

Kryoelektronová mikroskopie (cryo-EM) je rozvíjející se obor umožňující zobrazování molekul s rozlišením v řádech pikometrů. Snímky se získávají vystřelováním elektronů skrz vzorky molekul a detekcí rozptýlených elektronů. Z těchto dat lze následně zrekonstruovat 3D tvar molekul. V současné době je simulování tvorby snímku z cryo-EM založeno buď na naivních absorpčních modelech nebo na aplikaci komplikované vlnové funkce.

V této práci zkoumáme možnost simulace snímku z cryo-EM pomocí trasování elektronů s využitím Monte Carlo přístupu. Kombinací algoritmu delta-tracking s funkcí elektronového pružného diferenciálního průřezu a s Rutherfordovými vzorci odvozujeme dva Monte Carlo estimátory. Tyto modely jsou dále implementovány ve vysoce výkonném prostředí C++ / CUDA a porovnány s jinými běžně používanými modely. Naše simulované snímky vykazují značnou podobnost se známým vlnovým multislice modelem. Kvalitu naší simulace dále analyzujeme porovnáním s daty z reálných měření. Oba naše navrhované modely dosahují významně vyšších hodnot normalizované korelace s těmito daty než nejběžněji používaný absorpční model. Tato práce jednoznačně prokazuje použitelnost částicové simulace snímků z elektronového mikroskopu s využitím Monte Carlo přístupu a poskytuje intuitivní náhled do složitých procesů v cryo-EM. Díky efektivní implementaci a vysoké korelaci s reálnými daty mají navíc odvozené modely potenciál do budoucna nahradit absorpční model běžně používaný při rekonstrukcích molekulárních struktur.