

Вариант 1.

- (1) Перечислить основные этапы в расшифровке структуры белка с помощью рентгеноструктурного анализа (РСА). Какая физическая величина (функция) рассчитывается с помощью РСА? Что является экспериментальным результатом, а что - дальнейшей интерпретацией этого результата?
- (2) Даны три пары, состоящие из матрицы и вектора
 - Выбрать пару (матрица, вектор), определяющую движение.
 - Найти координаты образов трех точек плоскости с координатами $(0, 0)$, $(0, 1)$, $(1, 0)$ при данном движении.
 - Сохраняет ли это движение ориентацию плоскости?
 - Определить, какое движение закодировано этой парой (матрица, вектор) – если трансляция, то на какой вектор; если вращение – то указать центр и угол поворота, если зеркальное отражение, то указать прямую (“зеркало”), если зеркальное отражение со сдвигом на вектор, параллельный “зеркалу”, то указать этот вектор и “зеркало”
- (3) Дана кристаллическая конфигурация атомов на плоскости.
 - Нарисовать примитивную (т.е. наименьшую) кристаллографическую ячейку
 - Указать два вектора, порождающие все трансляционные симметрии.
 - Указать все вращательные симметрии (центр вращения, угол).
 - Нарисовать ассиметрическую ячейку
- (4) Как представляются экспериментально полученные данные РСА (привести строку файла “структурных факторов” и объяснить, где что)

Вариант 2

- (1) Какой смысл имеет функция плотности электронов в точке $\rho(\vec{r})$, где $\vec{r} = (x, y, z)$ - точка пространства? В каких физических единицах измеряется? Как программы представляют функцию плотности электронов в пространстве на экране монитора? Что происходит при изменении порогового значения?
- (2) Даны три пары, состоящие из матрицы и вектора
 - Выбрать пару (матрица, вектор), определяющую движение.
 - Найти координаты образов трех точек плоскости с координатами $(0, 0)$, $(0, 1)$, $(1, 0)$ при данном движении.
 - Сохраняет ли это движение ориентацию плоскости?
 - Определить, какое движение закодировано этой парой (матрица, вектор) – если трансляция, то на какой вектор; если вращение – то указать центр и угол поворота, если зеркальное отражение, то указать прямую (“зеркало”), если зеркальное отражение со сдвигом на вектор, параллельный “зеркалу”, то указать этот вектор и “зеркало”
- (3) Дана кристаллическая конфигурация атомов на плоскости.
 - Нарисовать примитивную (т.е. наименьшую) кристаллографическую ячейку
 - Указать два вектора, порождающие все трансляционные симметрии.
 - Указать все вращательные симметрии (центр вращения, угол).
 - Нарисовать ассиметрическую ячейку
- (4) Перечислить стереохимические ограничения, которые могут учитываться в составном факторе достоверности. Что такое "веса составляющих" фактора достоверности и откуда они берутся?

Вариант 3.

- (1) Какое приближение функции плотности электронов $\rho_A(\vec{r})$ вокруг одного изолированного атома A используется в рентгеновской кристаллографии? Различаются ли эти приближения для атомов углерода, азота, водорода, кислорода, серы, селена? Если да, то чем? Нарисовать графики для них так, чтобы отразить характер различий. (Не забудьте надписать оси!)
- (2) Даны три пары, состоящие из матрицы и вектора
 - Выбрать пару (матрица, вектор), определяющую движение.
 - Найти координаты образов трех точек плоскости с координатами $(0, 0)$, $(0, 1)$, $(1, 0)$ при данном движении.
 - Сохраняет ли это движение ориентацию плоскости?
 - Определить, какое движение закодировано этой парой (матрица, вектор) – если трансляция, то на какой вектор; если вращение – то указать центр и угол поворота, если зеркальное отражение, то указать прямую (“зеркало”), если зеркальное отражение со сдвигом на вектор, параллельный “зеркалу”, то указать этот вектор и “зеркало”
- (3) Дана кристаллическая конфигурация атомов на плоскости.
 - Нарисовать примитивную (т.е. наименьшую) кристаллографическую ячейку
 - Указать два вектора, порождающие все трансляционные симметрии.
 - Указать все вращательные симметрии (центр вращения, угол).
 - Нарисовать ассиметрическую ячейку
- (4) Что такое "разрешение", приводимое в PDB файлах и статьях? Что можно сказать про структуру с разрешением в 5\AA ? 3\AA ? $1,1\text{\AA}$?

