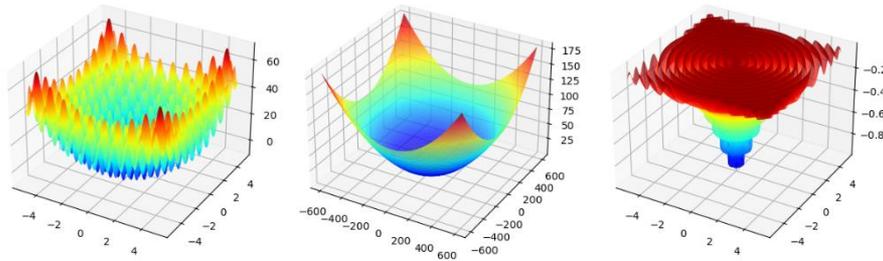
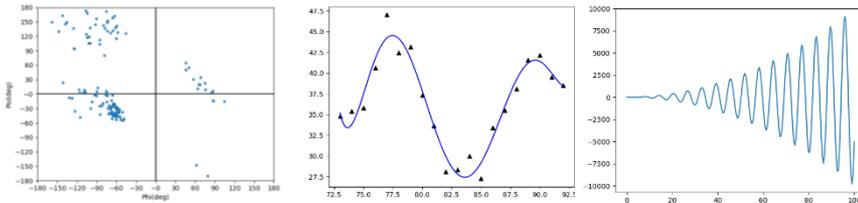


Síncrotron

$$\frac{dv}{dt} = g - \frac{b}{m}v$$

$$\frac{dy}{y} = -kdt$$

$$\frac{dv}{dt} = a_0 + a_1t + a_2t^2$$

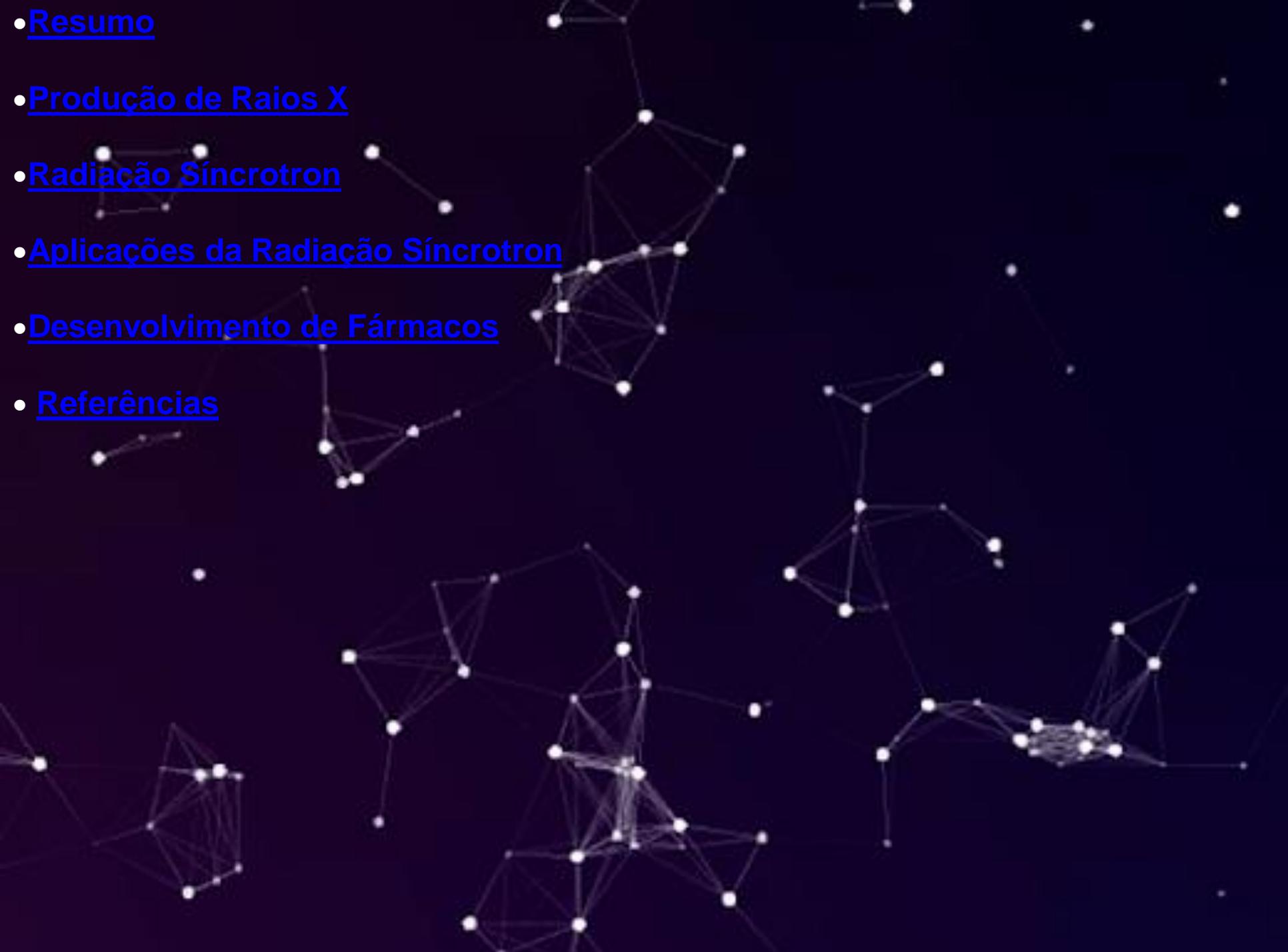


$$\frac{dv}{dt} = a$$

$$\frac{dx}{dt} = v_0 + at$$

$$\frac{du}{dt} = -k(u - T)$$

$$\frac{dy}{dt} = v_0 \sin \theta_0 - gt$$

- [Resumo](#)
 - [Produção de Raios X](#)
 - [Radiação Síncrotron](#)
 - [Aplicações da Radiação Síncrotron](#)
 - [Desenvolvimento de Fármacos](#)
 - [Referências](#)
- 

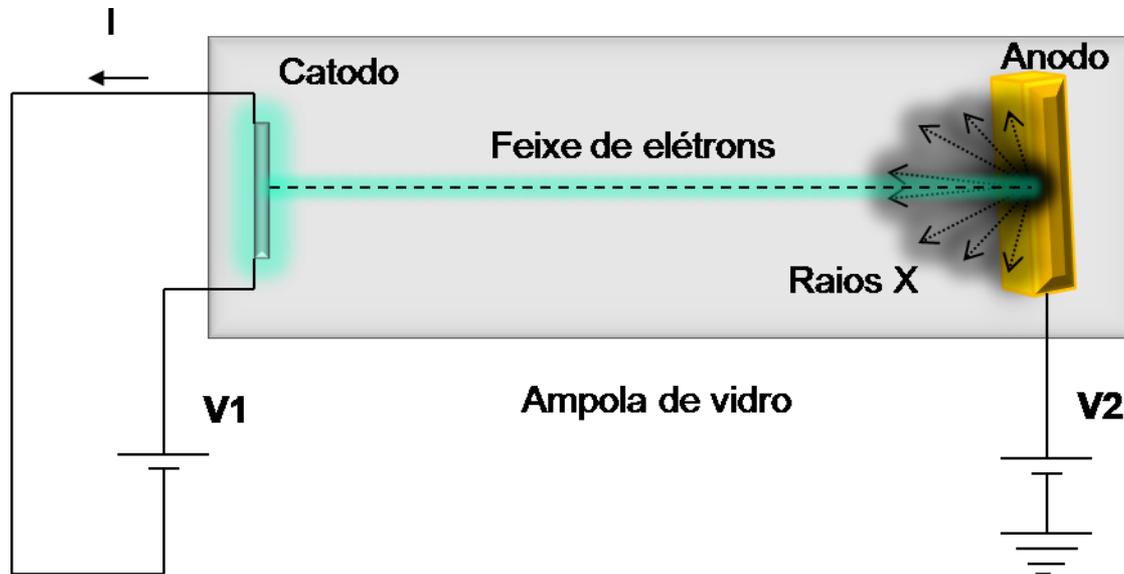
Radiações têm papel bem conhecido para geração de imagens médicas, sendo a radiação X a mais utilizada. Hoje veremos como podemos produzir raios X para diagnóstico e pesquisa básica sobre macromoléculas biológicas. Descreveremos a forma convencional de produção de raios X por meio de um tubo de raios X e através de um equipamento chamado sincrotron. Este usa um acelerador de partículas para a geração de radiação. Destacaremos as aplicações no estudo de possíveis fármacos para tratar a Covid-19.



