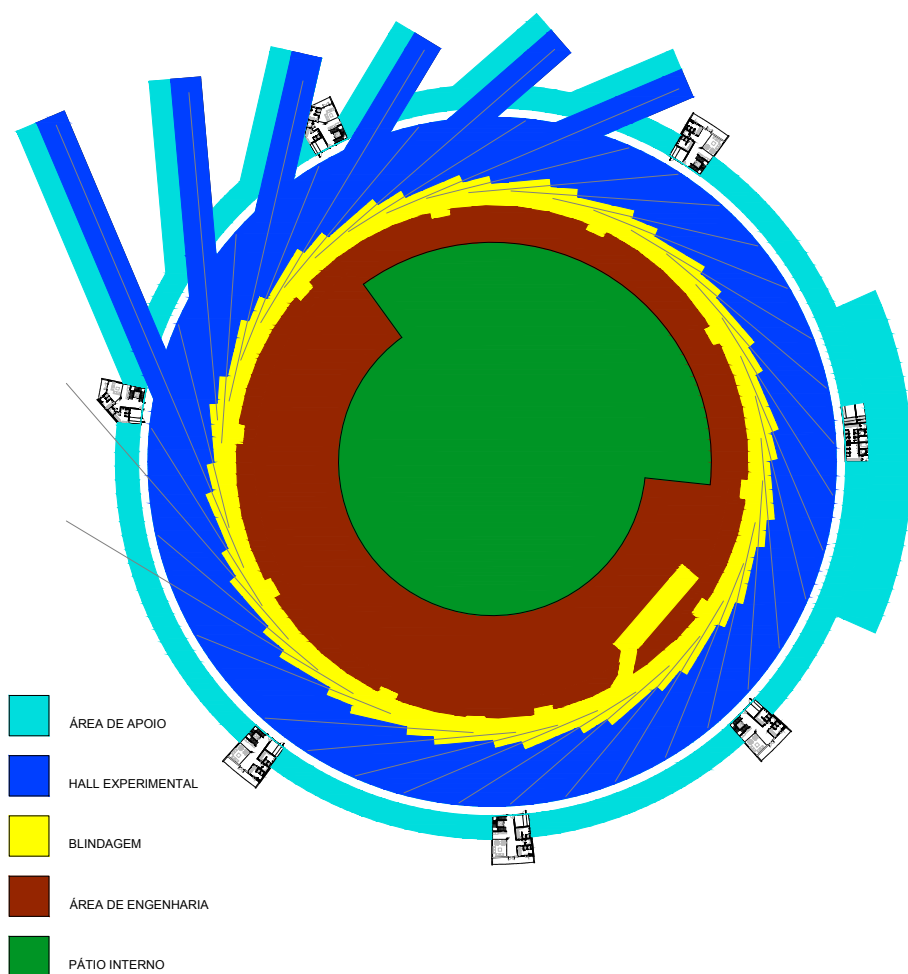
O acesso de pessoal aos aceleradores será feito pelas 10 chicanes localizadas na parede interior da blindagem. Por elas também se fará o acesso de parte das utilidades do interior da blindagem (ar condicionado, iluminação e outras).

Toda o cabeamento de potência, sinal e controle dos aceleradores adentrarão na blindagem através de passagens por canaletas sob o piso e a parede interna. Por canaletas semelhantes será também feita a transposição das tubulações dos circuitos hidráulicos de estabilização térmica, de gases e ar comprimido. Aberturas na parede interna estão previstas para os guias de onda das cavidades, as linhas de transferência de hélio líquido e linhas de visada para referenciamento externo da malha de alinhamento.

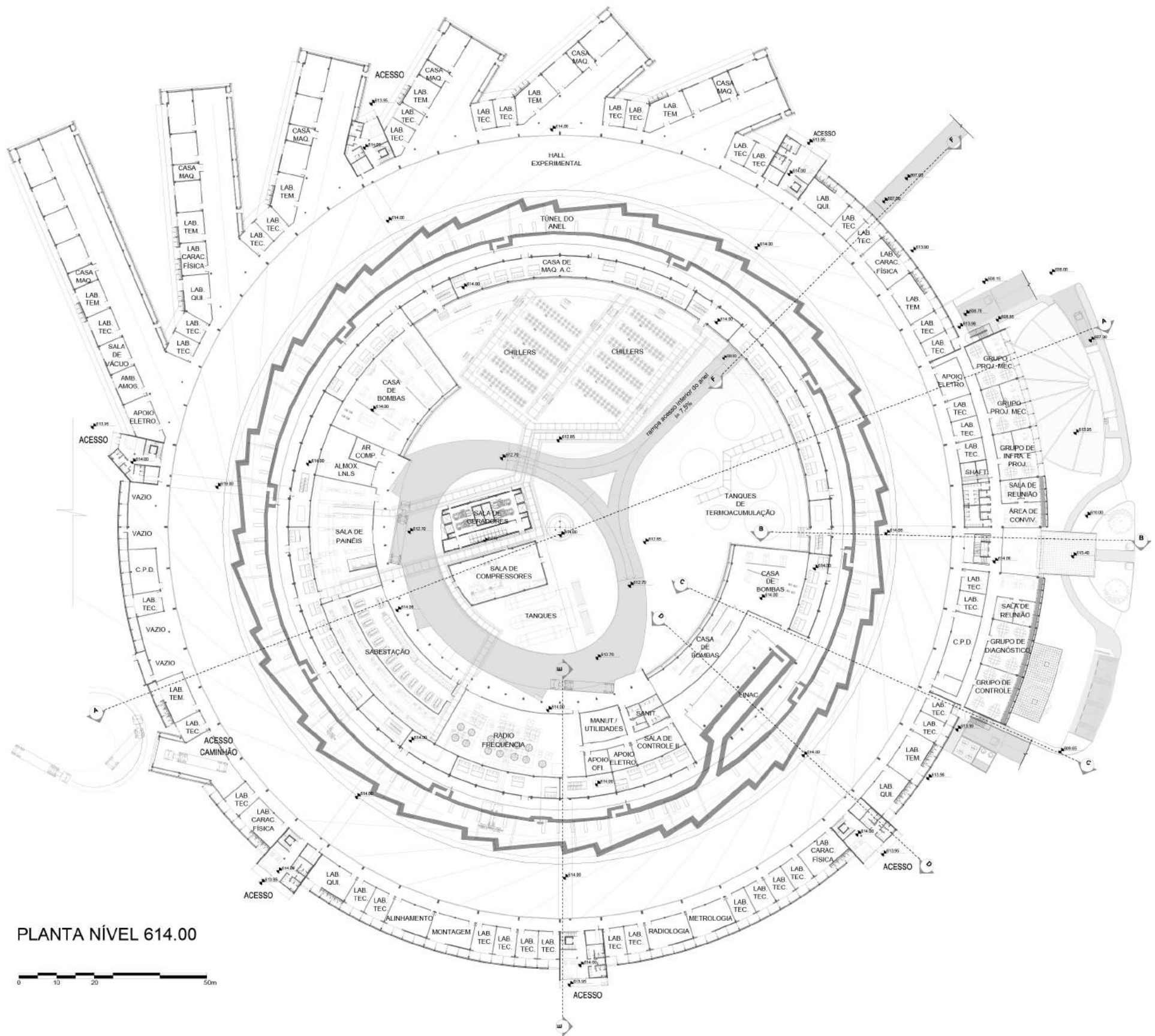
Na parede externa, em cada face de saída de linha de luz estão previstos furos para a passagem dos aparatos para a linha e suas instalações. Esses furos são especialmente desenhados de forma a garantir o total bloqueio da radiação durante a operação dos aceleradores.

**Hall experimental:** Esta área circunda a blindagem do anel de armazenamento e receberá as instalações e equipamentos que comporão cada linha de luz. **Entre suas principais características destaca-se seu piso em concreto com 60 centímetros de espessura**, com paginação adequada à geometria das linhas de luz.

**Área de apoio:** Composta de três pavimentos e interrompida pelas sete caixas de acesso, esta região desempenha um papel importante na estabilidade térmica do hall experimental, ao funcionar como uma barreira térmica entre o exterior e a área das linhas de luz. O pavimento térreo concentrará todas as salas consideradas de apoio às linhas de luz. Nele serão instalados la-

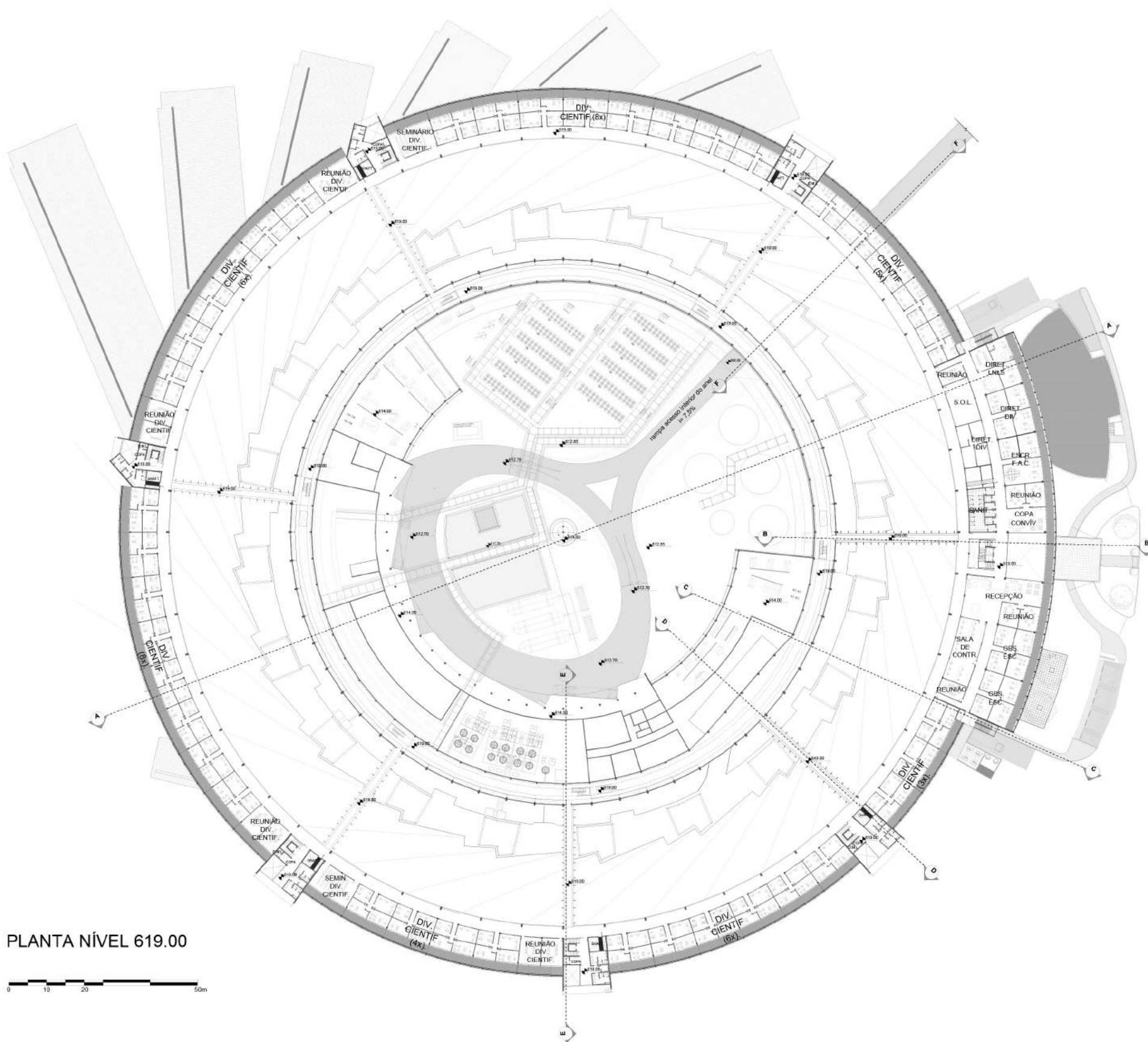


Principais áreas do prédio do Sirius



*Planta do pavimento térreo (nível 614), onde será instalada a fonte de luz síncrotron e as linhas de luz*





PLANTA NÍVEL 619.00



*Planta do primeiro pavimento (nível 619), onde serão instalados os escritórios dos pesquisadores*

boratórios químicos, físicos e temáticos, além de grupos de engenharia e da divisão científica, responsáveis pela operação, manutenção e melhoria das linhas.

Nesse pavimento serão instalados também dois *data-centers* diametralmente opostos, que poderão operar em redundância, aumentando a segurança e disponibilidade de processamento e armazenamento de dados das linhas de luz, da rede corporativa e das redes de controle. Já o corredor circular entre as salas e o hall experimental será utilizado para encaminhamento das utilidades para as linhas e salas.

O primeiro pavimento será destinado aos escritórios dos grupos de pesquisadores e alunos da divisão científica. Contará também com salas de reunião e de seminários, distribuídas por toda a extensão da área, o que permitirá a simultaneidade de eventos. Já o último pavimento se destinará à área técnica, onde será feita a distribuição de energia elétrica, de ar condicionado, exaustão e ventilação.

O projeto prevê, ainda, um hall de entrada em três níveis. No térreo será instalada a recepção, uma praça de alimentação, salas para seminários e, de modo coligado, um anfiteatro com capacidade para 399 lugares. O primeiro e o segundo pavimentos serão destinados aos escritórios da diretoria e grupos de física de aceleradores e de engenharia. Por fim, nas caixas de acesso encontram-se os sanitários, escadas, elevadores e uma área destinada ao convívio dos funcionários e usuários.

### Aspectos construtivos

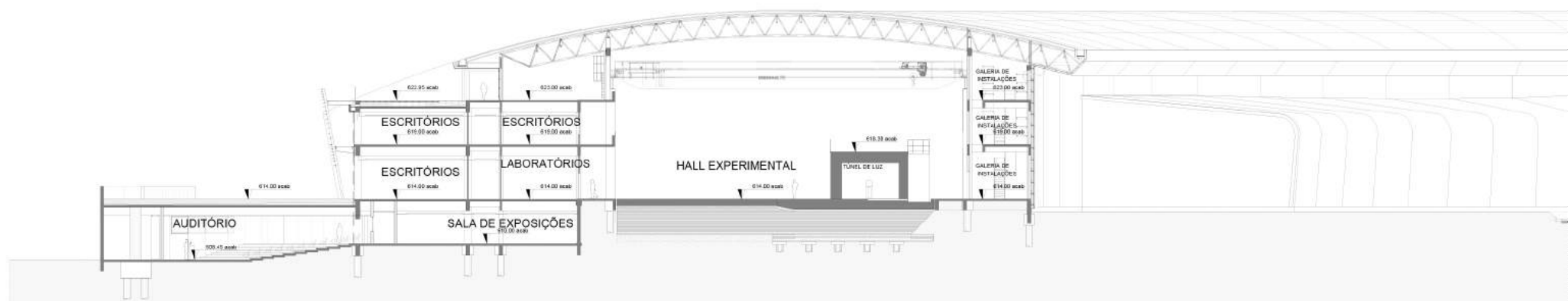
**A estabilidade dimensional dos aceleradores e linhas de luz, necessária para operar um feixe de elétrons com dimensões micrométricas e feixes de luz com foco na casa dos nanômetros, demanda edificações e instalações de alto desempenho.** Os aspectos mais importantes para seu bom desempenho são a estabilidade do piso contra recalques e deformações, o cuidado com o isolamento das vibrações provenientes do ambiente externo e com a mitigação das vibrações geradas pelos próprios componentes das instalações e a estabilidade térmica dos ambientes e componentes.

Além disso, é necessário prover as instalações de um bom sistema de aterramento, capaz de garantir a segurança das pessoas e preservar a integridade dos equipamentos, assim como reduzir os níveis de ruído eletromagnético que interferem na performance da instrumentação e componentes desses ambientes.

São descritos, a seguir, os elementos construtivos e sistemas que compõem o edifício do Sirius:

São descritos, a seguir, os elementos construtivos e sistemas que compõem o edifício do Sirius:

**Fundação:** Será dividida em duas, totalmente independentes entre si. A primeira, composta por 910 estacas com diâmetros entre 40 centímetros e um metro e profundidade



CORTE A-A





média de 18 metros, será totalmente intertravada com vigas baldrames, tendo como função suportar a estrutura do prédio. Já a segunda fundação suportará o piso do hall experimental e a blindagem dos aceleradores. Além do papel de simples suporte do piso e componentes sobrepostos, ela tem a função de evitar os recalques diferenciais e a propagação de vibrações, sejam elas geradas internamente ou provenientes dos ambientes externos.

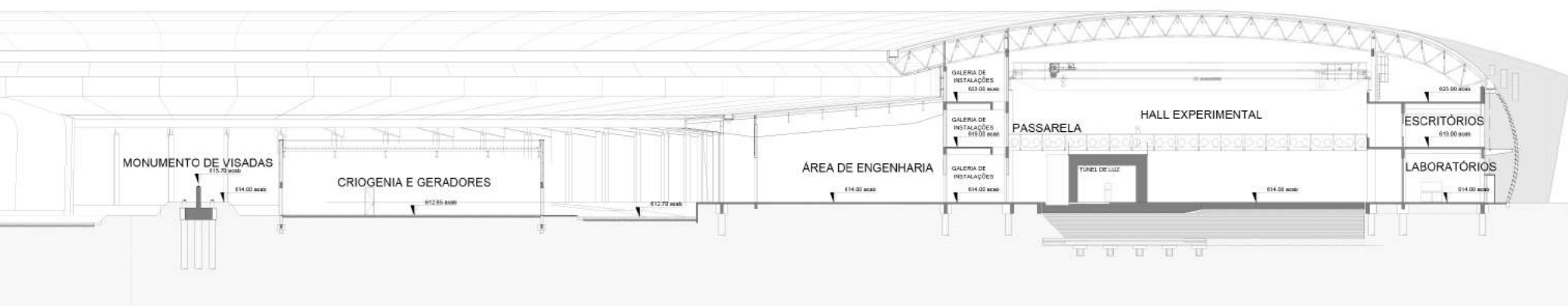
A fundação será composta por uma camada de 2,85 metros de profundidade de solo modificado, obtido a partir da remoção do solo local, seguida pela mistura com cimento e reaplicação em pequenas camadas, com alto grau de compactação. O processo confere maior resistência (especificado 2 MPa) e rigidez, mitigando vibrações propagadas pelo solo.

Na região da blindagem dos aceleradores a camada de solo modificado será apoiada em 1322 estacas, com 40 centímetros de diâmetro e 15 metros de comprimento. A interface entre o solo modificado e as estacas será feita por duas camadas de seixo-cimento, contidas por geogrelhas e apoiadas em capiteis sobre as estacas. Todas as estacas de fundação serão do tipo hélice contínua monitorada, o que confere à fundação grande uniformidade construtiva.

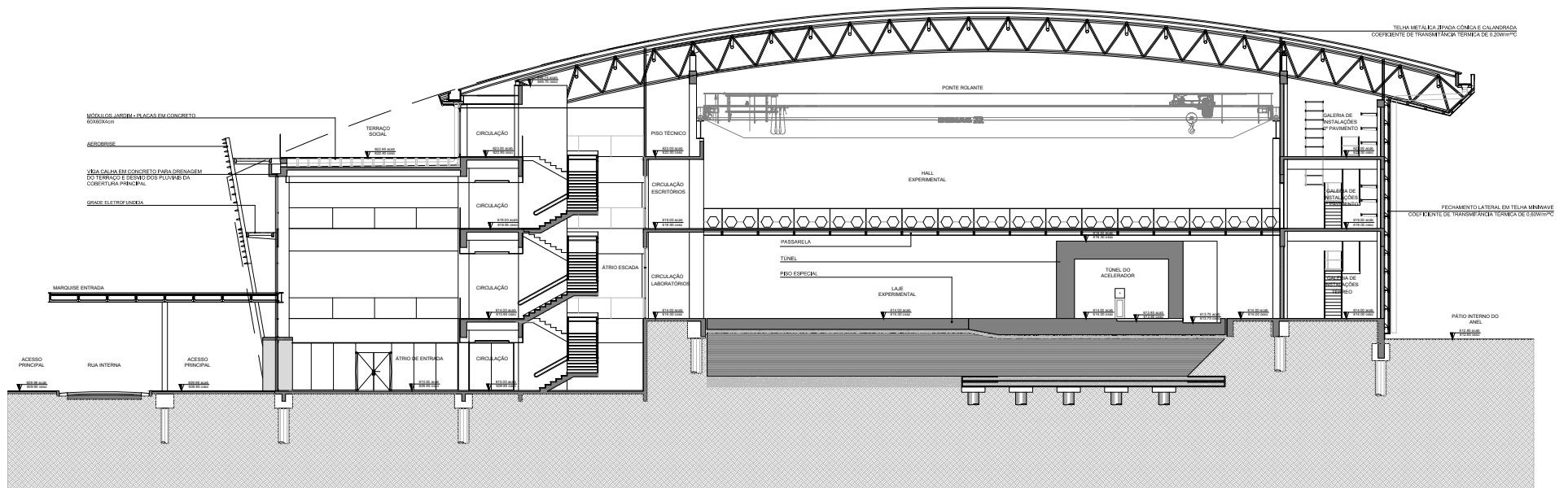
**Piso crítico:** Denomina-se assim o piso dos aceleradores e das linhas de luz. A sua concepção é resultado de estudos e simulações que incluíram a construção de pisos e estacas-protótipos para a escolha do modelo com melhor desempenho quanto à estabilidade e vibrações, conforme mencionado anteriormente.

Apoiado sobre uma camada com 15 centímetros de espessura de BGTC (brita graduada tratada com cimento), que reveste o solo modificado, o piso dos aceleradores será de concreto armado com 90 centímetros de espessura. A sua construção será realizada em 20 segmentos entre os quais se deixará uma faixa com dois metros de largura. O traço deste concreto prevê componentes que conferem ao concreto baixíssima retração. A concretagem das faixas será realizada após os segmentos alcançarem a quase totalidade da retração, de modo a obter um piso com estrutura monolítica sem a ocorrência de fissuras.

O piso destinado às linhas de luz terá espessura de 60 centímetros e estará ligado ao dos aceleradores por meio de barras de transferência. Entre seus segmentos estão previstas juntas de dilatação especiais, que permitam a circulação de dispositivos, sem que sofram desgaste prematuro ou causem vibrações indesejadas. Tanto o piso dos aceleradores quanto



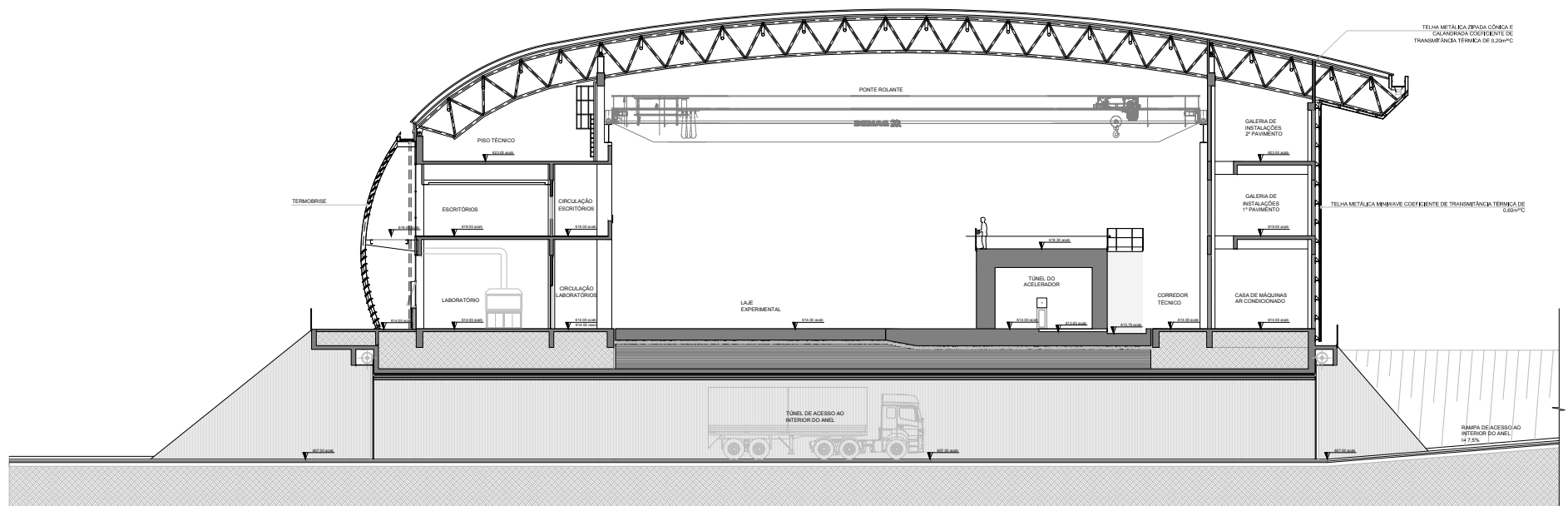
*Corte longitudinal da edificação (A-A) mostrando a área de auditório (à esquerda) e o hall experimental, onde pode ser vista a blindagem do túnel dos aceleradores*



CORTE B-B  
ESCALA 1:2000



*Corte (B-B) mostrando o acesso principal ao prédio e o hall experimental*



CORTE F-F



*Corte (F-F) mostrando o túnel de acesso ao interior do anel*



os das linhas de luz serão separados dos pisos do restante das edificações por juntas vedadas por elastômeros. Dessa maneira será garantida a total separação entre a área experimental e o restante da edificação.

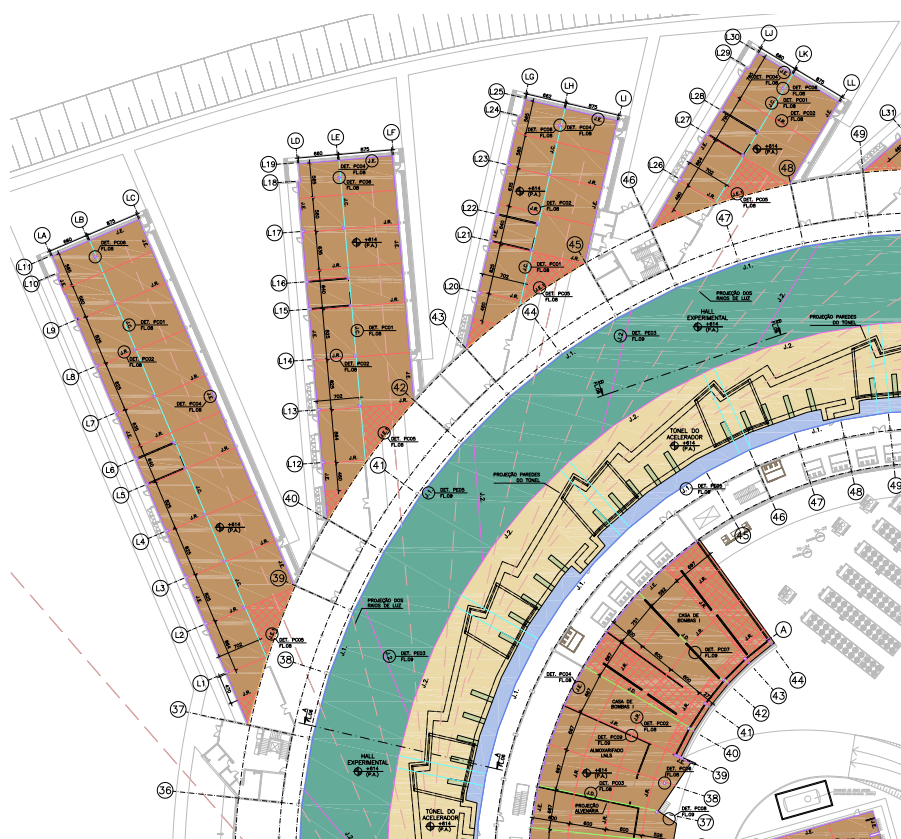
**A edificação: Sua estrutura será feita em concreto armado fundido *in loco* e todos os seus pisos, incluindo o térreo, serão também construídos em lajes de concreto armado. Assim, a estrutura apresentará grande rigidez, reduzindo a propagação de vibrações provenientes da ação dos ventos, da circulação de pessoas e do funcionamento dos equipamentos e das instalações.**

A cobertura será feita em telha zipada de perfil cônico com isolamento de baixa transmitância térmica. Isso confere grande estanqueidade térmica e economia de energia, garantindo o controle de temperatura de alta estabilidade exigido pelo ambiente. A estrutura de sustentação da cobertura será construída em aço, com as vigas principais treliçadas com seção triangular.

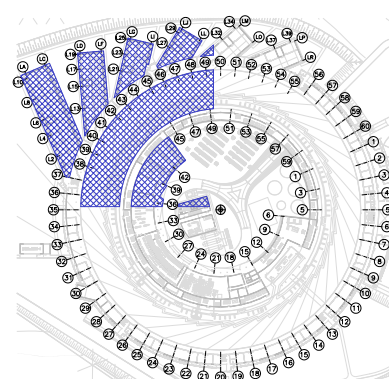
As paredes internas, em sua maioria, serão do tipo *dry-wall* preenchidas com lãs de vidro. Já a fachada externa do prédio será feita em pele de vidro sombreada por brises.

**Instalações elétricas:** Tendo em vista a alta disponibilidade dos aceleradores, as duas subestações de média tensão previstas para esta edificação operam com circuitos redundantes. Os ramais alimentadores, seus cubículos de medição, proteção e manobra até seus transformadores abaixadores serão duplicados, o que permitirá a continuidade da operação caso ocorra a falha de um deles.

Para atender à expectativa de qualidade de energia demandada pelas fontes dos aceleradores, estão previstos quatro conjuntos de UPS (*no-breaks*) configurados para redundância N+1, com potência de 900+300 KVA cada. Esses equipamentos suprimem as oscilações momentâneas da rede elétrica, operam com alto fator de potência e, devido à tecnologia *fly-wheel*, proporcionam rendimentos acima de 95% sem a necessidade do uso de baterias.

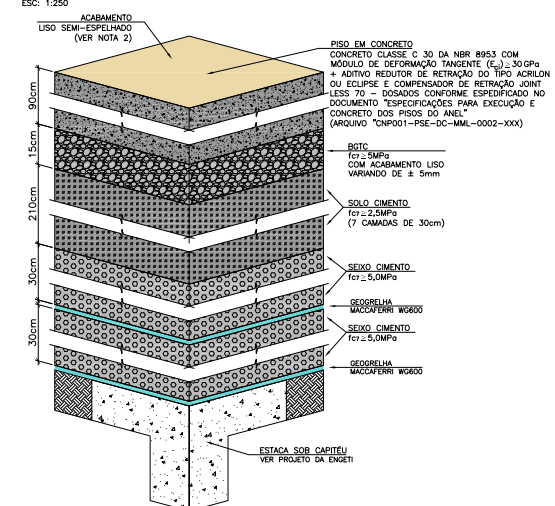


Quadrante com plantas de pisos especiais



- PERFIL TÍPICO ENGENHARIAS E LABORATÓRIOS  
ÁREA: 8.408,00 m<sup>2</sup>
- PERFIL TÍPICO TÚNEL DO ACELERADOR  
ÁREA (INCLUI OS REBAIXOS); 7.575 m<sup>2</sup>
- REBAIXO DO PERFIL TÍPICO DO TÚNEL DO ACELERADOR (+25cm)
- REBAIXOS DO PERFIL TÍPICO DO TÚNEL DO ACELERADOR (+15cm)
- PERFIL TÍPICO HALL EXPERIMENTAL  
ÁREA: 8.746 m<sup>2</sup>

IMPLANTAÇÃO NÍVEL 614 - TRECHO 01/04  
ESC: 1:250

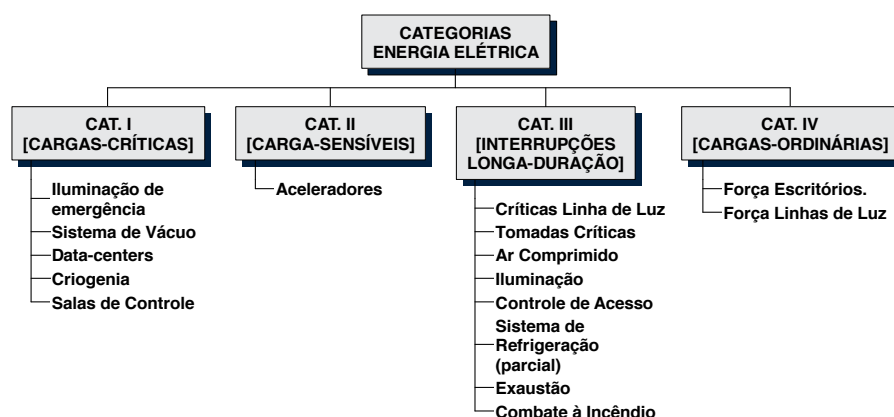


Estratificação do solo modificado sob o piso crítico dos aceleradores

Foram estabelecidas quatro categorias de consumo de energia elétrica conforme a disponibilidade:

**Água gelada: A produção de água gelada, com suas 4500 TRs (15,8 MW) de potência térmica, é destinada ao sistema de ar condicionado, sistemas hidráulicos de refrigeração e de estabilização térmica de componentes e sistemas das linhas de luz, laboratórios e aceleradores.** Por meio de 10 *chillers* com condensação a ar, parte da água produzida será utilizada diretamente nos equipamentos de ar condicionado, enquanto uma segunda parcela será direcionada aos circuitos de estabilização térmica. A terceira parte será armazenada em tanques de termoacumulação para serem utilizados nos períodos de ponta (energia elétrica mais cara), permitindo a economia de energia elétrica por meio do desligamento de parte dos equipamentos.

