

INSTYTUT FIZYKI JĄDROWEJ PAN IM. H. NIEWODNICZAŃSKIEGO

przy współdziale

KOMITETU FIZYKI POLSKIEJ AKADEMII NAUK

P R O G R A M

XLII OGÓLNOPOLSKIEGO SEMINARIUM NA TEMAT MAGNETYCZNEGO REZONANSU JĄDROWEGO I JEGO ZASTOSOWAŃ

Kraków, dnia 1 i 2 grudnia 2009

Seminarium sponsorują:

*AMX-ARMAR AG
BRUKER-POLSKA SP. Z O.O
VARIAN INTERNATIONAL AG
PAŃSTWOWA AGENCJA ATOMISTYKI*

Adresy sponsorów:

AMX-ARMAR AG

*mgr Anna Potrzebowska
ul. Bułgarska 12a
93-362 Łódź
tel. (042) 645 00 64
amx@amx.pl.pl*

BRUKER POLSKA SP. Z O.O

*mgr W. Leszczyński
ul. Budziszewska 69
60-179 Poznań
tel. (061) 868 90 08
fax. (061) 868 90 96
e-mail: sekretariat@bruker.poznan.pl
www.bruker.pl*

VARIAN INTERNATIONAL AG.

*mgr inż. W. Kośmider
ul. Skarbka 21
60-348 Poznań
tel. (061) 867 31 84
tel. kom. 602 287 918
e-mail: woko@eranet.com
www.varianinc.com*

KOMITET FIZYKI POLSKIEJ AKADEMII NAUK

*Instytut Fizyki PAN
Al. Lotników 32/46
02-668 Warszawa*

PAŃSTWOWA AGENCJA ATOMISTYKI

*ul. Krucza 36
00-921 Warszawa*

Wtorek, 1 grudnia 2009

10:00-10:15 Otwarcie

10:15-11:00 K. Pruessmann
Travelling-wave NMR and MRI

11:00-11:45 L. R. Schad
Sodium MR Imaging

11:45 -12:15 Przerwa na kawę i herbatę

12:15-12:45 G. Bauman, M. Puderbach, M. Deimling, J. Dinkel, Ch. Hintze, L. R. Schad
Non-contrast based MRI of human lung perfusion and ventilation

12:45-13:15 D. von Elverfeldt
Rodent MRI from Head to Tail

13:15-13:30 T. Zellhofer
The One NMR™ Probe From Varian and Their Combination Tools

13:30-13:45 C. Oerther
New Developments in MRI

13:45-14:00 S. Steuernagel
New Developments in CP-MAS

14:00-15:30 Przerwa na obiad

15:30-16:00 F. Hennel
Mapping of the B₁ Field Using Adiabatic Excitation Pulses

16:00-16:15 A. Młynarczyk, M. Gruwel, P. Kulinowski, K. Jasiński, P. Dorożyński, B. Tomanek,
W. P. Węglarz
Zastosowanie mikroskopii MR do oceny procesów hydratacji tabletek o przedłużonym
działaniu na bazie polimeru HPMC

16:15-16:30 K. Kamińska, S. Adaszewski, E. Piątkowska-Janko, P. Bogorodzki, M. Pisklak
System do monitoringu jakości obrazowania czynnościowego fMRI: fantom
oraz oprogramowanie do automatycznej analizy

16:30-16:45 P. Palowska, M. Ryń, U. Klose, Z. Drzazga
Analiza sygnału BOLD pnia mózgu po ciągłej aktywacji dźwiękowej

16:45-17:15 Przerwa na kawę i herbatę

17:15-17:30 M. Kuliszkiwicz-Janus
Oszacowanie stężenia fosfolipidów w osoczu, komórkach jednojądrzastych i erytrocytach
pacjentów z nowotworami krwi – badania ³¹P MRS in vitro

17:30-17:45 J. Schiller, M. Kuliszkiwicz-Janus, I. Dereń-Wagemann, S. Baczyński
Zmiany zachodzące w fosfolipidach tratw lipidowych u pacjentów z rozpoznaniem MDS

- 17:45-18:00 S. Gałdziński, T. C. Durazzo, A. Mon, Ping-Hong Yeh, D. J. Meyerhoff
Ocena procesów regeneracyjnych w istocie białej mózgow alkoholików podczas abstynencji
za pomocą wielu technik magnetycznego rezonansu jądrowego
- 18:00-18:30 S. Jurga
Dynamika molekularna polimerów o zróżnicowanej morfologii
- 18:30-20:30 SESJA PLAKATOWA
- 20:30-22:00 *Kolacja*
- 22:00 Odjazd autobusu do hotelu POP System

