

Annex

A

La llum de sincrotró

Aquest annex introdueix les expressions bàsiques que regeixen la llum de sincrotró. A partir d'aquestes, es mostren les característiques més remarcables que la fan útil com a font de raigs X.

A.1. Origen de la llum de sincrotró

Una partícula qualsevol amb càrrega elèctrica que es mou lliurement sota un camp magnètic B a una velocitat v es veu sotmesa a una acceleració provocada per aquest. Aquesta acceleració ve descrita per la força de Lorentz, que sota la influència d'un camp purament magnètic és

$$\vec{F} = m \frac{d\vec{v}}{dt} = e \vec{v} \times \vec{B} \quad ,$$

on F és la força feta sobre la partícula pel camp magnètic B , i m , e i v la massa, càrrega i velocitat de la partícula respectivament. Segons es desprèn de la força de Lorentz i les lleis de Maxwell, la partícula així accelerada genera un camp electromagnètic de radiació que depèn de les característiques de la partícula i de l'acceleració que experimenta.

En el cas particular d'una partícula que descriu una òrbita curvada a una velocitat molt més petita que la velocitat c de la llum, la distribució angular de la radiació és bàsicament dipolar (figura A.1). Aquesta distribució angular és similar a la d'una antena comú, en la qual circula un corrent oscil·lant que provoca l'emissió de radiació electromagnètica, per exemple d'ones de ràdio.

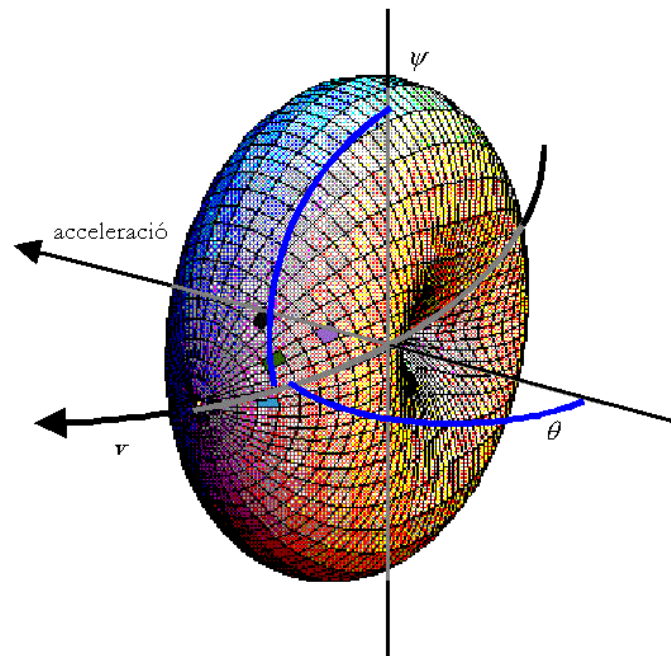


Figura A.1. Distribució angular de la radiació emesa per una partícula amb velocitat molt inferior a la de la llum i amb acceleració perpendicular a aquella. Es mostren la definició dels angles de divergència de la llum θ i ψ .

En el cas oposat, quan la partícula descriu una òrbita curvada a velocitats molt properes a la de la llum, aquesta radiació s'anomena *llum de sincrotró* (LS). Tal com es veu a continuació, la producció de llum de sincrotró solament és important en el cas que l'energia de la partícula sigui molt més gran que la seva massa en repòs. Aquest cas, a la pràctica, solament es dona en el cas dels electrons i dels positrons (antielectrons) i, per tant, són aquestes les partícules emprades correntment per produir la LS. Per tant, d'ara en endavant particularitzarem l'exposició en els electrons, si bé cal recordar que, en rigor, el fenomen s'estén sobre qualsevol partícula amb càrrega elèctrica.

A.2. Distribució i energia de la llum de sincrotró

Les expressions que caracteritzen la llum de sincrotró prenen una forma complexa, obtinguda a partir de considerar el camp de radiació retardat provocat per partícules relativistes en una trajectòria corba [Schwinger, 1949; Sokolov i Ternov, 1966; Jackson, 1975]. La seva deducció, que queda a fora de l'abast d'aquesta introducció, porta a la distribució angular de fotons emesos

$$\frac{d^3 N_{ph}}{dt d\theta d\psi} = \frac{3\alpha}{4\pi^2} \gamma^2 \frac{\omega}{\omega_e} \frac{I}{e} Y^2 (1 + X^2)^2 K_{2/3}^2(\xi) + \frac{X^2}{1 + X^2} K_{1/3}^2(\xi) \quad , \quad (\text{A.1})$$

on dN_{ph}/dt és el nombre de fotons per unitat de temps, θ i ψ els angles de divergència horitzontal (en el pla de l'òrbita) i vertical (perpendicular al pla) (figura A.1). α és la constant d'estructura fina, ω la freqüència angular dels fotons (i, per tant, $\Delta\omega/\omega$ és l'amplada de banda espectral), I el corrent del feix d'electrons, e la càrrega de l'electró, $Y = \varepsilon/\varepsilon_c$ l'energia dels fotons normalitzada amb respecte a una energia crítica ε_c , γ és el factor relativista,

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad , \quad (\text{A.2})$$

en què $X = \gamma\psi$ és la divergència vertical de la radiació normalitzada respecte de $1/\gamma$, i finalment $K_{1/3}(\xi)$ i $K_{2/3}(\xi)$ són les funcions de Bessel modificades, l'argument de les quals és $\xi = Y(1+X^2)^{2/3}$ [Abramowitz i Stegun, 1965].

L'expressió A.1 és l'expressió bàsica de la la distribució de la LS a partir de la qual es poden deduir les característiques de la llum emesa i és caracteritzada, en últim terme, pel *factor relativista* γ i l'*energia crítica* ε_c .

D'una banda, el factor relativista γ , definit per l'expressió A.2, és una mesura del règim, classic o relativista, en què es troba l'electró. Quan l'electró està aturat en el sistema de referència de l'observador, el factor γ val 1, i creix lentament a mesura que

la partícula s'accelera a velocitats v encara molt baixes respecte de la velocitat de la llum c . Aquesta és la situació en el règim clàssic. En canvi, quan la velocitat de l'electró és comparable a la de la llum, el factor relativista augmenta dramàticament de valor, i s'assoleix l'anomenat *règim relativista*. Així, quan $v = 0.9c$, el factor γ tot just és 2.3, mentre que, per exemple, a la instal·lació de LS europea ESRF (vegeu l'annex B), els electrons circulen amb $v = (1 - 3.6 \times 10^{-9})c$, i el factor relativista γ val 11742.

D'altra banda, l'energia crítica és definida per

$$\varepsilon_c = \frac{3hc}{2\rho} \frac{E}{m_0c^2}^3, \quad (\text{A.3})$$

on η és la constant de Dirac, ρ el radi de gir instantani de l'electró. E i m_0c^2 l'energia i l'energia en repòs de l'electró respectivament, el quocient de les quals és el factor relativista g . Operant l'expressió A.3 i convertint les magnituds a unitats pràctiques, l'energia crítica es formula com

$$\varepsilon_c [\text{keV}] = 0.665 E^2 [\text{GeV}] B [\text{T}], \quad (\text{A.4})$$

en què B és el camp magnètic experimentat per la partícula. L'energia crítica ε_c representa l'energia mitjana de la potència emesa. La meitat de la potència radiada té una energia més alta que ε_c , mentre que l'altra meitat té una energia més baixa. L'energia crítica és el paràmetre rellevant per definir el rang d'energies emeses. Així, segons l'expressió A.4, s'aconsegueix que l'energia crítica ε_c estigui dins el rang dels raigs X accelerant els electrons fins a energies de pocs GeV i sotmetent-los a camps magnètics B de ca. 1 T.

Quan més petita és la massa en repòs de la partícula i el seu radi de gir, més gran és el nombre de fotons emesos (expressió A.1) i més alta és l'energia crítica (expressió A.3). Això explica perquè la llum de sincrotró en la regió d'interès dels raigs X solament és apreciable en electrons i positrons, que tenen masses en repòs mil·lers de vegades menors que altres partícules carregades com protons o ions. D'altra banda, el radi de gir és limitat per les possibilitats tècniques en la generació en regions grans de camps magnètics intensos. La tecnologia actual permet construir electroimants no superconductors que generen camps de ca. 1 T.

Quan la velocitat de l'electró v , per tant, el factor g augmenten fins al règim relativista, la potència de la LS augmenta en un factor γ^2 , tot mantenint constant la força aplicada [Jackson, 1975]. Així, a velocitat nul·la, la radiació emesa és la d'una antena dipolar, com s'havia comentat (figura A.2a). En augmentar la velocitat, el lòbul anterior de la distribució es va engrandint i, a mesura que la velocitat v s'aproxima a c , la distribució és cada cop més col·limada i intensa en el sentit de la velocitat (figura A.2b-c). A velocitats properes a c (figura A.2d) es pot parlar pròpiament de llum de sincrotró: el lòbul anterior s'ha convertit en un con d'emissió molt intens i col·limat. A les instal·lacions de llum de sincrotró, la LS és encara molt més col·limada i intensa que la representada a la figura A.2d, donat que la velocitat del feix d'electrons s'aproxima encara molt més a c , i, per tant, el règim relativista és més extrem.

