**Opracowanie metody określania stopnia dopasowania widma doświadczalnego metabolitu do widma opublikowanego w bazie danych ludzkich metabolitów**

Baza danych *Human Metabolome Data Base* zawiera dane na temat ponad 100 tysięcy metabolitów i liczba ta stale rośnie. Stanowi ona największe i nieocenione źródło danych przydatnych w medycznych badaniach podstawowych oraz diagnostyce medycznej. Jej niejednorodność (dane tekstowe, obrazy) ogranicza w znaczącym stopniu jej stosowalność. Jednym z ważniejszych zastosowań jest potwierdzenie tożsamości metabolitu, występującego u badanego pacjenta, na podstawie widma masowego - czyli zbioru sygnałów pojawiających się przy charakterystycznej wartości stosunku masy do ładunku. Widmo zawierające grupę takich charakterystycznych sygnałów stanowi swoisty odcisk palca dla każdego związku. Dopasowanie jednak nigdy nie jest całkowite ze względu na różnice w budowie i działaniu stosowanych spektrometrów mas. Konieczne jest zatem narzędzie wyszukujące w bazie danych widma podobne do eksperymentalnych i określające stopień ich dopasowania.

Praca realizowana będzie we współpracy z Katedrą Chemii Analitycznej na Wydziale Chemicznym PW i obejmuje:

- zdefiniowanie parametrów krytycznych

- zdefiniowanie parametrów stopnia dopasowania widma

-……..

**Opracowanie metody wyznaczania parametrów rejestracji metabolitów za pomocą spektrometru mas na podstawie widm opublikowanych w bazie danych ludzkich metabolitów**

Baza danych *Human Metabolome Data Base* zawiera dane na temat ponad 100 tysięcy metabolitów i liczba ta stale rośnie. Stanowi ona największe i nieocenione źródło danych przydatnych w medycznych badaniach podstawowych oraz diagnostyce medycznej. Jej niejednorodność (zawiera także dane na temat metabolitów: roślin, leków, związków toksycznych, narkotyków i innych niesyntezowanych przez człowieka związków) ogranicza w znaczącym stopniu jej stosowalność. Konieczne jest stworzenie narzędzia pozwalającego na wyszukiwanie metabolitów charakterystycznych dla określonego: szlaku metabolomicznego, leku, lub organizmu żywego i określającego dla nich charakterystyczne parametry stosunku masy do ładunku, dla których mają być dokonane pomiary za pomocą spektrometru mas. Narzędzie to będzie pozwalało na wykonywanie analiz jakościowych i porównawczych bez stosowania kosztownych substancji chemicznych jako wzorcowych, a także pozwoli badań nowoodkryte metabolity, co znacznie przyśpieszy rozwój diagnostyki medycznej.

Praca realizowana będzie we współpracy z Katedrą Chemii Analitycznej na Wydziale Chemicznym PW i obejmuje:

- zdefiniowanie parametrów krytycznych, na podstawie których ma powstać tablica wyznaczonych wartości dla wybranych parametrów sterowalnych spektrometru mas

- ………………..

- ……

**Opracowanie metody wykrywania i wizualizacji statystycznie istotnych różnic w zawartości metali i metabolitów w płynach ustrojowych i tkankach ludzkich**

Badania metabolitów i jonów metali oraz wykrywanie nowych metabolitów, które mogą być wykorzystywane jako biomarkery wskazujące na występowanie choroby u człowieka jest procesem kosztownym, czasochłonnym i niezwykle trudnym. Jednym z większych problemów jest konieczność kalibracji aparatów pomiarowych z użyciem badanych metabolitów. Ogranicza to stosowalność technik spektroskopowych i spektrometrii mas w medycynie. Możliwe jest jednak stosowanie analiz porównawczych (pacjent leczony via pacjent otrzymujący placebo, zdrowy via chory), ale ze względu na ogromną różnorodność obiektów biologicznych konieczna jest normalizacja danych przed ich porównaniem. Konieczne jest zatem opracowanie narzędzia pozwalającego na wykrywanie różnic istotnych statystycznie w zawartościach metali i metabolitów w tkance człowieka pozwalające na wykrywanie najlepszej metody normalizacji wielowymiarowych danych ilościowych.

Praca realizowana będzie we współpracy z Katedrą Chemii Analitycznej na Wydziale Chemicznym PW i obejmuje:

- zdefiniowanie parametrów jakościowych i ilościowych dla badanych związków

- opracowanie narzędzia wykrywającego statystycznie istotne różnice z wybieralnymi opcjonalnie metodami normalizacji sygnałów.