

## **Szkoła Doktorska Instytutów PAN Technologii Informacyjnych i Biomedycznych**

### **Temat**

Półautomatyczna analiza widm NMR płynów ustrojowych/ekstraktów tkanek w zastosowaniu do badań metabolomicznych

### **Promotor, dane kontaktowe, jednostka naukowa**

dr hab. Beata Toczyłowska, prof. IBIB PAN, IBIB PAN, Ks Trojdena 4,

e-mail: beata.toczyłowska@ibib.waw.pl

### **Opis projektu**

Temat dotyczy przygotowania aplikacji pozwalającej na półautomatyczną analizę widm NMR. Widma różnych płynów ustrojowych (surowica, płyn mózgowo-rdzeniowy, ekstrakty lipidowe) mierzone są różnymi spektrometrami (różne formaty danych) w różnych warunkach, zależnych od badanego płynu. Celem doktoratu jest przygotowanie aplikacji, która: wczytuje dane FID zapisywane w formacie spektrometru, dokonuje transformaty Fouriera danych, korekcji fazy i linii podstawowej, normalizacji widma zgodnie z wzorcem referencyjnym. W oparciu o istniejące bazy danych widm substancji wzorcowych (HMDB) wspiera identyfikację związków w mieszaninie, jaką jest płyn ustrojowy oraz umożliwia oznaczenie stężenia wykorzystując substancję wzorcową o znanym stężeniu. Praca powinna zawierać analizę błędów.

Finansowanie: ze środków IBIB, planowane wystąpienie o grant NCN