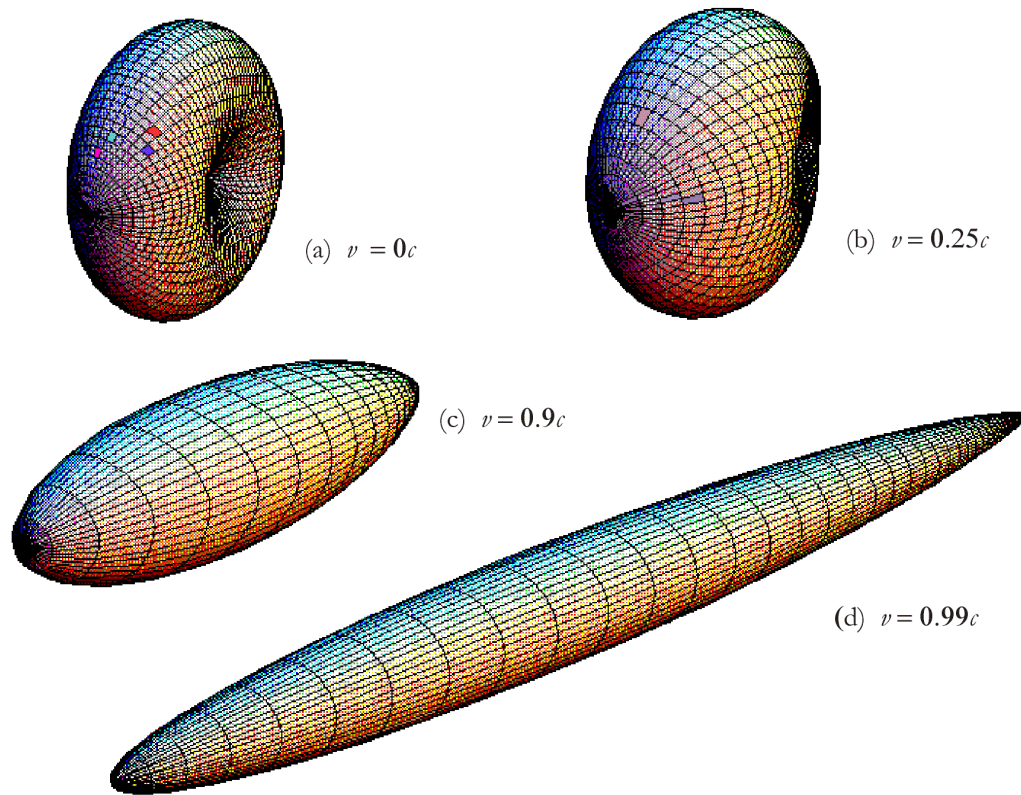


Figura A.2. Distribució de la llum de sincrotró per diferents velocitats v de l'electró, suposant un camp magnètic constant de $B = 1$ T. L'orientació dels eixos coordenats és la mateixa que a la figura A.1. (a) Emissió dipolar d'un electró aturat ($g = 1$). (b-d) Emissió de l'electró a velocitats cada vegada més properes a la velocitat de la llum ($g = 1.03$, $g = 2.3$ i $g = 7.1$, respectivament). La divergència del con d'emissió és determinada per l'expressió A.5. A les instal·lacions de llum de sincrotró actuals les velocitats són encara molt més properes a c , e.g. $v = 0.99999979c$ per al LLS, amb una divergència de menys d'un minut d'arc [LLS, 1997].

La LS representada a la figura A.2 és la distribució de l'emissió instantània d'un electró. De tota manera, no és aquesta la distribució vista finalment per l'observador, donat que, en els acceleradors, circulen electrons que descriuen una trajectòria circular i, per tant, van emetent la radiació en una direcció diferent a cada temps. Així, la LS vista per l'observador va escombrant el pla de l'òrbita dels electrons (figura A.3), de la mateixa manera a la llum dels fars d'un cotxe en girar en una corba.

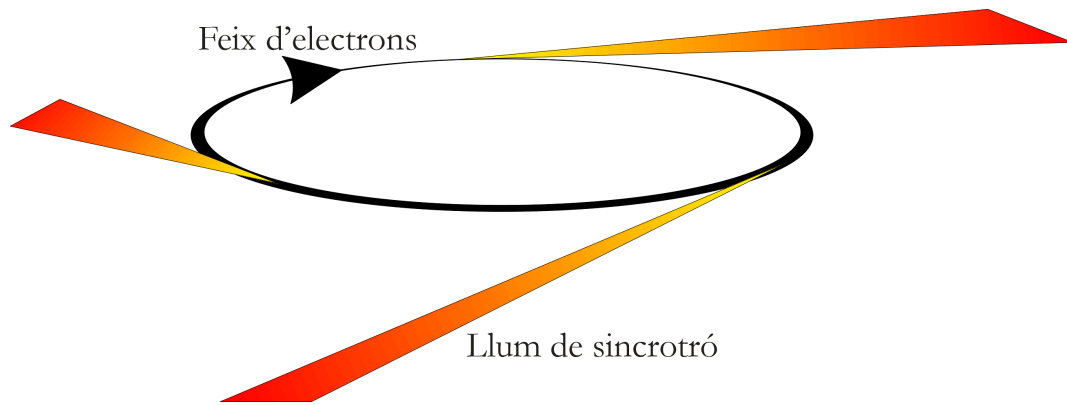


Figura A.3. Emissió de llum de sincrotró en un accelerador circular. La radiació emesa per un feix d'electrons amb una trajectòria circular va escombrant tot el pla a mesura que el feix d'electrons va avançant.

A.3. Característiques de la llum de sincrotró

La distribució angular de la intensitat de la LS (expressió A.1) té unes característiques particularment favorables per a l'ús en multitud de tècniques experimentals. Tot seguit es detallen les característiques més remarcables. Vegeu l'annex B per a l'exposició de les possibles fonts de LS en les instal·lacions de llum (imants dipolars i dispositius d'inserció), així com de les tècniques experimentals utilitzades en diferents camps de la ciència i en la indústria.

A.3.1. *Espectre continu*

Aquesta és una de les característiques més útils per a multitud d'aplicacions. L'emissió de LS abasta un rang continu i amplíssim d'energies que va des dels infrarojos fins als raigs X durs, passant pels ultraviolats i els raigs X tous (figura A.4). L'emissió de radiació augmenta amb l'energia dels fotons fins arribar a un energia d'emissió màxima que depèn de l'energia crítica, que se situa correntment en el rang dels raigs X. La LS, en energies superiors a l'energia crítica, cau abruptament, de forma aproximadament exponencial. En algunes tècniques experimentals es treu profit de l'espectre continu, com la difracció de Laue, si bé en la majoria de tècniques cal inserir dispositius òptics que monocromen la llum blanca i seleccionen l'energia desitjada.

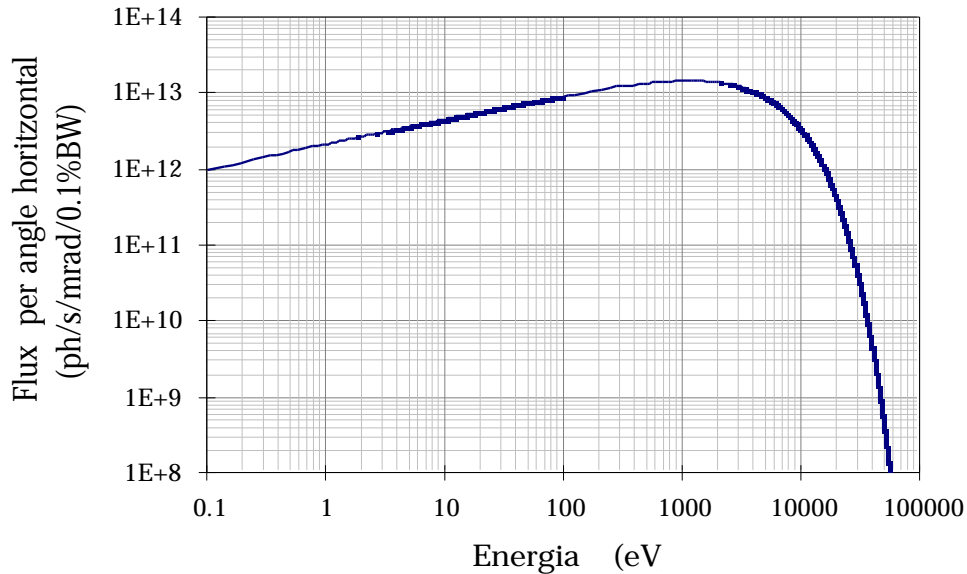


Figura A.4. Flux per angle horitzontal en funció de l'energia dels fotons d'un accelerador de tipus mitjà, de les característiques del LLS ($E = 2.5$ GeV, $e_c = 4.2$ keV) [LLS, 1997]. S'observa l'espectre d'emissió contínua per a totes les energies des dels infraroigs fins als raigs X.

A.3.2. Gran col·limació

Una de les característiques més importants de la LS és la gran direccionalitat que presenta, a diferència d'altres fonts convencionals en què l'emissió és isotròpia. Aquesta gran col·limació en el rang dels raigs X permet estudiar mostres extremadament petites com, per exemple, microdominis en aliatges o cristalls de proteïnes.

La divergència de la LS que genera un feix d'electrons és el resultat de la contribució de dos factors: la divergència del feix d'electrons i la divergència de la LS emesa per un sol electró. D'una banda, la divergència del feix d'electrons, que emeten en direccions lleugerament diferents, fa augmentar la divergència de la LS, sobretot a altes energies. La divergència del feix d'electrons, de perfil gaussià, es minimitza escollint adequadament el punt d'extracció de la LS en la trajectòria que descriuen.

D'altra banda, com ja hem vist, la LS emesa per un sol electró es comprèn dins d'un con molt estret que depèn del factor relativista de l'electró (és a dir, de la seva energia) i de l'energia dels fotons considerats (figura A.2). El con de la LS té perfil aproximadament gaussià en les dues direccions transversals al feix, amb una divergència, a l'energia crítica e_c , de

$$\sigma_\psi = 1/\gamma \quad . \quad (A.5)$$

En el cas del LLS i l'ESRF, el factor relativista γ és 4892 i 11742, respectivament, i, per tant, les divergències verticals σ_ψ són ca. 0.2 mrad i ca. 0.08 mrad [LLS, 1997; ESRF, 1987]. D'altra banda, fixada l'energia crítica en una trajectòria dels electrons, la

divergència de la LS disminueix en augmentar l'energia dels fotons que es consideren de manera aproximadament lineal (figura A.5). Per tant, respecte de la col·limació, la LS ofereix les màximes prestacions a energies similars o superiors a l'energia crítica.

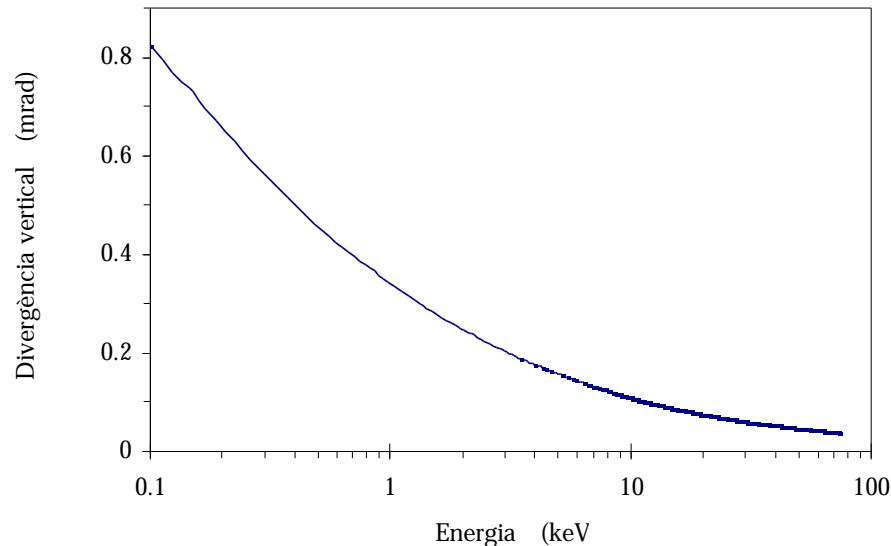


Figura A.5. Dependència de la divergència vertical envers l'energia de la LS emesa per d'un imant dipolar d'un sincrotró de tipus mitjà, de les característiques del LLS (energia crítica $\epsilon_c = 4.2$ keV) [LLS, 1997].

