

Python pluginy pro pokročilé zpracování dat se softwarem TopSpin NMR

studentský projekt, který lze rozšířit na bakalářskou nebo diplomovou práci

vedoucí: RNDr. Oleg Petrov, Ph.D., KFNT, MFF UK, Troja, Kryopavilón, C138,
tel. +420221912561, e-mail: olegvpetrov@yandex.ru

TopSpin je program od firmy Bruker založený na multi-taskingu, který slouží k ovládní spektrometru nukleární magnetické rezonance (NMR) a zpracování získaných dat. TopSpin podporuje pluginy napsané v jazyce Python, které umožňují vývojářům třetích stran rozšířit jeho funkce a přidat nové funkce s grafikou a uživatelskými rozhraními. Hledáme motivovaného studenta informatiky nebo fyziky, jehož úkolem by bylo převést algoritmy pro zpracování dat, které jsou v současné době k dispozici jako stand-alone Python skripty, do podoby TopSpin pluginů. Algoritmy již byly implementovány v jazyce Python, ale ne nutně optimálním způsobem. Student je vítán, aby přispěl svými vlastními nápady, jak zlepšit kód nebo najít alternativní algoritmy pro stejné problémy. V opačném případě bude celková úloha omezena na úpravu dostupného kódu pro jeho spuštění z TopSpinu.

Zde je popis problémů, o které se jedná:

- 1) *Korekce baseline pro 1D NMR spektra.* Algoritmus spočívá v automatickém rozpoznávání oblastí spekter bez signálu a spojení jejich středních bodů do spojitě baseliny pomocí lineární nebo polynomiální interpolace.
- 2) *Symetrizace spekter rotace pod magickým úhlem (magic angle spinning – MAS) spekter kvadrupolárních jader.* Rotační pásy MAS spekter, kterých tvar definuje tvar kvadrupolárních spekter prvního řádu, často postrádají požadovanou symetrii. Řešením je lokalizovat dvojice protilehlých rotačních pásů a nahradit je jejich průměrnými intenzitami.
- 3) *Synchronizovaná akvizice rotačních ech.* Periodické nalezení maxim signálů podél řady rotačních ech v MAS NMR.
- 4) *Kvantifikace NMR pomocí analýzy hlavních komponent (principal component analysis - PCA).* Měření intenzity signálu ve sdružených NMR experimentech pomocí PCA.
- 5) *Automatická korekce fázového a frekvenčního posunu.* Korekce variací fáze a frekvence ve združených NMR experimentech založená na PCA.

Literatura (na vyžádání): [1] Python Programming in TopSpin, a tutorial by Bruker BioSpin (2012)
[2] Python Tutorial: Using Python in TopSpin, by B. Guigas (2007)