**Circuitos de refrigeração e estabilização térmica:** Estão previstos oito circuitos fechados, os quais utilizam água ultrapura



Classificação dos circuitos de energia elétrica

Categoria	Rede	UPS	Gerador
I	X	X	X
II	X	X	
III	X		X
IV	X		

Quadro indicativo das quatro categorias de energia elétrica e suas possíveis fontes

como meio circulante. Eles são formados por um conjunto automatizado de pressurização que permite manter a pressão do sistema constante, fazendo variar a vazão à medida que as cargas a demandam. Esse circuito é importante para a estabilidade dos sistemas de controle de temperatura dos diversos componentes e permite o uso racional da energia. **Os sistemas de bombeamento utilizados valem-se de um mecanismo de controle computadorizado que utiliza algoritmos capazes de determinar a configuração mais eficiente para cada situação de operação.** Para evitar a geração de vibrações pela circulação de líquidos nestes circuitos, as tubulações serão superdimensionadas, de forma a se obter baixas velocidades.

**Aterramento:** O sistema de aterramento desta edificação tem duas finalidades principais:

1) A proteção e segurança de pessoas e equipamentos, tanto para casos de descargas atmosféricas quanto para situações de falhas em equipamentos e instalações.

2) O perfeito funcionamento dos equipamentos e instrumentação científica dentro de um ambiente com a presença de sistemas eletrônicos de alta potência que operam com radiofrequência, sistemas pulsados e intensos campos eletromagnéticos.

O projeto prevê uma resistência de aterramento de 1,2 Ohms. Além do sistema tradicional de captores, a interligação elétrica de toda a ferragem será utilizada na armação das estruturas, pisos e estacas de concreto. No solo, uma malha com 4,5 quilômetros de fios de cobre será interligada às armaduras das estacas. Final-

Circuito	NÚMERO	ESTABILIDADE	DISPONIBILIDADE	Potência (kW)	Set Point (°C)	Vazão (m³/h)	Diâmetro Nominal
MAGNETOS ANEL/BOOSTER	1	ALTA [± 0,1°C]	ALTA	491	20	169	8"
CRIOGENIA	2	BAIXA [± 1°C]	ALTA	390	18	29	4"
SISTEMAS DE RF	3	MÉDIA [± 0,5°C]	ALTA	1000	20	200	10"
CAVIDADES NORMAIS - LINAC	4	MÉDIA [± 0,5°C]	ALTA	248	20	108	8"
FRONT-ENDS QUAD/SEXT. BOOSTER	5	MÉDIA [± 0,5°C]	ALTA	1131	20	389	12"
ESTRUTURAS ACELERADORAS (*)	6	ALTA [± 0,1°C]	ALTA	14	45	24	3"
LINHAS DE LUZ - LAB. APOIO	7	MÉDIA [± 0,5°C]	ALTA	930	20	200	8"
FONTES DE POTÊNCIA - ACELERADORES	8	MÉDIA [± 0,5°C]	ALTA	158	20	34	4"

Circuitos de águas de processo e suas características



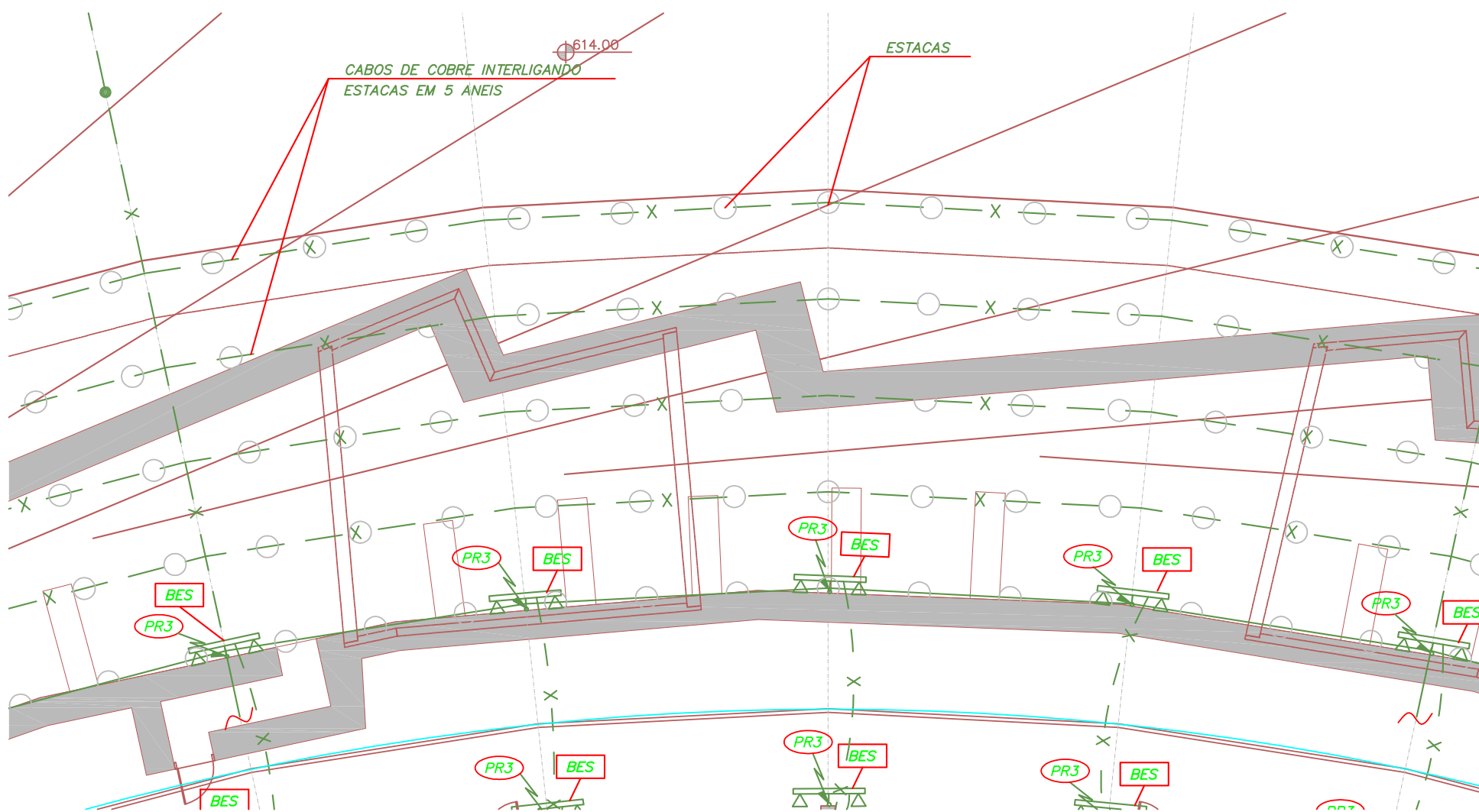


Exemplo de bomba que será utilizada no circuito de refrigeração e estabilização térmica

mente, também compõe o sistema de aterramento um grande anel formado por cabos de cobre ligados às hastes de aterramento distribuídas no perímetro do terreno e interligadas eletricamente à malha sob os prédios.

**Distribuição de nitrogênio líquido: Para atender o consumo de 18 mil litros de nitrogênio líquido por dia, previstos para a operação de 40 linhas de luz, serão instalados dois tanques criogênicos com capacidade para 60 mil litros cada.**

Essa capacidade será alcançada gradualmente com a instalação de tanques com capacidades crescentes e adequadas ao consumo previsto para cada etapa. Com isso, será garantido o consumo racional desse insumo, e um nível baixo de perdas por evaporação não aproveitada.



Detalhe da malha de aterramento que interliga em cinco anéis todas as 1332 estacas sob o piso do anel; esta malha é ligada radialmente ao restante do aterramento do edifício

## Gerenciamento e execução

Sirius será uma complexa infraestrutura de pesquisa, o que exige sofisticados desenvolvimentos de física e engenharia, tanto para o planejamento conceitual de seus componentes, quanto para a sua produção. O conjunto das inúmeras atividades a serem desenvolvidas por uma equipe técnica altamente especializada requer, portanto, planejamento e coordenação estruturados em uma gestão adequada.

O Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, pela experiência adquirida na construção e operação da primeira, e ainda hoje a única, fonte de luz síncrotron brasileira, reúne condições singulares para coordenar o desenvolvimento do projeto Sirius.

Sirius deve ser um equipamento no estado da arte das fontes de luz síncrotron, projetado para atender demandas científicas em áreas estratégicas para o País, fatores que fazem este projeto desafiador. Além disso, os principais parâmetros da nova fonte de luz – energia dos elétrons, corrente de operação, emitância, diâmetro do acelerador – devem ser estabelecidos com o objetivo de atender toda a complexidade de sua finalidade científica, ou seja, a análise em nível atômico e molecular de diversos materiais.

Esses desenvolvimentos demandam estudos teóricos detalhados e simulações numéricas, os quais definem requisitos para o projeto de engenharia de milhares de componentes e sistemas, como ímãs, fontes, sistema de radiofrequência e muitos outros. Assim, os grupos de engenharia procuram atender as especificações propostas pela equipe de física de aceleradores.

Durante esse processo, há interação entre as equipes técnicas, responsáveis pelo projetos dos diferentes subsistemas – vácuo, ímãs, diagnóstico, controle, injeção, alinhamento, etc. –, em busca de soluções possíveis e integradas que permitam atender os exigentes parâmetros de fabricação e operação. Normalmente, ocorre um longo ciclo de projeto, prototipagem e ajustes envolvendo os grupos de engenharia e de física de aceleradores.

Simultaneamente, ocorrem também os projetos das linhas de luz e das obras civis e os desenvolvimentos de todos esses projetos precisam ser inter-relacionados. Como Sirius é um projeto com características pioneiras, boa parte dos processos e componentes a serem usados não existem no mercado e seu desenvolvimento exige soluções inovadoras.

É importante salientar, ainda, que esse ciclo de desenvolvimentos conjuntos faz com que o projeto passe por constantes revisões ao longo de sua trajetória, em busca de soluções factíveis que permitam atender as suas inúmeras exigências técnicas. Neste sentido, o projeto já passou por diversos aprimoramentos, como detalha o quadro “Evolução do projeto”, à direita da página 83.

O sucesso do projeto Sirius requer, portanto, um rigoroso planejamento e acompanhamento de diferentes aspectos de gestão, como aquisição de materiais e equipamentos, análise de riscos, definição e monitoramento de cronograma e orçamento, recursos humanos e controle de qualidade, aspectos que serão detalhados a seguir.

### Escopo

A evolução técnica do projeto Sirius no período de 2012 a 2014 fez com que ele fosse definido segundo o seguinte escopo:

1) Projeto, construção e comissionamento da fonte de luz síncrotron, composta por um acelerador linear (Linac), anel intermediário (Booster), linhas de transporte de elétrons e pelo anel de armazenamento de elétrons com as seguintes características: energia de 3 GeV; emitância de 0,28 nm.rad; corrente de 350 mA.

2) Projeto, construção e comissionamento de 13 linhas de luz, incluindo suas respectivas estações experimentais.

3) Projeto, construção e comissionamento das obras civis, apropriadas ao funcionamento da fonte de luz síncrotron e das suas linhas de luz/estações experimentais.



*São necessárias interação e iteração para atender os requisitos de um projeto como o Sirius. Sua realização requer uma forte interação entre os grupos técnicos que, muitas vezes, trabalham no limite das soluções disponíveis na engenharia. O projeto também passa por ciclos de iteração, em busca de soluções para atingir as suas exigências, limitadas pelo orçamento e cronograma do projeto*

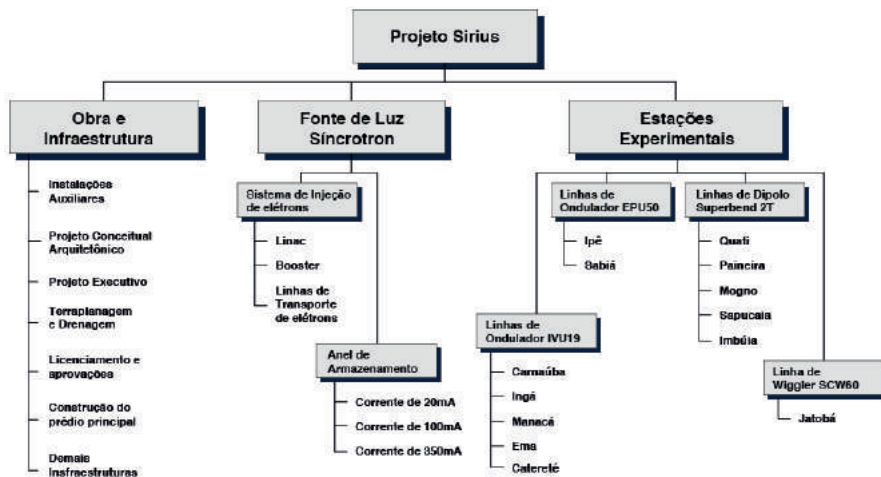


## Evolução do projeto

Sirius está sendo projetado para abrigar não somente as primeiras 13 linhas de luz, mas para comportar até 40 linhas, tendo em vista um planejamento de longo prazo para a vida útil do equipamento. No entanto, o orçamento, cronograma e os detalhes técnicos apresentados neste documento referem-se às 13 linhas iniciais descritas no escopo.

Desta forma, a execução do projeto se desdobra em três áreas distintas:

- 1) Obras civis e infraestrutura;
- 2) A fonte de luz síncrotron (aceleradores);
- 3) Linhas de luz/estações experimentais (instrumentação científica para uso dos pesquisadores).



Macroestrutura analítica do projeto Sirius

### Plano de gerenciamento

**Equipe:** A coordenação e acompanhamento de todos os aspectos técnicos, gerenciais e administrativos do projeto Sirius está a cargo da seguinte equipe: Antonio José Roque da Silva (diretor do projeto Sirius), Antonio Ricardo Droher Rodrigues (coordenador da fonte de luz síncrotron), Harry Westfahl Jr. (coordenador das linhas de luz/estações experimentais), Oscar Horácio Vigna Silva (coordenador das obras civis) e pela equipe de gerenciamento administrativo e de projetos: Cleonice Ywamoto, Roberta Paschoal Gomes e Marcelo Moreira Xavier.

Esta equipe é responsável pela gestão de todas as atividades do projeto Sirius e está em permanente articulação com o Conselho de Administração e a Diretoria Geral do CNPEM.

Os projetos da fonte de luz síncrotron e das linhas de luz são realizados pela equipe de profissionais do LNLS. Esses profissionais (técnicos, engenheiros, pesquisadores, etc.) são organizados em grupos que refletem as diferentes competên-

A nova fonte de luz síncrotron é o resultado de um processo de expansão da atividade científica e tecnológica no Brasil, para o qual há a inegável contribuição do LNLS. A definição atual do projeto Sirius é fruto de um processo contínuo de transformação e amadurecimento, ao longo do qual houveram alguns marcos importantes:

**2003** - É apresentada pela primeira vez, durante a 13ª Reunião Anual de Usuários (RAU), a necessidade de iniciar os estudos sobre uma nova fonte de luz síncrotron.

**2006** - Recomendação no Plano Diretor 2006-2009 da ABTLuS (antigo nome do CNPEM) da criação de uma força-tarefa para iniciar os estudos de um novo anel de armazenamento de baixa emitância para o LNLS.

**2008** - Primeira pré-proposta conceitual de um novo síncrotron é entregue ao Ministério da Ciência, Tecnologia e Inovação (MCTI). O governo aprova a continuidade desses estudos e direciona R\$ 2 milhões em recursos para o projeto, valor liberado em 2009.

**2009** - São realizados dois workshops com usuários para debater as características do novo síncrotron. São definidos a energia dos elétrons (de 3 GeV) e alguns parâmetros essenciais para o desenvolvimento do projeto básico da nova fonte.

**2010** - Projeto é apresentado na IPAC10 (International Particle Accelerator Conference), em Kyoto, Japão, já com o nome de Sirius<sup>1</sup>. No mesmo ano é iniciada a busca por uma área apropriada para a instalação da nova fonte.

**2011** - Comitê Científico Internacional do LNLS registra<sup>2</sup> a necessidade da construção de um novo síncrotron e recomenda a criação de um comitê internacional (Machine Advisory Committee, MAC) para avaliação e acompanhamento do projeto Sirius. No mesmo ano, a iniciativa "Construção de uma Fonte de Luz Síncrotron de 3ª geração" é incorporada ao Plano Plurianual 2012-2015 do Governo Federal, e já em 2012, é inclusa na Estratégia Nacional de Ciência, Tecnologia e Inovação 2012-2015<sup>3</sup> e na Lei Orçamentária Anual (LOA).

**2012** - Primeira revisão completa do projeto Sirius é feita pelo MAC. Classificado como síncrotron de 3ª geração, Sirius tem sua rede magnética é muito bem avaliada, no entanto o comitê recomenda a redução da sua emitância (de 1,7 para menos de 1 nm.rad). Em pouco tempo o LNLS redesenha a máquina e propõe uma emitância de apenas 0,28 nm.rad, a menor já planejada para um síncrotron com energia de 3 GeV. Com isso, Sirius passa a ser considerado pioneiro entre os síncrotrons de 4ª geração, ao lado da fonte suíça MAX-IV. O aperfeiçoamento demanda revisões nos projetos da rede magnética, dos componentes da fonte, do prédio e das suas estações experimentais.

**2013** - Aquisição da área de 150.000 m<sup>2</sup> dentro do Polo II de Alta Tecnologia de Campinas para instalação do Sirius, declarado de utilidade pública para fins de desapropriação pelo Governo do Estado de São Paulo.

<sup>1</sup> Sirius (BR): a new Brazilian Synchrotron Light Source. L. Liu, X. R. Resende and A. R. D. Rodrigues. Proceedings of IPAC10, Kyoto, Japan, p. 2481-83.

<sup>2</sup> LNLS Scientific Committee. Report of the LNLS Scientific Committee Meeting at LNLS, Campinas, Brazil. February 27 to March 2, 2001. p. 21. Disponível em <http://lnls.cnpem.br/wp-content/uploads/2011/08/2011-Scientific-Comitee-Report.pdf>

<sup>3</sup> ENCTI 2012-1015. MCTI, Brasília, 2012, p. 49.

cias técnicas exigidas pelo projeto, tais como física de aceleradores, vácuo, radiofrequência, magnetos, instrumentação de linhas de luz, proteção radiológica, instalações especiais, projetos mecânicos e outros.

Esses grupos estão organizados em três divisões no organograma do LNLS: 1) Divisão de Engenharia; 2) Divisão de Aceleradores; 3) Divisão Científica. O projeto Sirius é executado considerando uma estrutura matricial. A alocação das atividades para os funcionários é coordenada harmonicamente pelos líderes, coordenadores e gestores.

É importante salientar que, devido à especificidade e à complexidade do projeto, a qualidade e experiência técnica da equipe é item crucial para o sucesso da empreitada. Esse sucesso é garantido pela presença de funcionários com anos de experiência no LNLS, muitos dos quais participaram da construção do primeiro síncrotron brasileiro, inaugurado em 1997. Vale mencionar, nesse campo, o comentário feito pelo Comitê Internacional de Máquina em sua primeira avaliação, em junho de 2012: “LNLS has an enthusiastic staff with much knowledge and expertise”. [O LNLS tem uma equipe entusiasmada com muito conhecimento e experiência”]

Os líderes de cada grupo de trabalho têm a responsabilidade de coordenar suas atividades de maneira a atender os seus requisitos técnicos, dentro do cronograma e orçamento do projeto. A integração técnica é realizada por meio do acompanhamento e de reuniões regulares com os coordenadores de cada vertente

do projeto. A equipe de gestão de projeto também se reúne com essas equipes de forma regular para acompanhamento do orçamento e cronograma. Já a equipe administrativa dá o suporte para que compras e contratos ocorram no prazo e dentro das normas aplicáveis ao CNPEM.

### Orçamento

A partir do escopo e da estrutura analítica do projeto Sirius, foram definidas e sequenciadas as atividades com estimativas de recursos (humanos, financeiros e materiais). Como resultado, o orçamento total para o projeto Sirius é de R\$ 1.300 milhões, alocados da seguinte forma:

**Fonte de luz síncrotron:** O projeto da fonte de luz síncrotron está dividido em dois grandes blocos: anel de armazenamento e sistema de injeção de elétrons.

A gestão do anel de armazenamento é subdividida em 14 subprojetos. Já o sistema de injeção de elétrons é estruturado em quatro blocos: Linac, Booster, linha de transporte Linac-Booster e linha de transporte Booster-Anel. Cada um desses blocos é organizado em subprojetos distintos, como mostra o organograma.

Esses subprojetos são, por sua vez, estruturados em atividades diversas. Por exemplo, o subprojeto da rede magnética do Booster envolve os desenvolvimentos e a posterior fabricação dos dipolos, quadrupolos, sextupolos e corretoras do Booster. Cada uma dessas atividades é detalhada com os líderes dos grupos técnicos, em conjunto com os coordenadores e a equipe de gestão.

Item	Orçamento (R\$ milhões)
Obra	670
Estações Experimentais	220
Fonte de Luz Síncrotron	228
Gestão e Infraestrutura	94
Recursos Humanos	88
<b>TOTAL</b>	<b>1.300</b>

*Orçamento total estimado para o projeto Sirius*



Estratificação do Custo da Fonte de Luz Síncrotron Sirius (em milhões de R\$)				
Sistemas da Fonte de Luz	Anel de Armazenamento	Sistema de Injeção de Elétrons		
		Linac	Booster	Linhas de Transporte
Rede Magnética	44.8	12.7	6.2	0.8
Fontes da Rede Magnética	21.9		9.2	1.8
Sistema de Posicionamento dos Componentes	10.9		1.1	0.3
Sistema de Vácuo	17.0		4.6	0.9
Sistema de Diagnóstico e Realimentação	16.4		2.1	1.0
Sistema de Radiofrequência	46.8		2.9	
Sistema de Injeção Pulsada	0.8		0.3	0.4
Sistema de Proteção Radiológica	1.3			
Sistemas Auxiliares	20.5		0.5	0.3
Instalação e Montagem			2.4	

Estratificação do orçamento da fonte de luz síncrotron (em R\$ milhões)

A etapa final de execução é a instalação, montagem e comissionamento do anel de armazenamento e do sistema de injeção. O escopo do projeto prevê a conclusão deste objetivo em três fases, caracterizadas pela entrega de diferentes níveis de corrente dos elétrons no anel de armazenamento: 20 mA ao final da primeira etapa, 100 mA na segunda etapa, e 350 mA como resultado final.

A partir desse detalhamento, foi possível estimar o custo de cada atividade, e, portanto, de cada subprojeto. Somados, os orçamentos dos subprojetos geram os orçamentos globais de cada bloco e sistema.

**Linhas de luz:** Como apresentado na estrutura analítica do projeto, as linhas de luz estão organizadas em 13 projetos distintos. Como estratégia de execução, esses 13 projetos são abordados em quatro grupos, respeitando a sinergia técnica entre os desenvolvimentos de partes e sistemas de cada grupo, o que facilita a gestão.

O primeiro bloco é composto pelas linhas cuja fonte é baseada no ondulator IVU19: Ema, Carnaúba, Manacá, Cateretê e Ingá. Todas possuem entre si muitas semelhanças, como tipo de fonte geradora de luz síncrotron (onduladores em vácuo - IVU19), conceitos relativos ao *front end* e questões de proteção e segurança.

O segundo grupo engloba as linhas de luz cuja fonte é um ondulator de polarização elíptica EPU50: Sabiá e Ipê, que também possuem semelhanças técnicas entre si.

O grupo de linhas baseadas no Dipolo Superbend 2T é formado por: Quati, Paineira, Sapucaia, Imbuía e Mogno. Todas elas possuem um dipolo como fonte de radiação síncrotron, que já é

Linhas de IVU19					
Orçamento Total	110.7				
Orçamento por Linha	Carnaúba	Ema	Ingá	Cateretê	Manacá
Fonte	3.7	3.7	7.6	3.7	3.7
Front End	4.5	4.5	4.5	4.5	4.5
Cabana Ótica	4.7	4.7	4.7	4.7	4.7
Monocromador	1.1	1.1	1.1	1.1	1.1
Espelhos	1.1	1.1	1.1	1.1	1.1
Infraestrutura Interna	2.5	2.5	2.5	2.5	2.5
Cabana Experimental	8.2	8.1	10.8	8.2	7.0
Ótica de micro/nano foco	1.1	1.1	1.1	1.1	1.1
Posicionamento de amostra	0.9	1.1	2.0	0.9	1.1
Detectores	4.4	3.3	5.5	4.4	2.2
Infraestrutura Interna	1.8	2.6	2.2	1.8	2.6

Distribuição do orçamento para linhas de IVU19 (em R\$ milhões)

Linhas de EPU50		
Orçamento Total	37.5	
Orçamento por Linha	Ipê	Sabiá
Fonte	2.2	2.2
Front End	2.6	2.6
Cabana Ótica	4.1	2.9
Monocromador	1.1	0.6
Espelhos	1.1	0.6
Infraestrutura Interna	1.9	1.7
Cabana Experimental	11.4	9.5
Ótica de micro/nano foco	1.1	0.1
Posicionamento de amostra	1.0	2.0
Detectores	6.1	6.1
Infraestrutura Interna	3.2	1.3

Distribuição do orçamento para as linhas de EPU50 (em R\$ milhões)

Linhas de Dipolo Superbend 2T					
Orçamento Total	51.5				
Orçamento por Linha	Quati	Paineira	Sapucaia	Imbuía	Mogno
Fonte	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
Front End	2.6	2.0	2.6	0.9	1.8
Cabana Ótica	3.7	2.4	3.6	1.1	2.8
Monocromador	1.0	0.1	0.7	0.3	0.8
Espelhos	0.6	0.8	0.7	0.2	0.7
Infraestrutura Interna	2.1	1.5	2.2	0.6	1.3
Cabana Experimental	7.9	4.6	9.0	1.1	5.4
Ótica de micro/nano foco	0.6	0.5	0.7	0.0	0.5
Posicionamento de amostra	1.0	2.0	2.0	0.3	2.0
Detectores	4.1	0.5	4.1	0.5	2.0
Infraestrutura Interna	2.2	1.6	2.2	0.3	0.9

Distribuição do orçamento para linhas de IVU19 (em R\$ milhões)

Linhas de Wiggler SCW60	
Orçamento Total	20.3
Orçamento por Linha	Jatobá
Fonte	0.9
Front End	3.7
Cabana Ótica	4.2
Monocromador	1.1
Espelhos	1.1
Infraestrutura Interna	2.0
Cabana Experimental	11.5
Ótica de micro/nano foco	1.1
Posicionamento de amostra	1.0
Detectores	6.1
Infraestrutura Interna	3.3

Distribuição do orçamento para as linhas de Wiggler SCW60 (em R\$ milhões)

parte do acelerador. Por essa razão, os custos totais de cada linha têm valor reduzido em relação às demais.

Por fim, o último grupo é formado apenas pela linha Jatobá, baseada em um *wiggler* supercondutor SCW60.

Baseado nesse detalhamento, construiu-se o orçamento de cada uma das linhas de luz e de seus respectivos grupos, como apresentado nas tabelas na página anterior.

**Obras civis:** Conforme apresentado na estrutura analítica do projeto Sirius, as principais atividades relacionadas às obras civis, incluídas no escopo do projeto, são:

a) Instalações auxiliares: Novos prédios e intervenções realizadas em prédios pré-existentes no LNLS, indispensáveis para acomodar áreas técnicas de trabalho essenciais para o desenvolvimento e construção de componentes para a fonte e as linhas de luz do Sirius.

b) Elaboração de projeto conceitual arquitetônico: O projeto básico foi feito junto a uma empresa especializada. Trata-se de uma etapa necessária para a posterior contratação de outra empresa, responsável por fazer o projeto executivo.

c) Projeto executivo: Consiste no projeto detalhado de engenharia das obras civis, contendo informações técnicas necessárias e suficientes para permitir a orçamentação, plano de trabalho e execução por empresas interessadas na construção do empreendimento.

d) Terraplanagem e drenagem: Realização de serviços de preparação da área na qual o Sirius será construído.

e) Licenciamento e aprovações: Obtenção de licenças e aprovações junto a órgãos públicos - Prefeitura Municipal de Campinas, Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental (CETESB), Sociedade de Abastecimento de Água e Saneamento S/A (SANASA), Comissão Nacional de Energia Nuclear (CNEM), Corpo de Bombeiros, entre outros.

f) Construção do prédio da fonte de luz síncrotron: Contratação, acompanhamento e fiscalização de uma empresa especializada, responsável pela construção do prédio principal, de 68 mil metros quadrados. O acompanhamento será realizado em conjunto com uma empresa especializada em gerenciamento de obras, a fim de garantir o atendimento dos requisitos técnicos definidos no projeto executivo.

g) Demais itens de infraestrutura: Elaboração de projeto e construção de subestação de energia, estação de tratamento de água, portaria, arruamentos e estacionamentos.

A partir do projeto executivo do prédio principal, que já está concluído, e da análise de custos dos outros itens, foi feita a estimativa global do orçamento das obras civis de R\$ 668 milhões.

**Recursos humanos:** Para definir a necessidade de recursos humanos dedicados ao projeto e garantir a execução bem-sucedida do projeto Sirius, de acordo com o cronograma proposto, foi realizada uma análise detalhada de dimensionamento e carga de trabalho de cada grupo. A tabela inferior da página ao lado apresenta um exemplo de análise realizada com uma das áreas técnicas, relativa a uma atividade que deve ocorrer entre 2013 e 2015.

Análises semelhantes foram realizadas com cada líder de grupo e aprovadas pelos coordenadores e gestores. Essas análises são revisadas periodicamente, balizando a necessidade de contratação em cada área técnica e para cada perfil de colaborador. Elas são fundamentais para definir a necessidade de contratação de um novo colaborador em tempo hábil para que seja treinado.

O objetivo dessas análises é subsidiar o gerenciamento de recursos humanos a fim de garantir que uma determinada área não se torne gargalo no projeto, sendo, inclusive, parte das análises de risco do projeto. Dessa forma, a evolução do quadro de pessoal do LNLS para executar o projeto Sirius é apresentada na tabela superior à esquerda na página ao lado.

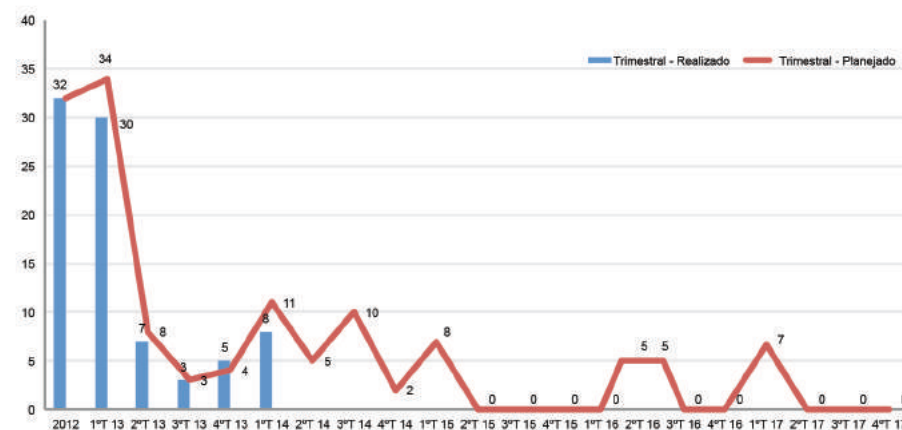
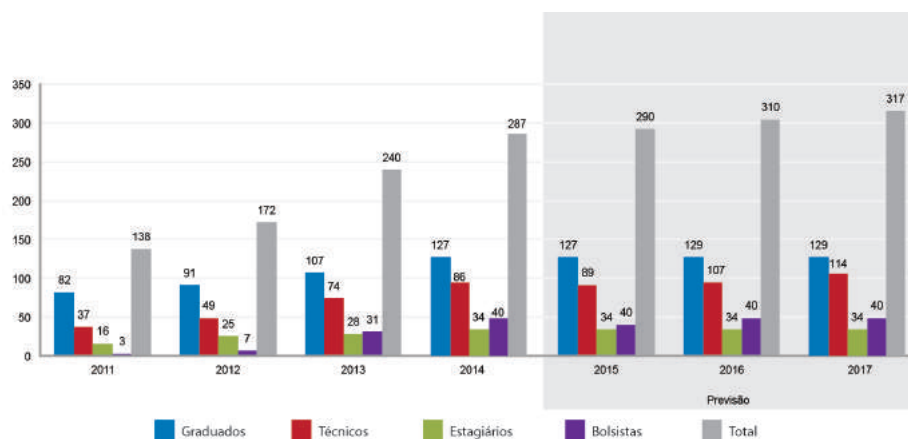
Também é feito o acompanhamento do que foi planejado e efetivamente realizado em contratações para o projeto Sirius, conforme mostra a tabela superior à direita.