A.3.3. Gran flux i brillantor

Un aspecte molt important de la LS és la intensitat de la radiació i la distribució d'aquesta. Per mesurar-ne la bondat s'utilitzen figures de mèrit estàndards, en especial el *flux* i la *brillantor*.

El *flux espectral* (*spectral flux*) és el nombre de fotons emesos per unitat de temps i per un cert ample de banda relatiu (*relative bandwidth*, $BW = \Delta E / E = \Delta \lambda / \lambda$). Correntment, el flux espectral és expressat en fotons/s/0.1%BW, si bé en alguns casos en què la radiació és emesa pels imants dipolars o per alguns dispositius d'inserció (*wigglers*, vegeu l'annex B), el flux es dona per unitat d'angle horitzontal (fotons/s/mrad/0.1%BW). Aquesta figura de mèrit indica la quantitat de fotons en un cert rang d'energia, sense tenir en compte la seva distribució. És la figura rellevant en experiments amb mostres grans o poc sensibles a la divergència de la llum, com és el cas de moltes espectroscòpies.

El perfil típic del flux de la LS en funció de l'energia és suau fins a l'energia crítica, a partir de la qual decreix exponencialment (figura A.4). Als sincrotrons actuals s'aconsegueixen valors típics d'entre 10^{12} i 10^{14} fotons/s/mrad/0.1%BW, superiors en molts ordres de magnitud a les fonts convencionals de raigs X.

Per altra banda la segona figura de mèrit de la LS, la *brillantor* (*brightness*) posa de manifest la *concentració* de la llum, és a dir, la seva col·limació i la dimensió de la font de llum. Es defineix com el nombre de fotons per unitat de temps, d'ample de banda relatiu i unitat d'espai fàsic, i usualment és expressada en fotons/s/mm²/mrad²/0.1%BW. El teorema de Liouville, que estableix la conservació de l'espai fàsic, comporta que la brillantor no pot ser millorada per cap element òptic i, de fet, a causa de les possibles pèrdues per absorció o dispersió, aquesta pot disminuir.

La brillantor és una bona figura per definir la qualitat de la LS i predir si aquesta és capaç de resoldre espacialment (quan calgui una dimensió petita de la font), en energies (quan convé una alta monocromaticitat) o en moment (quan calgui una gran col·limació). El significat físic és el de densitat de fotons útils del feix en experiments en què cal una energia monocromàtica, una secció eficaç o una col·limació que no excedeixin les dimensions de la mostra o la resolució en angle del detector. Aquesta figura és la rellevant en difracció, microscòpia i en multitud de noves tècniques en desenvolupament. La brillantor de la LS assoleix el màxim en energies properes a l'energia crítica (figura A.6), i disminueix de manera exponencial per a energies superiors.

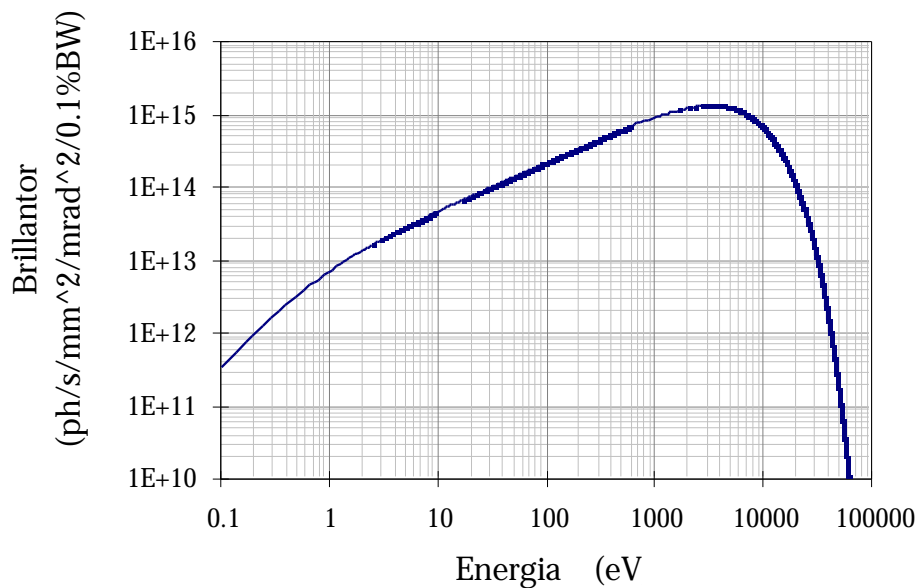


Figura A.6. Brillantor en funció de l'energia d'un imant dipolar d'una màquina de tipus mitjà, de les característiques del LLS [LLS, 1997]. El rang òptim d'energies es situa en els raigs X tous i durs (10-30000 eV).

A.3.4. Polarització

La LS es pot considerar una ona electromagnètica i, com a tal, el seu camp electromagnètic vibra en una determinada direcció, anomenada *polarització*, perpendicular a la direcció de propagació de la llum. Es distingeixen dos tipus de

polarització, segons que la LS vibri en el pla de la òrbita dels electrons (polarització s), o perpendicular a aquest pla (polarització p). La component de la LS de polarització s origina el terme $K_{2/3}(\xi)$ de l'expressió A.1, mentre que la component de polarització p és la causant del terme $K_{1/3}(\xi)$. Igualment, és possible tenir una combinació de les dues polaritzacions. El feix està polaritzat quan les ones electromagnètiques vibren en la mateixa direcció. La polarització del feix és una condició necessària per a la realització d'algunes tècniques, com és el cas de la fluorescència per reflexió total, mentre que per altres, si bé no és fonamental, simplifica l'anàlisi dels resultats.

La LS té una polarització que depèn de l'angle vertical y (figura A.7). En el pla de la òrbita dels electrons, la llum emesa presenta una polarització total de tipus s. A mesura que augmenta y , la polarització és més elíptica, és a dir, hi ha una diferència de fase constant entre les polaritzacions s i p. El sentit de rotació de la polarització és invers a dalt i a baix del pla de l'òrbita.

La polarització d'un imant dipolar, l'element corbador d'un accelerador circular, és donada per l'expressió A.1 i, per tant, és fixa. De tota manera, és possible d'obtenir altres tipus de polaritzacions (per exemple circular dextrògira o levògira en el mateix pla de l'òrbita dels electrons, on la radiació és més intensa) amb l'ús de *dispositius d'inserció* (vegeu l'annex B).

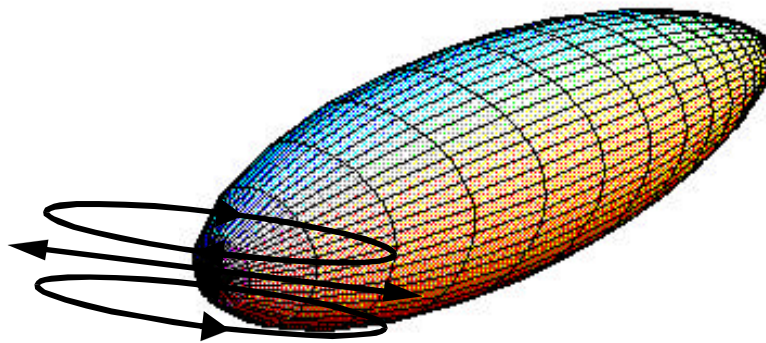


Figura A.7. Representació esquemàtica de la polarització de la llum de sincrotró. Els eixos coordenats són els mateixos que els de la figura A.1. En el pla de l'òrbita, els electrons estan polaritzats en el mateix pla (polarització s), mentre que, en allunyar-se d'aquest, la contribució de la polarització p és més apreciable i, per tant, la polarització total és cada cop més elíptica.

A.3.5. Estructura temporal

Els electrons s'agrupen en feixos o paquets que descriuen una trajectòria tancada a l'anomenat l'anell d'emmagatzematge de la instal·lació de LS (vegeu l'annex B), de manera que la LS que resulta no és contínua, sinó periòdica, amb un període corresponent al temps de pas d'un paquet al següent. Variant el nombre de paquets, per tant, es pot ajustar aquest període. Típicament, el temps de pas entre paquets varia

entre 1 ns i 1000 ns. Aquesta estructura temporal és aprofitada en algunes tècniques (p.ex., en la fluorescència per despolarització), en què s'aconsegueixen enregistrar fenòmens ultraràpids utilitzant detectors especials.

Malgrat aquesta estructura temporal, la majoria de tècniques utilitzen una llum contínua temporalment per als experiments. Això és degut a que els temps típics dels processos que s'enregistren i els temps de resposta dels detectors són més llargs que el període temporal de la LS.

Annex

B

Les instal·lacions i aplicacions de la llum de sincrotró

En aquest annex s'exposen les característiques de les instal·lacions de llum de sincrotró actuals i, en particular, de l'ESRF, la instal·lació on s'han realitzat els experiments d'aquest treball.

Es presenten igualment les possibilitats actuals que ofereix la llum de sincrotró en diversos camps científics i industrials.

B.1. La generació de llum de sincrotró

B.1.1. Les instal·lacions de llum de sincrotró

La llum de sincrotró (LS) és una radiació amb un espectre molt ample, que recorre tot l'espectre des dels infrarojos fins als raigs X molt durs, amb unes condicions de col·limació, polarització i estructura temporal ajustables a l'experiment (vegeu l'annex A). A causa d'aquestes propietats, la demanda de la LS s'ha generalitzat a multitud de camps del coneixement.

La generació de LS requereix un feix d'electrons que circuli en una trajectòria corba a velocitats prou properes a la de la llum (és a dir, energies prou elevades) com per què la radiació que emet el feix sigui suficientment intensa. Això s'aconsegueix a les anomenades *instal·lacions de llum de sincrotró*, les quals consten d'un sistema d'acceleradors optimitzat per subministrar energia als electrons, que l'emetrin en forma de llum de sincrotró.

En concret, la instal·lació de llum de sincrotró utilitzada als experiments presentats en aquest treball és l'ESRF (*European Synchrotron Radiation Facility*). Aquest és una instal·lació de llum de sincrotró fruit de la col·laboració de diversos estats europeus, entre ells Espanya amb una participació del 4%, situada a Grenoble (França). Les seves característiques fan que els onduldors (vegeu més endavant) arribin al rang dels raigs X, millorant en molt les prestacions d'altres dispositius d'inserció o dels imants dipolars. Això el fa especialment adequat pels experiments de difracció a baixos angles necessaris pel nostre estudi.