Środa, 2 grudnia 2009

- 9:00-9:30 H. Thiele
Structural Analysis of Complicated Chemical Compounds Based on MS, NMR and XRD Spectroscopic Data
- 9:30-10:00 K. Krynicki
Chloroform - a model component for NMR studies of various molecular motions in liquids
- 10:00-10:30 W. Koźmiński, K. Kazimierczuk, M. Misiak, J. Stanek, A. Zawadzka-Kazimierczuk
Postępy wielowymiarowej spektroskopii NMR z oszczędnym próbkowaniem losowym
- 10:30-11:00 P. Bernatowicz, K. Ruszczyńska-Bartnik, A. Ejchart, H. Dodziuk, E. Kaczorowska, H. Ueda
Badania dynamiki wewnątrzcząsteczkowej w cyklodekstrynach metodami relaksacji spinowej jąder ^{13}C w cieczech
- 11:00-11:30 *Przerwa na kawę i herbatę*
- 11:30-11:45 Z. Biedrzycka, K. Kamińska-Trela, M. Witanowski
Wiązanie wodorowe w acetylenie i jego pochodnych
- 11:45-12:00 P. Szczeciński, A. Dziadecka, A. Gryff – Keller
Badania struktury i stereochemii NTBC i jego metabolitów za pomocą kombinowanej metody NMR/DFT
- 12:00-12:15 H. Dodziuk
Nietypowa struktura i widma NMR kilku cyklofanów
- 12:15-12:30 L. Pazderski, T. Pawlak, J. Sitkowski, L. Kozerski, E. Szlyk
Przesunięcia koordynacyjne ^1H , ^{13}C , ^{15}N NMR kationowych kompleksów Fe(II), Ru(II) i Os(II) z 2,2'-bipyridyną i 1,10-fenantroliną
- 12:30-12:45 J. Jaźwiński, R. Głuszczka
Tworzenie adduktów tetrakarboksylanów rodu(ii) z pochodnymi metioniny: badania technikami VIS i NMR
- 12:45-13:00 M. Nowakowski, Ł. Jaremko, I. Zhukov, A. Belczyk, A. Bierzyński, A. Ejchart
Struktura ludzkiego białka apo-S100A1 na podstawie danych 3D NMR
- 13:00-13:15 M. Budzińska, M. Nowakowski, I. Zhukov, A. Bielczyk, A. Bierzyński, A. Ejchart
Zmiany strukturalne ludzkiego białka holo-S100A1 na podstawie przesunięć chemicznych NMR
- 13:15-13:30 Polkowska-Nowakowska, A. Gozdek, I. Zhukov, A. Stankiewicz-Drogon, J. Pawłowicz, W. Zagórski-Ostoja, P. Borowski, A. Boguszewska-Chachulska, J. Poznański, T. Kulikowski, A. Miazga, M. Bretner
Badanie mechanizmu działania inhibitorów helikazy HCV: TBBT i DCBT za pomocą metody chemical shift mapping

13:30-13:45 P. Kaczka, A. Polkowska-Nowakowska, K. Bolewska, I. Zhukov, J. Poznański,
K. L. Wierzchowski
Wpływ trójfluoroetanolu na strukturę regionu 4 białka σ^{70} z kompleksu polimerazy RNA E

13:45-15:15 Obiad

15:15-15:30 D. Kruk
Czy ESR i NMR opisują tę samą dynamikę układów paramagnetycznych?

15:30-15:45 A. Mielczarek, D. Kruk
Teoria dynamicznej polaryzacji jądrowej w ciałach stałych

15:45-16:00 T. Kupka
Teoretyczne obliczenia stałych ekranowania magnetycznego i sprzężenia spin-spin

16:00-16:15 W. Medycki, D. Kruk, R. Jakubas, J. Jadżyn
Dynamika molekularna i jądrowe procesy relaksacji kationów planarnych z symetrią pseudo-pięciokrotną: związki imidazoliowe i pyrazoliowe

16:15-16:30 W. Masierak, C. Uniszkiwicz, A. Privalov, F. Fujara, W. Medycki, D. Kruk
Badania relaksacji jądrowej w związkach imidazolowych zawierających jądra kwadropolowe

16:30-16:45 L. Latanowicz, Z. Gdaniec
Funkcje gęstości spektralnych złożonych ruchów molekularnych

16:45-17:15 Przerwa na kawę i herbatę

17:15-17:30 U. Tyrankiewicz, T. Skórka, S. Heinze-Paluchowska, M. Jabłońska, L. Drelicharz,
M. Woźniak, S. Chłopicki
Ocena rezerwy czynności serca w badaniu in vivo mysich modeli kardiomiopatii

