

00082

Platform Session IV

Remote NMR Data Processing

최인식, 권경훈, 김미옥, 윤희경, 정재준¹, 이철현¹

기초과학지원연구소 과학전산실, 자기공명팀¹

고가의 연구장비 및 공동연구 수행을 통한 문제 해결이 핵심 요소인 현대 과학기술 연구개발 환경에서 연구자들과 고가의 연구장비들간의 공간적 제약이 연구 생산성 향상 및 국제 경쟁력 향상에 최대 걸림돌로 작용할 수 있다. 이런 제약을 효율적으로 해소하기 위하여서는 Internet 기술을 활용한 연구개발 환경 구축이 필수적이라 하겠다. 이를 위하여 기초(연)에서는 연구장비 공동활용 정보화 환경 구축을 위하여 원격 실험 분석 시스템 개발을 추진 중에 있다. 여기에서는 기초(연)에서 분석지원 One-Stop 서비스를 위하여 추진 중인 원격 실험 분석 시스템의 개요 및 서버 시스템으로 개발된 원격 NMR 데이터 분석 시범 시스템을 소개한다.

현재 기초(연)에서 개발한 원격 NMR 데이터 분석 시범 시스템은 Web 기반의 실험 DB Management 기능과 데이터 분석 기능을 갖고 있다. 원격 NMR 데이터 분석 기능은 Java 기술을 활용하여 1차원 NMR 데이터 분석 기능과 2차원 NMR 데이터의 Graphic 처리 기능을 갖고 있으며 주요 기능은 다음과 같다. 1차원 NMR 데이터 분석 시스템 주요 기능으로는 1차원 FID 데이터 Fourier Transform에 의한 Spectrum 계산, 1차원 스펙트럼 데이터 Graphic 처리, 및 Apodization, Phase Correction, Integration, Baseline Correction, Peak Picking 등의 데이터 처리 기능을 갖고 있다. 2차원 NMR 데이터 Graphic 처리 기능으로는 2차원 스펙트럼의 Color display, Contour Display, Color Level 조절, 1차원 Cross Section인 FID의 Graphic 처리 등의 기능을 갖고 있다.