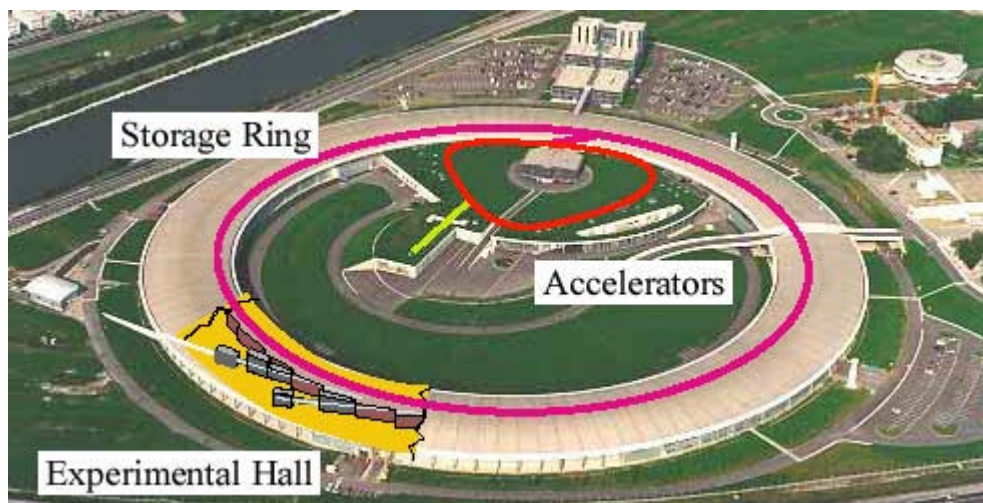


Figura B.1. Sistema d'acceleradors a l'ESRF. Els electrons s'acceleren en un accelerador lineal (verd), arriben a l'energia nominal de 6 GeV al *booster*, i finalment circulen per l'anell d'emmagatzematge (*storage ring*), on subministren llum de sincrotró als experiments que es realitzen a la nau experimental (*experimental hall*). A la secció feta de la nau s'observen dues línies de llum (figura B.4) [ESRF, 2000a].

Essencialment, una instal·lació de llum de sincrotró consta de diversos acceleradors, circulars o lineals, que incrementen per etapes l'energia dels electrons, i d'un *anell*

d'emmagatzematge, on els electrons circulen durant hores subministrant llum de sincrotró per als experiments (figura B.1). A l'anell d'emmagatzematge, els electrons es mantenen a la mateixa energia i solament se'ls subministra una energia igual a la que perden per radiació.

L'energia que se subministra als electrons prové d'un sistema de cavitats de radiofreqüència, el senyal de les quals ha d'anar sincronitzat amb el pas dels electrons per les cavitats (d'aquí l'origen del nom *sincrotró*). D'altra banda, a l'anell d'emmagatzematge cal assolir unes condicions de buit molt estrictes (típicament 10^{-9} tor) per evitar que el feix d'electrons col·lisió amb l'aire, fet que en suposaria la pèrdua en un temps molt petit.

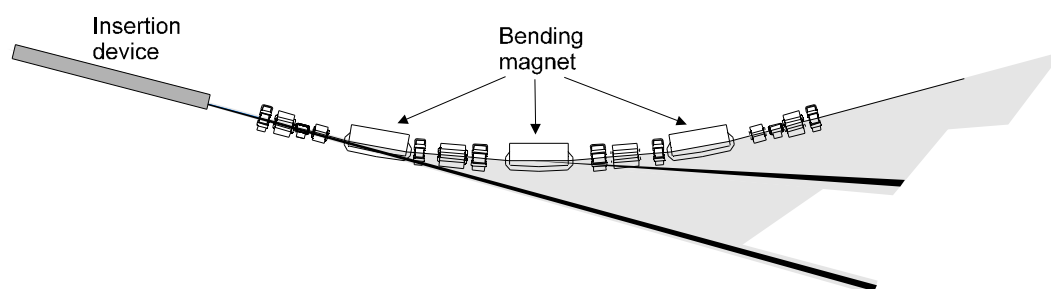


Figura B.2. Disposició en el LLS dels punts d'extracció de llum sincrotró. La llum s'obté dels imants dipolars (en aquest cas solament del central) i dels dispositius d'inserció o *insertion devices*. A més dels 3 imants dipolars assenyalats, a l'anell d'emmagatzematge hi ha també altres tipus d'imants (quadropolars, sextupolars) que permeten de mantenir el feix durant hores [LLS, 1997].

B.1.2. Fonts de llum de sincrotró

L'emissió de LS es produeix únicament quan el feix d'electrons traça una trajectòria corbada (vegeu l'annex A). Fins la dècada de 1980, a les instal·lacions de llum de sincrotró es va utilitzar solament l'emissió dels imants dipolars de l'anell d'emmagatzematge, que corben la trajectòria del feix, per a la realització d'experiments (figura B.2). Les prestacions de l'emissió d'aquestes fonts eren fixades, ja que les característiques dels imants vénen determinades per la dinàmica dels electrons.

Per variar les característiques de l'emissió, i fer-la més específica a cada tècnica, cal variar el camp magnètic vist pels electrons, donat que la generació de llum de sincrotró és una conseqüència de la curvatura dels electrons sota aquest camp magnètic. Aquesta és la idea bàsica dels anomenats *dispositius d'inserció* els quals, inserits en les seccions rectes dels acceleradors, mitjançant una disposició periòdica d'imants, generen un camp magnètic que provoca oscil·lacions del feix d'electrons i, per tant, l'emissió de llum de sincrotró. La situació dels dispositius d'inserció, així com dels imants dipolars, en l'anell d'emmagatzematge es mostra a la figura B.2 i la figura 3.2. La inclusió d'aquests dispositius d'inserció ha donat peu a una nova generació d'instal·lacions de llum de sincrotró, anomenades de *tercera generació*.

Essencialment, es poden distingir dos tipus de dispositius d'inserció, segons el tipus d'oscil·lació a què es sotmeten els electrons (figura B.3). D'una banda, als ondulators (*undulators*), els electrons experimenten petites oscil·lacions, de tal manera que la radiació emesa en diferents períodes se suma coherentment. Aquest tipus de dispositius proporcionen una LS que, malgrat que no pot tenir una molt petita

longitud d'ona (fins a ca. 0.08 nm), proporcionen una extraordinària col·limació i brillantor.

D'altra banda, en els dispositius anomenats *wigglers*, les oscil·lacions són més grans, la radiació emesa en diferents períodes perd la coherència i, per tant, la intensitat que en resulta és la suma de les intensitats emeses pels diferents períodes. La LS que generen els *wigglers* no té la brillantor de la dels ondulators, si bé pot assolir longituds d'ona molt més elevades.

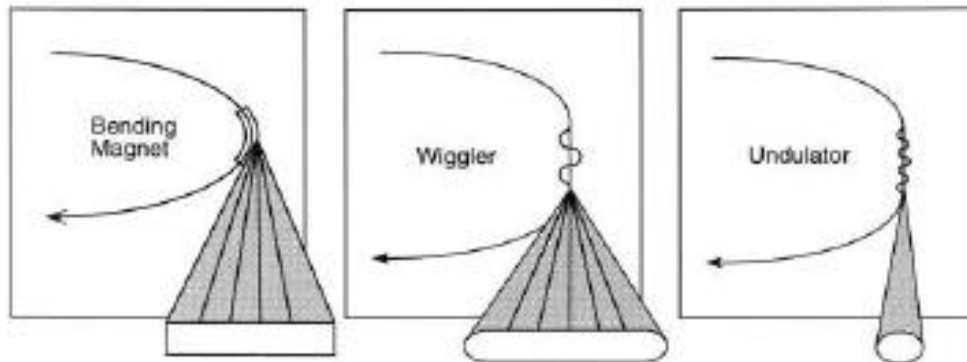


Figura B.3. Distribució de la LS que generen les diferents fonts. En un imant dipolar (*bending magnet*), la radiació surt tangencialment a la trajectòria, d'igual manera que en un *wiggler*, on les oscil·lacions del feix d'electrons són grans. En un ondulator (*undulator*), la LS s'emet únicament en un con estret [LBL, 2000].

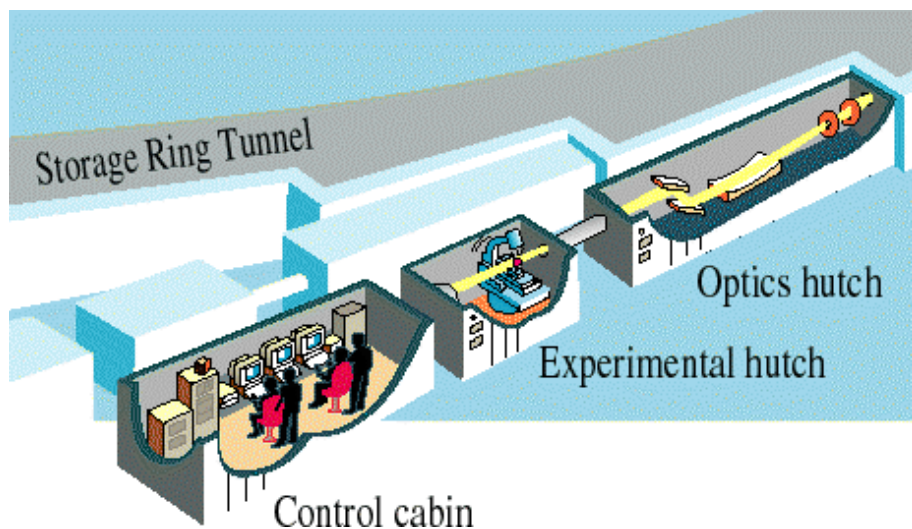


Figura B.4. Esquema d'una línia de llum a l'ESRF, situada a la nau experimental d'una instal·lació de llum de sincrotró (figura B.1). Aquesta es divideix en tres cabines aïllades per sistemes de seguretat independents. Des de la cabina de control (*Control cabin*) es manipulen les característiques de la llum, que s'ajusten mitjançant els elements òptics situats a la cabina òptica (*Optical hatch*), i de la mostra i el detector, situats a la cabina experimental (*Experimental hatch*) [ESRF, 2000a].

La llum emesa pel feix d'electrons a les diferents fonts de LS de l'anell d'emmagatzematge és recollida per les anomenades *línies de llum*. Aquestes consisteixen en un seguit d'elements òptics que ajusten les propietats de la LS (e.g. longitud d'ona, focalització, polarització) a les necessitats de l'experiment (figura B.4).

B.2. Aplicacions de la llum de sincrotró

L'ús de la llum de sincrotró (LS), també anomenada radiació sincrotró, s'ha convertit en els darrers 30 anys en una de les eines més poderoses per a l'avanç d'una gran quantitat de ciències experimentals. El seu rang d'aplicacions ha anat augmentant amb el desenvolupament de noves tècniques, fins abastar actualment camps tant diversos com la ciència de materials, la química, la farmàcia, la medicina, la biologia estructural, la cristal·lografia, la litografia o l'òptica. Tant des del punt de vista científic com tecnològic o industrial la seva repercussió és, doncs, cabdal. En aquesta secció s'anomenaran les tècniques i els camps de recerca que justifiquen aquesta rellevància.

