

SEBBM DIVULGACIÓN

ACÉRCATE A NUESTROS CIENTÍFICOS

El sincrotrón Alba

Jordi Juanhuix

Experiments Division, CELLS-ALBA Synchrotron, Barcelona



Biografía Resumen

Después del grado en Física por la Universitat Autònoma de Barcelona, obtuvo una beca en el CEA (Grenoble, France) para estudiar aleaciones granulares metálicas por EXAFS. Continuó en el Laboratori de Llum de Sincrotró (Barcelona) donde obtuvo el PhD estudiando por difracción a bajos ángulos (SAXS) la estructura y función de músculos vivos. En paralelo trabajó en el diseño de los dispositivos de inserción y de diversas líneas de luz. Desde 2001 trabajó como científico de línea en la línea BM16 del ESRF (Grenoble), donde diseñó e implementó la nueva óptica y las estaciones experimentales de cristalografía de proteínas (MX) y SAXS, y se involucró en estudios del sistema inmunitario del complemento por MX. Desde 2004 es responsable de la línea XALOC en ALBA, que ha diseñado, construido y puesto a punto. Junto con el trabajo en la línea, está colaborando en varios proyectos, incluyendo transportadores de membrana bacterianos, complejos inhibidor-factor de crecimiento y compuestos organometálicos.

Las aplicaciones en biología ocupan una parte importante de la ciencia en Alba, con tres estaciones experimentales (líneas de luz) dedicadas. En este artículo describimos sus usos, y detallamos en particular las propiedades y posibilidades de la línea de luz XALOC, dedicada a la cristalografía de macromoléculas.

Summary

The applications in biology are one of the main scientific applications of the Alba synchrotron, with three dedicated experimental stations (beamlines). Here we describe these beamlines, and focus on the properties and applications of the XALOC beamline, dedicated to macromolecular crystallography.

<http://www.sebbm.es/>

HEMEROTECA:

http://www.sebbm.es/ES/divulgacion-ciencia-para-todos_10/acercate-a-nuestros-cientificos_107

La luz de sincrotrón, principalmente en el rango de los rayos X, es la base de muchas técnicas experimentales, que aprovechan las diversas interacciones de la luz sincrotrón con los electrones de los átomos que forman muestras tan diversas como materiales magnéticos, catalizadores, polímeros, superconductores, o biomoléculas. Así, técnicas como la microscopía, la espectroscopía y la difracción de rayos X son ya una herramienta de uso común en muchos campos científicos, y también cada vez más en la biología molecular y la bioquímica. Las estaciones experimentales, también llamadas líneas de luz, del sincrotrón Alba en Barcelona (1), que entró en operación a mediados del 2012, son una prueba de ello: tres de las siete líneas de luz construidas tienen aplicación directa en las ciencias de la vida.

La primera de ellas, BL9-MISTRAL, está dedicada a la microscopía de transmisión de rayos X con una resolución espacial en 2D de 30 nm. La línea está pensada para la criotomografía (reconstrucción en 3D) de células en el rango de la llamada *water window*, una región del espectro de los rayos X blandos en la cual la luz sincrotrón interactúa más con las macromoléculas (con gran cantidad de carbono) que con el agua (constituida básicamente por oxígeno). Esta técnica es de reciente aparición y con toda probabilidad su uso se extenderá.

Otra línea es la línea de luz BL11-NCD, dedicada a la difracción y dispersión de rayos X a bajos ángulos (SAXS). El uso de esta técnica es cada vez más importante en estudios estructurales de proteínas y grandes complejos macromoleculares en solución. La técnica de SAXS permite determinar la forma de proteínas y complejos a baja resolución, sin necesidad de cristalizarlos.

Finalmente, BL13-XALOC es la línea de luz de Alba dedicada a la cristalografía de macromoléculas (MX), seguramente la técnica en biología más extendida en todos los sincrotrones del mundo. En la técnica MX, el haz de rayos X incide y es dispersado por un cristal cuya celda unidad contiene la proteína o complejo a estudiar. Las ondas de cada celda interfieren constructivamente sólo en determinadas direcciones, en las que aparece un pico de difracción, o reflexión (Figura a). La posición de la reflexión depende del tamaño y forma de la celda unidad, mientras que su intensidad depende de la proteína o complejo contenidos en ella. Así, localizando estas posiciones e intensidades para todas las orientaciones del cristal, y resolviendo el llamado *problema de las fases* mediante diversas técnicas, con datos básicos como la secuencia

es posible encontrar la estructura de la proteína o complejo con una resolución de pocos Angstroms, es decir, casi atómica.

Evidentemente, una condición previa, y también un cuello de botella, para realizar experimentos de MX es la cristalización de la estructura estudiada. Aún así, el ritmo de determinación de estructuras ha estado creciendo ininterrumpidamente desde la eclosión de la técnica, tal como se refleja en la base de datos mundial de estructuras (2). Cada vez más, dada la dificultad creciente de los proyectos, la técnica de MX precisa de mejores líneas de luz sincrotrón dedicadas, y se complementa con otras como espectroscopía de rayos X o, especialmente, SAXS, como se ha mencionado anteriormente.

La línea XALOC entró en operación el 18 de julio de 2012, y desde entonces ha dado servicio a decenas de usuarios. XALOC produce un haz monocromático entre 2.4 y 0.58 Å y de 50×10 μm (horizontal×vertical) de tamaño (Figura b). El haz se ha demostrado muy estable durante horas y con un cambio fácil y rápido de la longitud de onda. Además la línea está equipada con un buen equipo experimental (Figura c). Las muestras se sitúan en un goniómetro de alta precisión de un eje, en el que se puede acoplar un montaje adicional con dos ejes más (montaje *mini-kappa*) para orientar adecuadamente los cristales con parámetros de celda grandes. La línea cuenta también con un robot intercambiador de muestras, que es una pieza clave en la automatización de la línea que está en proceso. Finalmente, y de manera especial, cuenta con el detector de referencia actualmente en el campo de la MX, que permite una colección de datos con menos ruido de fondo en las imágenes de difracción, así como un rango dinámico elevado que permite medir a la vez reflexiones intensas y débiles en la misma imagen sin peligro de saturación. Típicamente una colección de datos completa se realiza en 1-3 minutos.

El acceso a la línea XALOC se basa en la evaluación científica de las propuestas de experimentos recibidas en

los periodos de aplicación de propuestas. En los dos periodos habidos hasta la fecha (diciembre 2012) se han registrado un centenar de propuestas sólo para esta línea. El próximo periodo de aplicación se abrirá alrededor del verano de 2013. Se puede obtener más información en la página de la línea (3).

Referencias

- (1) www.cells.es/Beamlines
- (2) www.rscb.org
- (3) www.cells.es/Beamlines/XALOC/

Figura. a) Ejemplo de diagrama de difracción, tomado en XALOC, de un cristal de rinovirus 2 humano, con parámetros de celda unidad superiores a 450 Å (cortesía Núria Verdaguer, IBMB-CSIC). b) Haz de rayos X producido en XALOC en la posición de la muestra. c) Interior de la cabina experimental de XALOC. Destacan el detector sobre la mesa roja, el goniómetro sobre la mesa azul, y el robot cambiador de muestras en amarillo.