17:30-17:45 P. Rosicka, K. Majcher, W. Marcol, W. Ślusarczyk, T. Banasik, J. Lewin-Kowalik,
W.P. Węglarz
Zastosowanie obrazowania magnetyczno - rezonansowego do monitorowania zmian w rdzeniu kręgowym w modelu zwierzęcym uszkodzenia rdzenia kręgowego przy pomocy impaktora ciśnieniowego

17:45-18:00 Ł. Kołaszewski, P. Bogorodzki, E. Piatkowska-Janko, J. Piotrowski, J. Skulski, M. Pisklak
Detektor do celów podwójnego rezonansu protonowo-elektronowego (pedri)

18:00-18:15 W. Obreński, P. Bogorodzki, E. Piatkowska-Janko
Optymalizacja impulsu adiabaticznego do magnetycznego znakowania krwi (Arterial Spin Labeling)

18:15-18:30 A. T. Birczyński, Z. T. Lalowicz, G. Stoch
Dynamika cząsteczek d_4 -metanol i d_6 -aceton w komorach zeolitu NaX w zakresie temperatur 10-290 K badana metodą deuteronowej spektroskopii MRJ

18:30-18:45 K. Turek, P. Liszkowski, B. Tomanek
Nowe magnesy do obrazowania magnetyczno-rezonansowego

18:45 Zakończenie Seminarium

Program Sesji Plakatowej

1. D. Bartusik, B. Tomanek
Zastosowanie ^{19}F MRI ex vivo w badaniach skuteczności leków
2. D. Bartusik, B. Tomanek, D. Siluk, R. Kaliszan
 ^{19}F MRI ex vivo w analizie wpływu tocotrienoli na kultury komórek nowotworowych MCF-7
3. M. Bugaj, B. Wileńska, W. Danikiewicz, K. Kamińska-Trela, A. Krówczyński
Badania struktury enaminoketonów arylowych i ich tioanalogów – widma NMR i MS
4. D. Cukier, I. Diaz-Moreno, D. Hollingworth, G. Kelly, S. R. Martin, A. Ramos
Strukturalne podstawy regulacji transkrypcji proto-onkogenu c-myc
5. M. Dobies, M. Kozak, S. Jurga, A. Grubb
Dyspersja szybkości relaksacji spin-sieć w wodnych roztworach białka HC (α_1 -mikroglobuliny)
6. K. Dybiec, S. Molchanov i A. Gryff-Keller
Badanie za pomocą ^{13}C NMR i obliczeń GIAO-DFT tautomerii wybranych oksopuryn w obojętnych i zasadowych roztworach wodnych
7. S. Gaździński, R. Millin, L. G. Kaiser, S. G. Mueller, Timothy C. Durazzo, M. W. Weiner i D. J. Meyerhoff
Interakcyjny wpływ efektów starzenia i otyłości na spektroskopowe markery zdrowia neuronów
8. H. Harańczyk, P. Nowak, M.A. Olech
*Zamarzanie wody związanej w plesze *Cetraria aculeata* (Schreb.) Fr. badane magnetyczną relaksacją jądrową*
9. M. Jabłońska, U. Tyrankiewicz, T. Skórka, H. Figiel, S. Heinze-Paluchowska, M. Woźniak, S. Chłopicki
*Wieloparametrowa ocena MR czynności serca w obrazowaniu mysiego modelu niewydolności Tgaq*44*
10. K. Jasiński, P. Latta, V. Volotovskyy, A. Młynarczyk, W. P. Węglarz, B. Tomanek
Mikropaskowe cewki RF – zastosowanie w MRI
11. M. Jaworska, P. B. Hrynczyszyn, K. Nowicka, W. Ciesielski, M. J. Potrzebowski
Tautomeria zasad Schiffa z (S)-difenylowalinolu: badania technikami NMR w ciele stałym i rentgenografii strukturalnej
12. J. Jencyk, S. Głowinkowski, M. Makrocka-Rydzik, A. Wypych, S. Jurga
Dynamika molekularna oraz struktura kopolimerów dwublokowych badana metodami NMR oraz spektroskopii dielektrycznej
13. J. Kamińska, J. Kobierski, B. Blicharska
Badania relaksacyjne NMR procesów utleniania surowicy krwi
14. A. Klimas, Z. Drzazga, E. Kluczevska
Użyteczność DWI w rozróżnianiu wybranych patologii mózgu