A causa de la gran demanda de LS, la construcció d'instal·lacions de llum de sincrotró ha augmentat contínuament des de la dècada 1960. Actualment, al món hi ha unes 50 instal·lacions, la major part d'aquestes estan situades als EUA, Japó i Europa, però també s'han construït instal·lacions en estats en vies de desenvolupament com Brasil o Índia. Aquestes instal·lacions requereixen una tecnologia complexa i sovint van acompanyades d'altres laboratoris annexos i complementaris, per exemple de microscòpia d'electrons o fonts convencionals de raigs X.

L'ús tan extens de la LS es basa en els diferents tipus d'interacció entre aquesta i la matèria. Aquesta interacció es pot plantejar des de l'òptica d'un experiment o com una transformació de la matèria estudiada. En el primer cas, l'experiment es planteja com un mètode de caracterització d'aquesta matèria, mentre que en el segon cas, en la transformació, es procura aconseguir canvis determinats, ja coneguts, en la matèria tractada. La primera orientació és pròpia dels experiments científics, mentre que la segona és característica dels processos industrials.

La detecció dels productes de la interacció determina el tipus d'experiment que es realitza (figura B.5). Essencialment, els productes detectats són raigs X (e.g. difosos, difractats, fluorescents) o electrons (e.g. Auger, fotoelectrons).

Les disciplines sobre les quals la radiació ha tingut un gran impacte són la biologia, química, física, ciència de materials i la recerca industrial.

B.2.1. Biologia i biotecnologia

Una de les aplicacions més importants de la LS en aquest camp ha estat l'ús d'aquesta en la determinació de l'estructura cristal·logràfica de macromolècules biològiques, especialment les proteïnes. El projecte Genoma Humà (*Human Genome*) ha identificat i produït una enorme quantitat de proteïnes (més de 50,000), l'estructura de les quals ha de ser determinada mitjançant la cristal·lografia de macromolècules, la qual s'ha de realitzar necessàriament amb LS.

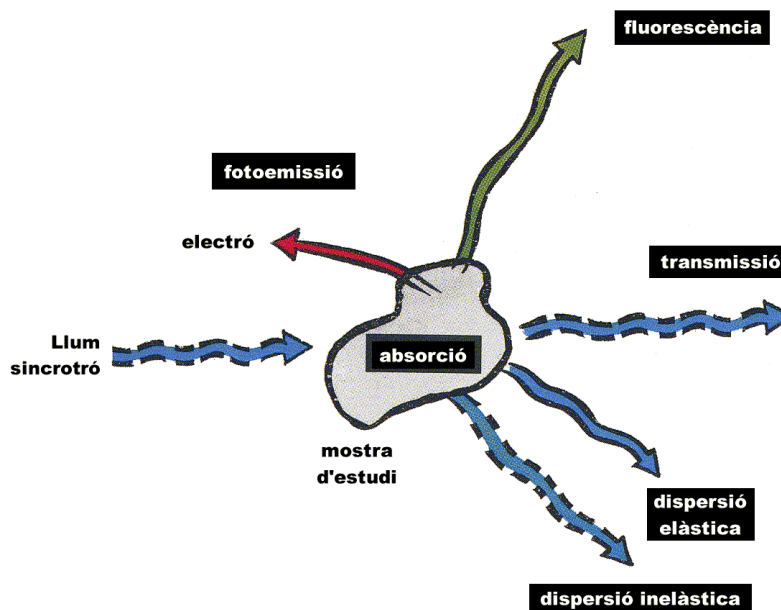


Figura B.5. Productes de la interacció de la LS amb la matèria.

D'altra banda, les tècniques espectroscòpiques com l'EXAFS (*Extended X-ray absorption fine structure*) juguen un paper clau en els estudis de metalo-proteïnes, enzims i pèptids. Un exemple important és l'estudi de la bioquímica associada als processos de fotòlisi.

Altres aplicacions són cada vegada més utilitzades a causa de l'augment constant de la brillantor de les instal·lacions que entren en funcionament. Entre aquestes noves aplicacions destaquem el dicromisme circular (*circular dichroism*), que pot tenir en un futur un paper clau en el coneixement de nous fàrmacs que actuen a nivell macromolecular, per exemple, actuant sobre canvis de conformació en α -hèlixs o fulles β (*β -sheets*).

Finalment, destaquem els tipus d'aplicació en què es basa aquest treball, estudis amb sistemes biològics intactes mitjançant, especialment, la dispersió o difracció de raigs X. La gran brillantor de les fonts de LS permeten la realització d'estudis en sistemes no manipulats que no depenen de models. El múscul, en aquest sentit, ofereix unes possibilitats òptimes per a aquest tipus d'estudi.

B.2.2. Química

L'ús de la LS en diferents camps de la química ha portat a l'establiment de noves tècniques i a la millora dels resultats obtinguts per les tècniques ja clàssiques.

Una primera aplicació és l'estudi de radicals lliures o de substàncies de transició, de gran reactivitat i, per tant, difícils d'estudiar. El coneixement d'aquests radicals és important per a l'optimització de processos contaminants. Un exemple d'això el dona l'estudi del paper dels radicals en la velocitat i completitud dels processos de combustió.

La microscòpia confocal és una poderosa tècnica d'imatges, de moment limitada a la biologia, però amb possibilitats d'expansió en camps de la química com la fotoquímica

amb resolució temporal. En el mateix sentit, el dicroisme circular i el dicroisme magnètic circular tenen interès en estudis estructurals de complexos moleculars o macromoleculars, com ara polímers o metallo-proteïnes.

La difracció de raigs X en superfície (*surface X-ray diffraction*, SXRD) és reconeguda com la millor tècnica per la mesura de superfícies netes o amb una capa d'adsorció en geometria plana. A més, l'aplicació simultània de la SXRD amb les tècniques d'espectroscòpia de raigs X (*X-ray spectroscopy*) permet la determinació de l'estructura de les molècules adsorbides respecte el substrat.

Les tècniques d'espectroscòpia de raigs X són les més emprades per a la determinació de l'orientació i la longitud dels enllaços en molècules d'hidrocarburs adsorbides. Actualment es comencen a realitzar estudis de dinàmica molecular, en reaccions de dissociació o desplaçament, on hi intervenen catalitzadors. La llum blanca d'alta intensitat de la LS permet estudis d'espectroscòpia amb resolució temporal per sota del mil·lisegon.

Igualment, les tècniques de fotoemissió i absorció de raigs X permeten uns resultats molt superiors a causa de l'excel·lent resolució espectral de la llum dels onduldors. Les tècniques d'EXAFS i XANES (*X-ray absorption near edge structure*) necessiten, a més, una quantitat de fotons que únicament la LS pot proporcionar.

B.2.3. Física

L'espectre utilitzat en experiments de física atòmica, molecular i matèria condensada abasta tot el rang de longituds d'ona que ofereix la LS, des de l'infraroig, passant per l'ultraviolat i els raigs X tous, fins als raigs X durs.

Els estudis de matèria condensada han utilitzat amb èxit els experiments d'espectroscòpia d'absorció de raigs X tous (*soft X-ray absorption spectroscopy*, SXAS), dicroisme circular magnètic i fotoemissió ressonant. Actualment s'utilitzen aquestes tècniques en sistemes complexos o diluïts, com superfícies o multicapes. A més, la LS ofereix una gran resolució a noves tècniques com la dispersió Raman ressonant.

L'estudi del comportament de materials magnètics és una àrea d'expansió a la física de l'estat sòlid. La detecció de la polarització de fotons dispersats i del *spin* dels electrons permeten conèixer el seu comportament, per bé que necessiten grans fluxos, accessibles solament amb la LS. Per a aquests estudis s'utilitza el dicroisme magnètic circular de raigs X tous i, en un futur, experiments en fluorescència d'aquests.

En el camp de la difracció, amb el mètode de Laue, que utilitza la llum blanca accessible amb la LS, es pot extreure informació en materials superconductors d'alta temperatura crítica o en entorns d'alta temperatura o alta pressió, amb escales de temps de l'ordre del mil·lisegon. La difracció magnètica, potencialment possible amb l'ús de *wigglers*, permetria determinar independentment les densitats electròniques d'orbitals i de *spin* independentment.

L'espectroscòpia dispersiva de raigs X, amb la LS, pot treballar a la resolució en què actua la química, molt inferior a 0.1 nm. Les cascades Auger poden ser estudiades amb precisió, permetent així els estudis d'alta resolució del decaïment dels estats moleculars excitats. Igualment, l'espectroscòpia Mössbauer necessita una font intensa de raigs X molt durs que la LS pot proporcionar.

Finalment, mitjançant la interacció per efecte Compton (*Compton backscattering*) del feix d'electrons amb un làser, s'obtenen raigs g d'alta energia, necessaris per a estudis d'espectroscòpia de física nuclear.

B.2.4. Ciència de materials

Les fonts de LS juguen un paper important en la recerca de diversos tipus de materials, com semiconductors, superconductors, ceràmiques, polímers, aliatges metàl·lics, organometàl·lics o vidres. Aquesta recerca ha estat impulsada no solament des de la recerca fonamental, sinó també des de la indústria.

D'entre les aplicacions destaquem els estudis de baixes concentracions de dopatges, per sota de 10^{16} àtoms/cm³ mitjançant tècniques d'espectroscòpia de raigs X en materials semiconductors o materials geològics, entre d'altres. Els estudis amb les mateixes tècniques a baixos angles permeten els experiments de superfícies amorfes o de fenòmens d'epitàxia tèrmica (*thermal epitaxy*), entre altres estudis en superfície.

La difracció de raigs X en pols té noves aplicacions i possibilitats amb la LS mitjançant l'ús de mètodes de Rietveld, fins al punt que s'han aconseguit resoldre *ab initio* algunes estructures cristal·lines. La dispersió de raigs X de cristalls orgànics pot ser mesurada, de manera que pot tenir aplicacions en el disseny de materials sintètics com superconductors orgànics.

La difracció de raigs X (*X-ray diffraction*, XRD) amb LS s'ha utilitzat igualment per a l'estudi de transformacions cristal·lines de ceràmiques, les fases i proporcions de les quals poden ser descrites en funció del temps. Les impureses d'aquestes ceràmiques, que juguen un paper clau en els canvis de fase, han de ser estudiades per XRD en combinació amb tècniques com l'EXAFS de fluorescència (*Fluorescence EXAFS*), que demanden un flux de fotons molt intens.

Els fenòmens de desordre en polímers (*polymer melting*) poden ser estudiats per dispersió de raigs X en alts i baixos angles (*small angle X-ray scattering*, SAXS; *wide angle X-ray scattering*, WAXS) en resolució temporal amb una escala de temps de 100 mil·lisegons. Aquests estudis permeten establir la relació entre el procés de fabricació del polímer i les seves propietats.