O cumprimento das metas de contratação é um item fundamental para o sucesso do projeto. Os desafios são grandes, pois exigem um volume significativo de recrutamento de profissionais qualificados, em um curto espaço de tempo.

Para garantir o atendimento das metas de contratação foi feito o mapeamento das etapas do processo de recrutamento e seleção, com ações específicas para redução, quando possível, dos prazos de cada etapa. Há, ainda, reuniões regulares entre a equipe de gestão do projeto Sirius e a área de recursos humanos do CNPEM, a fim de manter o acompanhamento de cada vaga e garantir o cumprimento de prazos.

É importante notar que o orçamento necessário à área de recursos humanos depende do cronograma do projeto, de modo que a extensão do cronograma tem impacto direto nesse valor. Considerando a conclusão do projeto Sirius em 2020, dentro do escopo apresentado neste documento, o orçamento total para recursos humanos é de R\$ 88 milhões.





Evolução do quadro de pessoal do LNLS necessário para execução do projeto Sirius

Planejamento e execução das contratações

	maio-13	junho-13	julho-13	agosto-13	setembro-14	outubro-13	novembro-13	dezembro-13	janeiro-14	fevereiro-14	março-14	abril-14	maio-14	junho-14	julho-14	agosto-14	setembro-14	outubro-14	novembro-14	dezembro-14	janeiro-15	fevereiro-15	março-15	abril-15	maio-15	junho-15	
Dias por mês	20	20	21	22	21	24	19	14	21	20	18	20	20	19	22	21	22	23	19	13	20	17	22	16	20	20	
Perfil																											
Líder	100	66	38	112	25	135	109	142	146	125	92	98	162	102	32	16	44	30	8	8	8	7	9	8	8	8	8
Engenheiro 1	120	127	94	134	129	131	101			13	115	128			13	134	141	147	122	122	134	109	141	122	32		
Técnico 1	45	74	96	62	115	50				44	72	72					8	92	60	12	84	68	88	76	80	80	
Engenheiro 2	104	140	166	142	131	138	115			13	115	128	96		3	48	141	147	122	122	134	109	141	122	80		
Técnico 2	138	27	168	53	103	116	23	82	86	72	101	61	80	54	9	8	57	101	78	76	84	68	88	76	80	32	
Técnico 3	58	8	13	104	63	136	114	46	58	47	58	88	111	72	40	46	88	60	15	15	17	38	102	84	60	36	
Técnico 4	82	115	88	32		113	97	82	149	43	31	32	56	74	29	8	9	9	8	21	34	13					
horas planejadas TOTAL	647	557	663	639	567	819	559	352	439	357	584	606	506	303	127	261	487	587	412	375	496	411	569	486	340	156	
nº de pessoas necessárias TOTAL	4.0	3.5	3.9	3.6	3.4	4.3	3.7	3.1	2.6	2.2	4.1	3.8	3.2	2.0	0.7	1.6	2.8	3.2	2.7	3.6	3.1	3.0	3.2	3.8	2.1	1.0	
Horas planejadas Técnicos	323	224	365	251	282	415	234	210	293	206	262	253	247	201	78	62	162	262	161	124	218	186	278	236	220	148	
nº de Técnicos Necessários	2.0	1.4	2.2	1.4	1.7	2.2	1.5	1.9	1.7	1.3	1.8	1.6	1.5	1.3	0.4	0.4	0.9	1.4	1.1	1.2	1.4	1.4	1.6	1.8	1.4	0.9	
Horas planejadas Engenheiros	324	333	298	388	286	404	325	142	146	150	322	354	258	102	48	199	326	324	251	251	277	224	290	251	120	8	
nº de Engenheiros Necessários	2.0	2.1	1.8	2.2	1.7	2.1	2.1	1.3	0.9	0.9	2.2	2.2	1.6	0.7	0.3	1.2	1.9	1.8	1.7	2.4	1.7	1.7	1.7	2.0	0.8	0.1	

Exemplo de análise de dimensionamento e necessidade de pessoal alocado no projeto Sirius

**Gestão e infraestrutura:** Finalmente, existem diversas outras atividades dentro do projeto Sirius, como aquisição de equipamentos de medição para garantia de qualidade, manutenção de equipamentos, visitas técnicas dos comitês inter-

nacionais de avaliação, gastos com software e outros. Esses itens foram agrupados em um bloco denominado gestão e infraestrutura. A estimativa de orçamento para esse bloco é de R\$ 96 milhões.

### Cronograma e fluxo de caixa

A definição do cronograma de execução do projeto passa por uma criteriosa avaliação técnica do tempo necessário para a execução das diferentes atividades, bem como por uma estimativa de fluxo de caixa anual. Levando em conta esses dois fatores, a proposta apresentada a seguir considera a finalização

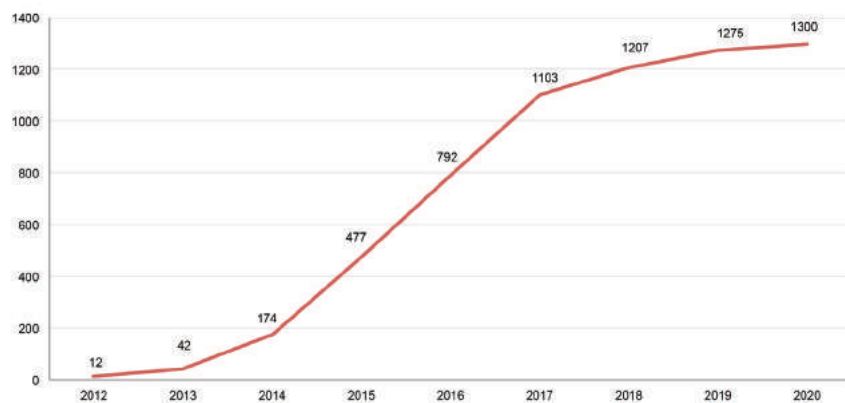
do projeto Sirius (dentro do escopo descrito neste documento) em 2020. É importante salientar que, do ponto de vista técnico, é possível reduzir esse tempo, o que implicaria em um fluxo de caixa mais agressivo.

A estimativa de orçamento do projeto Sirius distribuído no período entre 2012 e 2020 é a seguinte:

Orçamento do Projeto Sirius (em milhões de R\$)	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020	TOTAL
<b>Obra</b>	2,4	10,4	75,9	159,2	206,2	206,8	8,7	0,0	0,0	670
<b>Estações Experimentais</b>	4,5	1,2	8,1	26,0	21,3	51,9	68,0	34,4	4,5	220
<b>Fonte de Luz Síncrotron</b>	0,9	7,3	22,7	93,6	70,1	28,9	0,0	4,3	0,0	228
<b>Gestão e Infraestrutura</b>	4,1	6,3	13,2	14,9	6,1	10,3	13,2	14,1	11,9	94
<b>Recursos Humanos</b>	1,1	4,3	11,9	10,0	11,0	12,6	14,0	15,8	7,8	88
<b>Total Anual</b>	<b>13</b>	<b>29</b>	<b>132</b>	<b>304</b>	<b>315</b>	<b>310</b>	<b>104</b>	<b>69</b>	<b>24</b>	<b>1,300</b>

*Orçamento do projeto Sirius distribuído no período entre 2012 e 2020*

O planejamento considera o início da construção do prédio no último trimestre de 2014. A obra terá duas grandes entregas: em setembro de 2017 o prédio será liberado para a instalação e montagem da fonte de luz síncrotron e, em março de 2018, a obra será concluída.



*Curva de orçamento acumulado (curva S) para o projeto Sirius (em milhões de R\$)*

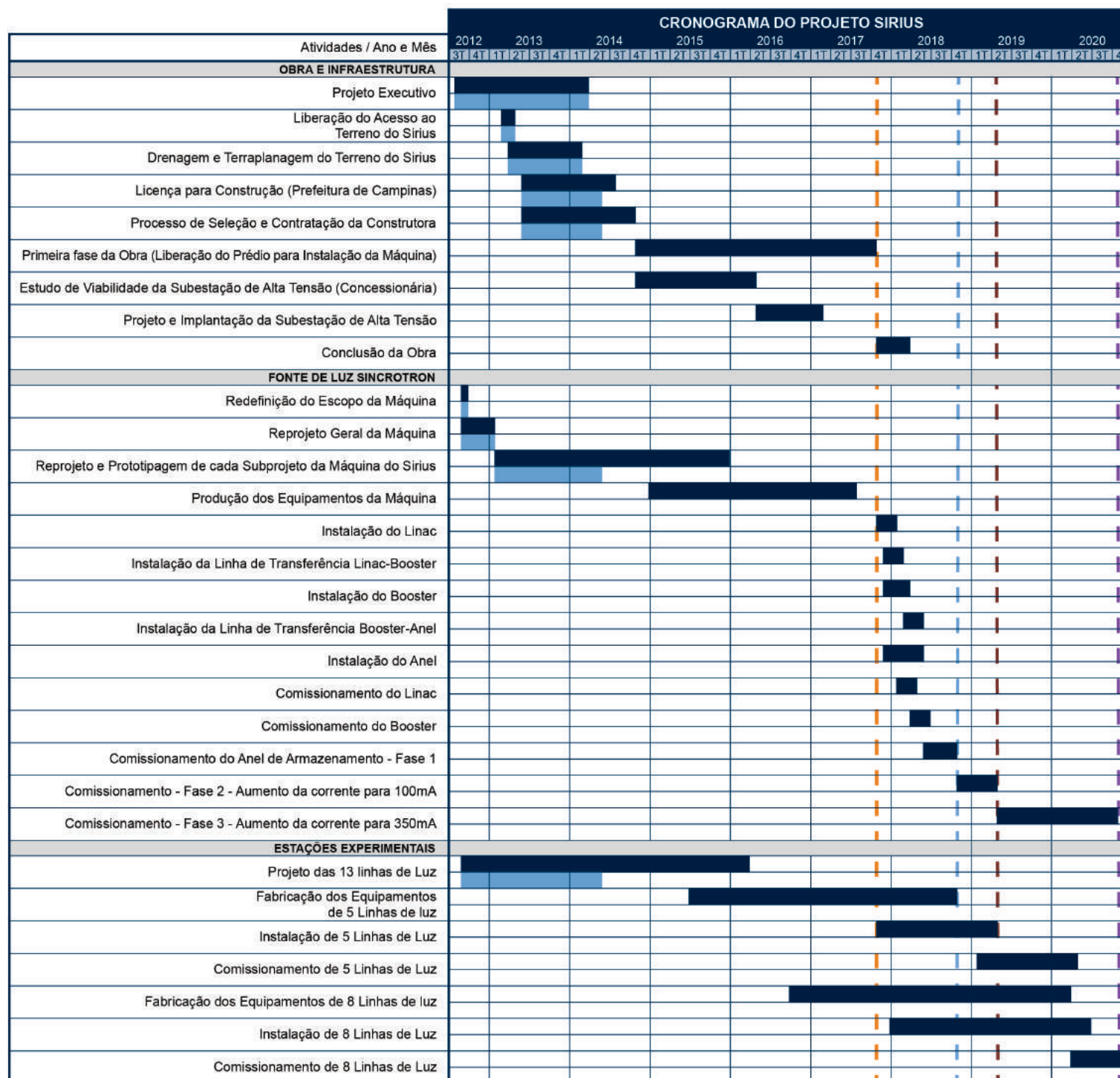
O processo de instalação dos inúmeros componentes que, reunidos, formarão a fonte de luz síncrotron começará pelo acelerador linear (Linac), seguido da instalação do anel intermediário (Booster) e do anel de armazenamento de elétrons.

De acordo com o planejamento realizado, o primeiro feixe de elétrons deve ser obtido em junho de 2018. Em setembro de 2018, a corrente da máquina será de 20 mA, a qual será aumentada para 100 mA até março de 2019. Até outubro de 2020, a corrente da máquina chegará 350 mA.

O projeto para construção das linhas de luz/estações experimentais, em 2014 encontra-se em fase de desenvolvimento técnico e prototipagem das primeiras 13 linhas previstas para serem instaladas no Sirius. No final de 2019, serão entregues as primeiras 5 linhas de luz baseadas em IVU19. E, ao final de 2020, serão entregues as 8 linhas de luz dos grupos de EPU50, Dipolo Superbend 2T e Wiggler SCW60.

Do ponto de vista técnico, é possível reduzir esse cronograma. O limitante na proposta apresentada é o fluxo de caixa.





LEGENDA

PLANEJADO  
REALIZADO

- — — — — Liberação do Prédio para Máquina
- — — — — Feixe de Luz de até 20 mA
- — — — — Aumento da corrente da Máquina para 100 mA
- — — — — Aumento da corrente da Máquina para 350 mA

*Cronograma do projeto Sirius distribuído no período entre 2012 e 2020*

## Qualidade

Considerando que o Sirius é um projeto no estado da arte mundial, com rígidas exigências para o planejamento e fabricação de todos os seus componentes, incluindo as obras civis, são fundamentais ações que garantam a qualidade do produto final.

**Avaliação internacional:** Uma das ações necessárias para garantir a qualidade e a assertividade do projeto é a avaliação periódica por comitês externos, compostos por especialistas em luz síncrotron de diversos locais do mundo. Assim, alguns comitês vêm periodicamente ao LNLS a fim de analisar os desenvolvimentos do projeto.

O Machine Advisory Committee (MAC) tem como papel principal avaliar os desenvolvimentos da fonte de luz síncrotron e demais instalações, incluindo as obras civis. O comitê é composto por Helmut Wiedemann (Stanford, EUA), Zhao Zhentang (SSRF-SINAP, Shanghai, China), Mikael Eriksson (MAX-IV, Suécia), Leonid Rivkin (PSI/SLS, Suíça), Albin Wrulich (PSI/SLS, Suíça), Robert Hettel (SSRL-SLAC, EUA) e Nelson Velho de Castro Faria (IF-UFRJ, Brasil).

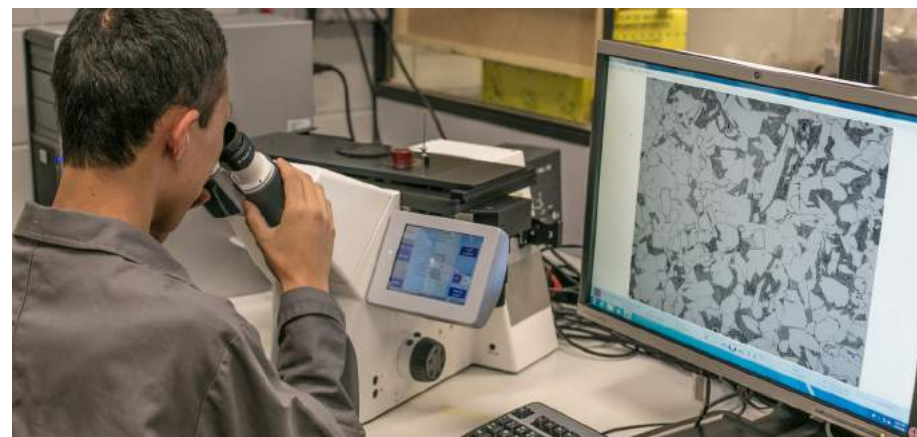
O Scientific Advisory Committee (SAC) é um comitê que vem regularmente ao LNLS para avaliar o Laboratório. Como parte de suas atribuições está também a avaliação das linhas de luz do Sirius. É composto por Massimo Altarelli (European XFEL GmbH, Alemanha), Nicholas Bernard Brookes (ESRF, França), Thomas Earnest (SSRF-SINAP, China), Rosangela Itri (IF-USP, Brasil), José M. Riveros Nigra (IQ-USP, Brasil), Sérgio Rezende (IF-UFPe, Brasil), Volker Saile (KIT, Alemanha), Qun Shen (BNL, EUA), Galo Soler-Illia (CONICET-CNEA, Argentina) e William G. Stirling (CEA/ESRF, França).

Por fim, ao longo do projeto das linhas de luz para o Sirius estão sendo constituídos diferentes comitês para avaliação de blocos de linhas específicas, chamados Beamline Advisory Committees (BAC's). Ao final de 2012, foi realizada a primeira reunião do BAC para avaliação das linhas de espectroscopia de raios X. Os participantes deste BAC foram Thomas Arthur Rabedeau (SLAC, EUA), Jean Susini (ESRF, França), Jonathan C. Lang, (Argonne National Lab., EUA), Felix Gregório Requejo, (UNLP, Argentina), Hélio Tolentino, (CNRS/Grenoble, França), Gustavo Azevedo (OF-UFRGS, Brasil), Marcelo Gonçalves Honnicke (UNILA, Brasil) e Eduardo Granado (IFGW/UNICAMP, Brasil).

**Metrologia:** Considerando que os componentes do Sirius exigem parâmetros técnicos bastante rigorosos, com necessidade de fabricação dentro de margens de erro também rigorosas, é

fundamental a medição e avaliação da precisão e qualidade desses componentes. Para tanto, o LNLS dispõe recursos humanos qualificados e de instrumental que permite o controle da qualidade e a inspeção completa de equipamentos para Sirius.

Em sua área de metrologia dimensional, por exemplo, o Laboratório conta com uma máquina de medição de coordenadas tridimensional CNC (Controle Numérico Computadorizado). Existe ainda um Laboratório para Ensaio Mecânico (ensaio de tração, medição de dureza e rugosidade); Laboratório de Medidas Magnéticas; Laboratório para Ensaio Elétrico que realiza medidas de isolamento, resistência e indutância elétrica e Laboratório para Análises Metalográficas equipado com microscopia eletrônica de fluorescência de raios X. Além disso, há capacidade para fazer análise de limpeza de peças usando a técnica XPS (*X-Ray Photoelectron Spectroscopy*).



*Colaborador do LNLS faz observação no Laboratório de Análises Metalográficas*



*Colaboradora do LNLS faz o controle dimensional de uma peça usando um sistema de medição por contato disponível no Laboratório de Vácuo*



**Obras civis:** A dimensão e os inúmeros fatores críticos de engenharia civil do prédio que abrigará a fonte de luz do Sirius levaram o LNLS à decisão de contratar uma empresa especializada em gerenciamento de projetos para monitorar todas as suas fases de construção. Isso constitui mais um processo de controle de qualidade, considerando que a empresa realiza a fiscalização e gerenciamento de prazos, custos, qualidade dos materiais e procedimentos especificados no projeto executivo.

A equipe da empresa que acompanha o projeto Sirius é composta por 11 profissionais, sendo seis membros da equipe técnica principal, três da equipe técnica de apoio e dois da equipe de apoio administrativo. Uma equipe de consultores especializados, a serem alocados conforme a demanda, também está disponível.

## Comunicação e integração

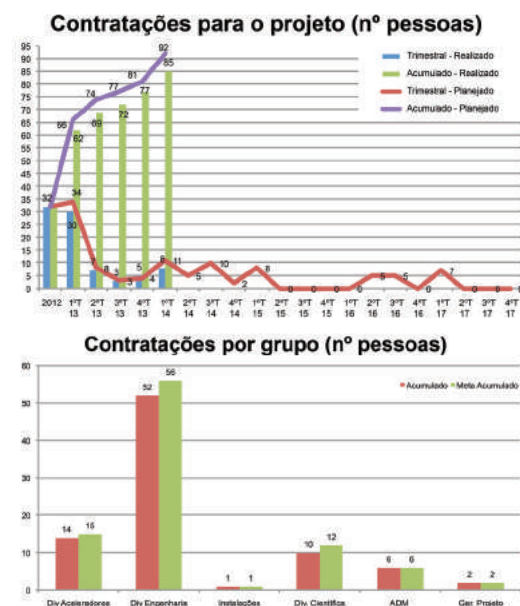
Considerando o grande número de subprojetos e a necessidade fundamental de integração entre eles, a comunicação torna-se um ponto que demanda atenção especial no gerenciamento do projeto Sirius.

O plano de comunicação gerencial do projeto está baseado em três reuniões principais internas periódicas: uma reunião semanal da equipe de coordenação do projeto para decisões de assuntos estratégicos, reunião específica de cada subprojeto para revisão do andamento das atividades de grupos técnicos, e reunião mensal de alinhamento com toda a equipe técnica do projeto Sirius. Além disso, a cada três meses é realizada uma reunião com o Presidente do Conselho de Administração e Diretor Geral do CNPEM para acompanhamento e alinhamento estratégico.

Um dos desafios da coordenação do projeto Sirius é a interação entre os seus subprojetos, organizados em três grandes blocos: edificações, fonte de luz síncrotron e linhas de luz, visando o compartilhamento de recursos e informação entre as equipes. Assim, para possibilitar o planejamento, execução, controle e monitoramento integrado dos subprojetos tem sido utilizada a ferramenta de gerenciamento de projetos Softexpert Excellence Suite.

O acompanhamento, controle e comunicação são feitos também por meio de relatórios sucintos, apresentados trimestralmente à equipe. Neles são apresentados quatro indicadores de performance do projeto: atendimento ao cronograma físico, gastos do projeto, contratações e percentual de compras nacionais. Os relatórios apresentam de forma simples e gráfica a evolução desses indicadores, comparando os resultados obtidos com as metas estipuladas. Além disso, eles apontam as causas prováveis

nos casos em que as metas não tenham sido atingidas, bem como planos de ação para melhoria dos resultados. Um exemplo é o indicador de contratações, mostrado abaixo.



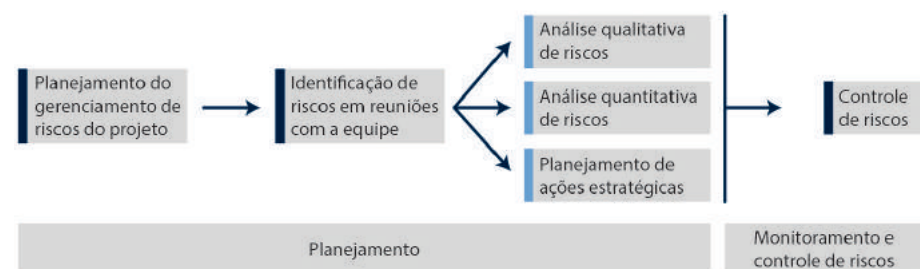
nº	Causa	Ação	Resp.	Prazo	Status
1	Processo de Recrutamento	Contratação de um analista de RH dedicado ao projeto Sirius	Gerente do Projeto	Out-12	OK
2		Mapeamento e Melhoria do processo de recrutamento e seleção	Assessora do Diretor	Mar-13	OK
3		Contrato com consultorias externas de recrutamento	Analista de RH	Mar-13	OK
4	Liberação de Visto de Estrangeiros	Contratação da consultoria EMDOC para liberação de vistos	Assessora do Diretor	Dez-12	OK
5		Contato junto ao Ministério do Trabalho para agilizar a liberação de vistos	Assessora do Diretor	Fev-13	OK
6		Contato junto ao Ministério da Justiça (Polícia Federal) para agilizar a obtenção do RNE	Assessora do Diretor	Mai-13	OK
7	Prazo de abertura e	Formulário on line de requisição de vaga	Analista de RH	Jan-14	OK
8	Demanda de Vagas	Estimativa da demanda de Recursos Humanos por área através da análise de	Gerente do Projeto	Mar-13	em andamento

Indicador de contratação de recursos humanos

## Riscos

O plano de gerenciamento de riscos do projeto Sirius está baseado nas seguintes ações: identificação de riscos potenciais (estratégicos, operacionais, técnicos, de qualidade), análise de cada risco, planejamento da resposta ao risco e monitoramento das ações e riscos. Essas ações são identificadas a partir dos documentos de escopo, estrutura analítica do projeto, estimativas de prazos e custos do projeto e, principalmente, da experiência da equipe técnica.

Após identificação, os riscos potenciais são classificados de acordo com critérios de probabilidade, impacto e prioridade, segundo os parâmetros definidos a seguir:



Fluxograma do plano de gerenciamento de riscos do projeto Sirius

Descrição					Fatores	Descrição do Impacto
A falta de estabilidade do piso do anel para a operação da fonte de Luz Síncrotron					Projeto, construção e materiais aplicados no piso	A Fonte de Luz Síncrotron não operar de acordo com as especificações
Data	Probabilidade	Impacto	Perda Esperada	Situação	Estratégia de Resposta	
					Plano de Mitigação	Plano de Contingência
2014	Baixa	Alto	Média	Em Mitigação	<p>Construção e medidas de estabilidade por meio de protótipos; medidas de vibração no local da construção; simulações numéricas de vibração e recalque.</p> <p>Acompanhar a construção do piso, garantindo o uso de materiais e procedimentos de acordo com a especificação do projeto executivo</p>	O impacto pode ser reduzido por meio de sistema de estabilização de órbita em projeto e execução

Exemplo de tabela de identificação de riscos usada no gerenciamento do projeto Sirius

Um exemplo de risco estratégico importante é a garantia de fluxo de caixa regular para execução das atividades do projeto dentro do cronograma estabelecido. Um exemplo de risco técnico é a falta de estabilidade do piso do anel para a operação da fonte de luz síncrotron, como mostra a tabela ao lado.

A título de ilustração, alguns dos riscos analisados estão relacionados à regularidade do fluxo de caixa, eficiência dos processos de compra e respeito ao regulamento de compras do CNPEM, capacidade de contratação oportuna de recursos humanos especializados; qualidade do projeto executivo do edifício e estabilidade dos componentes ópticos e dos medidores de posição de órbita para o anel de armazenamento.

Além disso, como o projeto Sirius demanda produtos de alta tecnologia, o desenvolvimento de fornecedores na indústria brasileira foi considerado como risco. Uma análise de risco específica para esse tópico foi desenvolvida com uso da metodologia da ferramenta FMEA (Failure Mode and Effects Analysis). A tabela na página ao lado apresenta exemplos de análises.

A análise de risco foi realizada para 73 produtos. Para cada produto, a equipe pontuou aspectos relativos à severidade, à ocorrência

e à detecção de falhas no processo de desenvolvimento do produto na indústria brasileira. Assim, foi possível mapear os riscos relacionados ao desenvolvimentos de produtos pela indústria brasileira.

### Aquisições

Visando o controle, economia e respeito aos prazos das aquisições e contratação de serviços, foi designada uma equipe administrativa dedicada a toda e qualquer aquisição ou contratação de serviços necessários para o projeto Sirius. Profissionais das áreas de compras nacionais, importação e assessoria jurídica do CNPEM, em conjunto com a equipe técnica do projeto Sirius, realizam o planejamento das aquisições, negociações de preços e condições de pagamento, acompanhamento dos status das compras e a gestão da execução dos contratos do projeto.

As execuções dos contratos celebrados são acompanhadas e controladas desde as assinaturas até os respectivos encerramentos, com a verificação do cumprimento das cláusulas pactuadas e do cumprimento das metas físicas e financeiras de cada contrato e do projeto como um todo. As atividades de gestão de contratos têm como objetivo assegurar a conformidade da execução de cada contrato, ou seja, o pleno aten-



Processo / Atividade	Modo de Falha Potencial	Lead Time produto importado	Fornecedor nacional domina a tecnologia?	Quantidade	Severidade	Ocorrência	Deteção	RPN Risk Priority number	Ação Recomendada	Resp.
Desenvolver e Fabricar Fontes de corrente de Baixa potência no Br	Não atender especificação técnica ou estourar custo e/ou cronograma	2 anos (Fabricação)	Sim (fabricação)	900 un.	3	1	3	9	Buscar Parceiro na Indústria brasileira	Líder do Grupo ELP
Desenvolver e Fabricar Fitas de aquecimento no Br	Não atender especificação técnica ou estourar custo e/ou cronograma	1,5 ano	podem existir tecnologias similares (Kapton)	800 m	1	5	3	15	Buscar Parceiro na Indústria brasileira	Líder do Grupo VAC
Desenvolver e Fabricar as Câmaras de Vácuo do Anel no Br	Não atender especificação técnica ou estourar custo e/ou cronograma	3 anos	Não devido a deposição do NEG (patente do CERN)	300	5	5	5	125	Fabricar internamente devido a complexidade /patente do processo de deposição NEG.	Líder do Grupo VAC
Projetar e Fabricar as Centrais de interlock no Br	Não atender especificação técnica ou estourar custo e/ou cronograma	4 meses	Sim (Integradores de sistemas)	340 unidades	5	1	1	5	Buscar Parceiro na Indústria brasileira	Líder do Grupo ICE
Desenvolver e Fabricar Cavidade de RF no Br	Não atender especificação técnica ou estourar custo e/ou cronograma	2 anos	não	2supercondutoras para o anel + 2 de cobre	5	5	5	125	Importar	
Projetar e Fabricar o sistema de Guias de ondas no Br	Não atender especificação técnica ou estourar custo e/ou cronograma	1 ano	sim	120 m	5	1	3	15	Buscar Parceiro na Indústria brasileira	Líder do Grupo de RF
Desenvolver e Fabricar berços no Br	Não atender especificação técnica ou estourar custo e/ou cronograma		sim (usinagem)	394 berços	3	1	1	3	Buscar Parceiro na Indústria brasileira	Líder do Grupo PRO
Desenvolver e Fabricar eletroímãs no Br	Não atender especificação técnica ou estourar custo e/ou cronograma	1,5 ano	sim	1440	5	1	1	5	Buscar Parceiro na Indústria brasileira	Líder do Grupo IMA

*Análise parcial de riscos de desenvolvimento de produtos na indústria brasileira*

dimento das obrigações da contratada, sejam essas relacionadas a cláusulas de caráter formal (seguros, garantias, registros, anotações de responsabilidade técnica, etc.), ou cláusulas de escopo, de prazo, de preços, etc.

O processo de aquisição mais significativo do projeto, ou seja, o de qualificação e seleção de empresa para construir o prédio que abrigará a fonte de luz síncrotron começou em julho de 2013, e está em fase final.

Durante o processo de seleção das empresas, a equipe Sirius, em conjunto com a gerenciadora, buscou propostas comerciais de empresas especializadas e independentes, com o objetivo de ter um padrão para comparar os orçamentos dos sistemas, como por exemplo: ar condicionado, instalações elétricas, sistema de combate a incêndio, automação, controle de acesso, fibra óptica, redes, dentre outras.

**Parcerias nacionais:** O projeto Sirius tem como um dos seus objetivos estimular o desenvolvimento da indústria brasileira, por meio da indução de demandas de serviços, matérias-primas e equipamentos. A meta é aplicar entre 65% a 70% dos recursos financeiros do projeto dentro do País.

Dentre parcerias já estabelecidas, cita-se, como exemplo, a realizada com a empresa Termomecânica São Paulo S. A., de São Bernardo do Campo (SP), líder no setor de transformação de metais não ferrosos. A empresa desenvolveu o processo para fabricação das câmaras de vácuo do anel de armazenamento, feitas de uma liga de cobre e prata, bem como dos fios de cobre ocos para os eletroímãs, que permitem circulação de água para refrigeração.

Outro exemplo de operação bem-sucedida na busca de parcerias é o da empresa WEG Indústrias S. A., de Jaraguá do Sul

(SC). Tradicional fabricante de motores elétricos, colocada no ranking mundial, a WEG se interessou pelo projeto Sirius e irá desenvolver processos de fabricação para construir os eletroímãs projetados pela equipe técnica do LNLS.

Existem também exemplos de parcerias com empresas de menor porte, como a FCA Brasil, de Campinas (SP), para a fa-



*Protótipo da câmara de vácuo do anel de armazenamento, desenvolvido com material da Termomecânica, parceira do projeto Sirius*

bricação das câmaras de vácuo do Booster, e com a empresa EXA-M Instrumentação do Nordeste Ltda. (BA), para o desenvolvimento e fabricação dos dispositivos para baking das câmaras de vácuo do anel de armazenamento.

Para ampliar a participação de empresas nacionais no projeto Sirius, outras ações sistemáticas foram realizadas. Tomando como base



*Protótipo de um quadrupolo a ser usado no Booster do Sirius, desenvolvido pela empresa WEG*

a análise de risco de 73 produtos que devem ser desenvolvidos, e considerando – além das áreas de atuação da indústria brasileira – o mercado para esses produtos e o desenvolvimento tecnológico requerido, foram escolhidos 29 desafios para serem desenvolvidos em parceria com a indústria brasileira. Todos eles apresentam uma grande oportunidade de desenvolvimento tecnológico para as empresas.