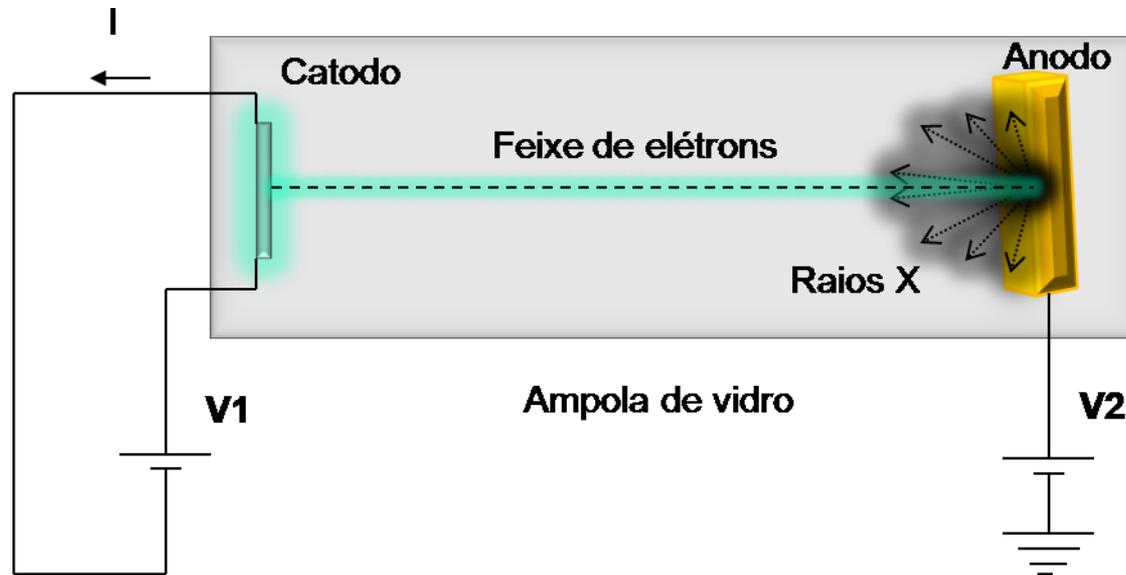
Os raios X foram descobertos em 1895 de forma quase acidental. O físico alemão Wilhelm Conrad Roentgen realizava experimentos com um tubo de vidro, onde foi feito vácuo. No tubo de vidro havia dois eletrodos e uma diferença de potencial de milhares de volts foi aplicada. Tal diferença de potencial levou elétrons a migrarem de um eletrodo para outro, gerando uma radiação desconhecida até então, que Roentgen chamou de raios X. Diversos testes foram realizados. Num dos experimentos Roentgen descobriu a radiografia médica de raios X (mostrada ao lado). Roentgen usou a mão de sua esposa (Anna Bertha Ludwig) para registrar a radiografia.



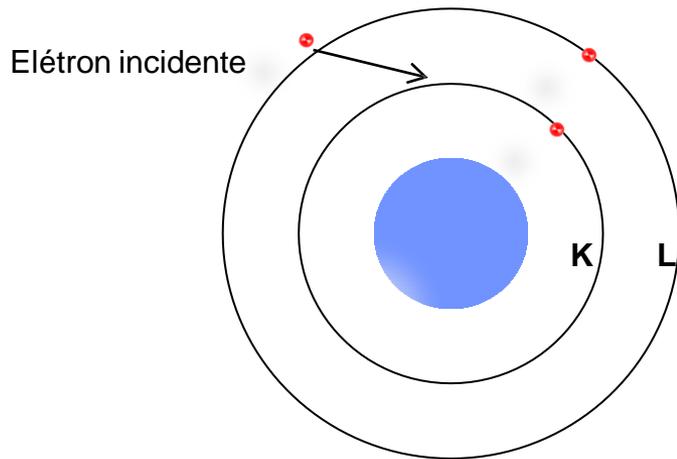
Considere um tubo de vidro onde foi feito vácuo, no tubo temos dois eletrodos inseridos, conforme o esquema abaixo. O catodo apresenta um filamento metálico. O catodo é aquecido devido à passagem da corrente elétrica I o que gera uma nuvem de elétrons. O anodo apresenta uma diferença de potencial (ddp) (V_2) em relação ao catodo. Essa ddp promove a aceleração dos elétrons do catodo para o anodo.



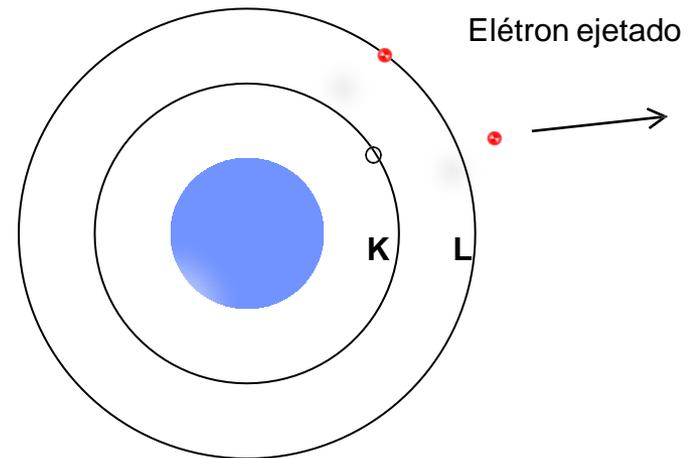
Os elétrons são acelerados e colidem com o anodo. A colisão converte parte da energia cinética (K) em energia térmica (E_t), que aquece o anodo. Outra parte da energia cinética (K) é convertida em radiação eletromagnética, na forma de raios X. Com uma ddp da ordem de algumas dezenas de milhares de volts (kV), teremos a geração de raios X. Esse espectro de raios X é chamado **radiação branca**, que se sobrepõe ao **espectro característico** devido à retirada de elétrons dos átomos do anodo.



O modelo de Bohr é suficiente para entendermos os principais aspectos do espectro característico de raios X. Considere que os átomos do anodo são bombardeados com elétrons com energia cinética (K). Os elétrons apresentam energia suficiente para arrancar elétrons da camada átomo (da camada K), como mostrado na figura abaixo.