15. J. Kobierski, H. Peemoeller, B. Blicharska
Procesy wymiany chemicznej w roztworach nadtlenu wodoru obserwowane poprzez relaksację NMR
16. H. Krawczyk, M. Popławska
Rola fulerenu C⁶⁰, węglowych nanorurek i magnetycznych nanocząstek przy tworzeniu kreatolu (5-hydroksykreatyniny) i metyloguanidyny- toksyn występujących w moczu
17. D. Kruk, A. Skowrońska
Procesy relaksacyjne wybranych biomolekuł
18. Artur T Krzyżak
Fantom anizotropowej dyfuzji do pomiaru macierzy b
19. A. Kubica, A. Mielczarek, D. Kruk
Kształt widm ESR dla układów wielospinowych w obecności relaksacji
20. T. Kupka, M. Stachów, M. Nieradka, J. Kaminsky i T. Pluta
Obliczanie stałych ekranowania magnetycznego przy pomocy DFT, SOPPA, SOPPA(CCSD) i CCSD(T) w granicy bazy funkcyjnej
21. T. Kupka, M. Spulber, M. Pinteala, A. Fifere, A. Raniszewska, M. Broda
Badania teoretyczne I eksperymentalne cytozyny i 5-fluorocytozyny
22. M. Kwasiborska, A. Zieleniak, M. Nowakowski, M. Oleszczuk, J. Wójcik, N. Chung Nga P. W. Schiller. i J. Izdebski
Conformational analysis of cyclic dynorphin analogues using NMR derived data
23. Z.T. Lalowicz, G. Stoch, A. Birczyński, M. Punkkinen, K. Góra-Marek, J. Datka
Dynamika deuteronów w grupie hydroksylowej i wodzie związanej w zeolicie NaDY(0.8) badana metodą MRJ
24. A. Lis-Cieplak, W. Kołodziejcki
Badanie kompleksów adamantanu i amantadyny z beta-cyklodekstryną metodą ¹³C i ¹⁵N CP/MAS NMR
25. M. Makrocka-Rydzik, A. Wypych, M. Jancelewicz, S. Jurga, K. Matyjaszewski
Dynamika molekularna i struktura kopolimerów gwiazdzystych o mieszanych ramionach PEO-PBA (tzw. "miktoarm star")
26. W. Masierak, C. Uniszkievicz, M. Noińska, M. Szreiber, H. Stork, K.-Peter Dinse, F. Fujara
Badania technikami EPR i NMR kryształów fluorku litu zdefektowanych ciężkimi jonami
27. A. Milewska, D. Kruk
Zależne od pola procesy relaksacyjne w dwu układach wielospinowych
28. M. Misiak, W. Koźmiński
Trójwymiarowe widma NMR cząsteczek organicznych
29. M. Olszewski, N. Sergeev
Niedebajowska relaksacja a temperaturowe zależności drugiego momentu

linii NMR

30. K. Nowicka, A. Jeziorna, A. Sobczuk, J. Jurczak, G.D. Bujacz, A. Bujacz, W. Ciesielski, M. J. Potrzebowski
W poszukiwaniu chiralnych kryształów benzodiazakoronandów
31. P. Paluch, M. J. Potrzebowski
Badania kompleksów koordynacyjnych i organometalicznych niklu i rutenu za pomocą spektroskopii NMR w fazie stałej
32. M. Pietrzak, V. Vetokhina, J. Nowacki, J. Herbich, A. L. Sobolewski
W poszukiwaniu przełącznika molekularnego – badania 7-hydroksy-4-metylocholinolono-8- karboaldehydu w roztworze
33. B. Pilawa, M. Zdybel, D. Czyżyk, E. Chodurek, S. Wilczyński
*Relaksacja spin-sieć w DOPA-melaninie i melaninie wyizolowanej z *Sepia officinalis* – porównawcze badania EPR*
34. E. Pindelska, A. Mazurek, W. Kołodziejski
Polimorfizm kryształów wodorosiarczanu S(+) klopidogrelu w świetle badań krystalograficznych i spektroskopii jądrowego rezonansu magnetycznego
35. B. Proniewski, H. Figiel, T. Pałasz
Konstrukcja cewek w.cz. do systemu obrazowania z polem 0.088 T
36. P. Ramos, B. Pilawa, P. Pepliński
Badania EPR właściwości paramagnetycznych sisomycyny i werapamilu poddanych działaniu temperatury
37. M. Rażew, E. Kaczorowska, E. Kuta-Świeżewska, E. Ciepichał, J. Wójcik
The influence of traces of water on the chemical shift of soulaene in benzene solution
38. K. Ruszczyńska-Bartnik, M. Nowakowski, H. Dodziuk, A. Ejchart
*Oddziaływanie wybranych bicyklicznych monoterenów z α -cyklodekstryną
Termodynamiczna charakterystyka kompleksowania*
39. T. Skórka, S. Heinze-Paluchowska, U. Tyrankiewicz, M. Jabłońska
Implementacja bramkowania retrospektywnego w zastosowaniu do badań MR czynności serca myszy in vivo
40. L. Skórski, M. Synowiecki, B. Blicharska
Wpływ obecności jonów miedzi na relaksację surowicy krwi
41. J. Stanek, W. Koźmiński
Iteracyjny algorytm transformacji fourierowskiej losowo próbkowanych trójwymiarowych widm NMR
42. K. Szpotkowski, A. Wypych, K. Szutkowski, M., S. Jurga
Dynamika molekularna i struktura układów: fosfatydylocholina (DMPC)/surfaktant kationowy gemini (GEM-IK1)
43. L. Szutkowska, M. Dobies, K. Szutkowski, S. Jurga and W. Wieczorek, G. Żukowska
Badanie dynamiki molekularnej protonowo przewodzących elektrolitów żelowych zawierających H_3PO_4 za pomocą metod NMR