*Protótipo de câmara de vácuo do Booster, desenvolvido em parceria com a empresa FCA Brasil, parceira do projeto Sirius*



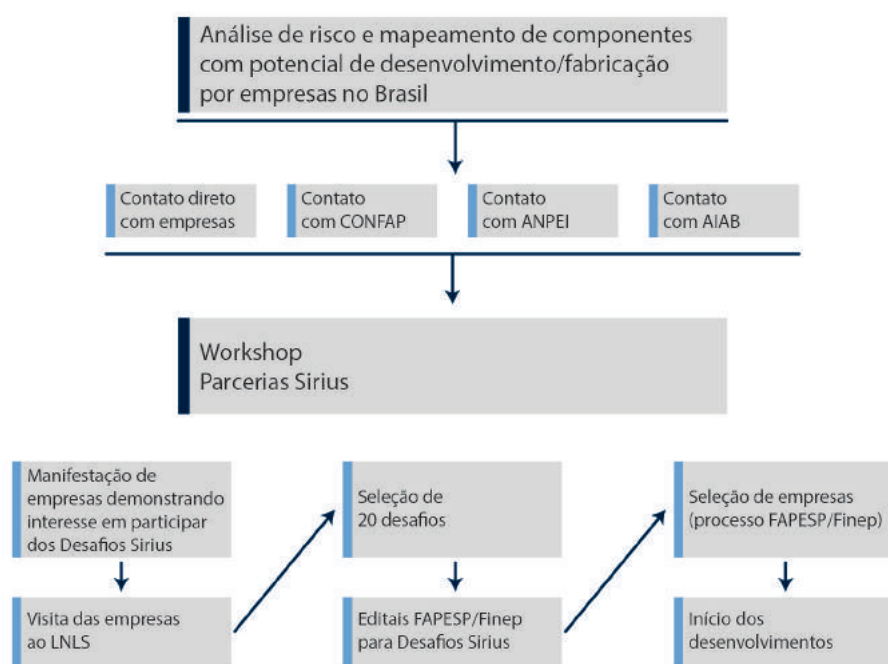
*Detalhe do dispositivo para baking das câmaras de vácuo para o anel de armazenamento do Sirius, desenvolvido pela empresa parceira EXA-M*



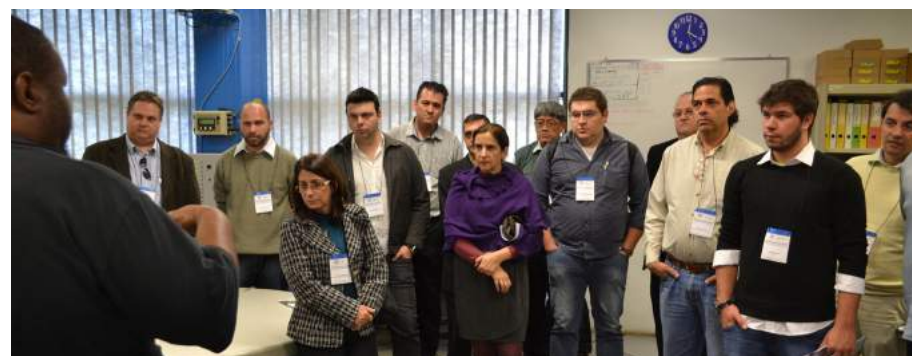
Uma vez identificados os desafios, iniciou-se a busca por parcerias e o contato com empresas brasileiras capazes de desenvolver esses produtos, identificadas por suas áreas de atuação. Posteriormente, esse processo foi desenvolvido por meio de conversas com o Conselho Nacional das Fundações de Amparo à Pesquisa (CONFAP), a Associação Nacional de Pesquisa e Desenvolvimento das Empresas Inovadoras (ANPEI) e a Associação das Indústrias Aeroespaciais do Brasil (AIAB).

Em 28 de junho de 2013, o LNLS promoveu o Workshop Parcerias Sirius, visando apresentar às empresas os desafios do projeto Sirius e o modelo de seleção de parceiros. A divulgação do evento foi feita por meio da página do CNPEM e das associações e agências citadas, incluindo a FAPESP. Empresas de diversos estados do Brasil foram convidadas e 50 delas (dos estados de São Paulo, Minas Gerais, Rio de Janeiro e Santa Catarina) participaram do workshop.

21 empresas participantes deste evento enviaram cartas de intenção, demonstrando o interesse em desenvolver algum dos desafios apresentados durante o evento. Negociações junto à Financiadora de Estudos e Projetos (Finep) e à Fundação de Amparo à Pesquisa no Estado de São Paulo (FAPESP) sinalizam para o lançamento de um edital destinado ao financiamento empresas habilitadas para o desenvolvimento de 20 componentes previstos no projeto Sirius. A expectativa é que o edital seja anunciado no segundo semestre de 2014.



*Fluxograma de atividades para o desenvolvimento de parcerias para o projeto Sirius*



*Workshop Parcerias Sirius, no qual o projeto e seus principais desafios foram apresentadas a representantes de empresas brasileiras*

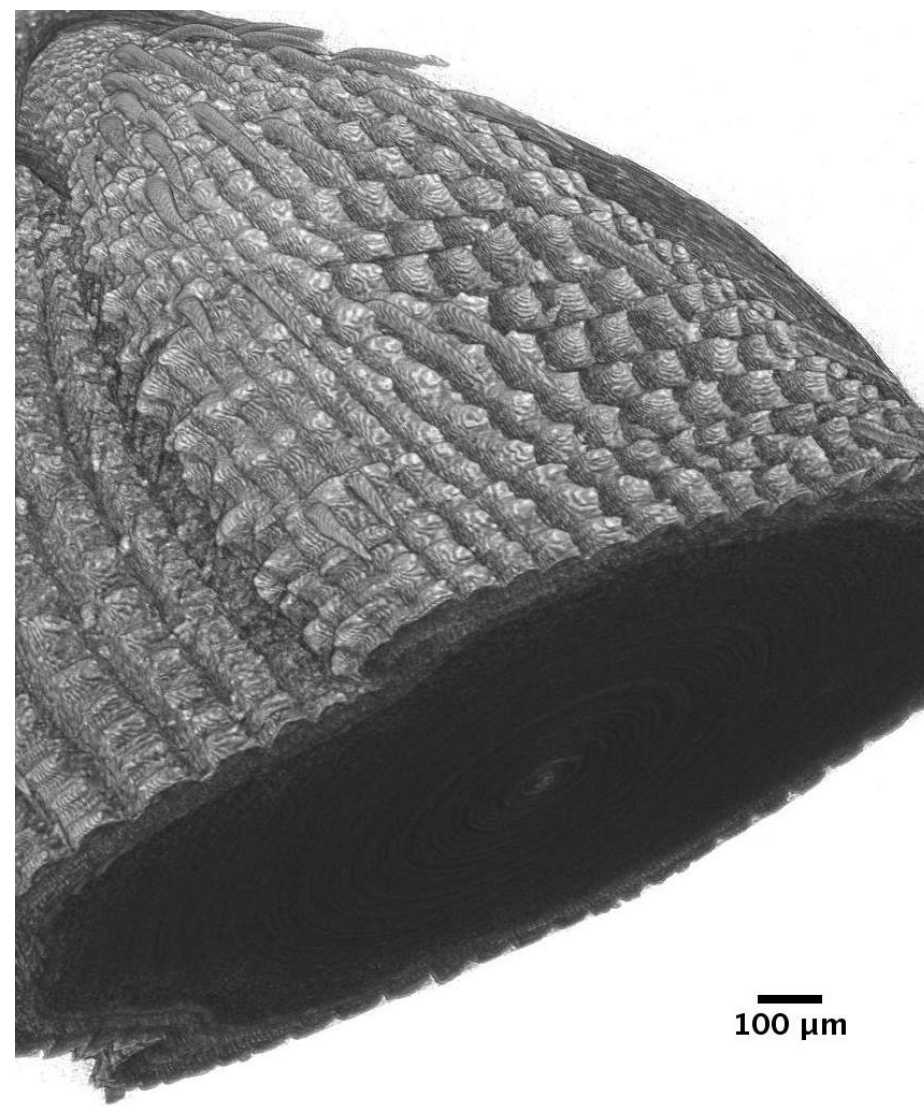
# ✦ Sirius: benefícios para a ciência em áreas estratégicas

Dadas as características da radiação produzida por síncrotrons de 4ª geração, não comparáveis às fontes de radiação convencionais, é possível criar uma variedade quase ilimitada de experimentos para a observação de características microscópicas da matéria com a radiação eletromagnética. Nos cerca de 50 síncrotrons em operação pelo mundo, pode-se observar aplicações para estender as fronteiras de praticamente todas as áreas do conhecimento científico dos materiais. Além disso, muitos dos novos síncrotrons de 3ª e 4ª geração foram criados com sustentação em casos científicos estratégicos para seus países de origem, buscando adequar suas instalações à investigação de certas áreas tecnológicas.

Um exemplo importante dessa estratégia para a área farmacêutica do Reino Unido ocorreu na construção do síncrotron britânico, o Diamond Light Source. Na sua implantação, esse laboratório recebeu mais de 14% de investimentos do *Welcome Trust*, o maior fundo britânico não governamental para pesquisas médicas, e que continua mantendo cerca de 14% dos custos de operação desta instalação. Tais investimentos contribuem para que o Reino Unido seja um dos líderes mundiais em ciência e tecnologia médica.

O Brasil é um dos poucos países do mundo que dominam a tecnologia de luz síncrotron e que tem a capacidade de construir um laboratório que se tornará um dos líderes mundiais na área. **Por meio de ferramentas de última geração para investigação microscópica da matéria, esta instalação, aberta aos pesquisadores dos meios acadêmicos e industriais, permitirá que o País fortaleça sua participação na ciência e tecnologia de áreas estratégicas.** Será apresentada a seguir uma breve descrição de como a radiação síncrotron em aceleradores de última geração foi utilizada para atacar problemas relacionados às áreas de agricultura, energia e saúde. O objetivo desta apresentação é mostrar como as ferramentas de investigação da matéria, disponíveis em um síncrotron de última geração, são capazes de sondar escalas de comprimento e de dinâmica microscópica da matéria, fornecendo informações valiosas para a construção de

soluções tecnológicas inovadoras para problemas práticos. Tais soluções passam necessariamente por investigações de questões científicas fundamentais que estão na fronteira do conhecimento da natureza. Essa combinação de ciência e tecnologia permitirá adquirir, ou mesmo recuperar, a liderança científica e tecnológica do País em algumas de suas maiores vocações.



*Renderização tridimensional de um grão de arroz, obtida a partir de microtomografia na linha IMX, instalada no anel UVX*



## Agricultura



*Plantação de soja no Rio Grande do Sul  
Crédito: Tiago Fioreze*

Assim como nas propriedades de materiais sintéticos mais simples e homogêneos, os processos químicos, físicos e biológicos que ocorrem em nível atômico e molecular no solo controlam a disponibilidade de nutrientes, transporte de poluentes, contaminação do solo e demais efeitos correlacionados. Dessa forma, se esses processos forem bem conhecidos e controlados, o ganho para produção agrícola mais eficiente e menos agressiva ao meio ambiente pode se tornar uma realidade.

O agronegócio representa cerca de 25% do Produto Interno Bruto (PIB) do Brasil. Além disso, o País, líder em produtividade na América Latina, apresenta índices acima da média mundial de desenvolvimento agrícola (grande parte desses avanços deve-se à pesquisa em aumento de produtividade pela Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária, Embrapa). No entanto, **os desafios para atingir a uma produção agrícola mais eficiente e menos poluente, considerando as particularidades geoquímicas pouco compreendidas dos solos tropicais, estão cada vez mais evidentes e carentes de técnicas analíticas avançadas.**

O LNLS já iniciou um intenso trabalho de popularização de técnicas de luz síncrotron na comunidade científica e tecnológica de ciências do solo com o uso do síncrotron de 2ª geração. Com o Sirius, será possível um avanço substancial nas técnicas de caracterização e levará a pesquisa de centros de pesquisa, como os da Embrapa, a outro patamar.

O solo pode ser visto como uma combinação sólida e heterogênea de compostos orgânicos e inorgânicos, imersos em soluções aquosas e em meio a raízes de plantas. Dada essa complexidade, é necessária uma grande variedade de técnicas analíticas de alta resolução (espacial e química), que possibilitem análises, de preferência *in situ*, para a compreensão de todos os processos

elementares que ocorrem no solo, desde a escala atômica até escalas micrométricas. Essas técnicas só são encontradas juntas em síncrotrons de última geração como o Sirius. As técnicas baseadas em luz síncrotron permitem a análise detalhada de composição química de soluções complexas aquosas; organização atômica em materiais de baixa cristalinidade; análise microscópica da interface sólido-líquido; modelagem atômica de interações entre minerais e a água e das interações entre plantas e metais pesados e nanomateriais; imagem detalhada de microrganismos presentes no solo e outros diversos fenômenos ligados a processos elementares no meio ambiente.

### **Solos e ambiente**

**Dentre os principais benefícios da tecnologia de análise microscópica por luz síncrotron para o agronegócio brasileiro está o desenvolvimento de novos fertilizantes, com maior eficiência agrônômica e menos nocivos ao meio ambiente e à saúde humana.** Fertilizantes são substâncias minerais ou orgânicas, naturais ou sintéticas, fornecedoras de um ou mais nutrientes requeridos para o crescimento e desenvolvimento de plantas. Eles constituem um dos principais insumos agrícolas e têm como fontes de matéria-prima produtos oriundos da petroquímica e da mineração. Destaca-se, por exemplo, a importância dos fertilizantes nitrogenados, fosfatados e potássicos, que constituem a mistura NPK.

Embora sua importância para o agronegócio seja um consenso, o conhecimento microscópico sobre o caminho físico-químico percorrido entre o fertilizante (na forma de grânulo, pó ou misturas) e a incorporação no metabolismo da planta ainda é insuficiente e altamente empírico, sem fundamentação precisa

nos mecanismos atômicos, moleculares e celulares envolvidos. Isso resulta no uso excessivo dos fertilizantes de forma ineficiente e, muitas vezes, nociva ao ambiente. Além disso, o Brasil ainda importa a maior parte dos fertilizantes que consome, cerca de 70% do total, segundo a Associação Nacional para a Difusão de Adubos (ANDA). O pouco que o Brasil produz é feito com insumos importados, já que nitrogênio, fósforo e potássio são amplamente importados no País. De fato, a importação de fertilizantes é um dos principais responsáveis pelo déficit da balança comercial de produtos químicos do País, que em 2012 atingiu o recorde de US\$ 28,1 bilhões.

A tecnologia de luz síncrotron é uma peça-chave no desenvolvimento agrícola. Ela pode contribuir para avanços tecnológicos no desenho racional de fertilizantes ao reduzir potencialmente a necessidade da sua importação, garantindo uma entrega mais racional e efetiva dos nutrientes, já que ele permite “enxergar” os caminhos físico-químicos do fertilizante até a planta.

Vale ressaltar que as linhas de luz do Sirius estão sendo projetadas para “iluminar e enxergar” de forma otimizada os elementos químicos (carbono, oxigênio, nitrogênio, fósforo, potássio, cálcio, magnésio e o enxofre) que compõem os macronutrientes das plantas e os microrganismos do solo. Na faixa de comprimentos de onda que melhor enxerga esses elementos químicos (os ditos “*soft and tender X-rays*”, de energias entre 300 eV e 4000 eV), o Sirius será a fonte de luz mais brilhante do mundo e colocará o Brasil em uma posição de liderança tecnológica nessa área. Para que se obtenha imagens de resolução e contraste cada vez melhores são necessárias fontes de raios X de dimensões menores e cada vez mais colimadas (daí a necessidade de um síncrotron de baixa emitância), além de óticas de microfocalização e detectores cada vez mais eficientes e rápidos. **Essas tecnologias, que estão sendo desenvolvidas no projeto Sirius, trarão oportunidades ímpares para o desenvolvimento do agronegócio brasileiro.**

**Nitrogenação:** Os exemplos da literatura que exploram o uso de técnicas de luz síncrotron na tecnologia de agricultura são relativamente escassos, se comparados às áreas mais clássicas da ciência dos materiais. Isso também representa uma janela de oportunidade científica para o Brasil assumir uma posição de liderança. Mais ainda, as respostas para boa parte dos problemas encontrados nas áreas estratégicas para o País, como energia, agricultura, saúde, petróleo e outras, estão intimamente relacio-

nadas a questões científicas fundamentais que envolvem a fronteira do conhecimento atual. Um desses exemplos está na transformação do nitrogênio do ar ( $N_2$ ) em amônia ( $NH_3$ ), forma com que as plantas podem absorver o nitrogênio. Importante componente das proteínas e da clorofila, o nitrogênio frequentemente é fator primordial no aumento da produtividade agrícola. Embora o  $N_2$  seja abundante na atmosfera, a forte ligação química tripla

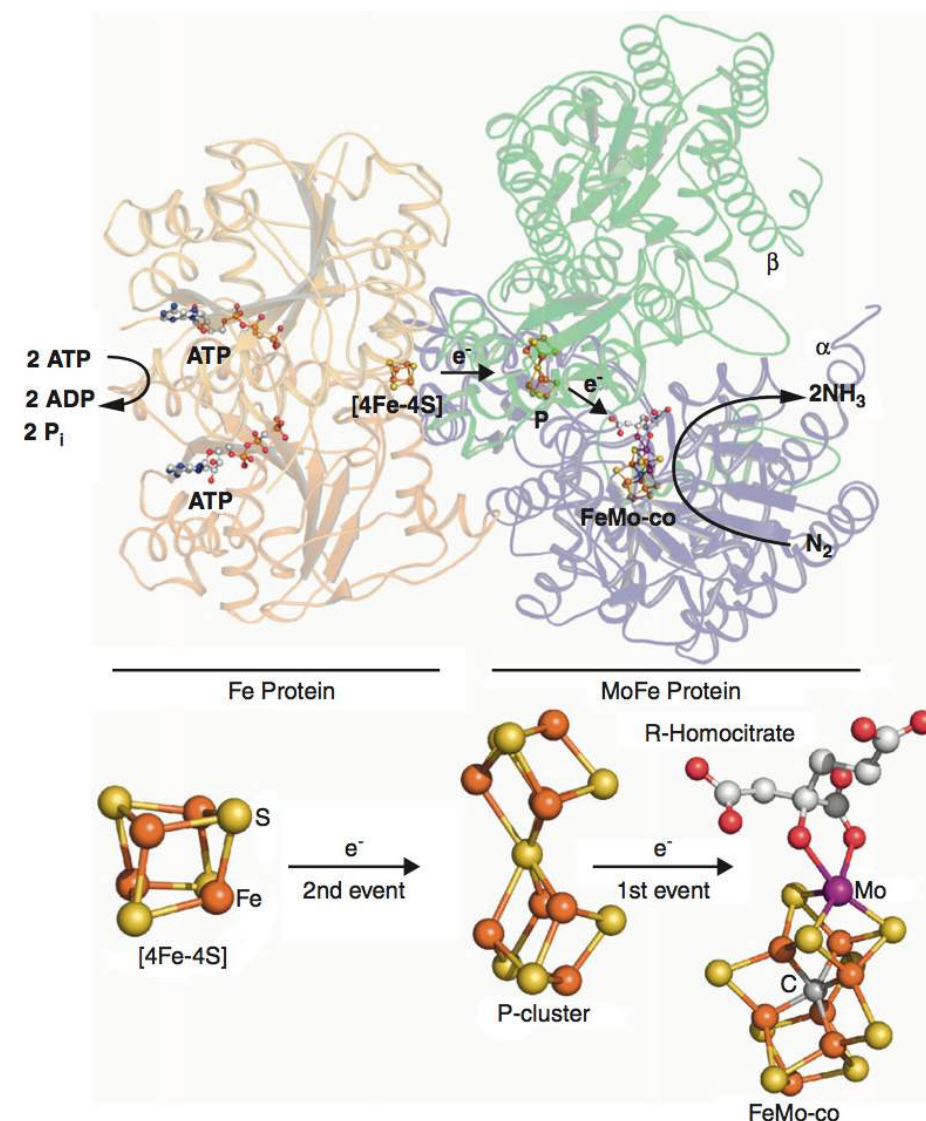


Figura 1 - Adaptado da referência [1]. Painel superior: Representação da nitrogenase e seus domínios obtida por cristalografia de macromoléculas. As setas e o caminho dos elétrons necessários para formação da amônia, desde o ATP até o cluster de FeMoco, onde supostamente a reação catalítica realizada pela enzima ocorre. Painel inferior: Cluster  $[4Fe-4S]$  da proteína Fe e o clusters P e o cofator FeMo-co da proteína MoFe. Fe (em laranja), S (em amarelo), C (em cinza), O (em vermelho), and Mo (em violeta)



que mantém os átomos de nitrogênio ligados os torna indisponíveis para absorção direta. A quebra eficiente dessa ligação é um dos maiores desafios da química moderna. Em escala industrial a produção de amônia é feita pelo processo Haber-Bosch, amplamente utilizado no mundo, que requer condições extremas de temperatura e pressão e consome estimadamente 1 a 2% da produção mundial de energia. No entanto, certas bactérias possuem enzimas, as nitrogenases, capazes de converter nitrogênio em amônia em condições ambientes. Conseqüentemente, há uma intensa busca científica pela compreensão do mecanismo pelo qual as nitrogenases realizam este feito,

Uma das nitrogenases mais estudadas são as que possuem molibdênio (Mo-nitrogenase). Essas nitrogenases contêm duas proteínas, uma que possui ferro com um *cluster* do tipo [4Fe:4S], usado na transferência de elétrons, e uma que contém molibdênio, com um *cluster* do tipo [8Fe:7S] (o cluster P), também usado na transferência de elétrons, e um *cluster* de ferro e molibdênio, (o cluster M, ou ferro-molibdênio cofator (FeMoco), mostrado na figura 1.

Os síncrotrons têm sido uma ferramenta essencial na elucidação da estrutura tridimensional do arranjo dos átomos que compõem as partes destas enzimas, ao longo das últimas décadas. Um dos principais experimentos, evidenciam os misteriosos mecanismos pelos quais estas enzimas quebram o  $N_2$ , é a cristalografia de macromoléculas, disponível, com limitações, no anel UWX do LNLS, e que será disponível na linha Manacá, de última geração, no Sirius.

Destaca-se também a espectroscopia de raios X de alta resolução, que poderá ser realizada na linha Ingá. No passado, a estrutura revelada por cristalografia de macromoléculas demonstrou a existência de um arranjo de sete átomos de ferro e um de molibdênio ligados por átomos de enxofre, formando uma cavidade de aproximadamente 4 Å de diâmetro com algum átomo leve. Embora outros experimentos com variantes genéticas da nitrogenase, deficientes de FeMoco, sugerem que este sítio é o responsável pela reação catalítica da nitrogenase, por muito tempo a natureza deste átomo leve permaneceu desconhecida. Um experimento de espectroscopia de emissão de raios X<sup>[1]</sup>, feito no síncrotron de Stanford, nos EUA, em 2011, revelou de forma clara que o átomo misterioso é um átomo de carbono. Dessa forma, o primeiro passo para o entendimento do funcionamento dessa enzima, a descrição completa de sua estrutura atômica, se completou.

Embora muito se saiba sobre esta estrutura, ainda não há um consenso sobre os mecanismos das nitrogenases. Só com este conhecimento será possível dominar um processo mais eficiente para as nitrogenases - algo que a humanidade, e em particular o Brasil, depende muito. Dessa forma, a exemplo dos grandes passos dados com o conhecimento derivado em síncrotrons, ferramentas mais precisas de investigação, como o Sirius, guiarão os próximos passos dos cientistas nesta área.

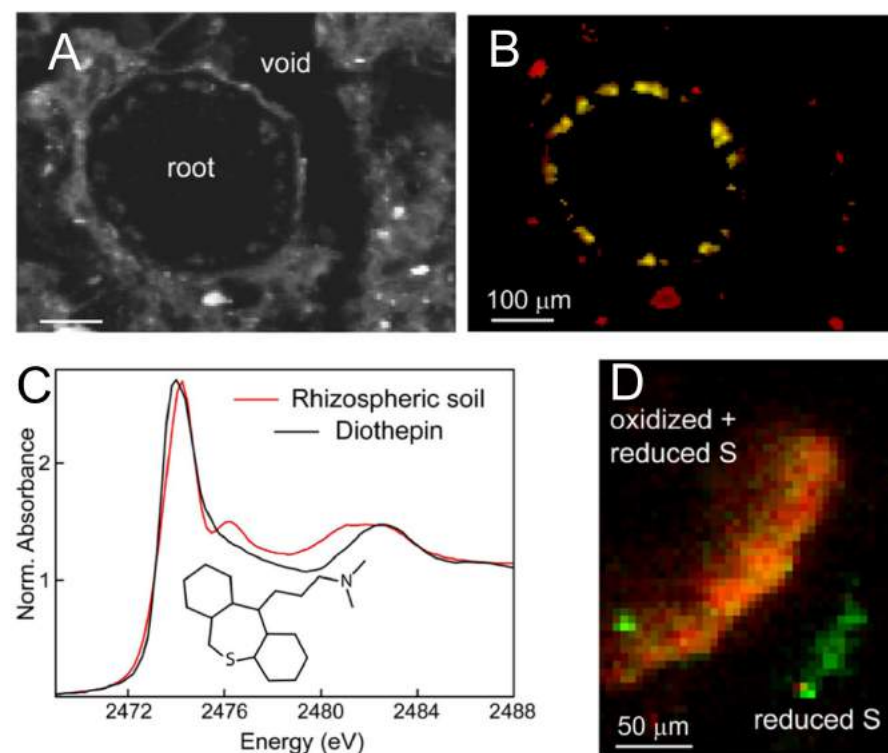


Figura 2 - Adaptado da referência[2]. Distribuição e especiação do enxofre (S) na rizosfera. (A) Imagem de corte transversal de uma raiz e do solo a sua volta com contraste dado pela concentração de S (branco). (B) Mesma imagem em mapa bicolor mostra a concentração relativa de S (vermelho) e Ca (amarelo); (C) espectro de XANES do enxofre heterocíclico compatível com a forma reduzida do enxofre na rizosfera. (D) Mapa bicolor de especiação de enxofre (em zoom) em uma região de valência mista, determinado pela concentração relativa de espécies oxidadas (vermelho) e reduzidas (verde)

**Rizosfera:** Bactérias que possuem este tipo de nitrogenase, e outras enzimas capazes de transformar os estados de oxidação de elementos químicos para que eles se tornem biodisponíveis para planta, em geral ficam onde o solo e as raízes das plantas entram em contato, a chamada rizosfera. O mapeamento químico de alta resolução espacial desta região, *in situ*, só pode ser realizado por técnicas de luz síncrotron, a melhor forma de entender esses pro-

cessos bioquímicos no seu ambiente natural. Um exemplo deste tipo de mapeamento quantitativo da rizosfera foi realizado no síncrotron de Berkeley<sup>[2]</sup> e é apresentado de forma adaptada na figura 2. Neste mapeamento por  $\mu$ XANES, que estará disponível nas linhas Ema e Carnáuba com resolução de 10 a 100 vezes melhor, é possível ver que a região da rizosfera é mais heterogênea e complexa que o próprio solo, com uma forte variação na valência química dos macronutrientes embebidos no solo. Essas imagens evidenciam o papel dos microrganismos, próximos à raiz, de transformar, por meio de fertilizantes, os macronutrientes de formas químicas disponíveis em formas que as plantas possam absorver, além de guiar de forma clara o desenho de novas formas de fertilização de plantas.

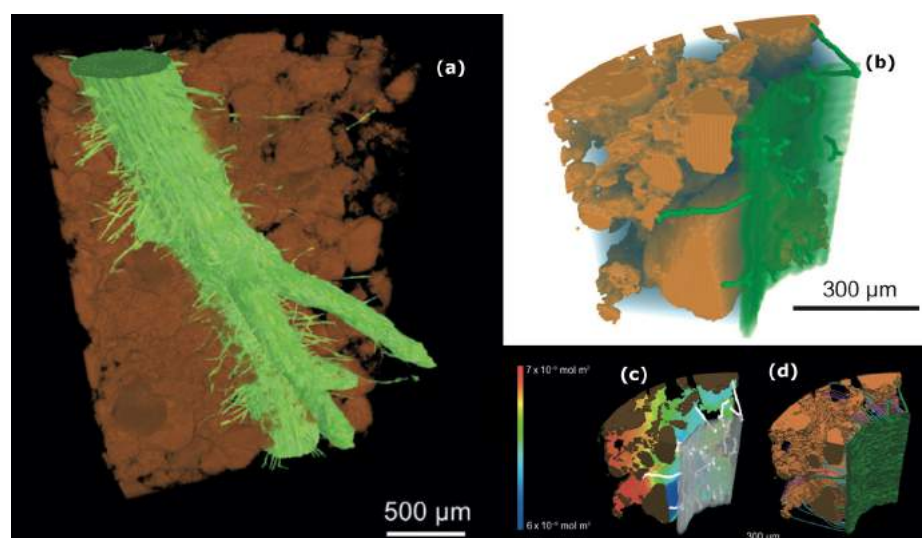


Figura 3 – Adaptado da referência [3] (a) Renderização 3D da raiz de trigo e o solo em volta. (b) Região selecionada digitalmente da rizosfera para simulação da assimilação de fósforo. (c) e (d) Simulação de concentração superficial de fósforo e linhas de corrente mostrando os caminhos de transporte de fósforo do solo para a raiz e para os pelos da raiz

Além da população de bactérias na rizosfera, a estrutura da raiz de uma planta no contato com o solo é também um dos fatores que determina sua capacidade de assimilar nutrientes do solo. Assim, em particular, a eficiência de absorção de fósforo, que é um dos fatores limitantes do crescimento da planta, está intimamente ligada à esta estrutura de ramificação (pêlos) das raízes na região absorvedora. Essas estruturas podem ser favorecidas por técnicas de melhoramento genético, desde que se conheça qual estrutura 3D de pelos favorece a assimilação de nutrientes, para cada tipo de solo. Este tipo de estudo foi feito recentemente<sup>[3]</sup> no síncrotron da Suíça, o SLS, utilizando microtomografia de raios X para obtenção de uma

imagem 3D de alta resolução *in situ* de uma raiz de trigo e do solo ao seu redor, como apresentado na figura 3. Os volumes digitais de pelos e poros foram então utilizados para modelar o transporte de fósforo para as estruturas da raiz. Este tipo de estudo pioneiro, poderá ser feito nas linhas de tomografia do Sirius, Mogno (em mais alta resolução) e Jatobá (com maior capacidade de penetração em amostras maiores), permitirá modelagens de como diferentes tipos de raízes interagem com solos de diferentes porosidades e de como a região da rizosfera é influenciada por essas ligações. Esse conhecimento guiará melhoramentos genéticos, os quais são realizados hoje de forma semiempírica.

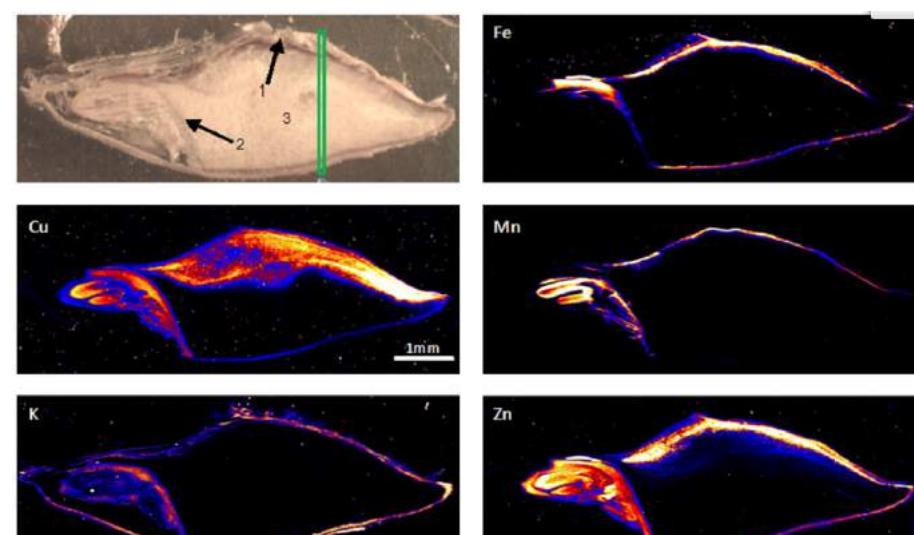


Figura 4 – Adaptado da referência [4]. Mapeamento elementar por microfluorescência de raios X de uma seção longitudinal de um grão de cevada. A escala de cores representa diferentes concentrações de elementos químicos, com preto e branco correspondendo a menor e maior concentrações, respectivamente. As setas indicam: 1, arista; 2, testa; e 3, aleurona

### Alimentos e nutrição

Passando do solo para as plantas propriamente ditas, **a análise de distribuição de nutrientes nos vegetais é um elemento chave para compreensão da concentração, biodisponibilidade e localização de nutrientes nos alimentos.** A biodisponibilidade é importante para que o nutriente seja, de fato, absorvido pelo organismo, enquanto a localização é fundamental para cereais processados antes do consumo.

**Nutrientes em cereais:** Entender a distribuição espacial dos nutrientes nos cereais permite otimizar a suas moagens e aumentar o valor nutricional de alimentos processados, sem aumento



de custo. Na figura 4 da referência<sup>[4]</sup> o mapeamento de micronutrientes na cevada, obtido por microfluorescência de raios X, é representado por um mapa de cores para cada elemento químico, com uma resolução espacial de  $1,25 \mu\text{m} \times 1,25 \mu\text{m}$ . O uso de um feixe intenso de microfoco na linha de luz de microfluorescência do síncrotron australiano, aliado ao uso do detector Maia<sup>[5]</sup> permitiu a aquisição de imagens de 18,4 Mpixel, em aproximadamente 3 horas. O brilho que será atingido na linha Ema do Sirius permitirá um ganho de tempo de pelo menos uma ordem de magnitude neste tipo de mapeamento.