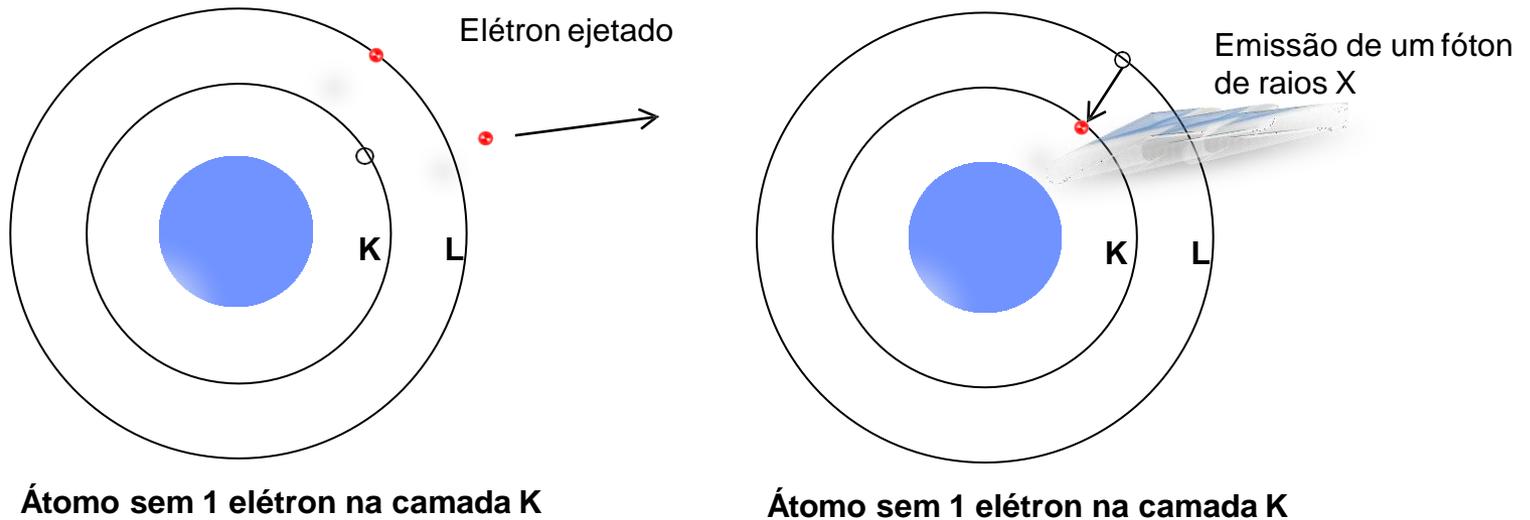


Átomo no estado fundamental

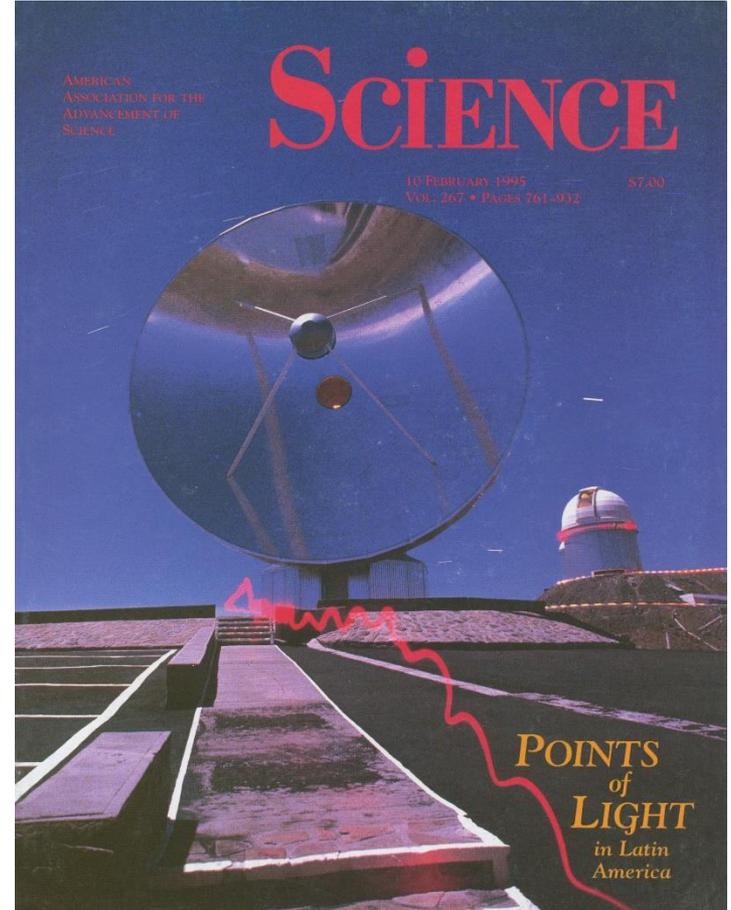


Átomo sem 1 elétron na camada K

O átomo sem um elétron é instável e tende a absorver um elétron de uma camada mais externa. Ao absorver esse elétron, o excesso de energia é emitido na forma de um fóton de raios X, que terá a energia determinada pela diferença de energia entre os níveis da transição.



Em 1995 a conceituada revista científica *Science* trouxe uma série de artigos destacando o progresso da ciência na América Latina. Um dos destaques foi o Laboratório Nacional de Luz Síncrotron ([Marshall E. Physicists hand-build a synchrotron. Science. 1995 Feb 10;267\(5199\):813. doi: 10.1126/science.267.5199.813. PMID: 17813896.](#)), que em 1995 ainda estava em fase de construção.



Capa da revista Science de Fevereiro de 1995. Fonte: <https://www.science.org/toc/science/267/5199>

Outra forma de produzirmos raios X é a partir da radiação síncrotron. Do eletromagnetismo clássico, sabemos que toda partícula com carga elétrica quando acelerada emite radiação. Assim, ao acelerarmos um elétron, ou pósitron (partícula com massa igual à do elétron, mas com carga positiva), e confinarmos esta partícula em um toroide (formato de donut), onde foi feito vácuo, teremos produção de radiação. Esse sistema de produção de radiação é chamado síncrotron. A radiação produzida é chamada de radiação síncrotron. A construção de um síncrotron demanda grande investimento e conhecimento técnico e científico. No Brasil, desde 1997 temos um laboratório nacional dedicado à produção de radiação síncrotron.



Diagrama esquemático do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS). Fonte: <http://www.lnls.br>

Num síncrotron temos um anel de armazenamento, onde fica girando um feixe de elétrons. A aceleração do feixe de elétrons produz radiação síncrotron. Para manter o feixe de elétrons confinado e sob constante aceleração, este é submetido a um campo magnético (B) (figura abaixo) que desvia a trajetória do feixe de elétrons o suficiente para mantê-los confinados e acelerados no anel de armazenamento.

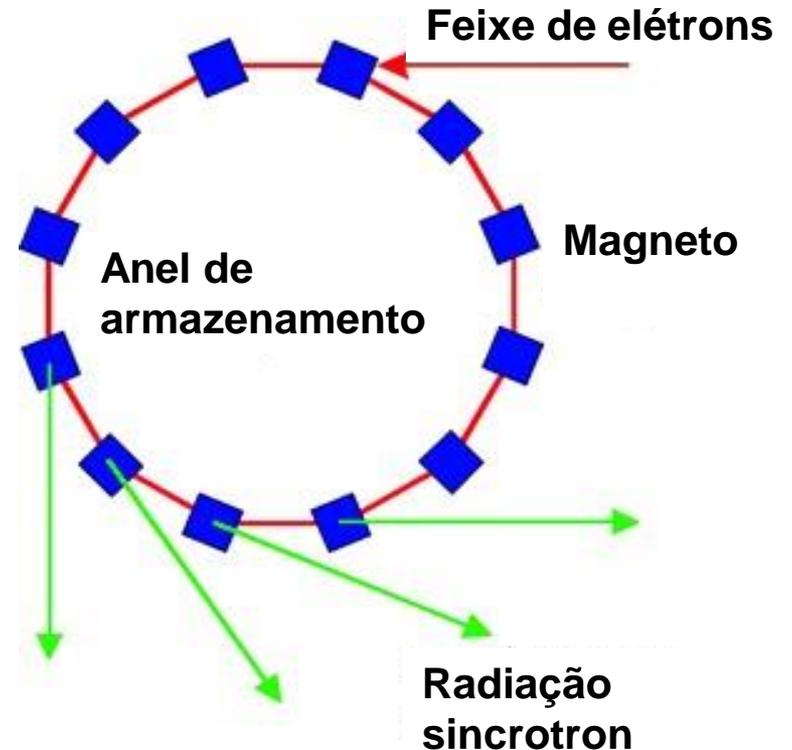
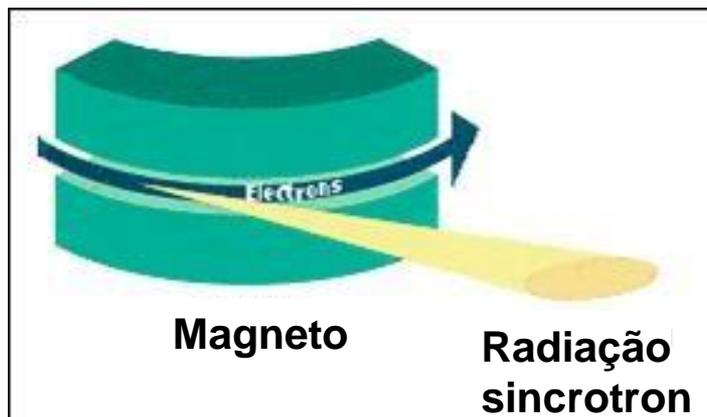


Diagrama esquemático do anel de armazenamento do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS). Fonte: <http://www.lnls.br>

O prédio do anel principal do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS) está mostrado na foto abaixo. O LNLS produz radiação intensa, que tem sido usada para experimentos de cristalografia por difração de raios X, espectroscopia e outras técnicas da física.