L'ús de la LS en microscòpia de fotoemissió (*photoelectron emission microscopy*) permet l'estudi d'inhomogeneïtats en la composició de la superfície (*chemical state imaging*). Amb una focalització inferior a una micra, es poden caracteritzar, entre d'altres aplicacions, estructures de semiconductors, corrosió de superfícies, transicions de fase en superfícies i defectes i fractures de superfícies.

B.2.5. La recerca industrial

La recerca industrial és un camp creixent de les aplicacions de la LS, a causa de les característiques d'aquesta, especialment en flux i longitud d'ona (figura B.6). La LS permet, a més, l'estudi de tipus de mostres que no entren dins dels canons acadèmics habituals, i necessiten un tractament específic. Així és possible, per exemple, l'estudi d'emulsions (e.g. cremes cosmètiques o maionesa) o cremes pastoses (e.g. xocolata o margarina).

Les tècniques utilitzades per la indústria poden ser analítiques o de transformació. Les tècniques més utilitzades actualment són les analítiques, donat que la LS ofereix la possibilitat conèixer *in situ* els resultats d'experiments amb resolució temporal. Les aplicacions industrials inclouen camps com la microelectrònica (manufatura de xips), micromecànica (micromotors, peces de microcirurgia, sensors), de la construcció (estudis de compactificació de ciments) o la indústria aeroespacial (calibració de detectors).

Les indústries que processen compostos químics i farmacèutics utilitzen algunes de les tècniques exposades en les seccions anteriors per al desenvolupament i control. Entre aquestes, es poden destacar les indústries petroquímiques, farmacèutiques, mineres, alimentàries, òptiques i del vidre.

D'altra banda, entre les tècniques de transformació, cal destacar les tècniques litogràfiques (LIGA, *soft x-ray lithography*), que comencen a ser necessàries per a la fabricació de xips d'ordinador a una escala d'integració superior a l'existent.

L'avaluació de les activitats de les empreses a les instal·lacions de LS no és fàcil, a causa del secret industrial que envolta la recerca que hi fan. Només a Europa, podem citar les indústries: ICI, BP, Shell, Unilever, Norwegian Sartoil (espectroscòpia de raigs X, difracció en pols, SAXS), i Glaxo-Wellcome i Hoecht (cristal·lografia de proteïnes, SAXS), entre d'altres. De fet, la nova instal·lació de llum de sincrotró ANKA (Karlsruhe, Alemanya) està dedicada quasi exclusivament a usos industrials. Als EUA i el Japó, l'ús industrial de la LS està encara més estès.

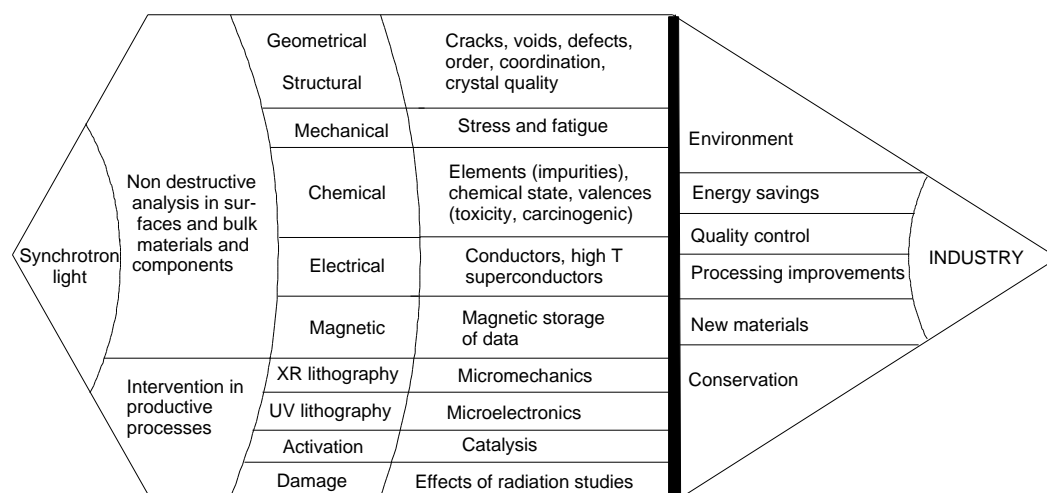


Figura B.6. Esquema dels usos i tècniques de la llum de sincrotró i llur aplicació industrial.

Bibliografia

- Abramowitz M i IA Stegun (1965), a *Handbook of Mathematical Functions*, Dover Publications (New York).
- Agnew WS (1988), *Nature* **334**:299.
- Alberts B, D Bray, J Lewis, M Raff, K Roberts i JD Watson (1989), a *Molecular biology of the cell*, 2^a ed., Garland Publishing (New York).
- Amemiya Y, K Wakabayashi, H Tanaka, Y Ueno i J Miyahara (1987), *Science* **237**:164-168.
- Amemiya Y, T Matsushita, A Nakagawa, Y Satow, J Miyahara i J Chikawa (1988), *Nucl. Instr. and Meth. Phys. Res.* **A266**:645-653.
- Andreev OA i J Borejdo (1991), *Biochem. Biophys. Res. Comm.* **177(1)**:350-356.
- Asakura S, M Taniguchi i F Oosawa (1963), *J. Mol. Biol.* **7**:55-69.
- Ashcroft NW i ND Mermin (1976), a *Solid State Physics*, International ed., Saunders College Publishing, EUA.
- Bagni MA, G Cecchi, F Colomo i C Poggesi (1990), *J. Musc. Res. Cell Motil.* **11**:371-377.
- Bagshaw CR (1993), a *Muscle contraction* 2^a ed., Chapman and Hall (London).
- Bayley K, H Gutfreund i AG Ogston (1948), *J. Biochem.* **43**:271-279.
- Bennett P, R Craig, R Starr i G Offer (1986), *J. Musc. Res. Cell Motil.* **7**:550-567.
- Beltran D (1999), *document intern.*
- Berman HM, J Westbrook, Z Feng, G Gilliland, TN Bhat, H weissig, IN Shindyalov i PE Bourne (2000), *Nucl. Ac. Res.* **28**:235-242.
- Block SM (1996), *Cell* **87**:151-157.
- Boesecke P, O Diat i B Rasmussen (1995), *Rev. Sci. Instrum.* **66**:1636-1638.

- Bonafe N and P Chaussepied (1995), *Biophys. J.* **68**:35s-43s
- Bonse U i M Hart (1965), *Appl. Phys. Lett.* **7**:238-250.
- Bordas J, GP Diakun, FG Díaz, JE Harries, RA Lewis, J Lowy, GF Mant, ML Martín-Fernández i E Towns-Andrews (1993), *J. Musc. Res. Cell Motil.* **14**:311-324.
- Bordas J, J Lowy, A Svensson, JE Harries, GP Diakun, J Gandy, C Miles, GR Mant i E Towns-Andrews (1995), *Biophys. J.* **68**:99s-105s.
- Bordas J (1996), *comunicat personal.*
- Bordas J (1998), *Revista de Física* **2**:44-51.
- Bordas J, A Svensson, M Rothery, J Lowy, GP Diakun i P Boesecke (1999a), *Biophys. J.* **77**:3197-3207.
- Bordas J (1999b), *comunicat personal.*
- Bragg WL (1913), *Proc. Camb. Phil. Soc.* **17**:43-64.
- Bragg WL i MF Perutz (1952), *Proc. Roy. Soc.* **A214**:425-434.
- Brenner B, M Schoenberg, JM Chalovich, LE Greene i E Eisenberg (1982), *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **79**:7288-7291.
- Brenner B (1990), a *Molecular mechanisms in muscular contraction*, JM Squire ed., Macmillan Press (London).
- Brenner B, JM Chalovich i LC Yu. (1995), *Biophys. J.* **68**:106s-111s.
- Campmany J (1997), *Revista de Física* **12**:14-22.
- Campmany J (2000), *comunicat personal.*
- Cantino ME, TStC Allen i AM Gordon (1993), *Biophys. J.* **64**:211-222.
- Civan MM i RJ Podolsky (1966), *J. Physiol.* **184**:511-534.
- Conibear PB i MA Geeves (1998), *Biophys J.* **75**:926-937.
- Cooke R (1986), *CRC Crit. Rev. Biochem.* **21**:53-118.
- Craig R i GW Offer (1976a), *Proc. R. Soc. London Ser. B.* **192**:451-461.
- Craig R i GW Offer (1976b), *J. Mol. Biol.* **102**:325-332.
- Craig R (1977), *J. Mol. Biol.* **109**:69-81.
- Craig R, L Alamo i R Padrón (1992), *J. Mol. Biol.*, **228**:474-487.
- Darnell J, H Lodish i D Baltimore (1995), a *Molecular cell biology*, 2^a ed., Scientific American Books, (New York).
- Das Gupta G i E Reisler (1989), *J. Mol. Biol.* **207**:833-836.
- Davey CL i AF Graafhuis (1976), *Experientia* **32**:32-34.
- Davies RE (1963), *Nature* **199**:1068.
- Denny RC (1995), *comunicat personal.*
- Díaz-Baños FG, J Bordas, J Lowy i A. Svensson (1996), *Biophys J.* **71**:576-589.
- Dobbie I (1998), *Nature* **396**:383-387.
- Dominguez R, Y Freyzon, KM Trybus i C Cohen (1998), *Cell* **94**:559-571.
- DuMond JWM (1937), *Phys. Rev.* **53**:872-874.