É importante notar que um dos grandes desafios neste tipo de medida em amostras mais espessas é a auto-absorção dos raios X fluorescentes, que torna a análise quantitativa mais imprecisa para elementos químicos leves (os macronutrientes tipo P, S, K e Ca). Isso porque os raios X de baixa energia, emitidos por estes elementos químicos, são facilmente absorvidos pelo ar presente entre a amostra e o detector e pela própria amostra. O uso da técnica de espalhamento Raman de raios X, que será implementada na linha Ingá, poderá resolver este tipo de problema de forma mais efetiva, já que os raios X incidentes e espalhados podem ter altas energias. A detecção dos elementos químicos leves, neste caso, é feita pela análise da perda de energia dos raios X incidentes, produzida pelo fenômeno de espalhamento inelástico.

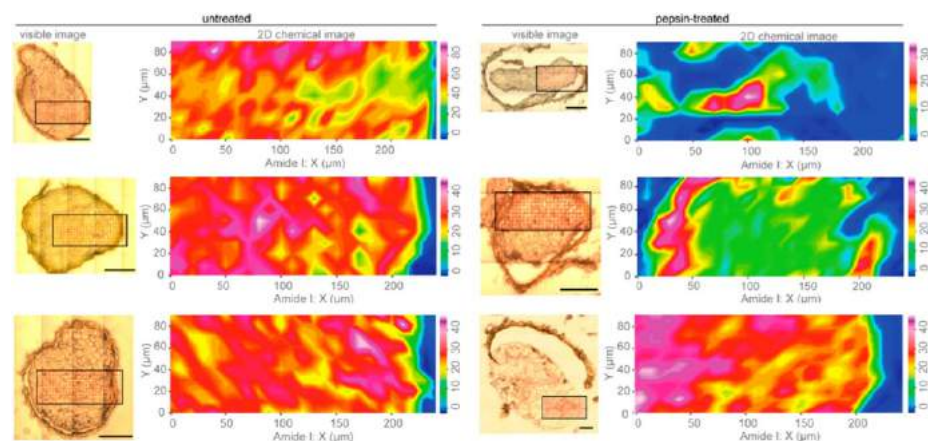


Figura 5 – Adaptado da referência<sup>[6]</sup>. Imagens de microscópio óptico (barra de escala =  $100 \mu\text{m}$ ) e imagens de composição química de FTIR síncrotron de sementes silvestres não tratadas e tratadas por pepsina (superior), CRUAbc (centro), CRUaBc (inferior). Imagens de composição química foram obtidas via integração do pico  $1650 \text{ cm}^{-1}$  (Amida 1). Escala de intensidade química refere-se a absorvância de infravermelho; valores mais altos indicam concentração de bipolímero

**Nutrientes em transgênicos:** Elementos essenciais da nutrição, como proteínas e lipídios, também podem ser localizados por técnicas de imagem com luz síncrotron. No entanto, por envolverem elementos químicos leves (C, N, O, H) e por se distinguirem mais pelas ligações químicas entre esses elementos do que pelas suas concentrações elementares, é possível identificar esses componentes pelo espectro de vibração das ligações químicas na região do infravermelho. Este tipo de medida, em um síncrotron de 4ª geração, resulta em imagens com melhores resolução e contraste e com menor ruído, graças ao seu alto brilho também nesta região do espectro, como demonstra o exemplo a seguir.

A biodisponibilidade do conteúdo proteico de sementes de crucíferas geneticamente modificadas, utilizadas na fabricação de óleo vegetal, é um assunto de grande importância na área de nutrição. Recentemente, este tema foi abordado<sup>[6]</sup> com o uso da técnica de FTIR (*Fourier Transform Infrared Spectroscopy*), como a que estará disponível na linha Imbúia. Neste trabalho a técnica de FTIR foi utilizada para observar microscopicamente a susceptibilidade das proteínas de sementes nativas e modificadas à ação da pepsina (enzima digestiva secretada pelo suco gástrico), como mostrado na figura 5. Esta susceptibilidade foi avaliada pelas diferenças da estrutura secundária das proteínas, antes e depois do tratamento dos tecidos por pepsina, dentro de uma célula da semente, sem necessidade de extração. De fato, o espectro de FTIR é bastante sensível às mudanças de estrutura secundária das proteínas que, por sua vez, afetam a forma com que a pepsina se acopla e desintegra as proteínas. Dado o extenso uso de transgênicos hoje em dia, suas vantagens e impactos precisam ser profundamente estudados neste nível microscópico para que seja possível um uso adequado de tais tecnologias.

### Nanotecnologia e meio ambiente

Atualmente, as implicações ambientais da presença de nanopartículas no meio ambiente são um assunto de extrema importância, que tende a crescer nos próximos anos. Os síncrotrons são instrumentos essenciais nesse tipo de avaliação sistemática, pois combinam o poder de penetração dos raios X, que permite enxergar “dentro dos vegetais”, com resolução espacial suficiente para observar estas pequenas inclusões de dimensões nanométricas. A presença de pequenas partículas inorgânicas em vegetais pode ocorrer por motivos de contaminação do meio ambiente ou podem ser um mecanismo de armazenamento de nutrientes ou defesa da própria planta. Exemplos de uso de técnicas de luz síncrotron nestes casos serão apresentados a seguir.

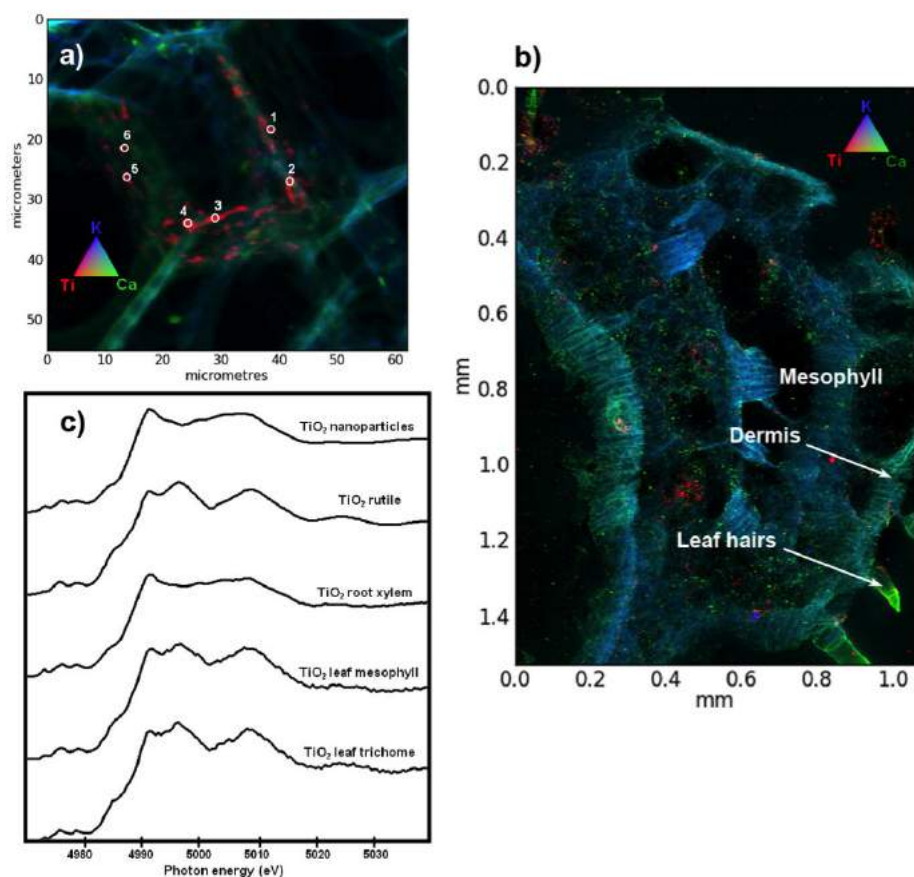


Figura 6 – Adaptado da referência [7]. (a) Mapeamento elementar por microfluorescência de raios X dos canais de transporte da raiz do pepino tratado com 750 mg  $\text{TiO}_2$  NPs  $\text{kg}^{-1}$ . A escala de cores representa diferentes concentrações de elementos químicos (Ti em vermelho, Ca em verde e K em azul), com preto e branco correspondendo a menor e maior concentração, respectivamente. (b) Mapeamento semelhante feito na folha do pepino (c) Espectro de XANES de formas cristalograficas de  $\text{TiO}_2$  de referência comparados com a raiz e a folha

**Nanopartículas no meio ambiente:** O uso de nanopartículas em bens de consumo se dá em escala cada vez maior devido a vantagens tecnológicas. A incorporação desses objetos no meio ambiente é inevitável. **Embora a existência de nanopartículas em plantas seja um fenômeno natural, sua incorporação artificial deve ser bem compreendida por meio de instrumentos adequados.** As nanopartículas de dióxido de titânio ( $\text{TiO}_2$ ), por exemplo, são utilizadas em diversos processos

das indústrias de cosméticos, tintas e protetores solares, entre outras. Com quase 10.000 toneladas produzidas por ano, sua incorporação ao meio ambiente pode ser um problema em potencial. Foi o que demonstrou um trabalho recente<sup>[7]</sup>, utilizando a técnica de  $\mu\text{XRF}$  e  $\mu\text{XANES}$  no síncrotron europeu (ESRF), onde foram estudados a transferência e o acúmulo de nanopartículas de  $\text{TiO}_2$  em tecidos de frutos de pepino. Nessa transferência, apresentada na figura 6, as nanopartículas passaram pela planta sem mudanças estruturais. No entanto, essa incorporação afetou a estrutura de algumas macromoléculas, como lipídios, proteínas e carboidratos, como evidenciado por FTIR. Embora as medidas de FTIR não tenham sido sistemáticas a ponto de se entender as consequências de biodisponibilidade e nutrição, como do estudo apresentado na figura 5, este é um exemplo de possível transferência de nanopartículas para a cadeia alimentar por meio de produtos agrícolas que deve ser bem compreendido.

**Nanopartículas sintetizadas por vegetais:** A ocorrência natural de nanopartículas inorgânicas em várias espécies de plantas também é um fenômeno de grande importância na agricultura, principalmente no que diz respeito ao processa-

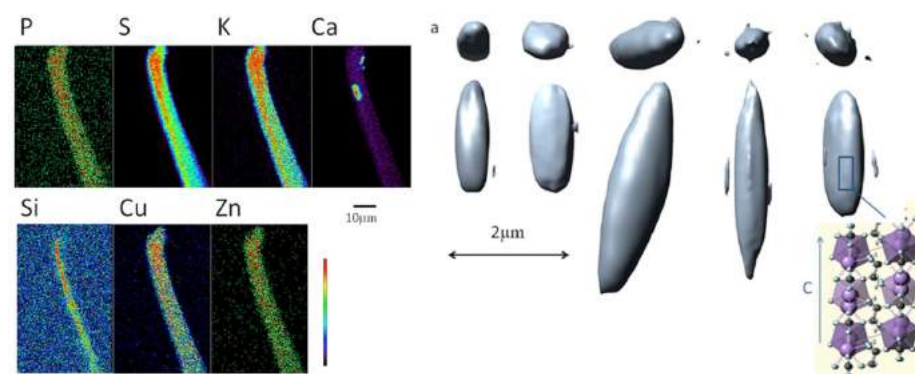


Figura 7 – Adaptado da referência [8]. Mapeamento elementar por microfluorescência de raios X do caule de milho e imagem 3D dos nanocristais de oxalato de cálcio. A escala de cores representa diferentes concentrações de elementos químicos. Nota-se que o cálcio está bastante concentrado na forma de partícula sub-micrométrica. Iso-superfície de densidade eletrônica representando a estrutura 3D dos nanocristais de oxalato de cálcio obtidas por BCDI com zoom representando a estrutura atômica dos nanocristais



## Energia



*Plataforma de petróleo em Angra dos Reis  
Crédito: Glauco Umbelino*

mento de biomassa para produção de combustíveis e produtos químicos. Essas inclusões, ao contrário dos casos de contaminação apresentados no item anterior, são ocorrências naturais, sintetizadas pela própria planta com o propósito de armazenamento de certos elementos químicos, defesa contra patógenos ou herbívoros ou até como função estrutural. O detalhamento dessas estruturas submicrométricas em estado natural, em geral, é bastante difícil, já que elas encontram-se embebidas na estrutura de fibras das plantas. Por outro lado, removê-las para realização de imagens pode criar alterações morfológicas em suas estruturas.

Uma técnica nova, disponível apenas em síncrotrons de 3ª e 4ª geração, permite modificar esse cenário e fazer imagens 3D de nanocristais incrustados em meio vegetal, com especificidade estrutural, sem necessidade de remover essas nanopartículas das plantas que as sintetizaram. Isso foi demonstrado recentemente<sup>[8]</sup> em um experimento realizado no síncrotron de Argonne nos EUA (o APS).

O experimento vale-se de uma técnica de imagem que utiliza contraste por difração de Bragg coerente. A técnica explora o fato de que todos os picos de Bragg de uma estrutura cristalina guardam informação da forma do cristal, desde que o comprimento de coerência da radiação seja grande o suficiente. Esta será uma das técnicas disponíveis na linha Carnaúba. Para que esta técnica seja possível é necessário que o feixe seja focalizado em regiões submicrométricas, mantendo uma baixa divergência, ao mesmo tempo. Esta é uma combinação que necessariamente requer baixa emitância como a do Sirius.

Na figura 7 é apresentado o mapeamento químico de componentes do caule, obtido por  $\mu$ XRF, e determinação estrutural das nanopartículas sintetizadas pelo milho obtida por BCDI, conforme publicado na referência<sup>[8]</sup>. Os nanocristais observados são de oxalato de cálcio, encontrados em muitas plantas tropicais e extremamente venenosos. Esses cristais são os principais depósitos minerais em plantas, e acreditava-se que eles eram encontrados apenas nas suas folhas. Neste experimento, com o uso de raios X coerentes, demonstrou-se não apenas sua existência, mas também o tamanho e formato destes nanocristais no caule das amostras de milho. Considerando o uso de biomassa para produção de etanol de segunda geração, ou mesmo para produção de materiais derivados de biomassa, esse tipo de caracterização é importante para guiar estratégias de processos industriais para purificação de produtos.

O conhecimento científico adquirido das ciências físicas, até o presente, deu à humanidade habilidades para manipular a matéria em níveis quântico, atômico e molecular. Não obstante, a civilização cresceu tão dependente de energia, que tais habilidades, agora, são a maior esperança para a transposição dos maiores desafios dessa era: a disponibilidade de energia abundante, limpa e barata. Esse é um dos maiores gargalos de desenvolvimento tecnológico, inclusive de países em desenvolvimento como o Brasil. Mesmo considerando fontes renováveis de energia, como os biocombustíveis, o grande uso de recursos hídricos na agricultura remete a um problema energético, já que o processo de dessalinização ainda requer muita energia<sup>[9]</sup>.

**Novos materiais, mais inteligentes e funcionais do que os materiais já disponíveis, serão necessários para converter biomassa em combustíveis e para canalizar de forma eficiente fontes de energia abundantes e limpas, como a energia luminosa do sol, energia cinética dos ventos ou energia potencial dos recursos hídricos.** Novos materiais para armazenar eletricidade, para ajudar na obtenção e uso mais eficiente de combustíveis fósseis e para reciclar o dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) também serão necessários. Com efeito, o controle de propriedades eletrônicas e a catálise de reações químicas para conversão de biomassa em combustíveis ou da luz em eletricidade requerem a coordenação de muitos processos microscópicos, que são controlados por meio de materiais e superfícies arquitetadas em nível atômico e molecular, utilizando princípios revelados pelas ciências básicas.

Muitas vezes esses processos podem ser desenhados inspirados na própria natureza que, por meio da evolução, teve bilhões de anos para depurá-los. No entanto, seja qual for a fonte de inspiração, ferramentas para enxergar em detalhe as interações en-

tre partículas elementares, como fótons e elétrons, as ligações químicas e suas escalas naturais de comprimento e tempo são imprescindíveis. As linhas de luz dos síncrotrons de 3ª e 4ª geração formam o conjunto essencial dessas ferramentas.

### Petróleo e gás natural

#### Um dos maiores desafios na exploração de óleo e gás em águas profundas é a compreensão das propriedades mecânicas e de transporte de materiais altamente heterogêneos, sob os quais são encontrados o óleo e o gás<sup>[10,11]</sup>.

Modelos microscópicos confiáveis para propriedades mecânicas e de transporte das rochas, baseados em tomogramas, são base para parâmetros fenomenológicos de equações constitutivas relacionadas ao comportamento macroscópico dos fáceis geológicos nas várias fases de exploração. No mapeamento sísmico, modelos de resposta mecânica que consideram a heterogeneidade cristalográfica e química das rochas carbonáticas, sua porosidade em múltiplas escalas de comprimento e a interação com os fluidos em seu interior são base para uma interpretação mais realista dos mapas sísmicos<sup>[12]</sup>. Na perfuração de poços, a previsão teórica da plasticidade das camadas de evaporitas e sua interação com os fluidos de perfuração estão entre os maiores desafios de exploração<sup>[13]</sup>. A heterogeneidade dos geomateriais, bem como suas propriedades multifásica e multiescala, exigem um conjunto de técnicas experimentais distintas que permitam a conexão entre a escala micro e a macroscópica, incluindo a possibilidade de medidas em diferentes condições de pressão e temperatura. Tomografia utilizando luz síncrotron tem se mostrado uma importante ferramenta para esse fim.

**Rochas carbonáticas e areníticas:** Os parâmetros elásticos de dispersão e atenuação usados na interpretação de propagação de ondas sísmicas em reservatórios carbonáticos são, hoje em dia, obtidos a partir da microestrutura das rochas, a qual é obtida por microtomografia de raios X computadorizada (micro XCT), combinada com ensaios mecânicos em laboratório (*digital rock e elastic up-scaling*). Uma tese recente defendida por de Paula<sup>[12]</sup> utilizou uma combinação de técnicas de micro XCT para medir a distribuição de poros e sua conectividade 3D, microscopia eletrônica e nano-indentação para medir distribuição de fases e propriedades elásticas, o trabalho ilustra esse princípio. Os conhecimentos obtidos pela análise dos resultados experimentais foram, posteriormente, utilizados para otimizar modelos de

simulação das propriedades elásticas de rochas carbonáticas. O modelo de dupla porosidade<sup>[14]</sup> (poros rígidos e poros maleáveis) foi empregado e foram previstas as velocidades de compressão e cisalhamento em rochas carbonáticas, a partir de suas microestruturas. Essa mesma abordagem também foi aplicada com sucesso em rochas areníticas<sup>[15]</sup>.

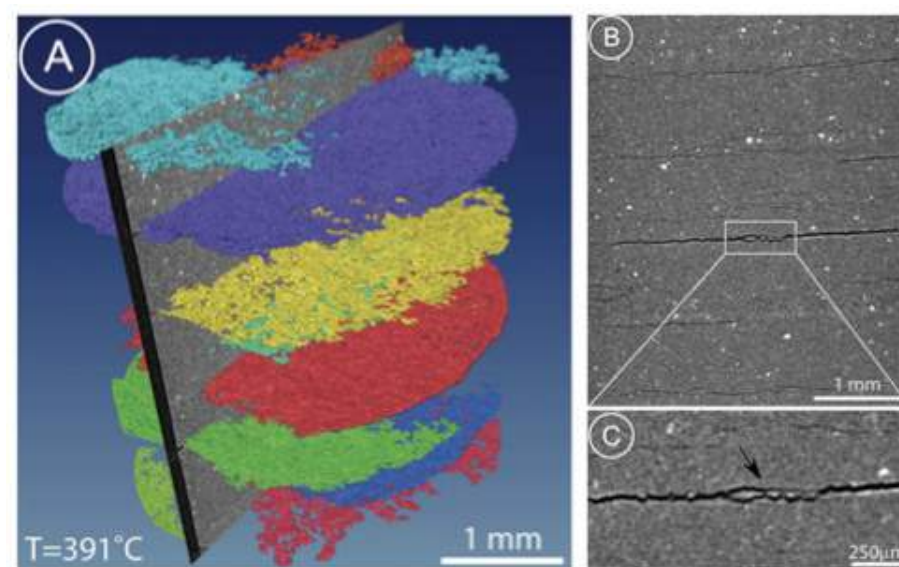


Figura 8 - Adaptação das referências [22,23] - Imagens por tomografia feitas no síncrotron europeu ESRF de uma amostra de xisto da Statoil, a 391°C, no momento de abertura das fraturas (a) Renderização 3D da rede final de fraturas. Cada cor representa uma fratura que cresce independentemente (b) fatia 2D mostrando (em cor mais escura) fraturas alongadas que se desenvolvem paralelamente (c) Detalhe da figura B mostrando a fratura se nucleando ao redor de um grão de pirita. (seta)

O uso de técnicas de tomografia de raios X em síncrotrons para análise de transporte de fluidos em meios porosos, aplicado a óleo e gás, iniciou-se em um trabalho de pesquisadores da ExxonMobil<sup>[16-19]</sup>. Mais recentemente, o uso de micro-XCT de síncrotron foi explorado em um projeto financiado pela Shell para estudar o óleo residual em rochas areníticas<sup>[20]</sup>, algo importante para processos de recuperação avançada ou mesmo para sequestro de CO<sub>2</sub><sup>[21]</sup>

Além das vantagens mencionadas do uso de fontes síncrotron em tomografia por raios X em 3D, o alto fluxo permite uma alta resolução temporal, no que é chamado atualmente de tomografia 4D. Essa técnica vem sendo explorada pela Statoil<sup>[22,23]</sup> em síncrotrons de 3ª geração, para a compreensão da formação de microrachaduras durante o processo de craqueamento do xisto conforme apresentado na figura 8.



**Evaporitas:** A perfuração de poços na região do pré-sal passa por camadas de evaporitas que, sob pressão e altas temperaturas, adquirem grande fluência mecânica (*creep*) e solubilidade<sup>[11,13,24]</sup>. O alto poder de resolução de tomografia de raios X em síncrotron foi utilizado para investigar os mecanismos de *creep* e mudança de permeabilidade em rochas de Halita<sup>[25]</sup> (figura 9).

Um dos grandes desafios na recuperação avançada de óleo e gás é compreender os mecanismos elementares de percolação de fluidos imiscíveis em meios porosos. Um experimento recente<sup>[26]</sup> feito em colaboração entre a Shell e o síncrotron da Suíça, poderá mudar a forma de modelamento computacional da passagem de água e óleo em meios porosos. Óleo e gás são, tipicamente, aprisionados em pequenos poros de rochas sedimentares, nos quais os modelos tradicionalmente aplicados para descrever o fluxo macroscópicos simultâneo de fluidos imiscíveis não se aplicam. Neste novo experimento, realizado em uma linha de luz de alta energia e alto fluxo, como serão as linhas Mogno e Jatobá do Sirius, foram adquiridas tomografias completas em cerca de poucos segundos que, juntas em um filme de alguns minutos, evidenciam os chamados Haines

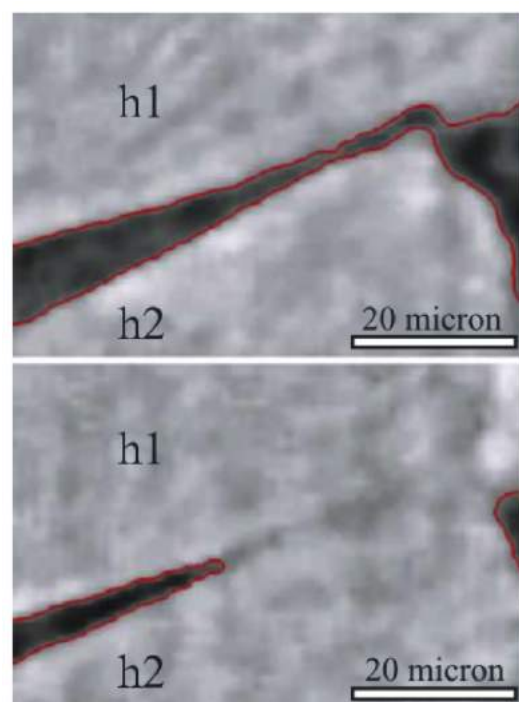


Figura 9 – Seção tomográfica mostrando a fusão de grãos de halita (mineral dominante da camada de sal do pré-sal) sob pressão (extraído da referência<sup>[25]</sup>)

jumps, que são mudanças abruptas na forma como os fluidos se movem através dos poros da rocha. A principal conclusão deste experimento é que, ao contrário do assumido nos modelos atuais, as variações abruptas de pressão não ocorrem pelo preenchimento de poros isolados, mas sim por uma cascata de preenchimento de dezenas de poros, como apresentado na figura 10. **Descobertas como essa, que só podem ser realizadas em síncrotrons de última geração, como o Sirius, têm um grande potencial para favorecer as modelagens computacionais de recuperação avançada de óleo e gás.**

Várias das linhas do Sirius terão impacto significativo na construção de modelos de rocha digital. Na linha Jatobá (micro-XCT de alta energia) será possível atingir energias de até 250 keV com fluxos milhões de vezes superiores aos dos geradores convencionais. Isso permitirá análise tomográfica de amostras muito maiores em tempos muito menores, possibilitando a aplicação de tomografia 4D na área de transporte de fluidos em meios porosos com resolução temporal de segundos. Por outro lado, as maiores limitações de aplicabilidade de modelos digitais de microestrutura de rochas residem na informação adquirida por micro-XCT.

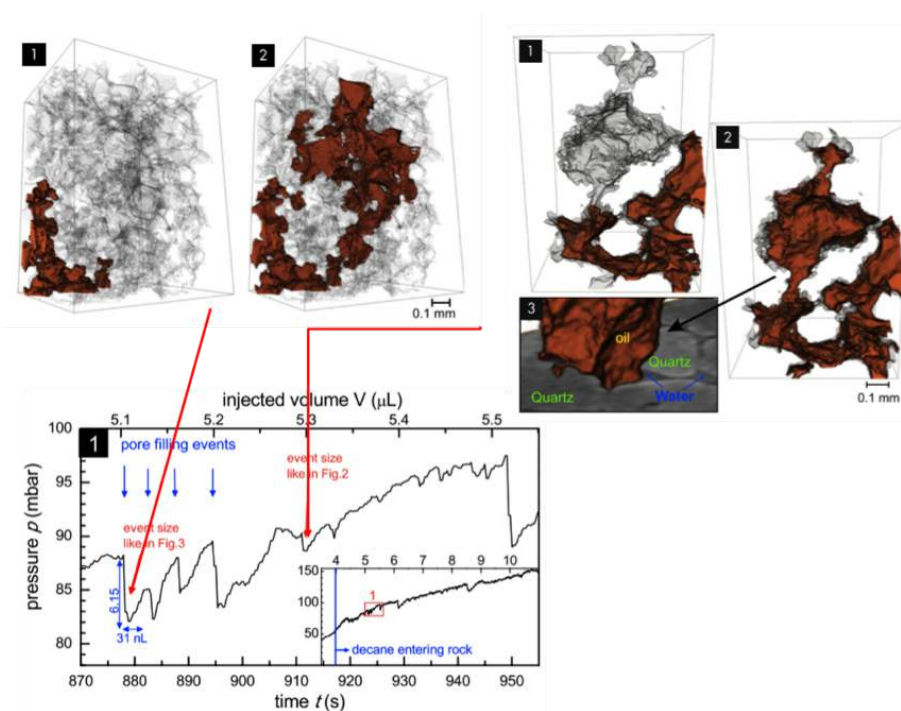


Figura 10 – Eventos singulares detectados pela tomografia 4D (adaptado da referência <sup>[26]</sup>) que evidenciam os chamados Haines jumps, associando as variações abruptas de pressão com o preenchimento de uma rede de poros da rocha em tempo real

Como a maior parte dos poros maleáveis ficam entre grânulos da rocha, seus tamanhos são tipicamente inferiores a 100 nm e não conseguem ser detectados por tomografia convencional. Como a resposta mecânica desses poros é muito mais significativa, sua descrição microscópica fiel é imprescindível. Com as linhas Mogno (micro e nano-XCT) e Jatobá (micro-XCT de alta energia), será possível uma maior capacidade de penetração em amostras e também resoluções melhores que 10 nm. Além disso, em tomografia convencional por absorção, a diferenciação entre grãos de diferentes fases cristalográficas é baixa, uma vez que sua absorção é semelhante. Com o uso de técnicas de tomografia por difração, disponíveis na linha Carnaúba (nano-XRD) essa limitação poderá ser vencida, construindo modelos digitais microestruturais com melhor segmentação entre diferentes mineralogias. A tomografia direta com contraste de espalhamento Raman, que estará disponível na linha Ingá, poderá revelar detalhes tomográficos com especificidade química da interação rocha-fluído. Para localização de frações de asfaltenos nos poros, pode-se usar a ressonância do enxofre, por exemplo, já que essa é a única componente do petróleo que possui enxofre covalente. No estudo de evaporitas, a diferenciação química entre diferentes sais poderá revelar suas diferentes interações com o fluido de perfuração. Esses estudos de espectroscopia com resolução submicrométrica na linha Ema poderão ser combinados com os de tomografia para dar informação completa sobre as rochas carbonáticas e seus fluidos.



Figura 11 - Asfaltenos, conhecidos como “colesterol do petróleo”, tendem a precipitar e se depositar em superfícies, causando o bloqueio de tubulações de poços de exploração de petróleo

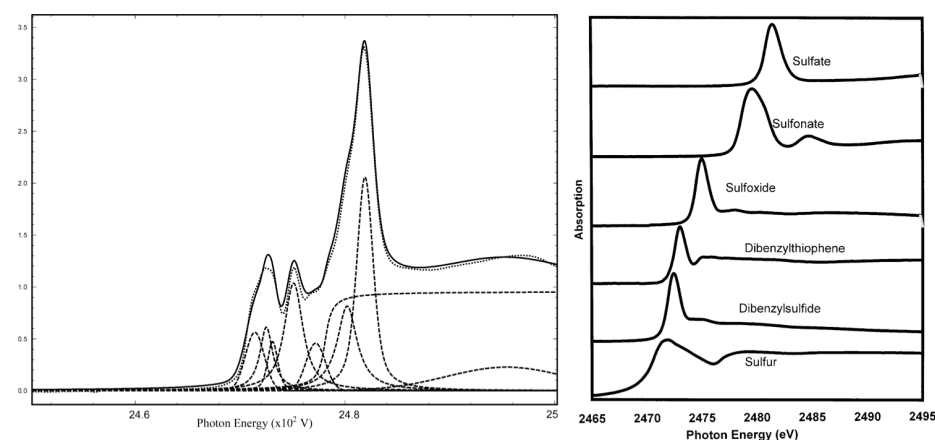


Figura 12 - Adaptado da referência [32]. Decomposição do espectro de um querogênio do tipo I em compostos modelos elementares. À esquerda: espectro de XANES de uma amostra de querogênio decomposto em seus componentes elementares (direita) como pirita, sulfidas orgânicas, tiofeno, sulfóxidos, sulfonatos e sulfatos

**Micro e nanoestrutura do petróleo:** Na caracterização do petróleo como fluido complexo, os síncrotrons de alto brilho são ferramentas essenciais. Aliás, o termo petroleômica foi introduzido por Oliver C. Mullins, da Schlumberger, e seus colaboradores<sup>[27]</sup>, em analogia aos projetos de genômica e proteômica em biologia estrutural fundamentada em experimentos de síncrotrons. A base é o paradigma introduzido por Francis Crick, ganhador de um prêmio Nobel pela resolução da estrutura do DNA: “Para compreender a função, estude a estrutura”. Essa é a base de toda área de biologia estrutural. Com efeito, **assim como os síncrotrons são, hoje, a principal ferramenta para biologia estrutural, tendo sido imprescindíveis para invenções de medicamentos como o Tamiflu e os coquetéis anti-AIDS, também terão impacto no futuro da petroleômica, área na qual um dos principais enigmas reside nas moléculas chamadas asfaltenos.**

Considerando o petróleo como um fluido complexo, os asfaltenos são a fração mais intrigante. Sua polaridade e estrutura molecular complexa determinam a viscosidade do óleo bruto e também sua tendência à floculação e precipitação. Quando adsorvidos em superfícies, eles entopem meios porosos de rochas, reduzindo dramaticamente a permeabilidade do poço. Como colóides, os asfaltenos causam uma redução significativa do fluxo de óleo por alterarem as propriedades reológicas não newtonianas e por formarem depósitos nas tubulações de poços e equipamentos auxiliares (figura 11). Em atividades de refino, eles podem também causar desativação de catalisadores.



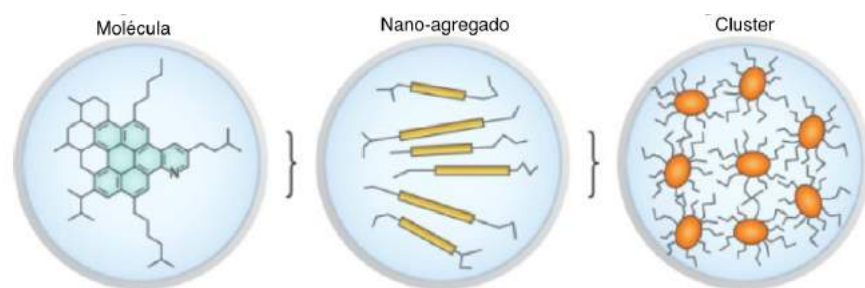


Figura 13 – Modelo de Yen-Mullins, adaptado da referência [37]. Este modelo é uma caricatura da estrutura molecular dominante dos asfaltenos em solventes e óleo cru. O peso molecular médio da molécula de asfaleno é de 750 g/mol. Os nano-agregados têm cerca de 6 moléculas empilhadas enquanto os clusters são formados por cerca de 8 nano-agregados. A formação destes nano-agregados e sua precipitação é um dos maiores problemas técnicos da indústria de petróleo

Diversas técnicas de síncrotron são utilizadas na investigação estrutural dos componentes do petróleo. Com o uso da técnica de espalhamento Raman de raios X, que só pode ser executada em síncrotrons de alto brilho, pesquisadores da Schlumberger e Chevron vêm investigando a estrutura química local do carbono em diversas moléculas aromáticas policíclicas e em asfaltenos<sup>[28,29]</sup>. As informações são semelhantes às obtidas com técnicas de espectroscopia de absorção, como *X-ray Absorption Near Edge Structure - XANES*, porém, utilizando raios X duros, como poderá ser feito na linha Ingá. Isso aumenta as possibilidades de investigações em ambientes de altas pressões, por exemplo.