Foto. Cortesia da Dra. Ana Luiza Vivan.

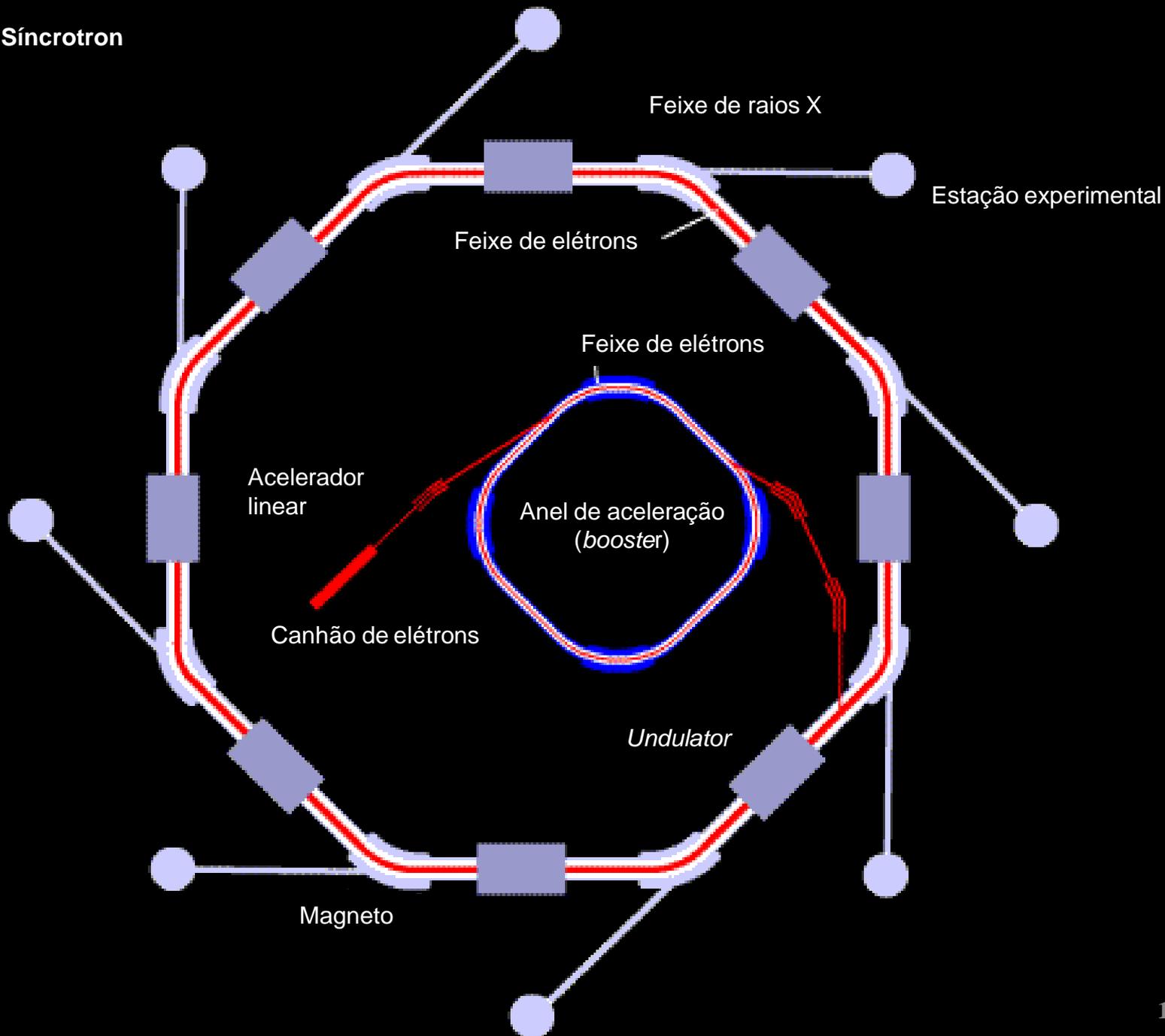
O LNLS foi inaugurado em junho de 1997, e desde então tem sido usado de forma intensa pela comunidade científica brasileira e internacional. O LNLS é um laboratório nacional, aberto à comunidade científica brasileira e internacional.



5 2 2009
18

Foto. Cortesia de Anne Vilela

Radiação Síncrotron



ENTENDA COMO FUNCIONA

- 1 Acelerador linear** - Onde os elétrons são gerados por aquecimento de uma liga metálica
- 2 Booster** - Anel de aceleração no qual os elétrons são acelerados para a injeção no anel principal.
- 3 Anel principal** - Tubo de vácuo no qual os elétrons viajam próximo a velocidade da luz. A rota dos elétrons é guiada por ímãs que curvam a trajetória do anel.
- 4 Linhas de Luz** - Quando a trajetória dos elétrons é desviada, eles emitem fótons na forma de síncrotron, que são canalizados para as 'linhas de luz', que se estendem para fora do anel. É nessas linhas que são feitos os experimentos.
- 5 Paredes de concreto** - Com espessuras de até 1,5 metros, isolam as partes internas do acelerador, impedindo o "vazamento de radiação".
- 6 Superperíodo de ímãs:**
 - Há 1250 ímãs em torno do anel, organizados em 20 blocos chamados superperíodos. Existem três tipos.
 - **Dipolos:** Desviam a trajetória dos elétrons para que sigam a curvatura dos anéis
 - **Quadrípolos:** Compactam os feixes de elétrons para não se dispersarem (foco)
 - **Sextupolos:** Corrigem pequenas dispersões de energias
- 7** As linhas de luz são isoladas em containers de chumbo, para isolamento radiológico e estabilidade térmica.
- 8 Monocromador** - Funciona como um filtro, selecionando o tipo de luz que o cientista precisa (exemplo, raios X)
- 9** Na ponta da linha é colocada a amostra que se deseja iluminar para o estudo

Projeto Sirius

O novo acelerador de partículas do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), cinco vezes maior e muito mais potente que o atual, será um dos melhores do mundo em sua categoria e tem previsão de inauguração em 2016.