- Ebashi S i A Kodama (1966), *J. Biochem.* **59**:425-426.
- Ebashi S (1980), *Proc. of the Roy. Soc. ser. B* **207**:259-268.
- Eisenberg E i C Moos (1968), *Biochemistry* **10**:4617.
- Eisenberg E i LE Green (1980), *Annu. Rev. Physiol.* **42**:293-309.
- Elliot GF, J Lowy i CR Worthington (1963), *J. Mol. Biol.*, **6**:295-305.
- Elliot GF i J Lowy (1968), *Nature*, **219**:156-157.
- ESRF (1987), a *Foundation phase report*.
- ESRF (2000a), <http://www.esrf.fr>.
- ESRF (2000b), http://www.esrf.fr/exp_facilities/ID2/handbook/handbook.html.
- Finer JT, RM Simmons i JA Spudich (1994), *Nature* **368**:113-119.
- Forcinito M, M Epstein i W Herzog (1997), *Biophys. J.* **72**:1278-1286.
- Ford LE, AF Huxley i RM Simmons (1977), *J. Physiol.* **269**:441-515.
- Ford LE, AF Huxley i RM Simmons (1981), *J. Physiol.* **311**:219-249.
- Fowler VM (1996), *Curr. Opin. Cell Biol.* **8**:86-96.
- Friedrich W, P Knipping i M von Laue (1912), *Proc. Bavarian Acad. Sci.*, 303. Reimprès a *Naturwissenschaften* (1952), **39**:367.
- Galvani L (1791), a *De viribus electricitatis in motu muscularis*.
- Gandy JG (1997), PhD Thesis, University of Liverpool, UK.
- Goldman YE (1987), *Ann. Rev. Physiol.* **49**:637-654.
- Goldstein H (1988), a *Mecánica clásica*, ed. Reverté (Barcelona).
- Goody RS i KC Holmes (1983), *Biochim. Biophys. Acta* **726**:13-39.
- Gordon AM, AF Huxley i FJ Julian (1966), *J. Physiol (London)* **184**:170-192.
- Gray BF i I Gonda (1977), *J. Theor. Biol.* **69**:187-230.
- Greene LE i E Eisenberg (1980), *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **77**:2616-2620.
- Greene LE i E Eisenberg (1983), *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **80**:4909-4917.
- Gregorio CC, H Granzier, H Sorimachi i S Labeit (1999), *Curr. Opin. in Cell Biol.* **11**:18-25.
- Guex N i MC Peitsch (1996), *Protein Data Bank Quaterly Newsletter* **77**:7-10, www.expasy.ch/spdbv/mainpage.htm.
- Guilford WH (1997), *Biophys. J.* **72**:1006-1021.
- Gulick AM, CB Bauer, JB Thoden i I Rayment (1997), *Biochem.* **36**:11619-11628.
- Gulick AM, CB Bauer, JB Thoden, E Pate, RG Yount i I Rayment (2000), *J. Biol. Chem.* **275**:398-408.
- Güth K i JD Potter (1987), *J. Biol. Chem.* **262**:12627-12635.
- Hammersley AP, SO Svensson i A Thompson (1994), *Nucl. Instr. Meth.* **A346**:312-321.
- Hanson J i HE Huxley (1953), *Nature* **172**:530-532.
- Hanson J i HE Huxley (1955), *Symp. Soc. Exp. Biol.* **9**:228-264.
- Hanson J i J Lowy (1963), *J. Mol. Biol.* **6**:46-80.

- Harada Y, K Sakurada, T Aoki, DD Thomas i T Yanagida. (1990), *J. Mol. Biol.* **216**:49-68.
- Harford JJ i JM Squire (1992), *Biophys. J.* **63**:387-96.
- Harrington WF (1979), *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **76**:5066-5077.
- Hart M i RD Rodrigues (1978), *J. Appl. Crystal.* **8**:436-448
- Haselgrove JC (1970), PhD Thesis, University of Cambridge, UK.
- Haselgrove JC (1973), *Cold Spring Harb. Symp. Quant. Biol.* **37**:341-352.
- Hasselbach W (1952), *Z. Naturforsch* **7b**:163.
- Hasselbach W (1953), *Z. Naturforsch* **8b**:449-454.
- Hill AV (1964), *Proc. Roy. Soc. Lond. ser. B* **159**:297-318.
- Hirose K i J Wakabayashi (1993), *J. Musc. Res. Cell. Motil.*, **14**:432-441.
- Holmes KC, D Popp, W Gebhard i W Kabsch (1990), *Nature* **347**:44-49.
- Holmes KC (1995), *Biophys. J.* **68**:2s-7s.
- Holmes KC (1997), *Curr. Biol.* **7**:R112-R118.
- Homsher E, M Irving i A Wallner (1981), *J. Physiol.* **321**:423-436.
- Houdusse A, C Cohen (1996), *Structure* **4**:21-32.
- Houdusse A, VN Kalabokis, D Himmel, AG Szent-Gyorgyi i C Cohen (1999), *Cell* **97**:559-570.
- Hudson L (1996), *Ultrastructure of the A-band unit cell in relaxed muscle*, PhD Thesis, University of London, UK.
- Hudson L, JJ Harford, RC Denny i JM Squire (1997), *J. Mol. Biol.* **273**:440-455.
- Huxley AF i R Niedergerke (1954), *Nature (London)* **173**:971-972.
- Huxley AF (1957), *Prog. Biophys.* **7**:255-313.
- Huxley AF i RM Simmons (1970), *J. Physiol.* **208**:52-54.
- Huxley AF i RM Simmons (1971), *Nature* **253**:533-538.
- Huxley AF (1973), *Proc. Roy. Soc. Lond. ser. B* **183**:83-86.
- Huxley AF (1974), *J. Physiol.* **243**:1-43.
- Huxley AF i S Tideswell (1996), *J. Musc. Res. Cell Motil.* **17**:507-511.
- Huxley AF i S Tideswell (1997), *J. Musc. Res. Cell Motil.* **18**:111-114.
- Huxley HE (1953), *Biochem. Biophys. Acta* **12**:387-394.
- Huxley HE i J Hanson (1954), *Nature (London)* **173**:973-976.
- Huxley HE (1956), *Proceedings of the Stockholm Congress on Electron Microscopy*, 290-291, Almquist and Wiksell (Stockholm).
- Huxley HE (1957), *J. Biophys. Biochem. Cytol.* **3**:631-648.
- Huxley HE i J Hanson (1957), *Biochim. Biophys. Acta* **23**:229-249.
- Huxley HE (1963), *J. Mol. Biol.* **7**:281-308.
- Huxley HE i W Brown (1967), *J. Mol. Biol.* **30**:383-434.
- Huxley HE (1968), *J. Mol. Biol.* **37**:507-520.

- Huxley HE (1969), *Science* **164**:1356-1366.
- Huxley HE (1971), *Proc. Royal Soc. ser. B* **178**:131-149.
- Huxley HE (1979), a *Fibrous proteins: Scientific, Industrial and Medical Aspects*, 1:71-96, DAD Parry and LK Creamer eds., Academic Press (London).
- Huxley HE, AR Faruqi, J Bordas, MHJ Koch i JR Milch (1980), *Nature* **285**:140-143.
- Huxley HE i M Kress (1985), *J. Musc. Res. Cell Mot.* **6**:153-161.
- Huxley HE, A Stewart, H Sosa i T Irving (1994), *Biophys. J.* **67**:2411-2421.
- Hymel L (1988), *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **85**:441.
- Ibach H i H Lüth (1996), a *Solid-State Physics*, 2^a ed., Springer-Verlag (Berlin).
- Ishii Y i SS Lehrer (1985), *Biochem.* **224**:6631-6638.
- Ishijima A, Y Harada, H Kojima, T Funatsu, H Higuchi i T Yanagida (1994), *Biochem. Biophys. Res. Comm.* **199**:1057-1063.
- Ishijima A, H Kojima, H Higuchi, Y Harada, T Funatsu i T Yanagida (1996), *Biophys. J.* **70**:383-400.
- Jackson JD (1975), *Classical Electrodynamics*, John Wiley and Sons (New York).
- Jasper H i A Pezard (1934), *C. R. Hebd. Seanc. Acad. Sci. Paris* **198**:499-501.
- Juanhuix J, J Bordas, J Campmany, A Svensson, ML Bassford i T Narayanan (2001), *Biophys. J.* **80**:1429-1441.
- Julian FJ (1969), *Biophys. J.* **9**:547-570.
- Julian FJ i DL Morgan (1981), *J. Physiol.* **319**:205-217.
- Jung DWG (1988), a *Dynamic properties of cross-bridges in frog skeletal muscles fibers*, p. 33-41, Rodopi (Amsterdam).
- Kabsch W, HG Mannherz, D Suck, EF Pai i K Holmes (1990), *Nature* **347**:37-44.
- Kensler RW i M Stewart (1986), *J. Biophys. Soc.* **49**:343-351.
- Kim K-J (1986), *X-ray Data Booklet*, PUB-490 Rev. Lawrence Berkeley Laboratory.
- Kinose F, SX Wang, US Kidambi, CL Moncman i DA Winkelmann (1996), *J. Cell. Biol.* **134**:895-909.
- Kitamura K, M Tokunaga, AH Iwane, T Yanagida (1999), *Nature* **397**:129-134.
- Kittel C (1976), a *Introduction to Solid State Physics*, 5^a ed., John Wiley and Sons (New York).
- Klug A, FHC Crick i HW Wyckoff (1958), *Acta Cryst.* **11**:199-213.
- Knappeis GG i F Carlsen (1962), *J. Cell Biol.* **13**:323-335.
- Knight P i JA Trinick (1984), *J. Mol. Biol.* **177**:461-482.
- Koch MHJ i PJ Bendall (1981), *Proc. Digital Equipment Computer User Soc.*, 13-16.
- Kojima H, A Ishijima i T Yanagida (1994), *Proc. Natl. Acad. Sci. USA, Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **91**: 12962-12926.
- Labeit S i B Kolmerer (1995a), *J. Mol. Biol.* **248**:308-315.
- Labeit S i B Kolmerer (1995b), *Science* **270**:293-296.
- LBL (2000), www.lbl.gov.

- LLS (1997), *LLS detailed design*, Laboratori de Llum de Sincrotró (Barcelona).
- Lodish K (1985), a *Molecular Cell Biology*, Scientific American Books (New York).
- Lodish K, D Baltimore, A Berk, SL Zipursky, P Matsudaira i J Darnel (1996), a *Molecular Cell Biology*, Scientific American Books (New York).
- Lombardi V, G Piazzesi i M Linari (1992), *Nature* **355**:638-641.
- Luther PK i JM Squire (1980), *J. Mol. Biol.* **141**:409-439.
- Luther PK, PM Munro i JM Squire (1981), *J. Mol. Biol.* **151**:703-730.
- Lymn RW i EW Taylor (1971), *Biochem.* **10**:4617-4624.
- Maita T, M Hayashida, Y Tanioka, Y Komine i G Matsuda (1987), *Proc. Natl. Acaad. Sci. USA* **84**:416-420.
- Malinchik SB i VV Lednev (1992), *J. Musc. Res. Cell Motil.* **13**:406-419.
- Mant GR i J Bordas (1996), *comunicació personal*.
- Marston SB i RT Tregear (1972), *Nature* **235**:23-24.
- Martz E i CF Finlayson (2000), www.umass.edu/microbio/rasmol/
- Martín-Fernández ML, J Bordas, GP Diakun, J Harries, J Lowy, GR Mant, A Svensson i E Towns-Andrews (1994), *J. Musc. Res. Cell Motil.* **15**:319-348.
- Matsubara I i N Yagi (1978), *J. Physiol.* **278**:297-307.
- Matsushita T i H Hashizume (1983), a *Handbook on Synchrotron Radiation Vol. 1*, EE Koch ed., North Holland Publishing Company (Amsterdam).
- Maw MC i AJ Rowe (1980), *Nature* **286**:412-414.
- McLachlan AD i M Stewart (1976), *J. Mol. Biol.* **103**:271-298.
- McLaughlin PJ, JT Gooch, H-G Mannherz i AG Weeds (1993), *Nature* **364**:685-692.
- Mehta AD, JT Fiber i JA Spudich (1997), *Proc. Natl. Acad. of Sci. USA* **94**:7927-7931.
- Milligan RA i PF Flicker (1987), *J. Cell Biol.* **105**:29-39.
- Milligan RA, M Whittaker i D Safer (1990), *Nature* **348**:217-221.
- Molloy JE, JE Burns, J Kendrick-Jones, RT Tregear i DCS White (1995), *Nature* **378**:209-212.
- Moncman CL i K Wang (1995), *Cell Motil. Cytoskel.* **32**:205-225.
- Mornet D, P Pantel, E Audemard i R Hassab (1979), *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **89**:925-932.
- O'Brien EJ, PM Bennett, J Hanson (1971), *Phil. Trans. Roy. Soc. London. B* **261**:201-214.
- Offer G (1972), *Cold Spring Harbor Symp. Quant. Biol.* **37**:87-96.
- Offer G, C Moos i R Starr (1973), *J. Mol. Biol.* **74**:653-676.
- Offer G (1974), a *Companion to biochemistry*, p. 623-671, 451, AT Bull, JR Lagnado, JO Thomas i TF Tipton eds., Longmans (London).
- Parry DAD i JM Squire (1973), *J. Mol. Biol.* **75**:33-55.
- Parry DAD (1975), *J. Mol. Biol.* **98**:519-535.
- Pepe FA (1975), *J. Histochem. Cytochem.* **23**:543-562.
- Pfuhl M, SJ Winder i A Pastore (1994), *EMBO J.* **13**:1782-1789.

