

Wykonywanie powtarzalnych, rutynowych czynności zabiera znaczną część życia każdego człowieka. Większość codziennych zadań nie jest ani satysfakcjonujących, ani zajmujących - nic dziwnego zatem, że w toku postępu cywilizacyjnego dążono do ich automatyzacji. Badania naukowe nie różnią się zbytnio w tej materii od innych dziedzin ludzkiej aktywności. Jednak naukowcy, zwłaszcza wykonujący badania podstawowe, często uważają, że stworzenie „zautomatyzowanych” rozwiązań leży poza obszarem ich zadań. Ograniczają się do tworzenia prototypów urządzeń lub schematów metod, które często pozostają w fazie „ręcznego sterowania” przez lata, gdyż niewielka liczba ich użytkowników nie jest wystarczającą motywacją do inwestowania w dalszy rozwój. Tymczasem automatyzacja metod często prowadzi do uzyskania rezultatów nie tylko szybciej, ale i z większą dokładnością.

Dobrym przykładem powyższego problemu w dziedzinie nauki jest spektroskopia jądrowego rezonansu magnetycznego (ang. Nuclear Magnetic Resonance, NMR), będąca jednym z podstawowych narzędzi analizy struktur cząsteczek chemicznych. Oparta na tym samym zjawisku fizycznym co znany wielu pacjentom tzw. rezonans medyczny (ang. Magnetic Resonance Imaging, MRI), posiada podobne zalety: nieinwazyjność oraz unikalny wgląd w strukturę badanych obiektów. Niestety, posiada też podobne wady, zwłaszcza kosztowność i czasochłonność pomiarów związaną zarówno ze stosunkowo niską czułością metody jak i z matematycznymi wymaganiami próbkowania sygnału. Czasochłonność staje się szczególnym problemem w pomiarach seryjnych, takich jak np. badania zachowania próbki w różnych temperaturach. Wykonanie ich klasyczną metodą wymaga uzyskania odpowiedniej czułości (stosunku sygnału do szumu) w każdym z pomiarów z osobna. Istnieją jednak metody, które pozwalają ominąć to ograniczenie, traktując serię pomiarową jak jeden obiekt danych. Nawet, jeśli każdy z wyników pomiarów w serii jest trudny w interpretacji, wspólne przetwarzanie wszystkich zapewnia znaczący wzrost jakości wyniku i ułatwia interpretację.

Proponowany projekt opiera się na adaptacji jednej z takich metod, znanej jako transformacja Radona, do badań NMR próbek białek natywnie niezwinionych, które odgrywają znaczącą rolę w wielu chorobach (np. Parkinsona, Alzheimer i innych). We współpracy z Vienna Biocenter, jednym z najlepszych na świecie ośrodków badających te cząsteczki, zamierzamy stworzyć pakiet metod który ułatwi wgląd w ich dynamikę i zmiany strukturalne związane z oddziaływaniami o znaczeniu biologicznym i medycznym. Bogate doświadczenie wykonawców projektu zarówno w opracowywaniu nowych technik, jak i w ich popularyzacji, pozwoli na udoskonalenie badań białek – jednej z najważniejszych dziedzin współczesnej nauki.