44. B. Toczyłowska
Profil metaboliczny płynu mózgowo-rdzeniowego pacjentów ze stwardnieniem zanikowym bocznym
45. K. Trzeciak-Karlikowska, A. Jeziorna, G. D. Bujacz, A. Bujacz, W. Ciesielski, M. J. Potrzebowski
Badania strukturalne N-terminalnej sekwencji dermorfiny z wykorzystaniem spektroskopii NMR w ciele stałym i XRD
46. C. Uniszkievicz, W. Masierak, A. Privalov, F. Fujara, W. Medycki, D. Kruk
Zastosowanie metody Fast Field Cycling NMR do pomiarów relaksacji jądrowej w związkach imidazolowych
47. W. Waszkowiak, A. Wypych, M. Dobies, S. Jurga, H. Maciejewski
Dynamika molekularna ruchów lokalnych i kooperatywnych w modyfikowanych polidimetylosiloksanach badana przy użyciu FFC NMR, spektroskopii dielektrycznej i FTIR
48. M. Wilczek, A. Szyprowska, W. Makulski
Moment magnetyczny węgla wyznaczony na podstawie pomiarów ^{13}C i ^3He mieszaniny metanu i fazy gazowej
49. S. Wilczyński, M. Zdybel, B. Pilawa, A. Deda, E. Pierzchała
Właściwości wolnorodnikowe suplementów diety opartych na olejach roślinnych i rybnych stosowane w kosmetologii
50. S. Wilczyński, B. Pilawa, M. Ptaszkiewicz, J. Swakoń, P. Olko, R. Koprowski, Z. Wróbel
Badania EPR wolnych rodników w radiacyjnie sterylizowanej piperacylinie
51. M. Wojciechowski (OP), D. Kruk
Parametry relaksacyjne jonów Gd(III) i Mn(II) w wodnych roztworach z punktu widzenia zastosowań jako środki kontrastowe
52. G. Woźniak, T. Skórka, K. Jasiński, T. Banasik, M. Mohammadzadeh, D. von Elverfeldt, J. Hennig, W. P. Węglarz
Płaskie jednostronne cewki gradientowe – od projektu do zastosowań
53. A. Wypych, M. Makrocka-Rydzik, G. Nowaczyk, E. Szcześniak, S. Jurga, A. Hirao, T. Watanabe
Dynamika molekularna polistyrenu o różnej organizacji przestrzennej badana przy użyciu: magnetycznego rezonansu jądrowego, szerokopasmowej spektroskopii dielektrycznej i reologii
54. A. Zawadzka-Kazimierczuk, K. Kazimierczuk, W. Koźmiński
Zestaw wielowymiarowych widm NMR służących łatwemu przypisaniu sygnałów w białkach
55. M. Zdybel, B. Pilawa, E. Buszman, D. Wrześniok, R. Krzyminiewski, Z. Kruczyński, R. Koprowski, Z. Wróbel
Wpływ temperatury na widma EPR kompleksów DOPA-melanina-netilmicyna
56. B. Pilawa, M. Zdybel, D. Czyżyk, E. Chodurek, S. Wilczyński
Relaksacja spin-sieć w DOPA –melaninie i melaninie wyizolowanej z Sepia officinalis-porównawcze badania EPR

57. M. Zdybel, J. Adamczyk, B. Pilawa, M. Kościelniak, D. Czyżyk
Relaksacja spin-sieć w sterylizowanym termicznie chlortalidonie
58. Ł. Żelazny, D. Wierzuchowska, B. Blicharska
Pomiary dyspersyjne $T_{1\rho}$ w roztworach białek