

Para o entusiasta: mais detalhes sobre a análise SANS

Traduzido por Duarte Nuno Januário

Por Julian Eastoe, Paul Brown, Isabelle Grillo e Tim Harrison

Um feixe de neutrões monocromático pode ser visto como um conjunto de partículas livres movendo-se na mesma direção e com a mesma velocidade. Devido à relação de de Broglie entre a velocidade da partícula (momento linear) e o comprimento de onda associado, o feixe pode ser visto como uma onda plana monocromática com um comprimento de onda, λ , e um vetor onda incidente, k_i .

Nas experiências SANS, as interações entre os neutrões livres no feixe e os que estão ligados aos núcleos das amostras fazem com que o feixe incidente seja defletido de um ângulo, 2θ , de forma simplificada, o feixe é desviado do seu trajeto (figura 1). Esta mudança de direção define o vetor da onda dispersada, k_s . O vetor resultante entre o incidente e o dispersado é chamado o vetor onda, q , e matematicamente, virá $q = k_s - k_i$. A magnitude de q define a resolução espacial, e portanto o raio das partículas que podem ser estudadas.

A intensidade dos neutrões dispersados é registada num detetor sensível à posição. A intensidade é proporcional à concentração de partículas e a um parâmetro, designado *densidade de comprimento de dispersão*, que está diretamente relacionado com a composição química das moléculas da amostra. Portanto, se conhecermos a composição química de uma amostra (a partir da qual podemos calcular a densidade de comprimento de dispersão) e a sua concentração ou densidade, podemos utilizar esta informação em modelos matemáticos para determinar o tamanho, a forma e a estrutura das partículas.

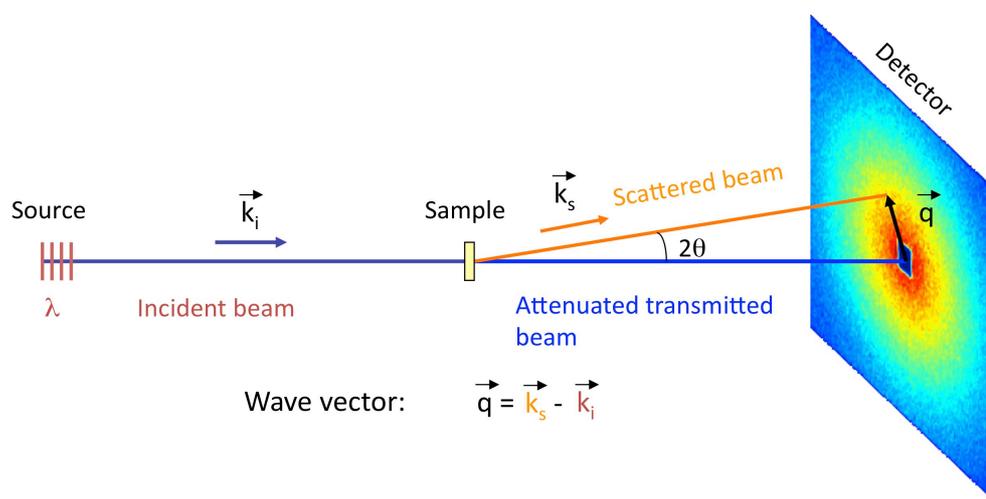


Figura 1: Representação esquemática de uma experiência de dispersão de neutrões de pequeno ângulo. Os vetores-onda incidente, k_i e dispersado, k_s mostram-se juntamente com o vetor dispersão, q , que se encontra no plano do detetor.

Imagem cortesia de: ILL

Material de apoio para:

Eastoe J et al. (2012) Magnetismo: o desenvolvimento de um novo surfatante.

Science in School **25**.

www.scienceinschool.org/2012/issue25/surfactants/portuguese

Uma característica importante da difração de neutrões é a notável diferença entre as densidades de comprimento de dispersão do hidrogénio e do seu isótopo deutério (o hidrogénio ‘normal’ tem apenas um protão enquanto o deutério tem um protão e um neutrão). Os surfatantes, os polímeros e as moléculas biológicas têm muitos átomos de hidrogénio, e se estas moléculas se encontrarem dissolvidas em água pesada (D_2O) em vez de água normal (H_2O), então o feixe de neutrões é fortemente dispersado. Logo, uma forma fácil de aumentar o sinal de dispersão é substituir o solvente normal por um deuterado.

Estabelecendo uma analogia com a luz visível, imagine que o hidrogénio e o deutério têm cores diferentes. Um lagarto verde numa folha verde é quase invisível, enquanto um lagarto verde a aquecer numa parede branca é uma presa fácil!

De facto, esta ideia pode ser estendida: usando modernos métodos químicos, é possível preparar não apenas solventes contendo deutério, mas também surfatantes, polímeros e até proteínas. Imagine as possibilidades para as experiências SANS.

Este tipo de substituição isotópica é hoje em dia uma poderosa ferramenta para observar partículas heterogéneas, por exemplo, micelas de surfatante com interiores gordurosos. A água em que as micelas estão dissolvidas contém três componentes: surfatante, gordura e água. A deuteração específica permite-nos assinalar seletivamente os interiores gordurosos ou, numa experiência à parte, os invólucros constituídos apenas por surfatante. Estas experiências resultam em padrões de dispersão diferentes que podem ser rapidamente distinguidos com recurso à informática. Isto dá-nos uma imagem detalhada da estrutura interna das micelas (figura 2).



Figura 2 – Conforme a solução isotópica muda da esquerda para a direita, as diferentes partes das partículas heterogéneas podem ser visualizadas. Na esquerda, apenas os interiores estão assinalados, enquanto na direita, apenas os invólucros o estão.

Imagem cortesia de: ILL

Material de apoio para:

Eastoe J et al. (2012) Magnetismo: o desenvolvimento de um novo surfatante.

Science in School **25**.

www.scienceinschool.org/2012/issue25/surfactants/portuguese