- Phillips Jr GN, EE Latman, P Cummins, KY Lee i C Cohen (1979), *Nature* **278**:413-417.
- Phillips Jr GN, JP Fillers i C Cohen (1980), *Biophysics Journal* **32**:485-502.
- Phillips Jr GN, JP Fillers i C Cohen (1986), *J. Mol. Biol.* **192**:111-131.
- Piazzesi G i V Lombardi (1995), *Biophys. J.* **68**:1966-1979.
- Podolsky RJ (1960), *Nature* **188**:666-668.
- Poole KV, Y Maeda, G Rapp i RS Goody (1991), *Biophys. J.* **68**:348-351.
- Popp D, Y Maeda, AAE Stewart i KC Holmes (1991), *Adv. Biophys.* **27**:89-101.
- Press WH, SA Teukolsky, WT Vetterling i BP Flannery (1994), a *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press (UK).
- Pringle JWS (1968), a *Aspects of cell motility*, p. 67-86, GH Bourne ed., Cambridge University Press (UK).
- Quinlan RA i M Stewart (1987), *J. Cell. Biol.* **105**:403-415.
- Ramsey RW i SF Street (1940), *J. Cell Comp. Physiol.* **15**:11-34.
- Rayment I i HM Holden (1994), *Trends Biochem. Sci.* **19**:129-134.
- Rayment I, WR Rypniewski, K Schmidt-Bäse, R Smith, DR Tomchick, MM Benning, DA Winkelman, G Wesenberg i HM Holden (1993a), *Science* **261**:50-58.
- Rayment I, HM Holden, M Whittaker, CB Yohn, M Lorenz, KC Holmes i RA Milligan (1993b), *Science* **261**:58-65.
- RCSB (2000), <http://www.rcsb.org/pdb>
- Reedy MK (1964), *Proc. Roy. Soc. Lon. Biol.* **201**:107-130.
- Reedy MK, KC Holmes i RT Tregear (1965), *Nature* **207**:1276-1280.
- Rees MK i M Young (1967), *J. Biol. Chem.* **242**:4449-4458.
- Rome E (1972a), *J. Mol. Biol.* **65**:331-345.
- Rome E (1972b), *Cold Spring Harbor Symp. Quant. Biol.* **37**:331-339.
- Rome E, G Offer i FA Pepe (1973a), *Nature (New Biol.)* **244**:152-154.
- Rome E, T Hirabayashi i SV Perry (1973b), *Nature (New Biol.)* **244**:154-155.
- Root DD i K Wang (1994), *Biochem.* **33**:12581-12591.
- Rost B i C Sander (1993), *J. Mol. Biol.* **232**:584-599.
- Rothery M (1998), *The Molecular Structure and Function of Muscle Tissues*, PhD thesis, University of Liverpool, UK.
- Ruff C, M Furch, B Brenner, DJ Manstein i E Meyhöfer (1999), comunicació del *XXVIII European Muscle Congress*, York.
- Sañé J (1997), *Resolució d'estructures cristal·lines a partir de dades de difracció en pols*, PhD thesis, Institut de Ciència de Materials de Barcelona, Universitat Autònoma de Barcelona, Spain.
- Sayle R i EJ Milner-White (1995), *Trends in Biochemical Sciences (TIBS)* **20**:374-384.
- Schröder RR, DJ Manstein, W Jahn, H Holden, I Rayment, KC Holmes i JA Spudich (1993), *Nature* **364**:171-174.
- Schutt CE, U Lindberg, M Myslik i N Strauss (1989), *J. Mol. Biol.* **209**:735-746.

- Schutt CE i U Lindberg (1992), *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **89**:319-323.
- Schutt CE, JC Myslik, MD Rozycki, NCW Gooneesekere i U Lindberg (1993), *Nature* **365**:810-816.
- Schwinger (1949), *Phys. Rev.* **75**:1912-1938.
- Schroder RR, DJ Manstein, W Jahn, H Holden, I Rayment, KC Holmes i A Spudich (1993), *Nature* **364**:171-174.
- Seymour J i EJ O'Brian (1980), *Canadian Journal of Biochemistry and Cell Biology* **62**:443-448.
- Sjöström M i JM Squire (1977a), *J. Mol. Biol.* **109**:49-68.
- Sjöström M i JM Squire (1977b), *J. Microsc. (Oxf.)* **111**:239-278.
- Spudich JA, HE Huxley i JT Finch (1972), *J. Mol. Biol.* **72**:619-632.
- Spudich JA (1994), *Nature* **372**:515-518.
- Sokolov AA, IM Ternov (1966), a *Synchrotron radiation*, Pergamon Press (Berlin).
- Squire JM (1972), *J. Mol. Biol.* **72**:125-138.
- Squire JM (1981), a *The structural basis of muscular contraction*, Plenum Press (New York).
- Squire JM, JJ Hardford, AC Edman i M Sjöström (1982), *J. Mol. Biol.* **155**:467-494.
- Squire JM (1986), *Comm. on Mol. Cel. Biophys.* **90**:155-177.
- Squire JM (1997), *Curr. Op. in Struct. Biol.* **7**:247-257.
- Squire JM (2000), *comunicat privat*.
- Stewart M i RW Kensler (1986), *J. Mol. Biol.* **192**:831-851.
- Stone D, J Sodek, P Johnson i LB Smillie (1975), *Proceedings of the 9th FEBS Meeting* **31**:125-136, Budapest.
- Svoboda K, FD Schmidt, BJ Schnapp i SM Block (1993), *Nature* **365**:721-727.
- Swartz DR, RL Moss i ML Greaser (1996), *Biophys. J.* **68**:1891-1904.
- Szent-Gyorgi AG (1951), a *Chemistry of muscular contraction 2nd revised ed.*, Academic Press (New York).
- Takahashi K, K Kohda i J Miyahara (1984), *J. Lumn.* **31**:266-274.
- Taylor KA i LA Amos (1981), *J. Mol. Biol.* **147**:297-324.
- Toyoshima Y (1991), *Advanced Biophysics* **27**:213-220.
- Tregear RT i JM Squire (1973), *J. Mol. Biol.* **77**:279-290.
- Trinick J (1973), *Ph.D. Thesis* University of Leicester, UK.
- Trinick J (1996), *Curr. Biol.*, Vol. 6, **3**:258-260.
- Tsukita S i M Yano (1985), *Nature*, **317**:182-184.
- Uyeda TQP, SJ Kron i JA Spudich (1990), *J. Mol. Biol.* **214**:699-710.
- Uyeda TQP, HM Warrick, SJ Kron i JA Spudich. (1991), *Nature* **352**:307-331.
- Vainshtein BK (1966), a *Diffraction of X-rays by chain molecules*, Elsevier (Amsterdam).
- Vibert PJ, JC Haselgrove, J Lowy i FR Poulsen (1972), *J. Mol. Biol.* **71**:757-767.
- Vibert P, R Craig i William Lehman (1997), *J. Mol. Biol.* **226**:8-14.

- Voet TD (1995), a *Biochemistry*, cap. 34, John Willey and Sons (New York).
- Wakabayashi K, Y Ueno, Y Amemiya i H Tanaka (1988), a *Molecular Mechanisms of Muscle Contraction*, p. 354-367, H Sugi and GH Pollack eds., Plenum Press (New York and London).
- Wakabayashi K, H Siato, N Moriwaki, T Kobayashi i H Tanaka (1993), a *Mechanism of Myofilament in Muscle Contraction*, p. 381-390, 451, H Sugi and GH Pollack eds., Plenum Press (New York and London).
- Wakabayashi K, Y Sigimoto, H Tanaka, Y Ueno, Y Takezawa i Y Amemiya (1994), *Biophys. J.* **67**:2422-2435.
- Wang K i Ramírez-Mitchel (1983), *J. Cell Biol.* **96**:562-570.
- Wang K (1985), *Cell Muscle Motil.* **6**:315-369.
- Weber A, CR Pennise, GG Babcock i VM Fowler (1994), *J. Cell. Biol.* **127**:1627-1635.
- White DCS i J Thorson (1973), *Prog. Biophys. Mol. Biol.* **27**:175-255.
- Whittaker M, EM Wilson-Kubalek, JE Smith, L Faust, RA Milligan i HL Sweeney (1995), *Nature* **278**:748-751.
- Wiedemann H (1995), a *Particle accelerator physics II*, Springer-Verlag (Amsterdam).
- WUSM (1999), Washington University School of Medicine, www.neuro.wustl.edu/neuromuscular/mother/myosin.htm
- Xu C, R Craig, L Tobacman, R Horowitz i W Lehman (1999) *Biophys. J.* **77**:985-992.
- Yagi N, EJ O'Brien i I Matsubara (1981), *Biophys. J.* **33**:121-138.
- Yagi N, K Horiuti i S Takemori (1998), *J. Mus. Res. Cell Mot.* **19**:75-86.
- Yanagida T (1981), *J. Mol. Biol.* **146**:539-560.
- Yanagida T (1985), *J. Musc. Res. Cell Motil.* **6**:43-52.
- Yanagida T, Y Harada i A Ishijima (1993), *Trends Biochem. Sci.* **18**:319-324.
- Yount RG, D Lawson i I Rayment (1995), *Biophys. J.* **68**:44-49.
- Zot AS i JD Potter (1989), *Biochemistry* **28**:6751-6756.