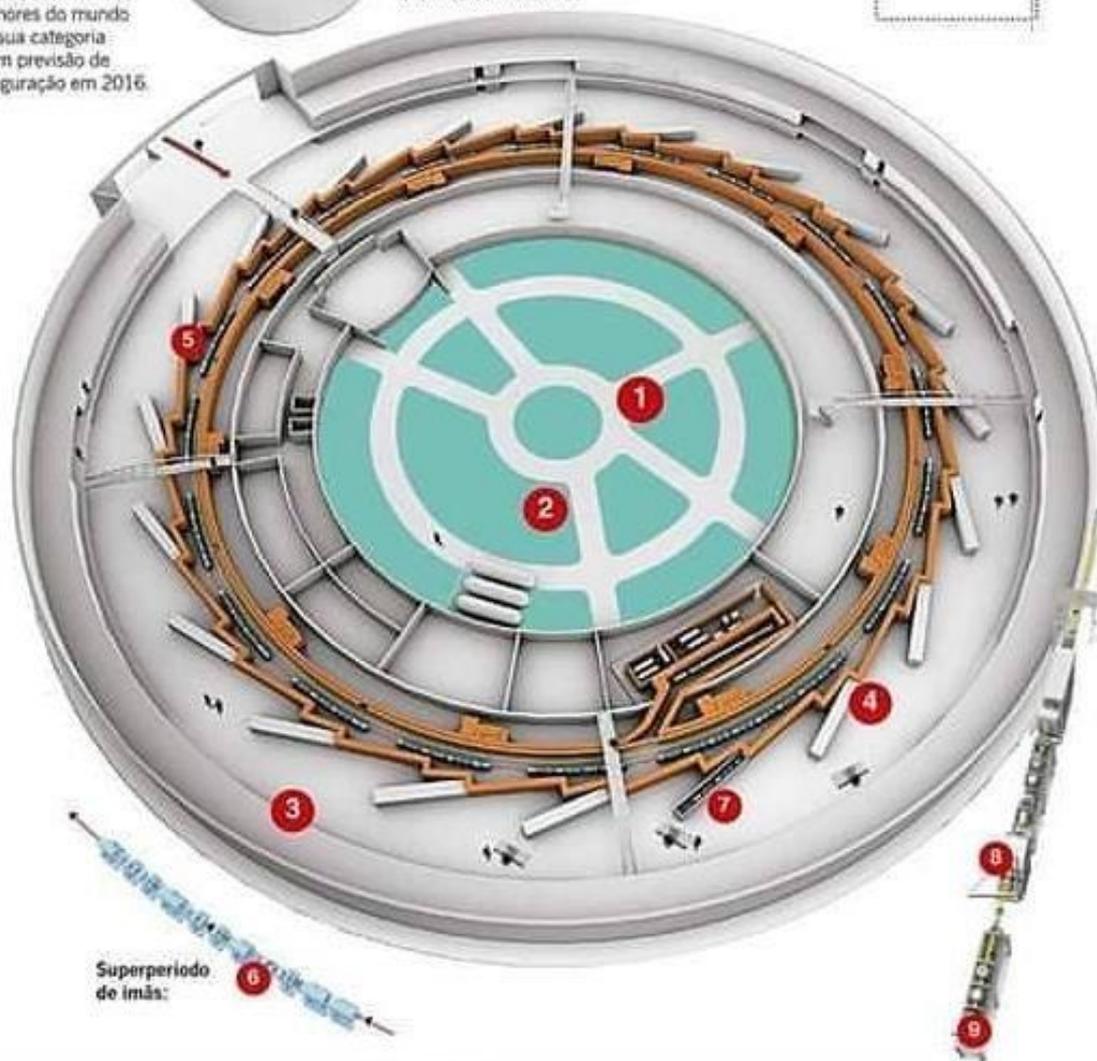
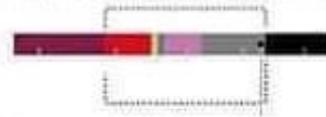


O que faz o acelerador

O Sirius é uma máquina que acelera elétrons em uma velocidade próxima a da luz, para produzir uma luz chamada "síncrotron", usada para estudar a estrutura atômica de materiais.

O que é a luz síncrotron

Toda luz é um tipo de radiação eletromagnética, definida pela sua frequência de onda (ou espectro). A luz síncrotron é uma radiação de amplo espectro, que abrange desde o infravermelho até o raio X.



Superperíodo de ímãs:

A estrutura do Sirius

O funcionamento da nova fonte de luz síncrotron

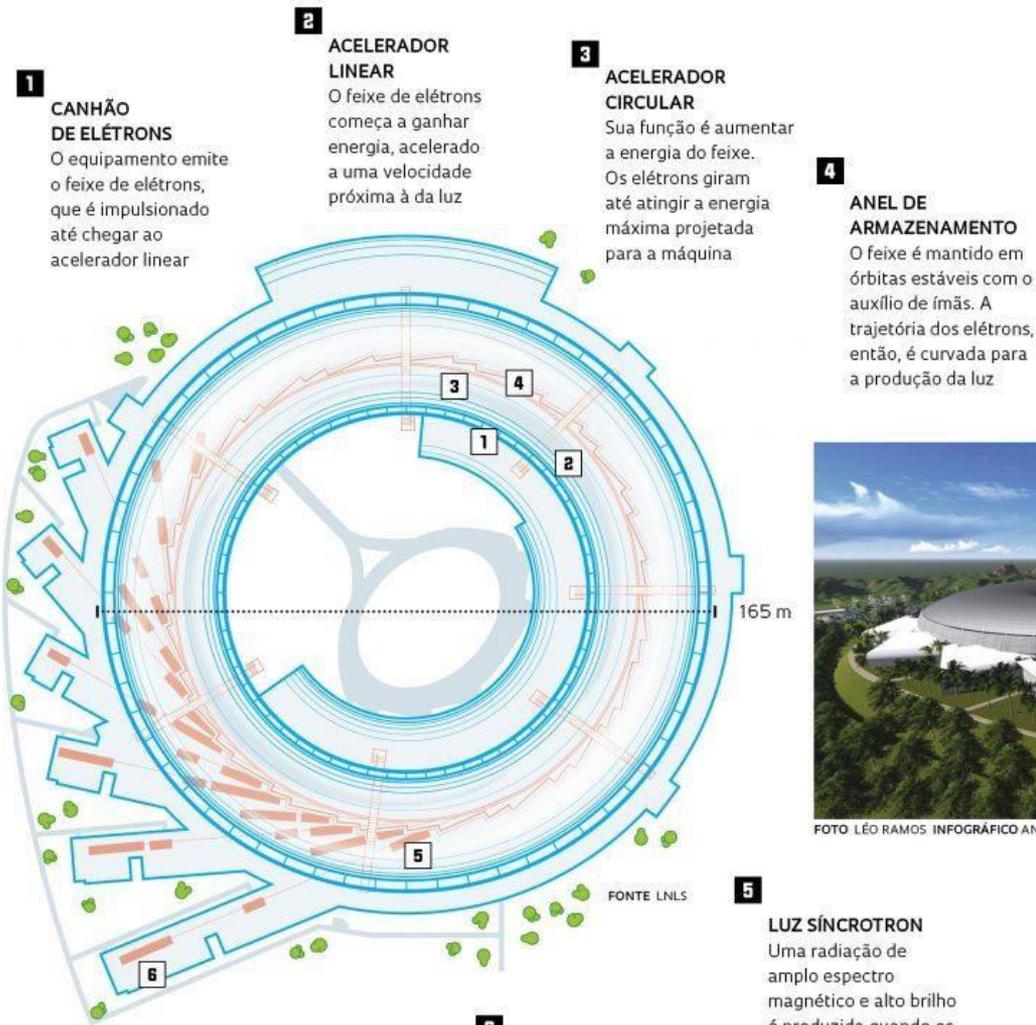


FOTO LÉO RAMOS INFOGRÁFICO ANA PAULA CAMPOS ILUSTRAÇÃO ALEXANDRE AFFONSO

O QUE É

Essencialmente, um acelerador de partículas que não realiza colisões entre elas. Dentro da máquina, elétrons ultrarrápidos emitem radiação síncrotron, um tipo especial de luz, que serve para estudar a estrutura de moléculas e cristais.

APLICAÇÃO

Serão montados laboratórios nos feixes de radiação gerados pelo acelerador para estudar a composição e comportamento de materiais ou moléculas com alta resolução.

Laboratórios

O Sirius começa a operar com 6 deles abrigados em extensões do prédio do acelerador. Outros 7 usarão linhas de luz curtas, que cabem no pátio principal. No total, há potencial para até 40 linhas de luz.

Fontes: ILS/CPDM

COMO FUNCIONA?

1 Canhão de elétrons

Um eletrodo é usado como canhão de elétrons para injetar essas partículas no circuito do acelerador.

2 Acelerador linear

Na primeira etapa, os elétrons passam por um acelerador linear, e começam a ganhar energia.

3 Booster

As partículas são inseridas no anel "booster", que usa ímãs para acelerá-las até quase a velocidade da luz.