O uso de XANES na borda K do enxofre para especiação desse elemento em óleos pesados data de trabalhos seminais de pesquisadores da Chevron<sup>[30]</sup> e seus colaboradores. Trabalhos semelhantes para o desenvolvimento de técnicas que permitem a especiação do ambiente químico do enxofre e nitrogênio também foram feitos por pesquisadores da Exxon<sup>[31]</sup>. Já o desenvolvimento da técnica de XANES com síncrotron para o estudo de compostos básicos de enxofre em querogênios do tipo I e II foram realizados por pesquisadores Schlumberger<sup>[32]</sup> e colaboradores com o objetivo de investigar o ambiente químico do enxofre nos componentes do petróleo. A grande vantagem das técnicas de XANES ou Raman na caracterização dos compostos contendo enxofre é ilustrada na figura 12.

As técnicas de espalhamento de raios X a baixos e altos ângulos (SAXS e WAXS) são talvez as que mais contribuíram para a compreensão da estrutura dos asfaltenos como nano-

-objetos. Pesquisadores do IFP (Instituto Francês do Petróleo) e Schlumberger, utilizando dados de espalhamento de raios X a baixos ângulos, desenvolveram modelos “caricatos” para a nanoestrutura dos asfaltenos em diversas soluções, o que culminou com um dos modelos mais aceitos na literatura, o modelo de Yen-Mullins, ilustrado na figura 13. Esse modelo é a base de estudos em reologia do petróleo<sup>[27,33-35]</sup>, dinâmica de floculação<sup>[34-36]</sup> e equação de estado utilizada em medidas de concentração de asfaltenos feitas por sondas de exploração<sup>[37]</sup>, realizados pela IFP, Schlumberger e Chevron. No Sirius, a espectroscopia tipo XANES na borda do carbono poderá ser feita na linha Sabiá. Nessa linha também será possível combinar a espectroscopia XANES na borda do carbono com o espalhamento a baixos ângulos (SAXS) em uma mesma medida, ressaltando, desta forma, a microestrutura formada por asfaltenos ou aromáticos policíclicos. Os estudos na borda K do enxofre que poderão ser feitos na linha Ema, com brilho superior a qualquer outra linha no mundo e com foco submicrométrico, permitirão mapeamentos químicos de alta resolução. Para medidas de componentes com enxofre ou carbono sob altas pressões, a técnica de espalhamento Raman de raios X da linha Ingá permitirá algo equivalente à espectroscopia XANES, mas com raios X duros, permitindo o uso de condições extremas de temperatura e pressão para observação do comportamento de reação dos asfaltenos nestas condições.

Já para as técnicas de SAXS e WAXS, a linha Sapucaia fornecerá um fluxo 100 vezes maior do que o disponível na SAXS1 do UVX, o que significa que será possível fazer os experimentos de Rheo-SAXS a mais altas frequências e com resolução temporal ordens de magnitude menor.

Um dos maiores avanços que o Sirius trará para essa área é a combinação de medidas estruturais como o SAXS com medidas de dinâmica molecular, como o espalhamento de luz, introduzida por Yudin e Anisimov para o estudo da dinâmica de agregação dos asfaltenos<sup>[27]</sup>. Essa técnica, embora muito importante na medida da dinâmica de formação de agregados e nanoagregados, é limitada pelo baixo poder de penetração da luz em óleo cru ou soluções densas, ou quando a região de escalas de comprimento acessadas é relativamente grande, devido ao comprimento de onda da luz visível. Com o alto fluxo coerente que será obtido na linha Cateretê será possível medir a dinâmica de agregação com um feixe de raios X coerente e fazer uma combinação das medidas de espalhamento dinâmico, com uma radiação penetrante,

que permite acessar escalas de comprimento muito menores. **Esse experimento totalmente inovador deverá resolver de forma unívoca a dinâmica de formação de agregados de asfalto em qualquer tipo de petróleo e sem diluição. Com o Sirius, esse experimento poderá abrir novas perspectivas na petroleômica.**

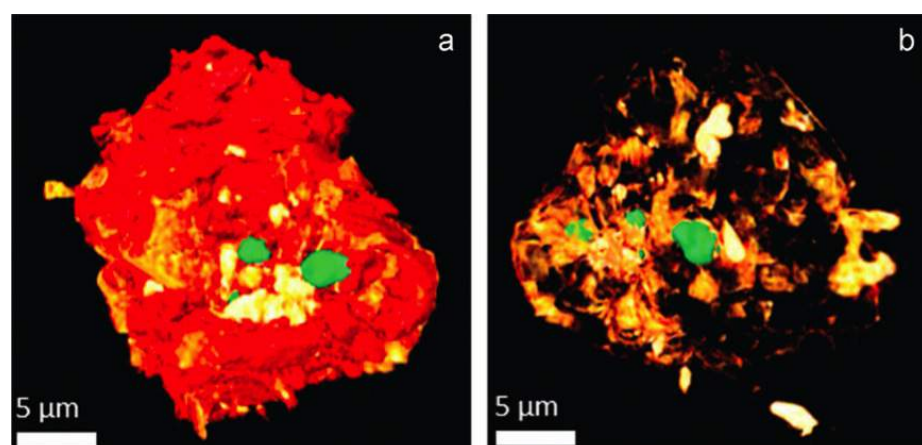


Figura 14 – Tomografia 3D com resolução química de uma partícula do catalisador FTO, Fe em vermelho para os compostos  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  e  $\text{Fe}_2\text{TiO}_5$ , Zn em verde para  $\text{ZnO}$ , e Ti+K em branco/amarelo/laranja para  $\text{TiO}_2$  e  $\text{K}_2\text{O}$  (branco significa maior concentração) [45]

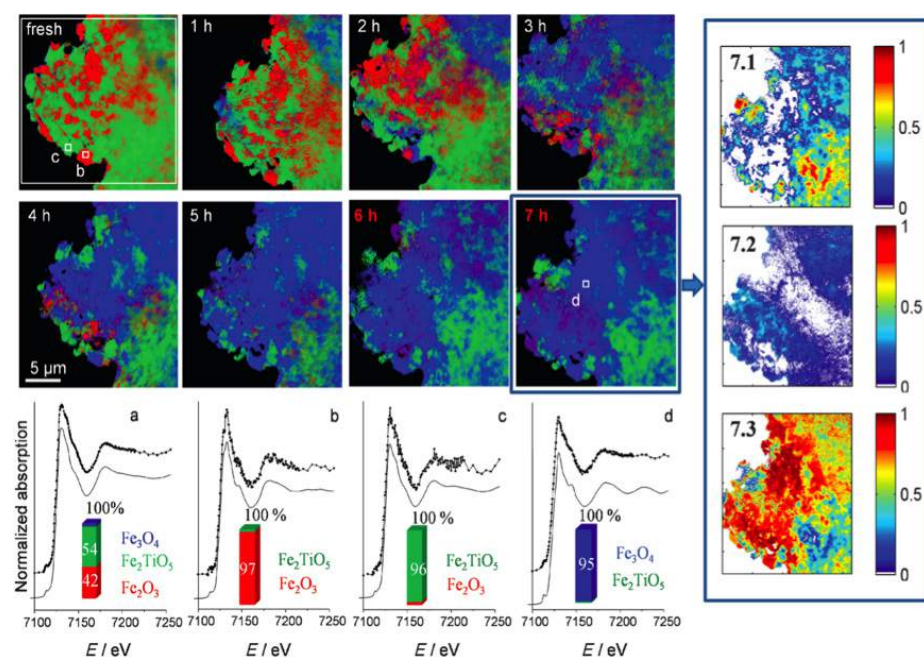


Figura 15 – Cinética de reação FTO, observada pela conversão de elementos no catalisador [45]

**Catalisadores para refino:** Estima-se que 70% de todos os processos da indústria petroquímica envolvam algum tipo de catalisador e que 90% dos novos processos industriais também irão fazer uso desses materiais. No processo de craqueamento do petróleo, as zeólitas são os principais catalisadores, por produzirem menos impurezas, terem maior eficiência e seletividade. Ao confinar moléculas em poros relativamente pequenos, são cau-

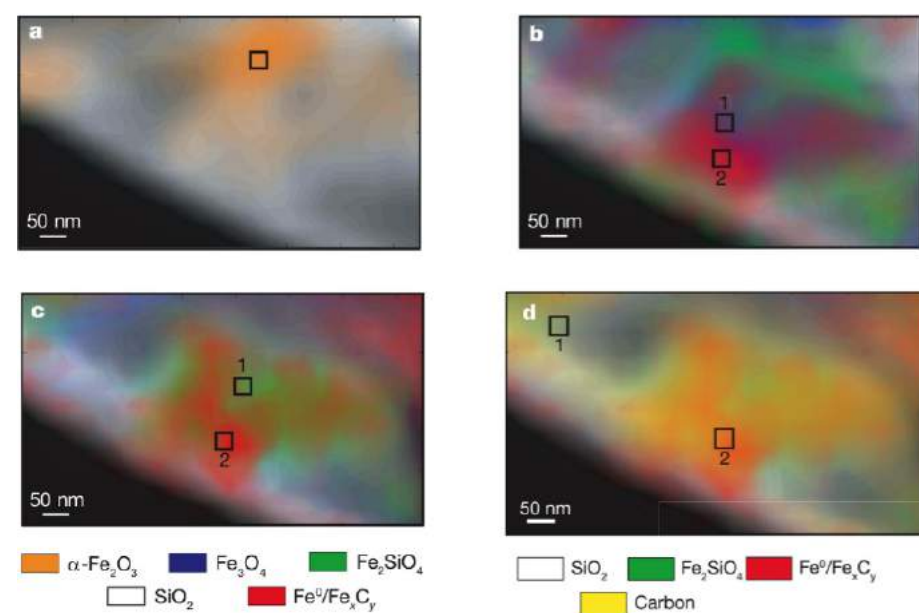


Figura 16 – Adaptação da referência original [46] que mostra o mapeamento químico do catalisador (a) antes do tratamento, à temperatura ambiente; (b) depois de 2h em  $350^\circ\text{C}$  em  $\text{H}_2$ ; (c) e (d) depois de 4 h na presença dos gases de síntese em  $250^\circ\text{C}$ , que evidenciam a transformação da fase rica em ferro em carbeto de ferro

sadas modificações de estrutura e reatividade. Na isomerização e reforma, catalisadores de metais como platina, suportados em zeólitas, são também os mais eficientes. Na síntese de olefinas, estruturas químicas que servem de base para síntese de muitos produtos da indústria petroquímica, o uso de gás de síntese aliado aos catalisadores do tipo Fischer-Tropsch tem sido uma alternativa ao craqueamento de nafta e etano.

A pesquisa em zeólitas com síncrotron é uma área muito ativa em empresas como Chevron [38-40] e Eni [41,42]. O objetivo comum nesses trabalhos é entender a estrutura de poros do suporte e como ela confina e aumenta a reatividade dos substratos. Muitas patentes foram depositadas recentemente com base em dados desse tipo. De fato, dados obtidos em síncrotrons são muito utilizados para o desenvolvimento de patentes [43,44].



Em um trabalho financiado pela Dow Chemical Company<sup>[45]</sup>, utilizando o síncrotron de Stanford, um grupo de pesquisadores projetou um reator especial para estudos *in situ* do processo de Fischer-Tropsch para olefinas. Nesse trabalho, eles puderam obter imagens 3D (figura 14) do catalisador, com resolução química, e correlacionar, em tempo real (figura 15), a química de catálise com os compostos contidos na partícula catalítica inicial. Em particular, eles observaram que, dentre todos os compostos iniciais, enquanto o  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  teve melhor atividade, o  $\text{Fe}_2\text{TiO}_5$ , formado pela calcinação do  $\text{TiO}_2$ , era quimicamente inativo. Esse tipo de informação pode, então, ser usada para melhorar os protocolos de síntese do catalisador.

Em um outro exemplo semelhante (figura 16) publicado na revista Nature<sup>[46]</sup>, a conversão de gases CO e  $\text{H}_2$  em hidrocarbonetos, na superfície de um catalisador de óxido de ferro, foi acompanhada por meio de um mapeamento químico das transformações sofridas pelo catalisador na presença dos gases de reação, com resolução de 40 nm. Nesse exemplo, o mapeamento foi feito com uma energia mais baixa, próxima a uma borda L de absorção do ferro, algo complementar ao experimento da figura 16, que poderá ser feito na linha Sabiá do Sirius.

A otimização de catalisadores nanoestruturados de prata (Ag) para conversão de propileno, um subproduto no refino de petróleo e processamento de gás natural, em óxido de propileno com alta seletividade, mesmo a baixas temperaturas<sup>[47]</sup>, é um outro exemplo no qual experimentos de síncrotron têm norteado o desenvolvimento racional de materiais para o refino. Óxido de propileno é um intermediário de alto valor agregado utilizado na fabricação de poliuretano empregado em espumas, elastômeros e plásticos rígidos. O óxido de propileno é também parte essencial de um novo e promissor processo de sequestro de  $\text{CO}_2$  na forma de polímeros que podem ser reutilizados na cadeia produtiva. Atualmente, o óxido de propileno é o fator limitante desta nova tecnologia, devido ao seu alto custo de produção e impacto no ambiente.

Medidas de espalhamento de raios X por incidência rasante (GISAXS) feitas no síncrotron de Argonne nos EUA (APS) – semelhante ao que estará disponível nas linhas Cateretê e Sapucaia –, durante a operação do catalisador, indicam que os *clusters* triméricos de Ag presentes no catalisador passam por um processo de aglomeração durante a reação. Isso forma agregados atômicos que apresentam atividade catalítica muito superior a todos os catalisadores de Ag previamente conhecidos.

Acooplado esse estudo à medidas de espectroscopia de fotoelétrons *in situ* (*in situ* XPS), realizadas no síncrotron BESSY da Alemanha em uma linha de raios X moles, como a Ipê e a Sabiá e uma simulação computacional, concluiu-se que a performance catalítica dos agregados atômicos está relacionada a uma certa configuração eletrônica, característica da dimensão nanométrica da estrutura que favorece a ligação dos reagentes tornando o catalisador mais ativo. Já em estruturas maiores, os elétrons mais reativos se organizam de tal forma que a performance catalítica é reduzida. Esse trabalho demonstra como efeitos de confinamento eletrônico obtidos pela redução de tamanho da fase ativa do catalisador influenciam a performance catalítica.

**Considerando o brilho e as faixas de energia cobertas pelas linhas Carnáuba, Ema, Quati e Mogno, o Sirius será o estado da arte em caracterização microscópica de catalisadores.** A linha Quati, por exemplo, por ser uma linha de espectroscopia com resolução temporal, permitirá experimentos de espectroscopia *in situ* para, por exemplo, observar as mudanças de estado de oxidação de sítios catalíticos com resolução temporal inferior a milissegundos. Nas linhas Ema e Carnáuba, será possível acompanhar, por meio de imagens de contraste químico e estrutural, com resolução micro e nanométrica, a evolução de catalisadores em *operando*.

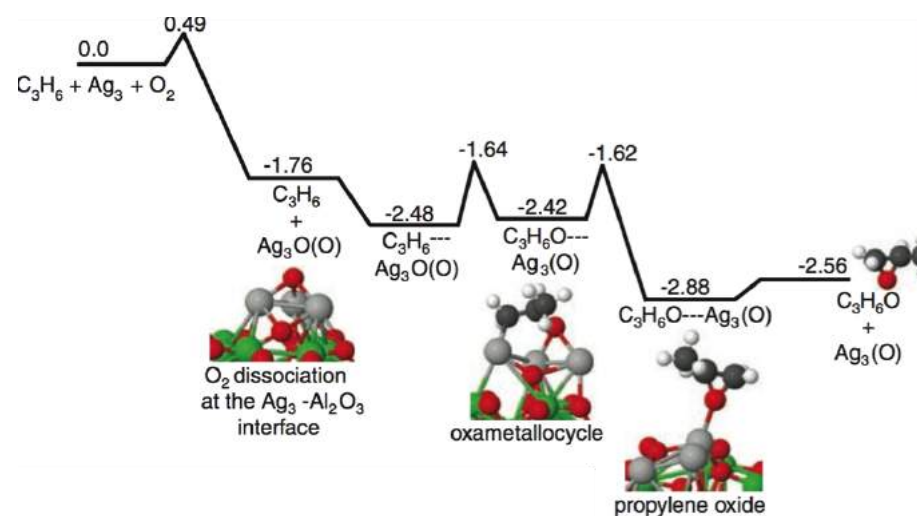


Figura 17 – Modelo teórico da referência<sup>[47]</sup> indicando o caminho estrutural de menor energia na transformação do propileno e oxigênio em epóxido na superfície de um catalisador contendo arranjos atômicos de 3 átomos de prata

Vale ressaltar que as faixas de energia cobertas no primeiro harmônico (mais brilhante) do ondulador das linhas Ema e Carnáuba, bem como os primeiros harmônicos das linhas Ipê e Sabiá, são essenciais para vários dos fenômenos relacionados à reatividade de catalisadores. Essas são faixas pouco exploradas em outros síncrotrons modernos e será um dos nichos do Sirius.

### Energias renováveis

A produção eficiente e economicamente viável de combustíveis e produtos químicos a partir da biomassa é um dos grandes desafios deste século. Uma é a disponibilidade de biomassa residual e outra é a capacitação científica e tecnológica para o desenvolvimento de processos eficientes e economicamente viáveis para transformar a biomassa em produtos de interesse industrial<sup>[48,49]</sup>. O Brasil já é destaque nessas áreas, devido à produção e uso do etanol como combustível, e tem a chance de ampliar ainda mais seu pioneirismo e inovação com o desenvolvimento e o domínio de tecnologias para a geração de energia limpa, renovável e sustentável.

A aplicação de catalisadores heterogêneos em áreas estratégicas para o Brasil impõe um grande desafio para a compreensão e controle das propriedades físicas e químicas destes materiais, com intuito de produzir catalisadores que apresentam grande atividade catalítica e que sejam seletivos ao produto químico de interesse. Os catalisadores heterogêneos são, de uma forma geral, sistemas multifásicos, e apresentam uma complexa estrutura tridimensional que varia em uma ampla escala de comprimento, desde ligações químicas em escala atômica, passando pela composição de fases e dos sítios ativos na escala nanométrica, indo para a estrutura poros em escala nano ou micrométrica até a morfologia do catalisador em escala macrométrica<sup>[50]</sup>. A combinação de técnicas de espectroscopia e difração de raios X presentes em síncrotrons de 3ª e 4ª geração é essencial, já que a estrutura real da fase ativa do catalisador pode variar de cristalina para amorfa ou ser uma mistura das duas. Essa é uma situação comumente observada em catalisadores metal/óxido, nos quais o suporte de óxido é principalmente cristalino e as pequenas partículas de metal são amorfas, como na referência<sup>[50]</sup>, por exemplo, em que foi investigada a estrutura química e estado de um catalisador CeO<sub>2</sub>/CuO usado na reação de mudança do vapor de água (RMV). Essa é uma importante reação industrial, frequentemente usada em conjunção com a reforma catalítica do metano ou outros hidrocarbonetos que são usados para a produção de hidrogênio de

alta pureza para o uso na síntese de amônia, como explicado no tópico de agricultura. Só quando se combina as duas medições, usando uma metodologia de análise autoconsistente, é possível obter novas informações sobre a natureza desordenada das espécies transientes ao longo do processo. Além disso, todas essas características mudam rapidamente em função das condições reacionais em que são aplicadas.

Portanto, o modo efetivo de estudar um catalisador é em condições de operação, ou seja, simulando o processo de preparo, ativação e reação catalítica junto com a análise estrutural, eletrônica e superficial, bem como a rápida detecção das mudanças que estão ocorrendo. Isso será possível na linha Quati, especializada em experimentos de espectroscopia de raios X com resolução temporal. Essa condição de análise é denominada *operando condition*<sup>[50]</sup> e seu principal objetivo é estabelecer a correlação direta das características estruturais e superficiais em condições reais de trabalho de um catalisador. Isso implica condições experimentais sofisticadas, com o uso de reatores catalíticos robustos para atuarem em alta pressão (200 atm), altas temperaturas (500-1000°C) e agitação para que se misture líquido, catalisador e biomassa sólida ou gasosa. Nessas condições operacionais

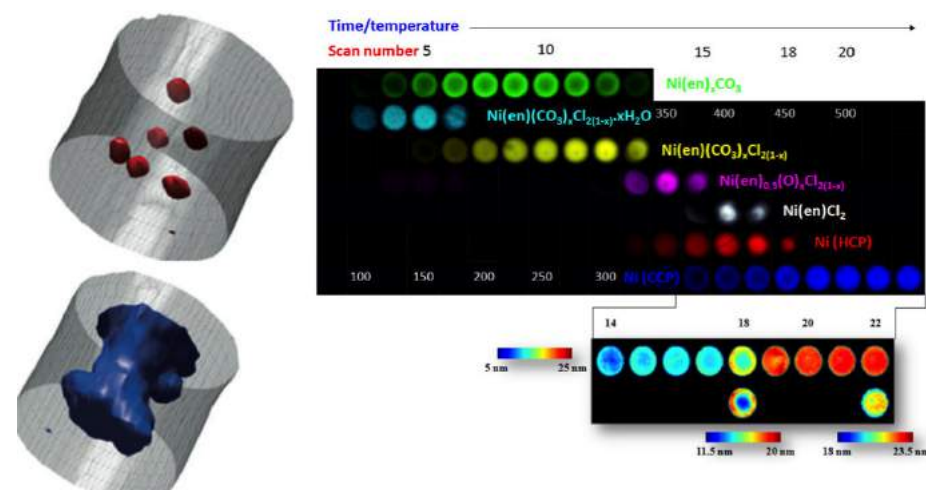


Figura 18 – Adaptado da referência [53]. À esquerda, imagens 3D por XRD-CT do catalisador de Ni em  $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ , antes e depois do tratamento térmico dos precursores (calcinação). A iso-superfície vermelha define regiões com 0% de alumina e as regiões azuis em 3D definem voxels com 33% do máximo de Ni em estado cristalino fcc. À direita, mapa de evolução temporal das fases entre o precursor até a formação do Ni em fase cristalina fcc (cúbico de face centrada). Estes dados evidenciam tanto a formação da fase ativa em torno de poros quanto a formação de diversos estados intermediários no processo de calcinação



somente feixes de raios X de elevado fluxo e alta energia (até 150keV, como na linha Jatobá), tamanho nanométrico (como na linha Carnaúba) e com sistema de detecção rápida permitem a plena investigação de características estruturais, eletrônicas, superficiais e morfológicas dos catalisadores em operação. A única possibilidade de atender de forma plena todos esses requisitos é com o uso de radiação síncrotron de alto brilho<sup>[50]</sup>.

**Conversão de biomassa:** Existem diversos tipos de biomassa e mecanismos para sua transformação, tanto por rotas químicas como biológicas. A biomassa lignocelulósica, composta por celulose, lignina e hemicelulose, apresenta grande potencial de exploração e valorização no Brasil devido às enormes áreas cultiváveis, economia ativa no agronegócio e à crescente exploração do bioetanol. Todas essas atividades econômicas geram enormes quantidades de biomassa lignocelulósica residual, como casca, folhas e bagaço. Essa biomassa é uma fonte abundante de carboidratos, porém ela ainda é utilizada em pequena escala na indústria papeleira e na construção civil. Alternativamente, ela é queimada para geração de energia ou simplesmente acumulada. No entanto, esses resíduos podem ser fonte de riqueza para o País, se transformados em biocombustível ou produtos químicos. A rota de desenvolvimento baseada em catalisadores sólidos ativos e seletivos para serem aplicados nas diversas etapas de transformação da biomassa lignocelulósica é uma das mais promissoras<sup>[48,49]</sup>. Isto porque os catalisadores são facilmente separados do meio reacional, podem ser reciclados e são também resistentes ao meio reacional agressivo (altas temperaturas, pressões e pH ácidos<sup>[48,49]</sup>) para a transformação da biomassa. Outra alternativa que tem atraído grande interesse tanto do setor acadêmico como industrial é a hidrólise enzimática<sup>[51,52]</sup>. Nessa rota bioquímica de redução de biomassa em açúcares simples, para posterior fermentação, empregam-se coquetéis enzimáticos produzidos por microrganismos especializados na degradação de biomassa vegetal<sup>[51,52]</sup>. Porém, a eficiência dessas enzimas está aquém das necessidades impostas pelo processo, necessitando de um profundo conhecimento molecular e funcional para seu redesenho atômico e otimização das propriedades catalíticas.

**Estudos por cristalografia de macromoléculas com linhas de alto brilho e microfoco (como a Manacá) se tornam elementos essenciais para o desenvolvimento deste conhecimento. Posteriormente, ele poderá ser aplicado na engenharia de proteínas e de rotas metabólicas em microrganismos, visando uma maior**

**performance na conversão de biomassa em químicos e combustíveis.** No entanto, o grande desafio científico, em ambas as tecnologias, reside no desenvolvimento de catalisadores baratos que promovam elevada conversão do reagente de partida e seletividade ao produto de interesse.

Como outros materiais funcionais, as propriedades químicas e estruturais dos catalisadores são fortemente dependentes da metodologia de preparação, do processo de ativação e das condições experimentais empregadas durante sua aplicação. Sendo assim, para o estudo e aperfeiçoamento dos sistemas catalíticos, é preciso dispor de técnicas de caracterização capazes de revelar as interações entre seus diversos constituintes, fase ativa/suporte/promotores, em escalas que vão do nível atômico e molecular à estrutura cristalina e morfológica. Ao mesmo tempo, as propriedades microscópicas desses materiais devem ser estudadas da forma mais próxima às suas condições reais de aplicação<sup>[50]</sup>.

Um exemplo de desafio crítico é o fato de que muitos biocombustíveis intermediários precisam ser hidrogenados para gerar um produto final saturado nos processos de produção. Com raras exceções, não há reação entre H<sub>2</sub> e compostos orgânicos que ocorra em temperaturas abaixo de 480°C sem o uso de catalisadores metálicos como platina, paládio, ródio e rutênio, que são altamente reativos mesmo a baixas pressões de H<sub>2</sub>.

Metais não tão preciosos, especialmente os baseados em níquel, são alternativas econômicas interessantes, porém são menos reativos e precisam operar em temperaturas e pressões de H<sub>2</sub> mais altas. Ainda sim, o desenvolvimento deste tipo de catalisador pode representar um ganho econômico interessante e otimizar sua preparação é um passo essencial.

Obviamente, entender as características estruturais microscópicas desses catalisadores, durante sua preparação, ou mesmo em condições de operação é o caminho para esse desenvolvimento. Este é o exemplo seguido na referência<sup>[53]</sup> na qual foi estudada a preparação de catalisadores de níquel suportados em  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> por meio da sua impregnação por soluções concentradas de sais de níquel. Nesse trabalho, foi utilizada uma técnica de tomografia que usa a estrutura cristalina como elemento de contraste de imagem, XRD-CT (tomografia computadorizada por difração de raios X), como poderá ser feita nas linhas Carnaúba ou Ema. O principal objetivo deste estudo, feito no síncrotron europeu ESRF, foi otimizar a síntese do catalisador, monitorando sua estrutura cristalina heterogênea<sup>[53]</sup> de forma a resolver os problemas associados à formação de espinéis e/ou problemas relacionados à dispersão

do níquel no suporte. Na dinâmica 2D XRD-CT estudada *in situ*, a figura 18 mostra as diversas modificações estruturais da amostra em uma mesma seção transversal tomográfica em 22 intervalos de tempo, bem como imagens 3D DRX-CT obtidas antes e após o experimento *in situ* abrangendo a totalidade da amostra.

Os resultados apresentados mostram claramente que a formação da fase ativa do catalisador final é um processo complexo de múltiplas etapas, que o catalisador forma uma estrutura não homogênea e evidencia a composição por fases em 2D e 3D. Tais observações são importantes para a preparação e a análise da atividade catalítica destes catalisadores e para o desenvolvimento de processos catalíticos de hidrogenação mais eficientes e econômicos.

**Baterias e células de combustível:** O armazenamento de energia é um dos passos importantes para seu uso eficiente. As baterias estão presentes em todos os equipamentos eletrônicos e são a principal fonte de energia em alguns carros mais modernos. No entanto,

quando a concentração de energia disponível por peso de material em baterias é comparada a combustíveis como gasolina ou etanol, as baterias podem parecer soluções pouco eficientes. De fato, há muito a ser desenvolvido para a produção de novas gerações de baterias mais eficientes. Baterias de lítio de alta capacidade, por exemplo, podem ser construídas com materiais de alta densidade de energia que formam ligas com lítio durante o processo de carga e descarga. Esses materiais oferecem capacidades até 10 vezes superiores que os compostos de intercalação normalmente utilizados em baterias comerciais. Porém, sua capacidade de carga acaba após alguns ciclos de carga e descarga. Isso é atribuído a uma maciça expansão dos eletrodos durante o processo de carga. Durante a descarga os materiais se contraem novamente, mas não retornam ao seu estado original. As partículas dos eletrodos se quebram, sua estrutura se desintegra e os fragmentos perdem contato elétrico com o resto da célula.

Esse fenômeno foi observado por meio de tomografia de raios X<sup>[55]</sup> durante ciclos de carga e descarga de baterias de lítio

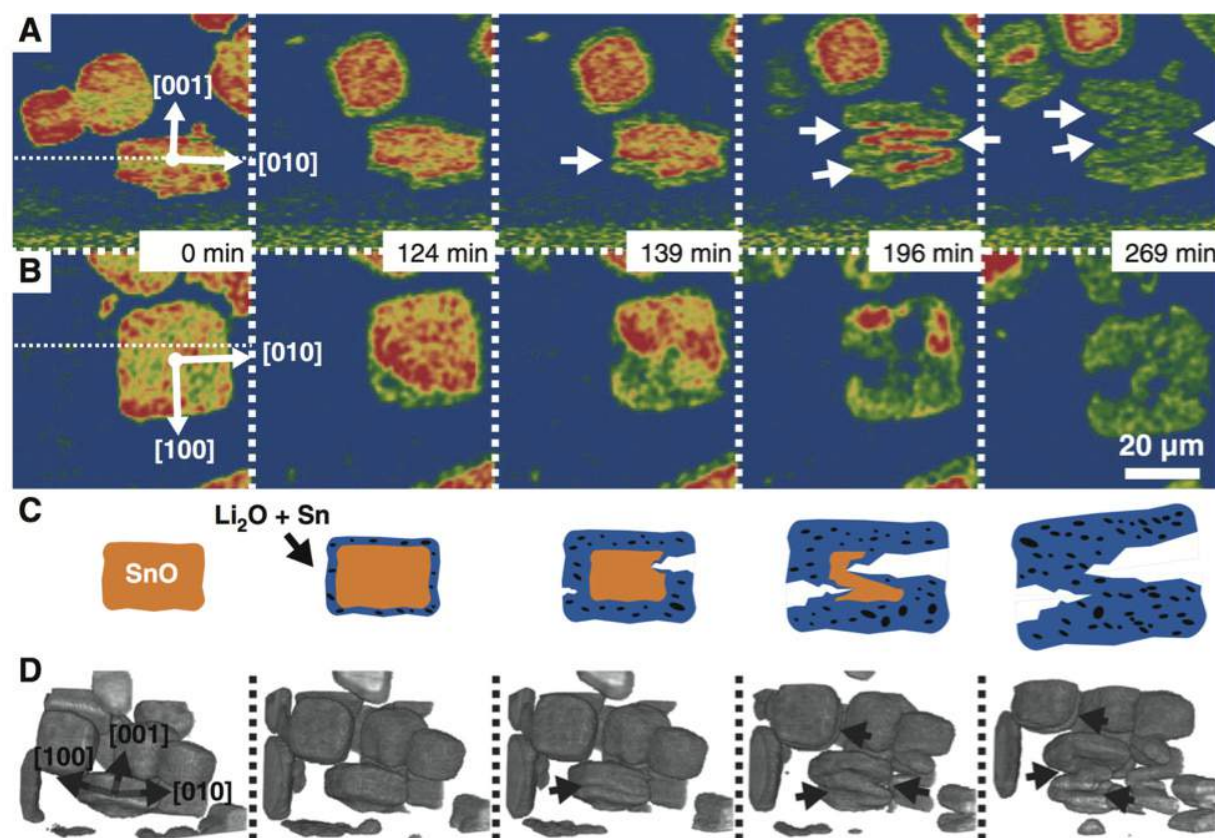


Figura 19 – Da referência [55]. Visualização de morfologia e composição química em tempo real de eletrodo modelo com partículas de óxido de Sn em baterias de Li. Seções transversais coronal (A) e transversa (B). Linha branca pontilhada em 0 min indica os planos de corte. Direções cristalográficas também indicadas na figura. (C) Evolução esquemática das rachaduras que levam a uma morfologia em zig-zag. (D) Renderização 3D do sub-volume com morfologia em zig-zag em múltiplas partículas. Setas pretas indicam a posição das fraturas



com eletrodo de óxido de estanho, mostrando assim o processo de formação da liga lítio-estanho, expansão volumétrica e fraturas em partículas individuais em tempo real. Fraturas expõem facetas novas de óxido de estanho que aceleram o processo de incorporação de lítio (carregamento), porém, comprometem a estabilidade mecânica do eletrodo. A quantificação da expansão volumétrica e quantidade de lítio indicam que a perda de capacidade após vários ciclos de carga e descarga relaciona-se à degradação estrutural e morfológica dos eletrodos. Esse trabalho evidenciou detalhes microscópicos do mecanismo de perda de capacidade de uma bateria de lítio baseada em liga metálica.

