

Koherent diffraktiv avbildning med röntgenlasrar – vad är en bra rekonstruktion?

Den första frielektronlasern som kan generera hårt röntgenljus (>5 keV) blev färdig 2009, vilket sedan dess har öppnat nya möjligheter att avbilda celler och virus. Dessa biopartiklar injiceras som en aerosol in en vakuumkammare där de överlappas med röntgenlasern så att diffraktionsmönster skapas på en 2D-detektor. Eftersom frielektronlasern kan producera flera tusen pulser i minuten är det viktigt att kunna automatiskt avgöra om en puls skapar ett högkvalitativt diffraktionsmönster eller inte.

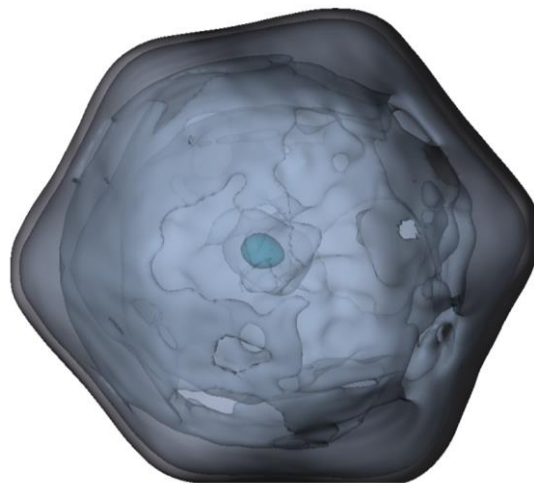
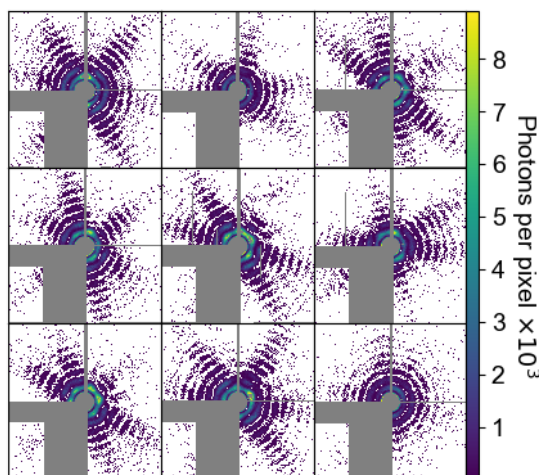
Detta är ett forskningsrelaterat projekt som använder programmering för att analysera hur man kan avgöra om ett diffraktionsmönster håller hög kvalitet eller inte. Detta bestäms av en rekonstruktion av spridningsamplitudens fas som är nödvändigt för att återskapa partikelns projektion i det verkliga rummet. Projektet kommer att bygga vidare på Vidar Elsin och Alfred Nilssons tidigare KEX-jobb:

<http://kth.diva-portal.org/smash/record.jsf?pid=diva2:1342377>

I projektet kommer diffraktionsmönster att användas som antingen kommer från verkliga experiment (se Fig. 1) eller från simulerade partiklar (se tidigare KEX-jobb). För att ha kapaciteten att återskapa många olika partiklar kommer KEX-jobbarna att få tillgång till datorklustret Davinci i Uppsala och med hjälp av programmeringsspråken Bash och Python lära sig skriva script som skickas till klustret för att utföra fasrekonstruktionerna. Den exakta problemfrågeställningen är flexibel, men exempel på projektuppgifter är att utveckla kriterier för när man kan mäta bra diffraktionsmönster, automatisk klassificering av experimentell data eller att jämföra kvaliteten vid olika fasrekonstruktioner från diffraktionsmönster.

Handledare: Jonas Sellberg, jonassel@kth.se

Maximalt antal KEX-jobb: 2 studenter



Figur 1. Högkvalitativa diffraktionsmönster från virus. **Figur 2.** Återskapning av virusets 3D-struktur.