4 Anel de armazenamento

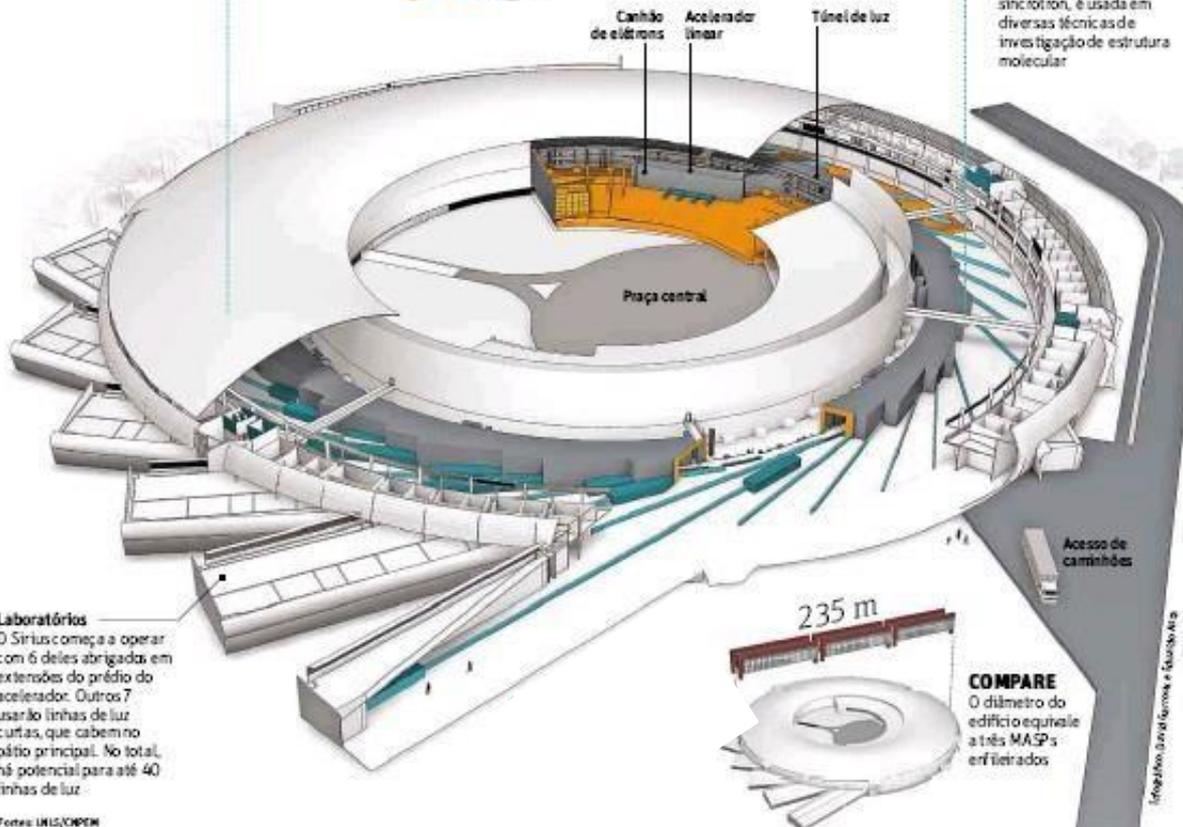
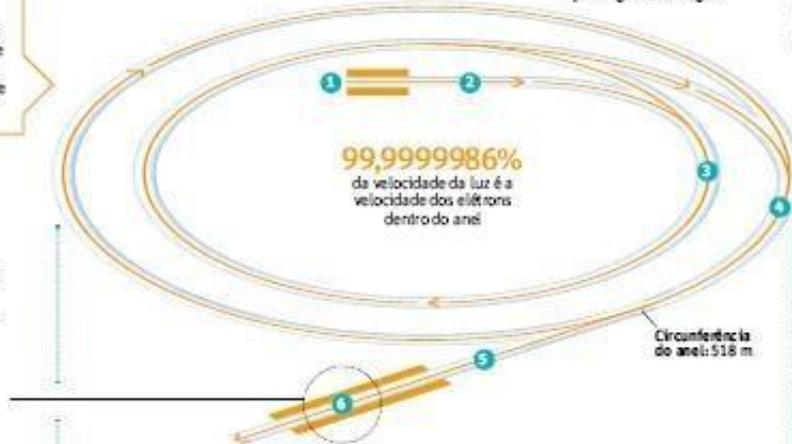
Os elétrons são entregues ao anel de armazenamento, em forma de um polígono de 20 lados, que os mantém circulando.

5 Linhas de luz

Quando ímãs forçam elétrons a fazer a curva dos vértices do polígono, as partículas emitem radiação pela tangente.

6 Aplicações

Essa radiação de amplo espectro, a luz síncrotron, é usada em diversas técnicas de investigação de estrutura molecular.



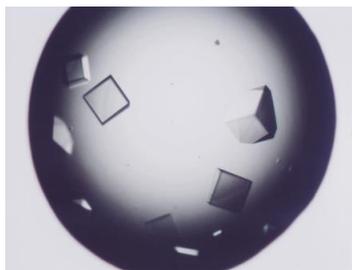
Site indicado: <https://www.lnls.cnpem.br/sirius/>

O site indicado acima é a página oficial do Laboratório Sirius Campinas-SP. O Sirius realiza pesquisas de alto nível sobre aplicações da radiação no estudo de diversos sistemas, com destaque para os sistemas biológicos e proteínas envolvidas em processos biotecnológicos. Clique na imagem para um tour virtual.



Há diversas aplicações científicas e tecnológicas da radiação síncrotron. Destacamos abaixo algumas delas.

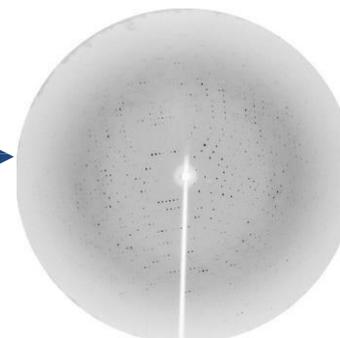
- Biotecnologia
- Biologia
- Nanotecnologia
- Desenvolvimento de Fármacos



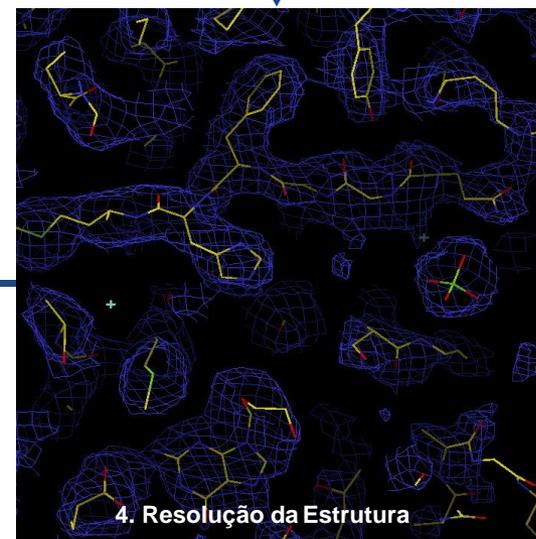
1. Cristalização



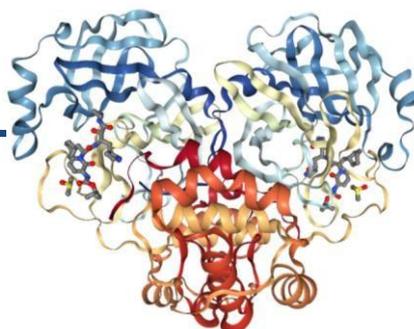
2. Coleta de Dados de Difração de Raios X



