

„Analiza sygnałów niestacjonarnych w spektroskopii NMR”

Celem projektu jest opracowanie nowej techniki badawczej opartej na spektroskopii Jądrowego Rezonansu Magnetycznego (NMR). Ten rodzaj spektroskopii pozwala na niezwykle dokładny wgląd w strukturę cząsteczek chemicznych, czyli ustalenie przestrzennego rozmieszczenia poszczególnych ich atomów. Niestety, pomiary NMR dostarczające najcenniejszej informacji są również najbardziej czasochłonne – potrafią trwać nawet wiele tygodni dla pojedynczej próbki. Ze względu na koszt użytkowania aparatury i niestabilność niektórych próbek, długi czas pomiarowy może zupełnie uniemożliwić badania. Sytuacja jest szczególnie trudna w przypadku np. badań zmian struktury cząsteczki, gdy pomiar trzeba powtórzyć wielokrotnie w zmieniających się warunkach. Na szczęście istnieją metody matematycznej analizy sygnału pozwalające na uzyskanie w relatywnie krótkim czasie informacji równoważnej tej uzyskanej w pomiarze seryjnym. Celem projektu jest adaptacja do spektroskopii NMR metod opartych na transformacie Fouriera, transformacji Radona, analizie czasowo-częstotliwościowej czy na teorii oszczędnego próbkowania oraz rozwijanie nowych metod analizy sygnałów otrzymywanych w niestacjonarnej spektroskopii NMR.

W wyniku realizacji projektu powstaną zaawansowane techniki rejestracji i przetwarzania danych w eksperymentach NMR. Ich celem będzie przyspieszenie pomiaru, poprawa czułości i usprawnienie analizy widm w których pod wpływem różnorodnych czynników dochodzi do zmian tzw. częstotliwości rezonansowych. Zmiany te chemicy potrafią interpretować jako przemieszczenia atomów w cząsteczkach, reakcje chemiczne i przemiany struktury materiałów.

Nowe techniki pomiarowe, pozwalające uzyskać dokładniejszy wgląd w zjawiska przyrodnicze, są jednym z motorów postępu nauki. Obok wynalazków udoskonalających samą aparaturę (*hardware*), ważnym polem innowacji są udoskonalenia metod zbierania i analizy danych (*software*).

Niniejszy projekt należy do tej drugiej kategorii. Jego realizacja przyczyni się do znacznej optymalizacji seryjnych pomiarów NMR i uzyskania dokładniejszych wyników w krótszym czasie. W rezultacie zostaną stworzone narzędzia do badania skomplikowanych lub szybko zmieniających się próbek chemicznych.

W wyniku realizacji projektu powstaną zaawansowane techniki rejestracji i przetwarzania danych w eksperymentach NMR. Ich celem będzie przyspieszenie pomiaru, poprawa czułości i usprawnienie analizy widm w których pod wpływem różnorodnych czynników dochodzi do zmian tzw. częstotliwości rezonansowych. Zmiany te chemicy potrafią interpretować jako przemieszczenia atomów w cząsteczkach, reakcje chemiczne i przemiany struktury materiałów.

Głównym odbiorcą opracowywanej w ramach projektu technologii mogą być branże farmaceutyczna i chemiczna. Pierwsza z nich wykorzystuje spektroskopię NMR w fazie opracowywania nowych leków (R&D). Seryjne pomiary NMR należą do najważniejszych

technik badania wiązania białek z lekami (ligandami) oraz pozwalają uzyskać dane wspierające komputerowe modelowanie struktur biocząsteczek. Pomyślna realizacja projektu może się przyczynić zatem do skuteczniejszego opracowywania nowych leków.

Z kolei w branży chemicznej, a także pokrewnych jej branżach technologii spożywczej i kosmetycznej, ważne jest skuteczne monitorowanie procesów produkcji, syntezy i starzenia (degradacji). Prowadzi się je za pomocą serii pomiarów wykonywanych w regularnych odstępach czasu. Spektroskopia NMR jest wykorzystywana jako czujnik monitorujący dość rzadko, ze względu na wysokie koszty funkcjonowania aparatury oraz czas trwania eksperymentów. Opracowywane w ramach projektu programy i metody pomiarowe umożliwią zmianę tej sytuacji i szersze wykorzystanie spektroskopii NMR w monitorowaniu i optymalizacji procesów przemysłowych.

Do zadań doktoranta będzie należało opracowanie nowych algorytmów przetwarzania danych w szybkich, wielowymiarowych, seryjnych eksperymentach NMR oraz przeprowadzenie pomiarów próbek różnego rodzaju: organicznych, biologicznych (białka), w cieple stałym itp. pozyskiwanych od współpracujących zespołów, np. zespołu prof. Roberta Konrata z Uniwersytetu Wiedeńskiego czy dr. Craiga Buttsa z Uniwersytetu w Bristolu.

Jak widać z powyższego opisu, projekt łączy w sobie zagadnienia chemii, fizyki chemicznej i matematycznego przetwarzania sygnałów (analizy harmonicznej i pokrewnych dziedzin). Kompetencje naukowe promotorów w pełni pokrywają się z tematyką zadań projektu: dr hab. Paweł Kasprzak z Wydziału Fizyki UW jest specjalistą w dziedzinie matematycznej analizy sygnału, zaś dr hab. Krzysztof Kazimierczuk z Centrum Nowych Technologii UW ma bogate doświadczenie w eksperymentach NMR.

Konieczne jest, aby doktorant przeszedł pozytywnie rekrutację przez komisję rekrutacyjną projektu FIRST TEAM, aplikując do niego do dnia 16 maja 2018 (szczegóły pod adresem: <http://cent.uw.edu.pl/pl/kariera/doktorant-do-laboratorium-nmr/>). Budżet projektu umożliwia odbywanie przez doktoranta zagranicznych szkoleń oraz pokrywa jego stypendium.

Dane kontaktowe opiekunów projektu:

dr hab. Krzysztof Kazimierczuk, Laboratorium Spektroskopii NMR, Centrum Nowych Technologii UW, tel: 22 55 43 669, email: k.kazimierczuk@cent.uw.edu.pl

dr hab. Paweł Kasprzak, Katedra Metod Matematycznych Fizyki, Wydział Fizyki UW, tel: 22 55 32 941, pawel.kasprzak@fuw.edu.pl