Вариант 4.

- (1) Нарисовать схему эксперимента для РСА. Чем объясняется рассеяние рентгеновского излучения? Какие параметры волны, идущей в направлении детектора, определяются исключительно установкой, а какие - зависят от рассеяния на электронах? Почему кристалл дает многократное усиление сигнала только в отдельных направлениях? При каких условиях возникает усиление сигнала?
- (2) Даны три пары, состоящие из матрицы и вектора
 - Выбрать пару (матрица, вектор), определяющую движение.
 - Найти координаты образов трех точек плоскости с координатами $(0, 0)$, $(0, 1)$, $(1, 0)$ при данном движении.
 - Сохраняет ли это движение ориентацию плоскости?
 - Определить, какое движение закодировано этой парой (матрица, вектор) – если трансляция, то на какой вектор; если вращение – то указать центр и угол поворота, если зеркальное отражение, то указать прямую (“зеркало”), если зеркальное отражение со сдвигом на вектор, параллельный “зеркалу”, то указать этот вектор и “зеркало”
- (3) Дана кристаллическая конфигурация атомов на плоскости.
 - Нарисовать примитивную (т.е. наименьшую) кристаллографическую ячейку
 - Указать два вектора, порождающие все трансляционные симметрии.
 - Указать все вращательные симметрии (центр вращения, угол).
 - Нарисовать ассиметрическую ячейку
- (4) Что дает и чего не дает РСА эксперимент для восстановления функции электронной плотности? Объяснить, что такое “фазовая проблема”. Разрешима ли она по результатам одного РСА эксперимента? Перечислить методы ее решения. Каким методом решена рекордная структура с разрешением $0,9\text{Å}$?

Вариант 5.

- (1) Что такое вектор рассеяния? Написать формулу для вычисления разности фаз волн, рассеиваемых двумя электронами в направлении $\vec{\sigma}$, при облучении их плоской электромагнитной волной длины λ идущей в направлении $\vec{\sigma}_0$? В каких единицах принято измерять разность фаз? При каких значениях разности фаз амплитуды двух волн складываются?
- (2) Даны три пары, состоящие из матрицы и вектора
 - Выбрать пару (матрица, вектор), определяющую движение.
 - Найти координаты образов трех точек плоскости с координатами $(0, 0)$, $(0, 1)$, $(1, 0)$ при данном движении.
 - Сохраняет ли это движение ориентацию плоскости?
 - Определить, какое движение закодировано этой парой (матрица, вектор) – если трансляция, то на какой вектор; если вращение – то указать центр и угол поворота, если зеркальное отражение, то указать прямую (“зеркало”), если зеркальное отражение со сдвигом на вектор, параллельный “зеркалу”, то указать этот вектор и “зеркало”
- (3) Дана кристаллическая конфигурация атомов на плоскости.
 - Нарисовать примитивную (т.е. наименьшую) кристаллографическую ячейку
 - Указать два вектора, порождающие все трансляционные симметрии.
 - Указать все вращательные симметрии (центр вращения, угол).
 - Нарисовать ассиметрическую ячейку
- (4) Что такое “температурный фактор”? Имеет ли он отношение к температуре белка? Какие значения температурного фактора считаются приемлемыми для того, чтобы верить данным PDB файла? какие — неприемлемыми? Что такое анизотропный температурный фактор?

Вариант 6.

