



L

## DIFRAKČNÍ ZOBRAZENÍ JEDNÉ ČÁSTICE

R. Kužel

Univerzita Karlova v Praze, Matematicko-fyzikální fakulta, Ke Karlovu 5, 121 16 Praha 2

V poslední době se začínají velké naděje vkládat do zobrazení pomocí difrakce na jedné částici - single-particle diffraction (soubor referencí viz. [1]). Idea 3D zobrazení molekul a částic je fascinující.

Z hlediska optiky stojí vše na rozdílu difrakčního obrazu periodické struktury tvořené ostrými braggovskými maximy a difrakčního obrazu jedné částice, kde cenná informace je i v oblasti mezi maximy. V takovém případě můžeme obraz převzorkovat (oversampling), naměřit v intervalu jemnějším než je tzv. Nyquistova frekvence (převrácená hodnota velikosti částice). Odpovídá to vlastně tomu, že kromě vlastní částice uvažujeme oblast větší, i když s nulovou hustotou. Tím způsobem pak překonáme známý fázový problém. Převzorkování by mělo být větší než 2. Nutnou podmínkou je také použití koherentního záření.

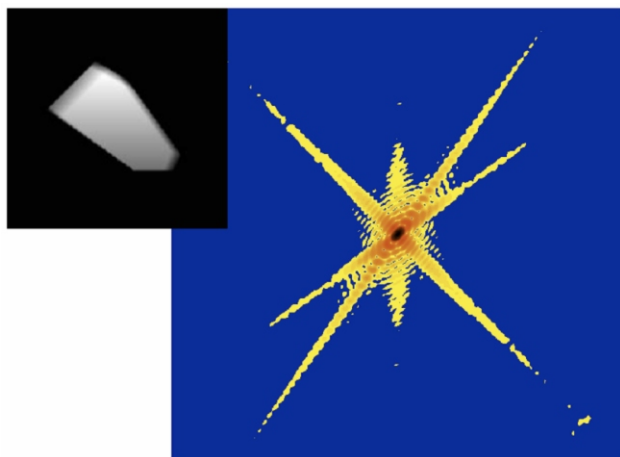
Fázový problém pak můžeme řešit iteračně. Změřené intenzity kombinujeme s nahodilým výběrem fází, provedeme inverzní Fourierovu transformaci, dostaneme elektronovou hustotu, zahrneme oblast s nulovou hustotou, spočteme v další iteraci obraz, atd. Na simulovaných datech většinou stačí pro dobrou rekonstrukci obrazu kolem 400 iterací. Pro složitější objekty (makromolekuly) pak několik tisíc iterací.

Dosud se pozornost soustřeďuje zejména na studium nanočástic, magnetických domén a makromolekul. Studovány byly obrazy zlatých nanočástic [2, 3] a zobrazena bakterie *Escherichia coli* [4]. Zobrazení makromolekul je zatím ve fázi simulací. Zásadním problémem je radiační destrukce molekul. Obraz je třeba získat dříve než k dojde k totálnímu zničení. Simulace ukazují, že je třeba řádu jednotek femtosekund, tzn. extrémně silných a krátkých pulsů koherentního záření. Takové by měl být schopen generovat laser na volných

elektronech (free-electron laser). Odhaduje se, že první 3D obrazy molekul by mohly být získány kolem roku 2008 [5, 6].

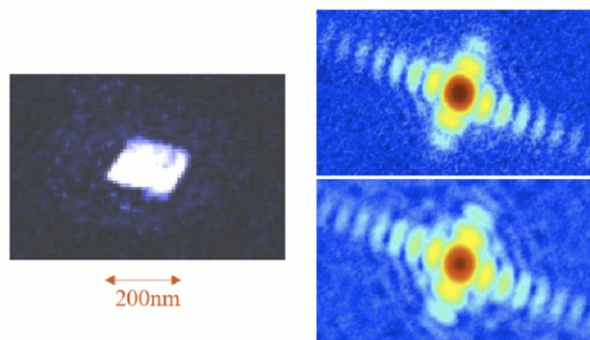
Metodě single-particle diffraction je na nadcházejícím světovém kongresu IUCr ve Florencii věnována nejen plenární přednáška, ale i celá sekce.

1. R. Kužel: Modern X-ray imaging techniques and their use in biology, *Materials Structure*, **12** (2005), 4-7.
2. I. K. Robinson, I. A. Vartanyants, G. J. Williams, M. A. Pferfer, & J. A. Pitney, *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001) 195505.
3. Ian K. Robinson, F. Pfeiffer, I. A. Vartanyants, Yungang Sun and Younan Xia, Enhancement of coherent X-ray diffraction from nanocrystals by introduction of X-ray optics, *Optics Express*, **11**, (2003) No. 19, 2329.
4. J. Miao, K. O. Hodgson, Tetsuya Ishikawa, C. A. Larabell, M. A. LeGros and Yoshinori Nishino, Imaging whole *Escherichia coli* bacteria by using single-particle x-ray diffraction, *PNAS - Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA*, **100** (2003), no. 1, 110–112.
5. J. Miao, H. N. Chapman, J. Kirz, D. Sayre, and K. O. Hodgson, TAKING X-RAY DIFFRACTION TO THE LIMIT: Macromolecular Structures from Femtosecond X-Ray Pulses and Diffraction Microscopy of Cells with Synchrotron Radiation, *Annu. Rev. Biophys. Biomol. Struct.* **33** (2004) 157–76.
6. S. Marchesini, H. N. Chapman, S. P. Hau-Riege, R. A. London, A. Szoke, H. He, M. R. Howells, H. Padmore, R. Rosen, J. C. H. Spence, U. Weierstall, Coherent X-ray diffractive imaging: applications and limitations, *Optics Express*, **11**, (2003) No. 19, 2344.



Nanočástice Au a její difrakční obraz. Převzato od autorů [2, 3].

## Reconstruction of Ag Nanocrystal



Rekonstrukce nanočástice Ag (vlevo) z difrakčních obrazů (vpravo). Převzato od autorů [2, 3].