3. Análise dos Dados



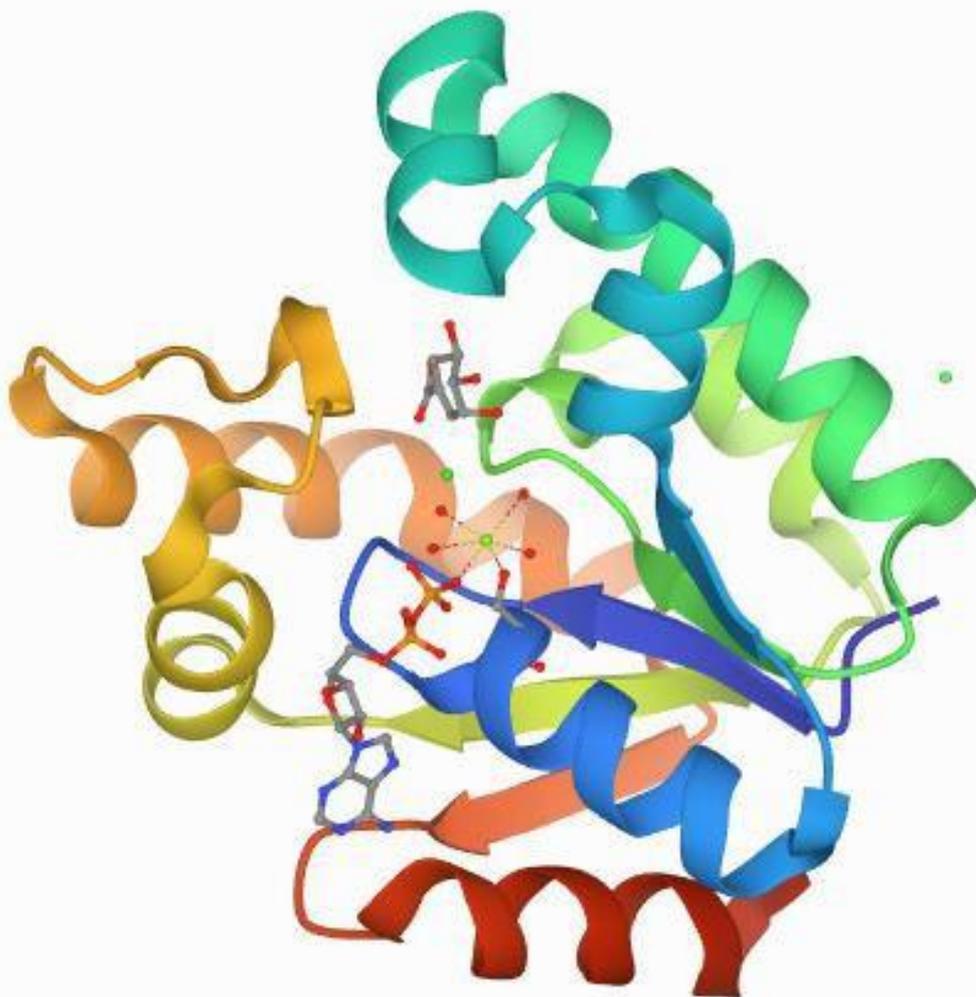
4. Resolução da Estrutura



5. Análise da Estrutura



6. Desenho de Fármacos Baseado em Estrutura



ISSN 0907-4449

Volume 60
Part 12
Number 2

December 2004

Ribosome-inactivating
proteins from a
hemiparasitic plant

Photoactive yellow protein
EsoQ mutant

Aspartate-beta-semi-
aldehyde dehydrogenase
oxanyon specificity

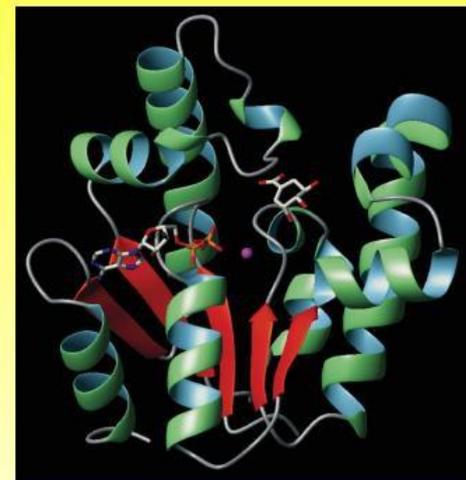
Integral membrane
protein SmrE

SAD at a home source



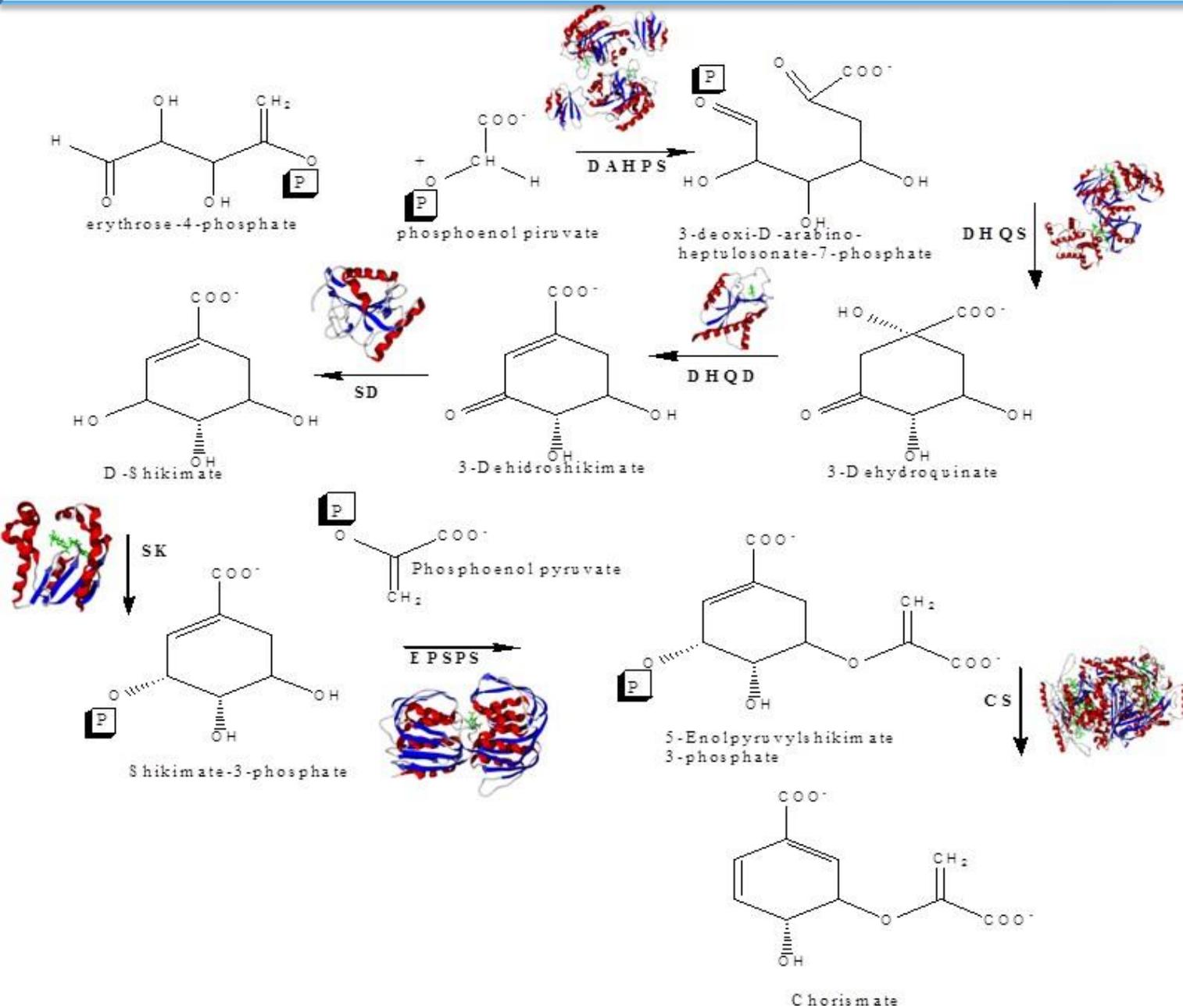
Acta Crystallographica Section D
**Biological
Crystallography**

Editors: E. N. Baker and Z. Dauter



First structure of a shikimate kinase in complex with shikimate, p. 2310

journals.iucr.org
International Union of Crystallography
Blackwell Munksgaard



Henrique Pereira - jbei.org

jbei.org/person/henrique-pereira/

About Research People News Industry Education



[510-486-4790](tel:510-486-4790)

