

**TYTUŁ PROJEKTU DOKTORSKIEGO: Półautomatyczna analiza widm NMR płynów ustrojowych/ekstraktów tkanek w zastosowaniu do badań metabolomicznych**

**PROMOTOR (+adres email):** Beata Toczyłowska, prof. IBIB PAN, beata.toczyłowska@ibib.waw.pl

**PROMOTOR POMOCNICZY (+adres email) (opcjonalnie):**

**SZKOŁA DOKTORSKA (niepotrzebne skreślić):**

1. Szkoła doktorska Technologii Informacyjnych i Biomedycznych Instytutów PAN (TIB PAN)
2. ~~SZKOŁA DOKTORSKA MEDYCYNY TRANSLACYJNEJ „Bench to Bedside—B 2 B 4 PhD”~~

**AFILIACJA:** Instytut Biocybernetyki i Inżynierii Biomedycznej im. Macieja Nałęczu Polskiej Akademii Nauk, ul. Ks. Trojdena 4, 02-109 Warszawa

**DYSCYPLINA NAUKOWA:** inżynieria biomedyczna

**OPIS PROJEKTU** (maks. 2500 znaków; *zawierający ogólną informację dotyczącą celu naukowego projektu i hipotez badawczych, aktualny stan wiedzy, krótki plan badawczy i metodyka badań*)

Praca dotyczy przygotowania aplikacji umożliwiającej półautomatyczną analizę widm NMR. Obecnie istnieje kilka programów do analizy widm, w tym płynów ustrojowych, ale nie identyfikują one poprawnie metabolitów. Wynika to z przesunięcia sygnałów w widmie wraz ze zmianą pH, przy czym każdy związek zachowuje się inaczej. Wszystkie te programy działają w trybie automatycznym, identyfikując związki, które nie mogą znajdować się w próbkach (zanieczyszczenia lub toksyny) i pomijają ważne związki ze względu na zmianę położenia sygnału w widmie. Stąd konieczność stworzenia półautomatycznej aplikacji pozwalającej operatorowi na dokonywanie korekt wynikających ze zmiany pH. Aplikacja powinna również wspierać przeszukiwanie baz danych widm standardowych. Widma różnych płynów ustrojowych (surowica, płyn mózgowo-rdzeniowy, ekstrakty lipidowe) można mierzyć różnymi spektrometrami NMR (różne formaty danych) w różnych warunkach pomiarowych (różne sekwencje) w zależności od badanego płynu. Celem pracy doktorskiej jest przygotowanie aplikacji, która: odczytuje surowe dane (FID) zapisane w formacie spektrometru, wykonuje transformację Fouriera danych, korekty fazy i linii bazowej, normalizuje widmo zgodnie z sygnałem substancji odniesienia znane stężenie. W oparciu o istniejące bazy danych widm substancji wzorcowych (HMDB) – metabolitów obecnych w próbce, aplikacja powinna umożliwiać ich identyfikację w mieszaninie, która jest płynem ustrojowym oraz oznaczenie ich stężeń przy użyciu substancji odniesienia, która jest mierzona razem z próbką. Praca powinna również zawierać analizę wybranych widm będących w posiadaniu Laboratorium. Ze względu na oprogramowanie dostępne w Laboratorium aplikacja powinna być napisana w języku Pascal (Delphi) lub C++.

**Źródła finansowania badań:** Dane i oprogramowanie do tworzenia aplikacji jest w posiadaniu Pracowni.

**Źródła finansowania stypendium:** Finansowanie wewnętrzne. W przypadku pozytywnego rozpatrzenia grantu złożonego w NCN – finansowanie z grantu.

**WYMAGANIA STAWIANE KANDYDATOM**

1. Tytuł magistra w dziedzinie inżynierii informatyki/inżynierii biomedycznej/fizyki/biofizyki lub pokrewnej;
2. Podstawowa wiedza w zakresie spektroskopii NMR;
3. Podstawowa wiedza w zakresie programowania w Pascalu/C++/Matlabie/.