Análises similares em materiais para armazenamento de energia durante operação serão possíveis com Sirius nas linhas Mogno (micro e nano-XCT) e Jatobá (micro-XCT de alta energia), nas quais haverá maior capacidade de penetração em amostras e resolução espacial superior.

Já as células combustíveis são sistemas eletroquímicos de armazenamento de energia, das quais, ao contrário das baterias, os agentes químicos não esgotam, pois são fornecidos e consumidos continuamente para fornecer energia elétrica de forma eficiente e pouco poluente. Estes agentes são, normalmente, um agente redutor (combustível) e um agente oxidante (comburente). Embora existam muitos tipos de células combustíveis, quase todas funcionam de forma semelhante: elas são compostas de um anodo, um eletrólito e um catodo. No catodo há tipicamente um catalisador (de platina, por exemplo) que quebra as moléculas de combustível em elétrons e íons, enquanto no anodo há um catalisador (de níquel, por exemplo) que transforma os íons em produtos de combustão, como água ou gás carbônico.

A aplicação de células combustíveis em larga escala depende do desenvolvimento de catalisadores melhores e de baixo custo para a reação de redução de oxigênio, fator limitante neste processo. Além do alto custo envolvido no uso de platina nos catalisadores de células de combustível, esse metal se liga muito fortemente ao oxigênio, atrapalhando sua eficiência de eletrorredução. Consequentemente, há um desafio científico e tecnológico em encontrar ligas de platina que resolvam essas questões para células combustíveis que produzem energia limpa por meio da reação de  $H_2$  e  $O_2$ , produzindo água. Uma possível solução foi apresentada na referência<sup>[56]</sup>, na qual catalisadores formados pela lixiviação seletiva de nanopartículas de ligas Pt-Cu apresentaram reatividades catalíticas bastante altas na reação de redução do oxigênio.

Por meio de uma combinação das técnicas de espectroscopia de fotoelétrons (XPS) e de difração anômala de raios X (aXRD), aliadas à microscopia eletrônica e à simulação computacional, foi demonstrado que o processo de lixiviação seletiva promove remoção do cobre das nanopartículas precursoras. Isso resulta em uma estrutura de “casca-carço” na superfície de nanopartículas, com uma camada externa rica em platina com estrutura cristalina deformada.

Adicionalmente, as medidas eletroquímicas mostram que a performance de catalisadores com diferentes composições da liga platina-cobre se correlaciona com o grau de deformação da rede cristalina, após segregação da platina. Já a absorção e emissão de raios X (XAS XES) em um sistema modelo Pt-Cu(111) mostram que a deformação estrutural na camada superficial de platina causa uma mudança na estrutura eletrônica da superfície (deslocamento da banda d), o que resulta em um enfraquecimento da ligação de intermediários de oxigênio. Este mecanismo explica a melhor eficiência do catalisador na quebra das moléculas de água.

Esse trabalho identifica, em nível atômico, os ingredientes fundamentais de um catalisador, relacionado a produção de energia. Com esse conhecimento, estratégias racionais de preparação de novos catalisadores podem ser desenvolvidas. Ligas metálicas fornecem não só um melhor desempenho, mas também um custo reduzido, pois utilizam uma menor quantidade de metal nobre de alto custo.

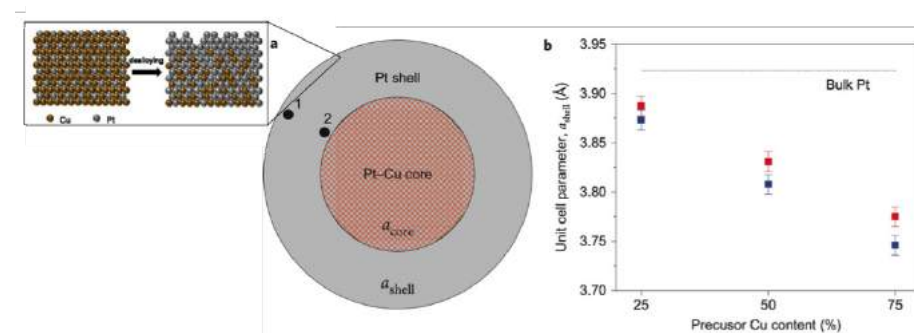


Figura 20 – Adaptado da referência [56]. Representação esquemática da formação da estrutura de casca-carço nas nanopartículas de Pt-Cu para catalisadores de células de combustível e o mapeamento da deformação cristalina e composição das nanopartículas por difração anômala



*O uso da luz síncrotron no desenvolvimento de fármacos têm levado a avanços na área da saúde*  
Crédito: NVinacco

A descoberta dos raios X, em novembro de 1895 por Wilhelm Conrad Röntgen, teve um enorme impacto em todas as áreas da ciência de materiais sintéticos e biológicos, por permitir enxergar o interior de materiais opacos, revelando detalhes que, por quaisquer outras técnicas, seriam invisíveis. Na medicina, essa descoberta abriu uma nova era de diagnósticos de alta resolução não invasivos e, desde então, os diversos avanços e o uso da luz síncrotron em investigações na área de saúde têm resultado em impactos positivos.

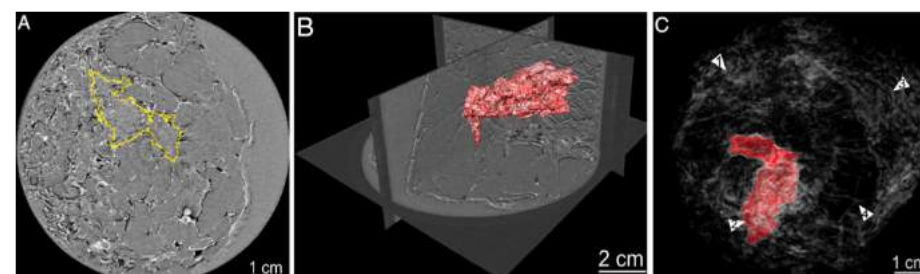
**Há mais de 30 anos, os avanços do conhecimento obtidos por meio de técnicas de luz síncrotron têm permitido a compreensão de problemas relacionados às ciências da vida e medicina. As diversas técnicas exploradas nessa área do conhecimento abrem novas oportunidades para os estudos de seres vivos em diferentes escalas, desde organismos inteiros, órgãos e tecidos até células, organelas e moléculas biológicas ativas, como as proteínas.**

A seguir serão apresentados alguns exemplos dos últimos desenvolvimentos feitos com o uso de técnicas de luz síncrotron em fontes de alto brilho, que servem de inspiração para o desenho das linhas de luz do Sirius.

### Diagnóstico por imagem

Embora tipicamente os síncrotrons não sejam usados para diagnóstico médico convencional, suas características muito superiores às fontes convencionais permitem medidas com maior resolução e contraste, em tempos muito menores. Na tomografia convencional por raios X, por exemplo, o alto brilho das fontes de luz síncrotron permite minimizar tempos de exposição em várias ordens de magnitude, reduzindo a perda de resolução por “borrão”

de movimento e medidas *in vivo*. Outro aspecto importante é o alto fluxo, mesmo com alta monocromaticidade, facilmente obtida em síncrotrons. Como os coeficientes de atenuação linear são função da energia dos fótons, as imagens por absorção de raios X em síncrotrons possuem melhores contrastes do que em fontes convencionais policromáticas e ainda permitem otimização do contraste em uma ou mais bandas monocromáticas. Mas, o maior ganho que se obtém com uma fonte de maior brilho, e mais coerente é nas imagens por contraste de fase. Neste modo de imagem por raios X são detectados os pequenos desvios dos raios causados por variações do índice de refração dos materiais. Em tecidos moles, na faixa de energia de 15 a 25 keV, isso pode representar um ganho em contraste de quase 1000 vezes, permitindo a distinção de tecidos em que a diferença de absorção é pequena demais para ser detectada. Há pelo menos três tipos de técnicas por contraste de fases: a interferometria por raios X (XRI), a imagem por contraste de difração (DEI) e o contraste de fase por propagação (PPI).



*Figura 21 - Adaptado da referência [57]. Visualização tridimensional de um tumor de mama. (A) Segmentação do tumor em uma fatia axial onde a linha amarela indica a fronteira do tumor. (B) Três fatias perpendiculares do tumor segmentado. (C) Renderização 3D do tumor (em vermelho) onde as setas indicam diferentes estruturas finas de 1: lóbulos; 2: tumor; 3: pele; 4: ductos lactíferos*

**Mamografia:** Em um artigo publicado em 2012<sup>[57]</sup>, feito no síncrotron europeu, o ESRF, foram obtidas imagens de tomografia de mama (mamografia) com alta resolução (da ordem de 0,1 mm), alto contraste e baixa dose de radiação, utilizando a técnica de DEI com um feixe de raios X de alta energia (60 keV) e alta colimação, essenciais para a técnica. A mamografia é a principal técnica de diagnóstico de câncer de mama. No entanto, na mamografia convencional, quase 20% dos tumores não são detectados e há muitos resultados falsos positivos. Muito destes problemas se devem ao baixo contraste de absorção dos tumores em relação ao tecido da mama. Por outro lado, a mamografia por contraste de fase demonstrou sucesso na detecção de tumores. Porém, suas condições técnicas de uso acabam sendo complicadas para uso clínico prático.

Uma das técnicas desenvolvidas<sup>[57]</sup> permitiu um avanço em relação a tomografia de contraste de fase, em resolução e contraste e principalmente, na dose de radiação aplicada. Mais ainda, a dose final utilizada para as melhores imagens, como as apresentadas na figura 21 foram da ordem de 2 mGy, ou seja, bem abaixo dos 3,5 mGy estipulado pelo US *Food and Drug Administration* (FDA) para a dose glandular média.

**Histologia patológica de câncer de próstata:** Além do diagnóstico por raios X, a faixa de mais baixa energia do espectro de emissão dos síncrotrons, o infravermelho, é usada com sucesso no diagnóstico e prognóstico de câncer por meio de histopatologia, de forma a avaliar a severidade da doença. A técnica de microespectroscopia de infravermelho ( $\mu$ FTIR), como a que estará disponível na linha Imbúia, mostrou-se eficaz na caracterização de malignidade de vários tipos de tecidos, incluindo pele, esôfago, estômago, pulmão, ovários, cólon e outros<sup>[58,59]</sup>. Além de ser um método analítico não destrutivo, altamente sensível e que dispensa o uso de marcadores ou corantes, a técnica de  $\mu$ FTIR permite conhecer a composição molecular e estrutural de amostras biológicas com resolução micrométrica em questão de segundos. Em particular, diversas características espectrais das regiões de Amida I e II, regiões lipídicas, carboidratos, DNA e RNA, podem ser usadas como biomarcadores (“impressões digitais”) para a identificação de alterações fisiológicas em tecidos causadas pelo câncer. Estudos recentes<sup>[60,61]</sup> mostram que o espectro de infravermelho de células expostas a medicamentos para tratamento de câncer pode ser usado para avaliar as alterações metabólicas, induzidas pelos próprios me-

dicamentos. Uma vez que o espectro de infravermelho fornece imagens precisas das ligações químicas presentes na amostra, diferentes alvos possuem características espectrais específicas relacionadas aos modos de ação dos medicamentos.

Um exemplo importante dessa metodologia aplicada ao diagnóstico de câncer de próstata é mostrado nas referências<sup>[61,62]</sup>. No Brasil, o câncer de próstata é o segundo mais comum entre os homens, atrás apenas do câncer de pele não-melanoma. Em valores absolutos, é o sexto tipo mais comum no mundo e o mais prevalente em homens, representando cerca de 10% do total de cânceres. Seu diagnóstico por métodos tradicionais de biópsia ainda é muito sujeito a falhas, especialmente em tumores no seu estágio inicial, nos quais as chances de cura são maiores. Na biópsia convencional de tecidos com suspeita de câncer de próstata atribui-se uma pontuação às alterações morfológicas de acordo com o sistema de Gleason, que permite a classificação de tumores em 5 graus visuais de gravidade distintos. Esse é um método sujeito a erros de procedimento de biópsia e a subjetividade de avaliação dos patologistas. No estudo pioneiro da referência<sup>[62]</sup>, o método de  $\mu$ FTIR combinado com o método de componente principal foi utilizado para avaliar amostras de tecido com câncer de próstata<sup>[62]</sup>. Os autores compararam essas medidas com a pontuação de Gleason, fornecida por um patologista experiente. A sensibilidade e a especificidade conseguidas nessa comparação foram de 92,3% e 98,9%, respectivamente. Adicionalmente, o método foi capaz de diferenciar os tumores clinicamente confinados à próstata daqueles tumores considerados invasivos.

Apesar da técnica de FTIR ser uma técnica de bancada, o brilho de várias ordens de magnitude superior de um síncrotron permite obter imagens de maior resolução e melhor relação sinal ruído. Essas diferenças são ilustradas na figura 22 da referência<sup>[63]</sup>, na qual a imagem de um tecido de próstata canceroso revela linfócitos de diâmetro entre 2–7  $\mu$ m e outras características também visíveis por microscopia óptica com contraste de corantes hematoxylina e eosina. Como pode ser visto nas imagens d e e da figura 22, essas características não são diferenciáveis nas imagens por  $\mu$ FTIR com uma fonte convencional. Com as bandas de absorção de  $\text{CH}_3$  e Amida I é possível obter imagens com contrastes seletivos a diferentes componentes celulares.

Como pode-se notar nas imagens de  $\mu$ FTIR da figura 22, o limite de resolução é de alguns microns. Essa não é uma limitação dos sensores de imagem, mas sim do limite de difração, que dita que uma fonte de comprimento de onda  $\lambda$  não pode obter



imagens com resolução melhor que  $\lambda/2$ . Como os comprimentos de onda usados nestes experimentos são da ordem de 3-5  $\mu\text{m}$ , a resolução da imagem não será maior que alguns microns. Essa é uma limitação importante para estudos de interações de certas moléculas biológicas com medicamentos, por exemplo. Nesses casos, a resolução da ordem de nm é necessária. Para vencer esta barreira, a linha Imbúia adotará um sistema de imagem que acopla a ponta de um microscópio de força atômica com o feixe focalizado de um síncrotron, uma técnica chamada SINS (*Synchrotron Infrared Nano Imaging*). O efeito de antena criado pela ponta do AFM amplifica o campo irradiado próximo à amostra e permite a aquisição do espectro de infravermelho com a resolução determinada pela ponta do AFM, ou seja, da ordem de 10-20 nm. Uma versão operacional desta linha já está sendo comissionada no anel UVX do LNLS. O potencial da técnica só poderá ser explorado com o feixe mais brilhante do Sirius, mas este experimento é importante para o futuro da espectroscopia de infravermelho de macromoléculas biológicas. O síncrotron de Berkeley de 3ª geração, o ALS, também acaba de criar uma linha de luz exatamente com o mesmo propósito da Imbúia e demonstra o potencial da nova técnica de síncrotron. Imagens feitas como prova de conceito de uma  $\gamma$ -globulina e um peptídeo (cadeia que mimetiza um peptídeo) ilustram bem a resolução nanométrica de imagem e espectroscopia da técnica de SINS. A identificação es-

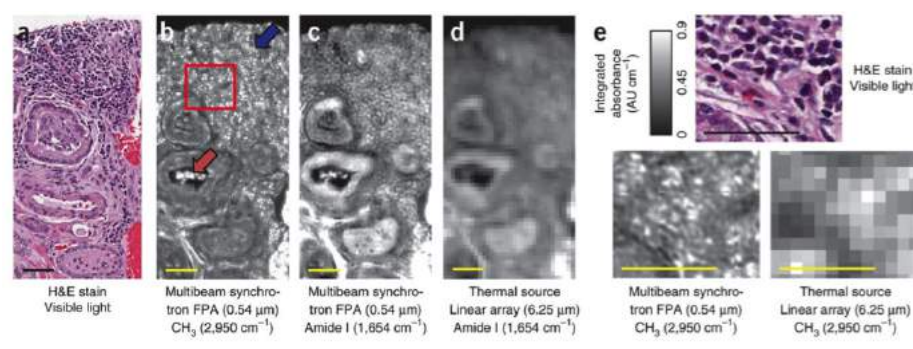


Figura 22 – Adaptado da referência [63]. Imagens de  $\mu\text{FTIR}$  por síncrotron. (a) Imagem ótica de um tecido de próstata canceroso com inflamação crônica. (b,c) Imagem por absorção de infravermelho em um síncrotron (linha de alto fluxo), em duas bandas de espectro, no mesmo tecido e sem corantes. Detalhes dos linfócitos (seta azul) e hemácias (seta vermelha) (d) Mesma imagem obtida com uma fonte de infravermelho de bancada (e) Zoom da área quadrada na figura b, mostrando com clareza os linfócitos que não podem ser distinguidos com equipamento convencional. Barra amarela de escala de 50  $\mu\text{m}$

pectroscópica de proteínas requer a resolução de vários modos vibracionais simultaneamente. A região de “impressão digital”, por exemplo, varre várias centenas de  $\text{cm}^{-1}$ , que pode ser alcançada com uma fonte síncrotron. A figura 23, adaptada da referência<sup>[64]</sup> compara, por exemplo, o espectro de IR obtido por métodos tradicionais de  $\mu\text{FTIR}$  com o obtido por SINS. As posições e formatos dos picos de Amida I e Amida II são praticamente idênticos na área de  $10 \times 10 \mu\text{m}^2$ . Outros picos menores também são observados na região de 1200-1400  $\text{cm}^{-1}$ , que resulta do modo de vibração Amida III e das cadeias laterais de aminoácidos, só que com resolução de < 40 nm, algo que não seria atingido por  $\mu\text{FTIR}$ .

### Fármacos

A determinação da estrutura tridimensional de proteínas, isto é, as posições de cada um dos seus átomos e suas interações, permitiu o desenvolvimento de novas tecnologias para desco-

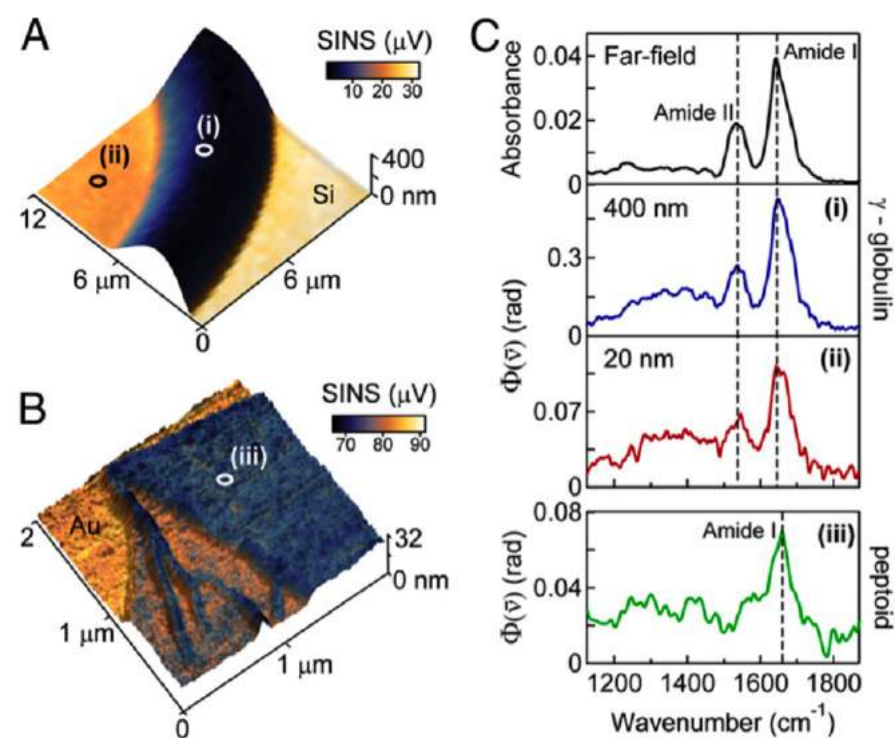


Figura 23 – Adaptado da referência [64]. Medidas de SINS sobrepostas a topografia de uma amostra de  $\gamma$ -globulina seca em um substrato de Si (A) e um nano-filme de peptídeo em substrato de Au. À direita os espectros de FTIR com resolução espacial nanométrica obtidos nas regiões i, ii e iii das figuras (A) e (B) comparados com o espectro mais convencional de FTIR (far-field)

berta de fármacos, um dos exemplos mais impactantes do uso dos síncrotrons. De fato, existem hoje cerca de 92.000 estruturas de proteínas conhecidas e registradas no Protein Data Bank (PDB), das quais cerca de 80% foram resolvidas com o uso de radiação síncrotron. Atualmente, esta proporção vem aumentando, chegando a 90% das estruturas desvendadas em síncrotrons por ano. O chamado desenho racional de fármacos (*rational drug design*), por exemplo, procura identificar oportunidades de bloquear ou modificar estas interações moleculares das proteínas. Uma vez que uma proteína é identificada como o alvo terapêutico, o estudo estrutural com um síncrotron pode mostrar como o fármaco se liga a essa molécula, guiar modificações para melhorar essa ligação do fármaco, ou mesmo sugerir que modificações na estrutura molecular do fármaco, possam ser feitas sem afetar suas capacidades de ligação na proteína.

Alguns dos primeiros exemplos de sucesso desta metodologia, em que a estrutura guiou o desenho racional dos fármacos, incluem o captopril (Capoten) para o tratamento de hipertensão, por meio da inibição de enzimas conversoras de angiotensina; a dorzolamida (Trusopt), para o tratamento de glaucoma por meio da inibição de anidrase carbônica; e vários medicamentos que fazem parte do coquetel anti-AIDS, os quais inibem a protease do HIV; além dos medicamentos zanamivir (Relenza) e oseltamivir (Tamiflu) para tratamento de influenza tipo A e a influenza tipo B, empregados como tratamento durante a pandemia de gripe suína (gripe H1N1), em 2009. Esses últimos inibem uma proteína da superfície do vírus da gripe, a neuraminidase.

No tratamento de alguns cânceres, doenças inflamatórias e do diabetes, proteínas chamadas quinases têm sido alvo de diversas investigações da biologia estrutural, voltadas ao desenho racional de fármacos. Elas formam uma classe de enzimas que participam ativamente na regulação de processos celulares, como metabolismo, crescimento e diferenciação. Vários inibidores de quinases desenvolvidos por desenho racional tem sido alvo de testes clínicos, sendo o de maior sucesso o imatinib (Glivec). Esse fármaco é usado para tratar leucemia mieloide crônica, tumores estromais gastrointestinais, e outras doenças malignas. Vale ressaltar que esse foi o primeiro genérico para o câncer a ser produzido no Brasil. Esses medicamentos foram baseados na combinação de observações clínicas, químicas e biológicas, mas contaram com a tecnologia de luz síncrotron como ferramenta decisiva na elucidação dos mecanismos nanoscópicos necessários para que os fármacos atingissem seu alvos.

**HIV:** Um exemplo de modelo atômico do capsídeo do vírus HIV-1 (cápsula de origem proteica que protege e facilita sua proliferação) permitirá grandes avanços na cura da AIDS<sup>[65]</sup>. Para infectar uma célula os vírus têm que se ligar a receptores para ganhar sua entrada. Uma vez dentro da célula, o capsídeo se desfaz e o material genético do vírus é liberado, sabotando a maquinaria da célula para fazer cópias do seu próprio código genético e proteínas. Esse novo material genético é então encapsulado em capsídeos esféricos novos e imaturos que escapam da célula e que amadurecem na forma de cones para que eles possam infectar novas células<sup>[66]</sup>.

A partir deste conhecimento da estrutura atômica do capsídeo maduro, simulações computacionais permitirão determinar a estabilidade da estrutura em diferentes regiões e identificar possíveis pontos fracos, que podem ser alvos de novos medicamentos que ataquem esta cápsula protetora, sem a qual o vírus não sobrevive. No entanto, obter este tipo de estrutura tridimensional do capsídeo do HIV-1 inteiro por cristalografia de proteínas é uma tarefa complexa que exige o uso de feixes de raios X micrométricos, como os da linha Manacá. Na figura 24 são apresentadas as estruturas das partes do capsídeo e o modelo atomístico completo construído a partir destas peças elementares obtidas por cristalografia de macromoléculas.

Atualmente, a combinação de medicamentos do “coquetel” anti-AIDS ataca diferentes passos da replicação do vírus, aumen-

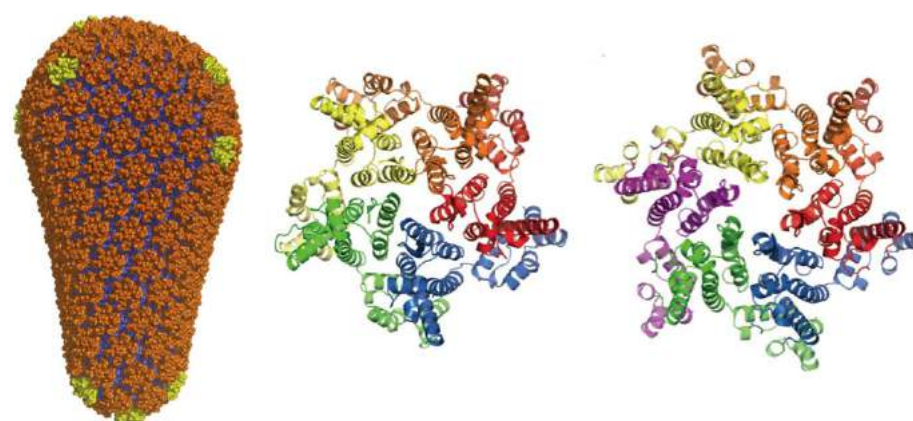


Figura 24 - Adaptado da referência [65]. À esquerda: estrutura tridimensional do capsídeo do HIV baseada em 1065 unidades de proteínas de capsídeo. Os domínios pentâmeros e hexâmeros e dímeros são coloridos em amarelo, laranja e azul. Meio e direita: Estrutura dos pentâmeros e hexâmeros, respectivamente

tando a sobrevivência de pessoas infectadas. Embora eles tenham mudado o padrão epidêmico da AIDS há ainda muito a ser feito, principalmente quanto à redução de efeitos colaterais. Novos medicamentos como os inibidores de enzimas que inserem o DNA do vírus ao DNA humano (raltegravir e elvitegravir) são menos tóxicos, mas parecem induzir mutações genéticas nos vírus, tornando-os mais resistentes. Medicamentos que explorem outros alvos, como os capsídeos<sup>[66]</sup>, podem ser uma alternativa importante para o futuro do tratamento da doença.

**Opiáceos:** Embora o desenho racional de fármacos tenha se tornado uma estratégia comum na indústria farmacêutica, a maioria dos medicamentos disponíveis hoje não foram desenvolvidos dessa forma. Apesar de eficácia comprovada, pouco se sabe sobre os seus mecanismos moleculares de ação.

Este conhecimento, mesmo em medicamentos muito usados e comprovadamente eficazes, é necessário. Este é o caso dos opiáceos, por exemplo. Embora amplamente receitados, seus mecanismos de transdução neuroquímica de sinais ainda não são completamente conhecidos.

Nas terminações nervosas sensoriais existem receptores opiáceos periféricos que são naturalmente disparados por neurotransmissores naturais, como endorfinas, as encefalinas e dinorfinas. Opiáceos sintéticos e semissintéticos como morfina, codeína e heroína também podem disparar estes receptores, imitando os neurotransmissores naturais. No entanto, a presença de íons de sódio em concentrações tipicamente encontradas nos fluidos do cérebro são capazes de inibir a interação dos neurotransmissores ou dos opiáceos com os receptores.

O mecanismo desta inibição de neurotransmissores, foi desconhecido por 40 anos, foi resolvido este ano<sup>[67]</sup> com o auxílio da cristalografia de proteínas. Esse conhecimento abrirá as portas para novos tratamentos de distúrbios relacionados à dor ou à depressão e dependência química. Um dos grandes desafios foi resolver a estrutura dos receptores opiáceos com resolução de 1,8 Å. Essa alta resolução foi necessária para reconhecer regiões do receptor opiáceo  $\delta$ , o maior receptor opiáceo do cérebro humano, ao qual os íons de sódio podem se ligar, modificando sua estrutura terciária e inibindo sua capacidade de ligação com os neurotransmissores.

**Tomografia celular e parasitologia:** Os exemplos anteriores, com os raios X, apresentaram escalas de comprimento extremas, indo dos diagnósticos por tomografia de raios X de obje-

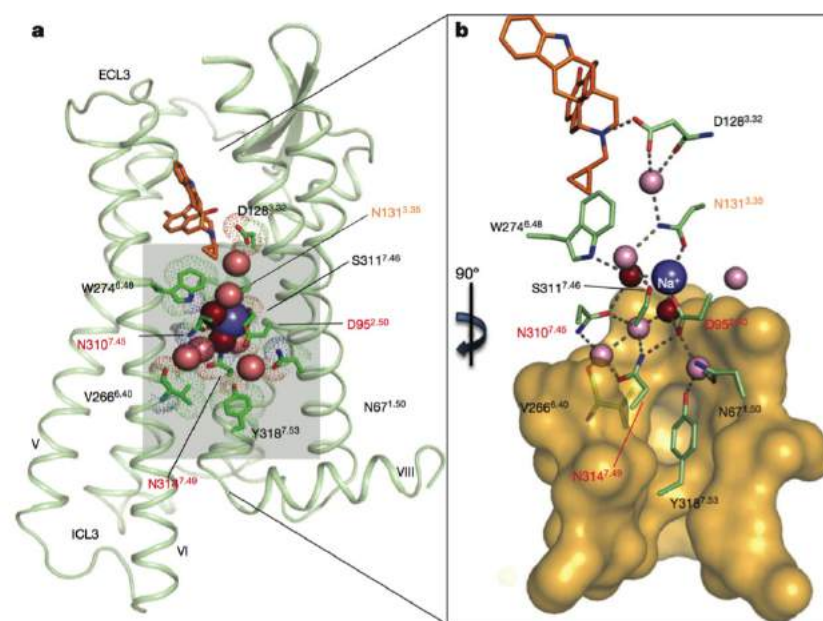


Figura 25 - Adaptado da referência [67]. Estrutura tridimensional do receptor opiáceo  $\delta$ , mostrando em azul o íon de Sódio alojado e em vermelho e rosa moléculas de água na primeira e segunda esfera de coordenação

tos macroscópicos com resoluções microscópicas, da ordem de  $\mu\text{m}$ , até as imagens detalhadas das estruturas tridimensionais de proteínas com tamanhos de até dezenas de nm, com resolução da ordem de 0,1 nm. Esses limites dizem respeito a processos fisiológicos correlacionados, porém, houve um vazio entre escalas de comprimento de dezenas de  $\mu\text{m}$  e dezenas de nm, que corresponde às dimensões da célula. As técnicas de tomografia por raios X moles e tender (que estarão disponíveis nas linhas Catere-tê e Sabiá) permitem obter imagens de células com resolução suficientes para entender a estrutura de organelas, permitindo correlacionar todas as escalas de comprimento, desde o diagnóstico por imagens até a escala estrutural das proteínas. **No futuro, será possível não apenas projetar novos fármacos ou estruturas de enzimas vegetais, mas também ter uma visão global dos mecanismos de metabolismo celular, desde o nível atômico até o nível de tecido, combinando várias técnicas de imagem por luz síncrotron. Esse talvez seja o maior impacto científico que fontes de luz síncrotron, como o Sirius, trarão para a evolução da fronteira do conhecimento na área da saúde.**

Atualmente, a técnica de tomografia celular por raios X está sendo usada em vários estudos na área de saúde, saindo de um experimento conceitual, como era considerado há alguns anos, para algo aplicado em áreas como a parasitologia. Um exemplo importante é apresentado nas referências<sup>[68,69]</sup>, na qual a téc-



nica foi utilizada para compreender melhor os mecanismos de infecção por malária. A malária é uma doença infecciosa, febril, potencialmente grave, causada pelo parasita do gênero *Plasmodium*, transmitido ao homem, na maioria das vezes pela picada de mosquitos infectados. Estima-se que mais de 40% da população mundial está exposta ao risco de adquirir malária. No Brasil, segundo dados do Ministério da Saúde, em 2011, 99,7% dos casos de transmissão da doença se concentraram na região amazônica, considerada uma área endêmica no País. A grande maioria das mortes é provocada por espécies *falciparum* do *Plasmodium*. Em particular, o nome *falciparum* se dá pelo formato falciforme (forma de foice) que o parasita adota quando se prepara para ser transferido para o mosquito vetor da malária, em contraste com a forma mais arredondada de parasitas menos virulentos da malária. Em uma parte do seu ciclo de vida, em que o parasita passa dentro de glóbulos vermelhos do seu hospedeiro humano, ele se desenvolve de forma assexuada em formas anelares e trofozóitos (afiliada) e, posteriormente, se divide em cerca de 20 células esquizontes. Na célula hospedeira são também produzidas, em menor fração, formas sexuais (gametócitos) capazes de infectar outro mosquito e dar continuidade ao ciclo de vida. Esta fase representa um gargalo no desenvolvimento do parasita, e atacá-la poderia impedir a transmissão da doença. De fato, várias organizações como a *Gates Foundation*, a *Medicines for Malaria Venture (MMV)*, e a *Malaria Vaccine Initiative (MVI)* consideram a pesquisa em gametócitos de alta prioridade na erradicação da doença<sup>[68]</sup>.