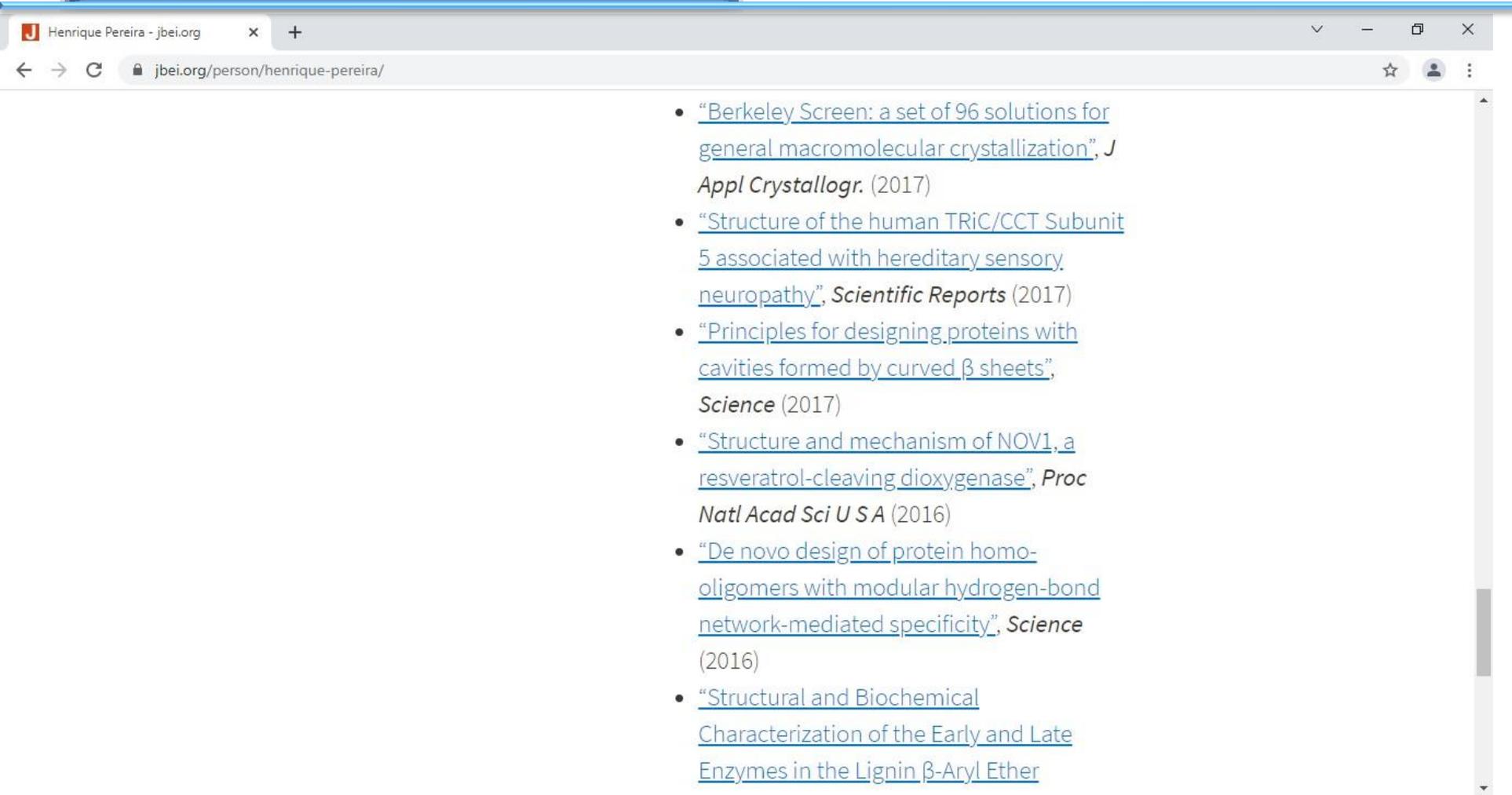
Henrique Pereira

Deputy Director, Structural Biology

Research Focus

Dr. Pereira received a PhD in Molecular Biophysics from Physics Department of São Paulo State University. After his postdoc at University of California – Berkeley, Dr. Pereira joined the Structural Biology group at JBEI. He is a Scientist of the [Molecular Biophysics and Integrated Bioimaging](#) Division at the Lawrence Berkeley National Laboratory's Biosciences Area.

Dr. Pereira's research focuses in Protein X-rays



The image shows a screenshot of a web browser window. The browser's address bar displays the URL [jbei.org/person/henrique-pereira/](https://www.jbei.org/person/henrique-pereira/). The page content consists of a list of seven scientific publications, each preceded by a bullet point. The publications are:

- [“Berkeley Screen: a set of 96 solutions for general macromolecular crystallization”](#), *J Appl Crystallogr.* (2017)
- [“Structure of the human TRiC/CCT Subunit 5 associated with hereditary sensory neuropathy”](#), *Scientific Reports* (2017)
- [“Principles for designing proteins with cavities formed by curved \$\beta\$ sheets”](#), *Science* (2017)
- [“Structure and mechanism of NOV1, a resveratrol-cleaving dioxygenase”](#), *Proc Natl Acad Sci U S A* (2016)
- [“De novo design of protein homo-oligomers with modular hydrogen-bond network-mediated specificity”](#), *Science* (2016)
- [“Structural and Biochemical Characterization of the Early and Late Enzymes in the Lignin \$\beta\$ -Aryl Ether](#)

Fonte: <https://www.jbei.org/person/henrique-pereira/>



[How X-ray crystallography is used in biofuels production](#)



Featured Publications

Complete list from [Research Gate](#)

- [“Berkeley Screen: a set of 96 solutions for general macromolecular crystallization”](#), *J Appl Crystallogr.* (2017)
- [“Structure of the human TRiC/CCT Subunit 5 associated with hereditary sensory neuropathy”](#), *Scientific Reports* (2017)

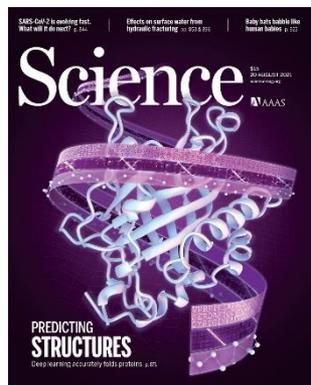
Fonte: <https://youtu.be/Elwwe5YUV7A>



Referência:

Baek M, DiMaio F, Anishchenko I, Dauparas J, Ovchinnikov S, Lee GR, Wang J, Cong Q, Kinch LN, Schaeffer RD, Millán C, Park H, Adams C, Glassman CR, DeGiovanni A, **Pereira JH** et al. Accurate prediction of protein structures and interactions using a three-track neural network. *Science*. 2021; 373(6557): 871-876.

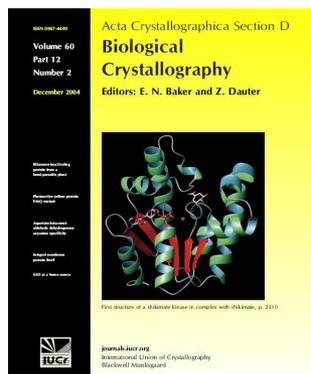
<https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/34282049/>



Baek M, DiMaio F, Anishchenko I, Dauparas J, Ovchinnikov S, Lee GR, Wang J, Cong Q, Kinch LN, Schaeffer RD, Millán C, Park H, Adams C, Glassman CR, DeGiovanni A, **Pereira JH** et al. Accurate prediction of protein structures and interactions using a three-track neural network. *Science*. 2021; 373(6557): 871-876. [PubMed](#)

Canduri F, de Azevedo WF. Protein crystallography in drug discovery. *Curr Drug Targets*. 2008 Dec;9(12):1048-53. doi: 10.2174/138945008786949423. PMID: 19128214. [PubMed](#)

Marshall E. Physicists hand-build a synchrotron. *Science*. 1995 Feb 10;267(5199):813. doi: 10.1126/science.267.5199.813. PMID: 17813896. [PubMed](#)



Pereira JH, de Oliveira JS, Canduri F, Dias MV, Palma MS, Basso LA, Santos DS, de Azevedo WF Jr. Structure of shikimate kinase from *Mycobacterium tuberculosis* reveals the binding of shikimic acid. *Acta Crystallogr D Biol Crystallogr*. 2004 Dec;60(Pt 12 Pt 2):2310-9. doi: 10.1107/S090744490402517X. Epub 2004 Nov 26. PMID: 15583379. [PubMed](#)



**Que a luz da ciência acabe com
as trevas do negacionismo.**