- (1) В чем заключается прямая задача теории рассеяния? Решается ли она? В чем заключается обратная задача? Объяснить формулу (разложение функции электронной плотности в ряд Фурье)

$$\rho(x, y, z) \approx F_{0,0,0} + \sum_{h,k,l \in \mathbb{Z}} F_{h,k,l} \cos(2\pi(hx + ky + lz) - \varphi_{h,k,l})$$

В каких координатах записана эта формула: кристаллографических или ортогональных?

- (2) Даны три пары, состоящие из матрицы и вектора
- Выбрать пару (матрица, вектор), определяющую движение.
 - Найти координаты образов трех точек плоскости с координатами $(0, 0)$, $(0, 1)$, $(1, 0)$ при данном движении.
 - Сохраняет ли это движение ориентацию плоскости?
 - Определить, какое движение закодировано этой парой (матрица, вектор) – если трансляция, то на какой вектор; если вращение – то указать центр и угол поворота, если зеркальное отражение, то указать прямую (“зеркало”), если зеркальное отражение со сдвигом на вектор, параллельный “зеркалу”, то указать этот вектор и “зеркало”
- (3) Дана кристаллическая конфигурация атомов на плоскости.
- Нарисовать примитивную (т.е. наименьшую) кристаллографическую ячейку
 - Указать два вектора, порождающие все трансляционные симметрии.
 - Указать все вращательные симметрии (центр вращения, угол).
 - Нарисовать ассиметрическую ячейку
- (4) Что такое "коэффициент заполнения" в PDB файлах? Привести две причины появления коэффициента заполнения $\neq 1$. Что такое "альтернативные конформации" (alter code в PDB файлах)?

Вариант 7.

- (1) Дать определение кристаллографической конфигурации атомов. Что такое элементарная ячейка кристалла? Каковы ее параметры? Что такое кристаллографические координаты? Написать координаты всех 8 вершин элементарной ячейки в этих координатах.
- (2) Даны три пары, состоящие из матрицы и вектора
 - Выбрать пару (матрица, вектор), определяющую движение.
 - Найти координаты образов трех точек плоскости с координатами $(0, 0)$, $(0, 1)$, $(1, 0)$ при данном движении.
 - Сохраняет ли это движение ориентацию плоскости?
 - Определить, какое движение закодировано этой парой (матрица, вектор) – если трансляция, то на какой вектор; если вращение – то указать центр и угол поворота, если зеркальное отражение, то указать прямую (“зеркало”), если зеркальное отражение со сдвигом на вектор, параллельный “зеркалу”, то указать этот вектор и “зеркало”
- (3) Дана кристаллическая конфигурация атомов на плоскости.
 - Нарисовать примитивную (т.е. наименьшую) кристаллографическую ячейку
 - Указать два вектора, порождающие все трансляционные симметрии.
 - Указать все вращательные симметрии (центр вращения, угол).
 - Нарисовать ассиметрическую ячейку
- (4) Почему кристалл дает многократное усиление сигнала только в отдельных направлениях? При каких условиях возникает усиление сигнала?

Вариант 8.

- (1) Что такое элементарная ячейка кристалла? Каковы ее параметры? Пусть порождающие векторы трансляционных симметрий кристалла — \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} . В каких направлениях относительно них появляются рефлекссы (написать условия на вектор рассеяния и его связь с направлением на детектор и объяснить почему они такие)
- (2) Даны три пары, состоящие из матрицы и вектора
- Выбрать пару (матрица, вектор), определяющую движение.
 - Найти координаты образов трех точек плоскости с координатами $(0, 0)$, $(0, 1)$, $(1, 0)$ при данном движении.
 - Сохраняет ли это движение ориентацию плоскости?
 - Определить, какое движение закодировано этой парой (матрица, вектор) — если трансляция, то на какой вектор; если вращение — то указать центр и угол поворота, если зеркальное отражение, то указать прямую (“зеркало”), если зеркальное отражение со сдвигом на вектор, параллельный “зеркалу”, то указать этот вектор и “зеркало”
- (3) Дана кристаллическая конфигурация атомов на плоскости.
- Нарисовать примитивную (т.е. наименьшую) кристаллографическую ячейку
 - Указать два вектора, порождающие все трансляционные симметрии.
 - Указать все вращательные симметрии (центр вращения, угол).
 - Нарисовать ассиметрическую ячейку
- (4) Стандартный фактор достоверности расшифровки $R_{X\text{-ray}}$ — что это такое? Написать и объяснить формулу. В чем причины того, что к близким к нулю значениям этого фактора следует относиться с осторожностью?