Durante o desenvolvimento do parasita nos glóbulos vermelhos, ele passa por várias transformações de forma e volume. No caso da evolução da fase assexuada, a variação de volume do parasita pode chegar a 20 vezes, mantendo o volume do glóbulo infectado quase constante, enquanto na fase sexuada o gametócito passa por grandes mudanças de forma, chegando a uma forma de “banana” (figura 26). Há várias questões intrigantes que passam por conhecer a estrutura tridimensional das fases do parasita. Porque, e como, ele pode mudar de forma e aumentar seu tamanho sem causar ruptura da membrana plasmática e destruição do glóbulo vermelho, no qual está hospedado. Imagens 3D de glóbulos vermelhos infectados permitem avaliar com precisão detalhes das organelas das células e o conteúdo de hemácias e mostram que o parasita consome parte dos componentes da célula para poder ocupar seu volume, produzindo cristais de hemozoína, resultantes da digestão da hemoglobina pelo parasita, conhecido como pigmento malárico. Além disso, é possível concluir com esse estudo que a mudança de forma dos gametócitos é um mecanismo que os permite a entrada na corrente sanguínea.

Assim como na cristalografia de proteínas, um dos grandes desafios técnicos é evitar o dano por radiação de estruturas biológicas frágeis durante a exposição por raios X. As imagens reproduzidas na figura 26 foram obtidas pelo contraste de absorção de raios X de baixa energia. Para evitar danos de radiação, as amostras foram congeladas em diferentes estágios do desenvolvimento do gametócito. No ponto atual de desenvolvimento da técnica de tomografia celular por raios X, espera-se que, em breve, seja possível obter imagens como essas em tempo real, utilizando contraste de difração.

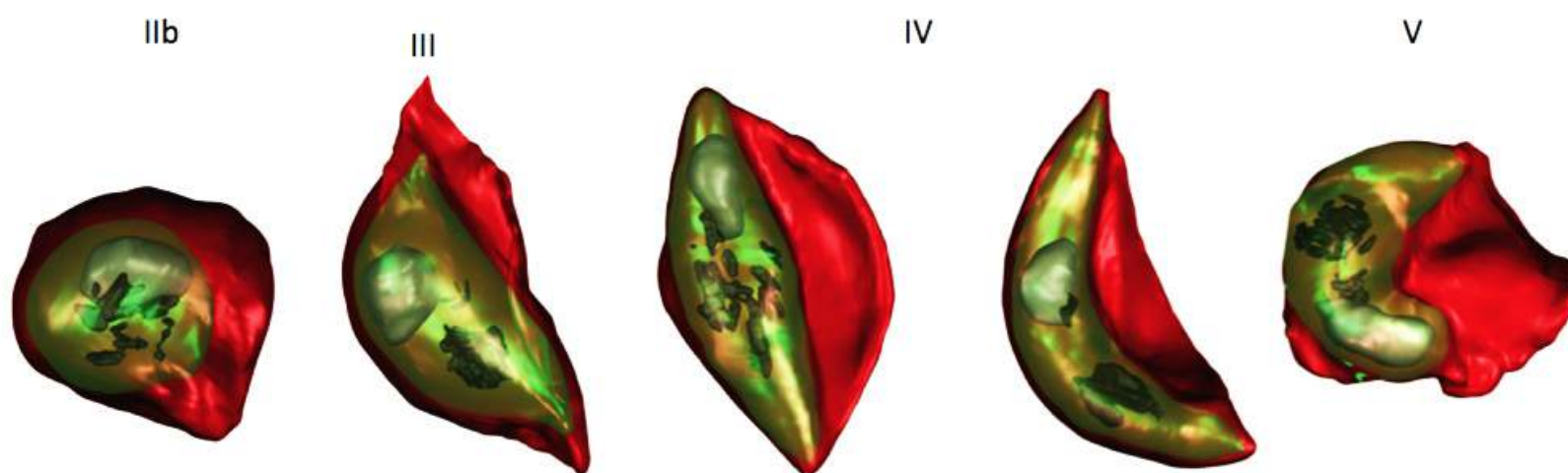


Figura 26 - Adaptado da referência [68]. Estágios do desenvolvimento do gametócito dentro dos glóbulos vermelhos, observados por nanotomografia de raios X. Membrana do glóbulo vermelho (vermelho translúcido), núcleo (azul-cinza), superfície do parasita (verde translúcido) e cristais de hemozoína, resultantes da digestão da hemoglobina pelo parasita, conhecido como pigmento malárico (cinza escuro)

A técnica de imagem difrativa por raios X coerentes permite um melhor contraste e um menor dano por radiação, além de permitir o uso de amostras em meio líquido<sup>[70]</sup>, como demonstrado recentemente. Na figura 27<sup>[71,72]</sup>, as organelas de um fungo são apresentadas em detalhe com resolução de 10 nm, obtida pelo método de imagem por difração coerente.

**A linha Cateretê, com seu alto fluxo coerente, graças à baixa emitância do Sirius, está sendo projetada para ser o estado da arte neste tipo de técnica, e abrirá novas perspectivas no estudo de células e na compreensão de processos de metabolismo celular ligados a nutrição, atividade enzimática, doenças e outros.**

No futuro, essa técnica, aliada às informações de resolução atômica dada pela cristalografia de proteínas, e às informações de morfologia de tecido, dadas pela tomografia de raios X por contraste de fases, trará um conhecimento profundo e atômico

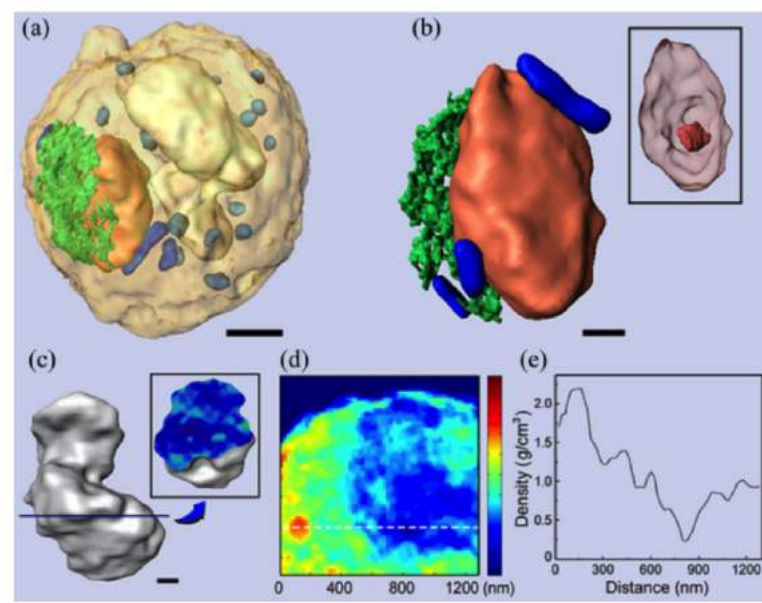
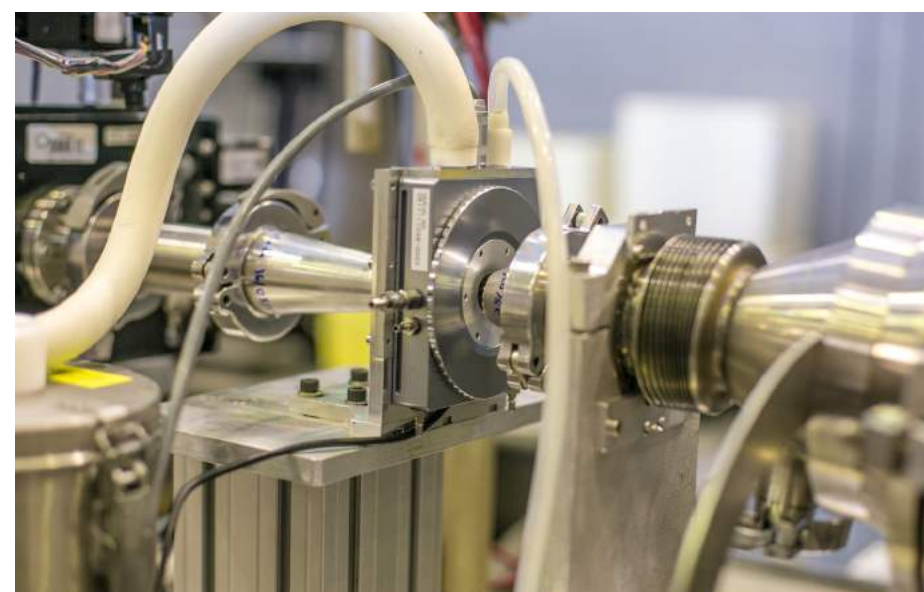


Figura 27 – Adaptada das referências [71,72]. Imagem 3D quantitativa de uma célula de esporo de fungo do *Schizosaccharomyces pombe*. (a) Renderização volumétrica mostrando núcleo (laranja), retículo endoplasmático (verde), vacúolo (branco), mitocôndria (azul), e grânulos (azul claro). A barra de escala é de 500 nm. (b) Zoom da morfologia 3-D e estrutura do núcleo, retículo endoplasmático e mitocôndria. Detalhe do núcleo em laranja em destaque. Barra de escala de 200 nm. (c) Morfologia 3D do vacúolo com detalhe da seção transversal 200 nm. (d), (e) Fatia transversal do esporo de fungo e traçado de densidade eletrônica pela linha branca tracejada mostrando as variações através da mitocôndria e do vacúolo

de toda maquinaria de funcionamento dos seres vivos, levando a uma nova era de conhecimento científico. Com o Sirius, o Brasil poderá participar e se tornar um dos líderes desta revolução científica, prevista para as próximas décadas.

Em todos os exemplos apresentados anteriormente, foram abordados problemas que são estratégicos para o Brasil nas áreas de agricultura e meio ambiente, saúde e energia. A estratégia científica que permeia todos esses exemplos é a compreensão dos mecanismos micro e nanoscópicos que levam a processos macroscópicos desejados ou indesejados em materiais biológicos ou sintéticos a fim de possibilitar a manipulação da matéria em nível molecular. Seja na criação de um medicamento, no ataque a um parasita, na extração do petróleo, no aproveitamento da biomassa para obtenção de energia ou no desenho de novos fertilizantes, o conhecimento micro e nanoscópico é indispensável.

Obviamente, não há uma única ferramenta que cubra todos os aspectos técnicos e científicos individualmente. Ao mesmo tempo, não há ferramenta que seja útil sem a criatividade do pensamento humano dedicado à solução de problemas. **Combinar linhas de luz especialmente escolhidas e desenhadas para atacar problemas estratégicos para o País, usando uma das fontes de luz síncrotron mais avançadas do mundo, de modo a transformar conhecimento microscópico em riqueza para a nação – essa é a proposta do projeto Sirius para o avanço tecnológico do País.**



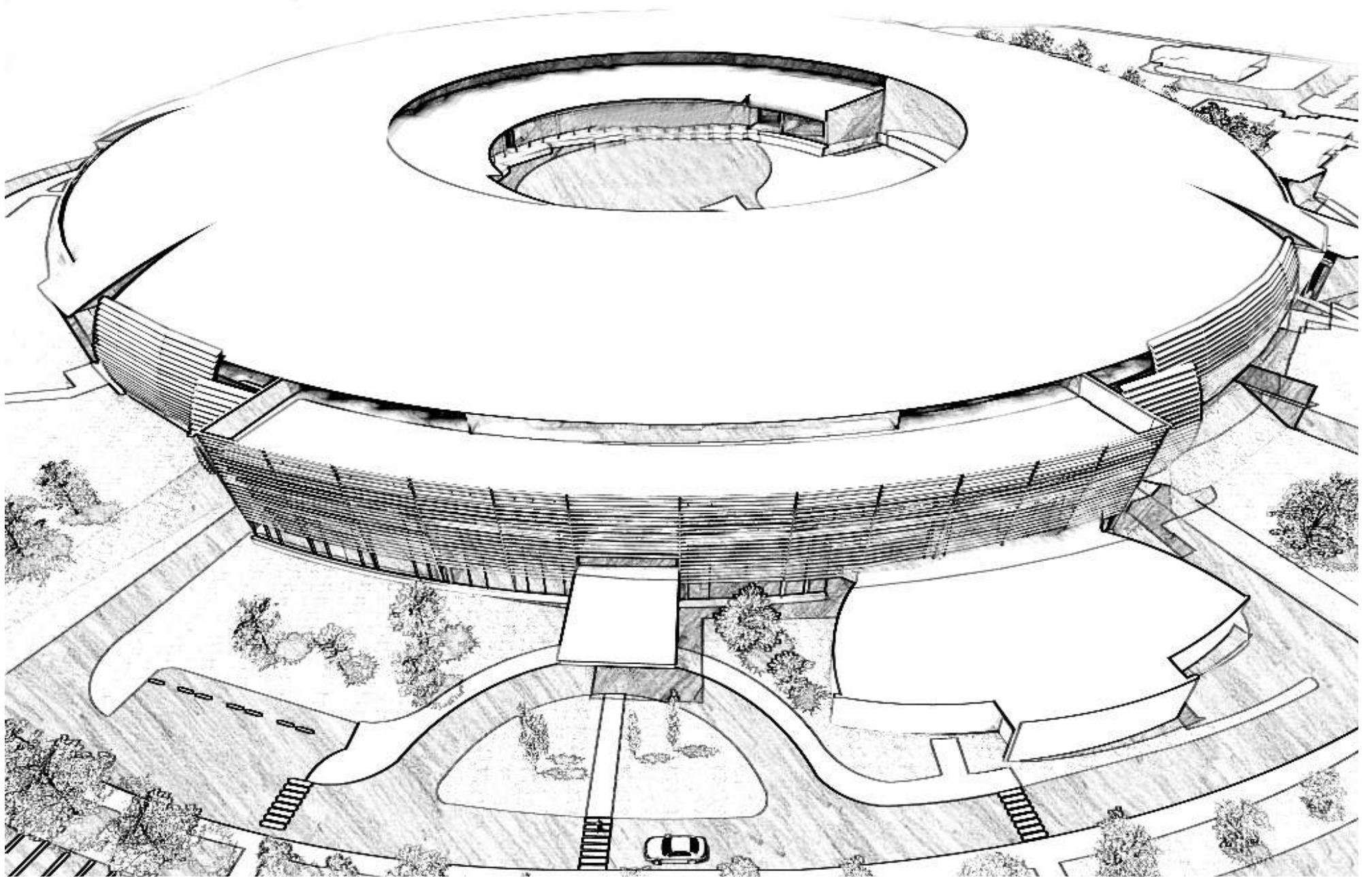
Set up experimental de espalhamento de raios X a baixos ângulos com calorimetria diferencial in situ

## Referências

- [1] SEEFELDT, L. C., HOFFMAN, B. M., & DEAN, D. R. (2012). Electron transfer in nitrogenase catalysis. *Current Opinion in Chemical Biology*, 16(1-2), 19–25. doi:10.1016/j.cbpa.2012.02.012
- [2] MANCEAU, A. e NAGY, K. L. Quantitative analysis of sulfur functional groups in natural organic matter by XANES spectroscopy. *GEOCHIMICA ET COSMOCHIMICA ACTA*, v. 99, p. 206–223, doi:10.1016/j.gca.2012.09.033, 2012.
- [3] KEYES, S. D. et al. High resolution synchrotron imaging of wheat root hairs growing in soil and image based modelling of phosphate uptake. *The New phytologist*, v. 198, n. 4, p. 1023–9, doi:10.1111/nph.12294, 2013.
- [4] LOMBI, E. et al. Megapixel imaging of (micro)nutrients in mature barley grains. *Journal of experimental botany*, v. 62, n. 1, p. 273–82, doi:10.1093/jxb/erq270, 2011.
- [5] KIRKHAM, R. et al. The Maia Spectroscopy Detector System: Engineering for Integrated Pulse Capture, Low-Latency Scanning and Real-Time Processing. *American Institute of Physics Conference Proceedings*, v. 1234, n. 1, 2010.
- [6] WITHANA-GAMAGE, T. S. et al. Characterization of Arabidopsis thaliana lines with altered seed storage protein profiles using synchrotron-powered FT-IR spectromicroscopy. *Journal of agricultural and food chemistry*, v. 61, n. 4, p. 901–12, doi:10.1021/jf304328n, 2013.
- [7] SERVIN, A. D. et al. Synchrotron verification of TiO<sub>2</sub> accumulation in cucumber fruit: a possible pathway of TiO<sub>2</sub> nanoparticle transfer from soil into the food chain. *Environmental science & technology*, v. 47, n. 20, p. 11592–8, doi:10.1021/es403368j, 2013.
- [8] BADGER, J. et al. Three-dimensional imaging of crystalline inclusions embedded in intact maize stalks. *Scientific reports*, v. 3, p. 2843, doi:10.1038/srep02843, 2013.
- [9] ELIMELECH, M. e PHILLIP, W. a. The future of seawater desalination: energy, technology, and the environment. *Science* (New York, N.Y.), v. 333, n. 6043, p. 712–7, doi:10.1126/science.1200488, 2011.
- [10] BEASLEY, C. J. et al. Brazil 's Presalt Play. *Oilfield Review*, v. 22, p. 28–37, 2010.
- [11] PEREZ, M. A. et al. Meeting the Subsalt Challenge Drillers today are confident about their ability to reach reserves buried beneath. *Oilfield Review*, v. 1, n. 1, p. 4–17, 2008.
- [12] PAULA, O. B. DE. *Elastic Properties of Carbonates: Measurements and Modelling*. Western Australian School of Mines - [S.l.]. 2011.
- [13] DUSSEALUT, M. B. (GEOMECH) et al. Drilling through salt: constitutive behavior and drilling strategies. In: GULF ROCKS, THE 6TH NORTH AMERICA ROCK MECHANICS SYMPOSIUM (NARMS). *Anais...* [S.l.: s.n.], 2004.
- [14] SHAPIRO, S. A. Elastic piezosensitivity of porous and fractured rocks. *Geophysics*, v. 68, n. 2, p. 482–486, 2003.
- [15] SHULAKOVA, V. et al. Computational elastic up-scaling of sandstone on the basis of X-ray micro-tomographic images. *Geophysical Prospecting*, p. no–no, doi:10.1111/j.1365-2478.2012.01082.x, 2012.
- [16] HAZLETT, R. D. et al. DEVELOPMENTS IN SYNCHROTRON X-RAY MICROTOMOGRAPHY FOR APPLICATION TO FLOW IN POROUS MEDIA. In: ANNUAL TECHNICAL CONFERENCE OF THE SOCIETY OF CORE ANALYSTS. *Anais...* Montpellier, France: [s.n.], 1996.
- [17] COLES, M. E. et al. Pore level imaging of fluid transport using synchrotron X-ray microtomography. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, v. 19, p. 55–63, 1998.
- [18] LINDQUIST, W. B. et al. synchrotron X-ray tomographic images. *Journal of Geophysical Research*, v. 105, p. 509–521, 2000.
- [19] DUNSMUIR, J. H. (ExxonMobil) et al. X-RAY MICROTOMOGRAPHIC IMAGING AND ANALYSIS FOR BASIC RESEARCH. *JCPDS*, p. 53–62, 2006.
- [20] IGLAUER, S. et al. Comparison of residual oil cluster size distribution, morphology and saturation in oil-wet and water-wet sandstone. *Journal of colloid and interface science*, v. 375, n. 1, p. 187–92, doi:10.1016/j.jcis.2012.02.025, 2012.
- [21] DUROCHER, K.; KOTZER, T. e WHITTAKER, S. Physical and Chemical Characterization of Subterranean CO<sub>2</sub> Storage Sites Using Synchrotron-based Computed. *Saskatchewan Geological Survey*. [S.l.: s.n.], 2005. v. 1p. 1–7.
- [22] KOBCHENKO, M. et al. 4D imaging of fracturing in organic-rich shales during heating. *Journal of Geophysical Research*, v. 116, n. B12, p. 1–9, doi:10.1029/2011JB008565, 2011.
- [23] PANAH, H. et al. A 4D Synchrotron X-Ray-Tomography Study of the Formation of Hydrocarbon- Migration Pathways in Heated Organic-Rich Shale. *SPE Journal*, 2012.
- [24] SCHOENHERR, J. et al. Deformation mechanisms and rheology of Pre-cambrian rocksalt from the South Oman Salt Basin. In: PROCEEDINGS OF THE 6TH CONFERENCE ON THE MECHANICAL BEHAVIOR OF SALT, "SALTMECH6." *Anais...* Hannover, Germany: [s.n.], 2007.
- [25] RENARD, F. et al. Synchrotron 3D microtomography of halite aggregates during experimental pressure solution creep and evolution of the permeability Franc. *Geophysical Research Letters*, v. 31, p. 1–4, doi:10.1029/2004GL019605, 2004.
- [26] BERG, S. et al. Real-time 3D imaging of Haines jumps in porous media flow. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, n. 14, p. 3–7, doi:10.1073/pnas.1221373110, 2013.
- [27] MULLINS, O. C. (Schlumberger-D. R. et al. *Asphaltenes, Heavy Oils, and Petroleomics*. New York: Springer Science, 2007. p. 0677
- [28] BERGMANN, U. et al. X-Ray Raman Spectroscopy—A New Tool to Study Local Structure of Aromatic Hydrocarbons and Asphaltenes. *Petroleum Science and Technology*, v. 22, n. 7-8, p. 863–875, doi:10.1081/LFT-120038722, 2004.
- [29] BERGMANN, U. et al. Carbon K-edge X-ray Raman spectroscopy supports simple , yet powerful description of aromatic hydrocarbons and asphaltenes. *Chemical Physics Letters*, v. 369, p. 184–191, doi:10.1016/S0009-2614(02)02003-1, 2003.
- [30] WALDO, G. S. et al. Sulfur speciation in heavy petroleums: Information from X-ray absorption near-edge structure. *Geochemica et Cosmochimica Acta*, v. 55, p. 801–814, 1991.
- [31] GORBATY, M. L. (Exxon R. e KELEMEN, S. R. (Exxon R. CHARACTERIZATION AND REACTIVITY OF ORGANICALLY BOUND SULFUR AND NITROGEN IN FOSSIL FUELS. *Fuel processing technology*, v. 71, n. 1, p. 71–78, 2001.
- [32] WILTFONG, R. et al. Sulfur Speciation in Different Kerogens by XANES Spectroscopy. *Energy & Fuels*, v. 52, n. 6, p. 1971–1976, 2005.
- [33] ISABELLE, H. et al. Organization of Asphaltenes in a Vacuum Residue: A Small-Angle X-ray Scattering ( SAXS ) - Viscosity Approach at High Temperatures. *Energy & Fuels*, v. 26, p. 2696–2704, 2012.
- [34] BUCKLEY, J. S. (New M. P. R. R. C. et al. ASPHALTENE PRECIPITATION AND SOLVENT PROPERTIES OF CRUDE OILS. *Petroleum Science and Technology*, v. 16, n. 3, p. 1–28, 1998.
- [35] PINA, A.; MOUGIN, P. e BÉHAR, E. Characterisation of Asphaltenes and Modelling of Flocculation – State of the Art. *Oil & Gas Science and Technology – Rev. IFP*, v. 61, n. 3, p. 319–343, 2006.
- [36] BARRE, L.; SIMON, S. e PALERMO, T. Solution Properties of Asphaltenes. *Langmuir*, v. 24, n. 29, p. 3709–3717, 2008.



- [37] ZUO, J. Y. et al. Advances in the Flory–Huggins–Zuo Equation of State for Asphaltene Gradients and Formation Evaluation. *Energy & Fuels*, p. 121120163051002, doi:10.1021/ef301239h, 2012.
- [38] MCCUSKER, L. B. et al. A re-examination of the structure of the germanosilicate zeolite SSZ-77. *Solid State Sciences*, v. 13, n. 4, p. 800–805, doi:10.1016/j.solidstatesciences.2010.02.028, 2011.
- [39] SHAYIB, R. M. et al. Structure-Directing Roles and Interactions of Fluoride and Organocations with Siliceous Zeolite Frameworks. *JACS*, v. 133, p. 18728–18741, 2011.
- [40] XIE, D. et al. Optimized Synthesis and Structural Characterization of the Borosilicate MCM-70. *Journal of Physical Chemistry C*, v. 113, p. 9845–9850, 2009.
- [41] ZANARDI, S. et al. ERS-18: A new member of the NON–EUO–NES zeolite family. *Microporous and Mesoporous Materials*, v. 143, n. 1, p. 6–13, doi:10.1016/j.micromeso.2011.01.025, 2011.
- [42] ZANARDI, S. et al. Investigation on the hydrated and dehydrated forms of the ion-exchanged microporous stannosilicate EMS-2. *Microporous and Mesoporous Materials*, v. 117, n. 1–2, p. 414–422, doi:10.1016/j.micromeso.2008.07.030, 2009.
- [43] United States. SCHMITT, D. K. *Use of crystalline SUZ-9*. n. [s.n.], 1994.
- [44] United States. VALENCIA, A. et al. ITQ-26, *new crystalline microporous material*. n. United States, 2009.
- [45] GONZALEZ-JIMENEZ, I. D. et al. Hard X-ray Nanotomography of Catalytic Solids at Work. *Angewandte Chemie (International ed. in English)*, v. 51, p. 11986–11990, doi:10.1002/anie.201204930, 2012.
- [46] SMIT, E. DE et al. Nanoscale chemical imaging of a working catalyst by scanning transmission X-ray microscopy. *Nature*, v. 456, p. 222–225, 2008.
- [47] LEI, Y. et al. Increased silver activity for direct propylene epoxidation via subnanometer size effects. *Science (New York, N.Y.)*, v. 328, n. 5975, p. 224–8, doi:10.1126/science.1185200, 2010.
- [48] CLIMENT, M. J.; CORMA, A. e IBORRA, S. Conversion of biomass platform molecules into fuel additives and liquid hydrocarbon fuels. *Green Chemistry*, v. 16, n. 2, p. 516, doi:10.1039/c3gc41492b, 2014.
- [49] SHUTTLEWORTH, P. S. et al. Applications of nanoparticles in biomass conversion to chemicals and fuels. *Green Chemistry*, v. 16, n. 2, p. 573, doi:10.1039/c3gc41555d, 2014.
- [50] FRENKEL, A. I.; RODRIGUEZ, J. A. e CHEN, J. G. Synchrotron Techniques for In Situ Catalytic Studies: Capabilities, Challenges, and Opportunities. *ACS Catalysis*, v. 2, n. 11, p. 2269–2280, doi:10.1021/cs3004006, 2012.
- [51] CHUNDAWAT, S. P. S. et al. Deconstruction of lignocellulosic biomass to fuels and chemicals. *Annual review of chemical and biomolecular engineering*, v. 2, p. 121–45, doi:10.1146/annurev-chembioeng-061010-114205, 2011.
- [52] GILBERT, H. J. The biochemistry and structural biology of plant cell wall deconstruction. *Plant physiology*, v. 153, n. 2, p. 444–55, doi:10.1104/pp.110.156646, 2010.
- [53] JACQUES, S. D. M. et al. Dynamic X-Ray Diffraction Computed Tomography Reveals Real-Time Insight into Catalyst Active Phase Evolution \*\*. *Angewandte Chemie International Edition*, v. 50, p. 10148–10152, doi:10.1002/anie.201104604, 2011.
- [54] PAKHARE, D. e SPIVEY, J. A review of dry (CO<sub>2</sub>) reforming of methane over noble metal catalysts. *Chemical Society reviews*, doi:10.1039/c3cs60395d, 2014.
- [55] EBNER, M. et al. Visualization and quantification of electrochemical and mechanical degradation in Li ion batteries. *Science (New York, N.Y.)*, v. 342, n. 6159, p. 716–20, doi:10.1126/science.1241882, 2013.
- [56] STRASSER, P. et al. Lattice-strain control of the activity in dealloyed core-shell fuel cell catalysts. *Nature chemistry*, v. 2, n. 6, p. 454–60, doi:10.1038/nchem.623, 2010.
- [57] ZHAO, Y. et al. tomography for 3D diagnosis of human breast cancers. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, v. 109, n. 45, p. 18290–18294, doi:10.1073/pnas.1204460109/-/DCSupplemental.www.pnas.org/cgi/doi/10.1073/pnas.1204460109, 2012.
- [58] MOSS, D. (Ed. . Biomedical Applications of Synchrotron Infrared Microspectroscopy. 2011.
- [59] BELLISOLA, G. e SORIO, C. Infrared spectroscopy and microscopy in cancer research and diagnosis. *American journal of cancer research*, v. 2, n. 1, p. 1–21, 2012.
- [60] DERENNE, A.; VERDONCK, M. e GOORMAGHTIGH, E. The effect of anticancer drugs on seven cell lines monitored by FTIR spectroscopy. *The Analyst*, v. 137, n. 14, p. 3255–64, doi:10.1039/c2an35116a, 2012.
- [61] DERENNE, A.; GASPER, R. e GOORMAGHTIGH, E. The FTIR spectrum of prostate cancer cells allows the classification of anticancer drugs according to their mode of action. *The Analyst*, v. 136, n. 6, p. 1134–41, doi:10.1039/c0an00872a, 2011.
- [62] BAKER, M. J. et al. FTIR-based spectroscopic analysis in the identification of clinically aggressive prostate cancer. *British journal of cancer*, v. 99, n. 11, p. 1859–66, doi:10.1038/sj.bjc.6604753, 2008.
- [63] NASSE, M.; WALSH, M. e MATTSON, E. High-resolution Fourier-transform infrared chemical imaging with multiple synchrotron beams. *Nature Methods*, v. 8, n. 5, p. 1–12, doi:10.1038/nmeth.1585.High-resolution, 2011.
- [64] BECHTEL, H. a et al. Ultrabroadband infrared nanospectroscopic imaging. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, doi:10.1073/pnas.1400502111, 2014.
- [65] PORNILLOS, O.; GANSER-PORNILLOS, B. K. e YEAGER, M. Atomic-level modelling of the HIV capsid. *Nature*, v. 469, n. 7330, p. 424–7, doi:10.1038/nature09640, 2011.
- [66] ENGELMAN, A. e CHEREPANOV, P. The structural biology of HIV-1: mechanistic and therapeutic insights. *Nature reviews. Microbiology*, v. 10, n. 4, p. 279–90, doi:10.1038/nrmicro2747, 2012.
- [67] FENALTI, G. et al. Molecular control of  $\delta$ -opioid receptor signalling. *Nature*, v. 506, n. 7487, p. 191–6, doi:10.1038/nature12944, 2014.
- [68] DIXON, M. W. a et al. Shape-shifting gametocytes: how and why does *P. falciparum* go banana-shaped? *Trends in parasitology*, v. 28, n. 11, p. 471–8, doi:10.1016/j.pt.2012.07.007, 2012.
- [69] HANSEN, E. et al. Soft X-ray microscopy analysis of cell volume and hemoglobin content in erythrocytes infected with asexual and sexual stages of *Plasmodium falciparum*. *Journal of structural biology*, v. 177, n. 2, p. 224–32, doi:10.1016/j.jsb.2011.09.003, 2012.
- [70] NAM, D. et al. Imaging Fully Hydrated Whole Cells by Coherent X-Ray Diffraction Microscopy. *Physical Review Letters*, v. 110, n. 9, p. 098103, doi:10.1103/PhysRevLett.110.098103, 2013.
- [71] MIAO, J.; SANDBERG, R. e SONG, C. Coherent X-Ray Diffraction Imaging. *Selected Topics in Quantum ...*, p. 1–12, 2012.
- [72] JIANG, H. et al. Quantitative 3D imaging of whole, unstained cells by using X-ray diffraction microscopy. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, v. 107, n. 25, p. 11234–9, doi:10.1073/pnas.1000156107, 2010.



[Inls.cnpem.br/sirius](http://Inls.cnpem.br/sirius)



**CNPEN**

---

Rua Giuseppe Máximo Scolfaro, 10000  
Pólo II de Alta Tecnologia de Campinas  
Bairro Guar - Campinas, So Paulo, Brasil

Correspondncia: Caixa Postal 6192  
CEP 13083-970, Campinas, So Paulo, Brasil  
Fone: +55 19 3512-1010 - Fax: +55 19 3512-1004

---

Ministrio da  
**Cincia, Tecnologia  
e Inovao**