

Automatização de projetos de porta-amostras para experimentos de espalhamento de raios X a baixos ângulos (SAXS) na linha Sapucaia

Orientação: Antonio Malfatti Gasperini (LNLS)

1. Introdução e estado da arte

A linha de luz SAPUCAIA do SIRIUS será dedicada a experimentos de Espalhamento de Raios-X a Baixo Ângulo (SAXS) tanto para amostras sólidas quanto para amostras líquidas. A linha foi projetada para ter um baixo espalhamento parasita para experimentos em solução; para isso ela contará com uma ótica onde não serão necessárias janelas de proteção de vácuo, e será instalada em um trecho de alto beta do SIRIUS, garantindo baixa divergência do feixe [1].

SAXS é uma ferramenta muito útil para a caracterização estrutural de sistemas com dimensões que vão desde algumas unidades até algumas centenas de nanômetros. Os experimentos são geralmente bastante simples e rápidos. Isto permite que seja possível estudar a evolução temporal do comportamento de amostras sujeitas às mais diversas condições experimentais, como em altas (ou baixas) temperaturas, pressões, ou mesmo durante uma reação química ou interação entre moléculas. Eles são realizados na *cabana experimental*, onde se encontra um porta-amostra para cada tipo diferente de experimento. No momento do experimento, essa cabana precisa estar fechada por uma questão de segurança radiológica; e o processo para abrir e fechar a cabana e carregar as amostras pode ser custoso para o experimento, visto que demora cerca de alguns minutos. Quando multiplicado pelas dezenas ou centenas de amostras medidas durante o dia, fica evidente que a automação dos processos de limpeza do porta-amostras (no caso de amostras líquidas) e de troca de amostras é um fator de extrema importância para se otimizar o tempo útil dos pesquisadores que visitam a linha para realizar suas pesquisas.

Além desta otimização do tempo útil, há um outro fator que mostra a importância da automação nos processos de troca de amostra: o tempo de exposição. Este tempo, principalmente para amostras líquidas da matéria mole ou biológica, deve ser cuidadosamente escolhido, visto que o alto fluxo de fótons provido pela fonte Sirius e a baixa divergência do feixe faz com que a dose de radiação absorvida pela amostra seja bastante alta. Isto pode alterar a estrutura de proteínas e de outras moléculas antes mesmo que o tempo de exposição para a aquisição dos dados termine, gerando dados irreais sobre os sistemas estudados. A solução para este problema está em realizar

experimentos em amostras líquidas sob fluxo, renovando a parte da amostra que está sendo exposta ao feixe de fótons durante a medida. Esta solução, contudo, somente se torna viável quando há um controle preciso do processo de coleta de amostras e aquisição de dados sem que haja a necessidade de que o usuário esteja presente dentro da cabana experimental. Exemplos de porta-amostras para líquidos comerciais podem ser encontrados nas referências [2] e [3].

2. Porta-amostras disponíveis na linha Sapucaia

Hoje, a linha Sapucaia possui dois porta-amostras em fase de construção que serão utilizados frequentemente pela comunidade de usuários. Um para amostras líquidas – que atenderá cerca de 60% da comunidade – e outro para amostras sólidas – que atenderá cerca de 25% da comunidade –. A automatização destes equipamentos contribuirá para a otimização do tempo de usuário, aumentando a qualidade dos experimentos e a quantidade de propostas executadas na linha. Ambos porta-amostras estão em fase final de projeto (com protótipos já manufaturados) e a automação e controle é a última etapa para que estejam prontos para sua utilização. O aluno terá todo o apoio necessário para a execução de todas as etapas através da equipe da linha.

3. Objetivos

O objetivo deste projeto é introduzir ao aluno ao ambiente de instrumentação e automatização aplicados ao desenvolvimento de equipamentos e sua programação nas linhas de luz. O aluno irá:

- projetar instrumentos complementares aos porta-amostras que tornem possíveis suas automações;
- integrar os instrumentos no processo de coleta de dados;
- realizar o comissionamento dos instrumentos e da programação *fora e dentro* da linha de luz;
- realizar um experimento real usando os porta-amostras na linha de luz.

4. Metodologia

A automatização dos porta-amostras deve ser feita em duas frentes: (1) o projeto dos instrumentos complementares, com a inclusão de: motores, câmeras de luz visível e infravermelha, sensores de temperatura e de presença, botões de fim-de-curso, etc.; e (2) o projeto de programação e controle destes instrumentos. O projeto dos instrumentos com base nos porta-amostras que estão sendo desenvolvidos pela equipe da linha. Protótipos para provas-de-conceito serão montados usando *Arduíno* ou *Raspberry Pi* e posteriormente integrados aos equipamentos de controle da linha. A

programação das rotinas de operação e integração com o sistema de controle da linha Sapucaia será escrito em *Python/Epics*.

5. Público-alvo

Este projeto destina-se a alunos que estejam, no mínimo, cursando o 4º período do curso de graduação em Física, Engenharias (Física, Mecânica, Mecatrônica, Elétrica) e áreas afins. Desejável, mas não imperativo, que o aluno tenha algum conhecimento de programação em Python e/ou eletrônica.

6. Referências

- [1] <https://www.lnls.cnpem.br/facilities/sapucaia>
- [2] Adam Round, et al., "BioSAXS Sample Changer: a robotic sample changer for rapid and reliable high-throughput X-ray solution scattering experiments".
- [3] Anne Martel, et al., "An integrated high-throughput data acquisition system for biological solution X-ray scattering studies".