Вариант 9.

- (1) Перечислить параметры плоской электромагнитной волны. Какой смысл имеет фаза? Что происходит при наложении волн? Какие параметры рассеянной волны определяются установкой, а какие – зависят от кристалла?
- (2) Даны три пары, состоящие из матрицы и вектора
 - Выбрать пару (матрица, вектор), определяющую движение.
 - Найти координаты образов трех точек плоскости с координатами $(0, 0)$, $(0, 1)$, $(1, 0)$ при данном движении.
 - Сохраняет ли это движение ориентацию плоскости?
 - Определить, какое движение закодировано этой парой (матрица, вектор) – если трансляция, то на какой вектор; если вращение – то указать центр и угол поворота, если зеркальное отражение, то указать прямую (“зеркало”), если зеркальное отражение со сдвигом на вектор, параллельный “зеркалу”, то указать этот вектор и “зеркало”
- (3) Дана кристаллическая конфигурация атомов на плоскости.
 - Нарисовать примитивную (т.е. наименьшую) кристаллографическую ячейку
 - Указать два вектора, порождающие все трансляционные симметрии.
 - Указать все вращательные симметрии (центр вращения, угол).
 - Нарисовать ассиметрическую ячейку
- (4) Объяснить что такое свободный фактор достоверности R_{free} , зачем придуман и чем лучше/хуже $R_{\chi-ray}$.

Вариант 1

$$(1) R = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}; v = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}, 0\right)$$

$$(2) R = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}; v = \left(1 - \frac{\sqrt{2}}{2}, -\frac{\sqrt{2}}{2}\right)$$

$$(3) R = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}; v = \left(1 - \frac{\sqrt{2}}{2}, -\frac{\sqrt{2}}{2}\right)$$

Вариант 2

$$(1) R = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}; v = (1, -1)$$

$$(2) R = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}; v = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}, 1 - \frac{\sqrt{2}}{2}\right)$$

$$(3) R = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}; v = \left(1 - \frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2}\right)$$

Вариант 3

$$(1) R = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}; v = (0, 2)$$

$$(2) R = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; v = (-1, 0)$$

$$(3) R = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; v = (1 - \frac{\sqrt{2}}{2}, 0)$$

Вариант 4

$$(1) R = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}; v = (1, -1)$$

$$(2) R = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; v = (1, -1)$$

$$(3) R = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}; v = (\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2})$$

Вариант 5

$$(1) R = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; v = (-1, 0)$$

$$(2) R = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}; v = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}, -\frac{1}{2}\right)$$

$$(3) R = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; v = (-2, 0)$$

Вариант 6

$$(1) R = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; v = (4, 2)$$

$$(2) R = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}; v = (0, 0)$$

$$(3) R = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 1 & -1 \end{pmatrix}; v = \left(1, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right)$$

Вариант 7

$$(1) R = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}; v = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

$$(2) R = \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}; v = (1, -1)$$

$$(3) R = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}; v = (-2, 0)$$

Вариант 8

$$(1) R = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}; v = \left(-\frac{1}{2}, 1 - \frac{\sqrt{3}}{2}\right)$$

$$(2) R = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}; v = (5, 6)$$

$$(3) R = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}; v = (1, 1)$$

Вариант 9

$$(1) R = \begin{pmatrix} -1 & -2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}; v = (1, 2)$$

$$(2) R = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}; v = (1 - \frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2})$$

$$(3) R = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}; v = (0, 1)$$