

### **Część 1**

1. Problem fazowy w krystalografii, zasada metody Pattersona i metod bezpośrednich
2. Metody przestrzeni rzeczywistej w rozwiązywaniu struktur krystalicznych. Idea metod 'symulowanego wyżarzania'
3. Metody przestrzeni rzeczywistej w rozwiązywaniu struktur krystalicznych. Metoda systematycznego przeszukiwania (grid search), wady, zalety.
4. Metoda 'charge flipping' w badaniach strukturalnych
5. Metody dyfraktometrii proszkowej w badaniach materiałowych; wady, zalety, możliwości.
6. Analiza strukturalna z użyciem pełnego profilu dyfrakcyjnego – metoda Rietvelde. Różnice pomiędzy dyfrakcją proszkową a dyfrakcją na monokryształach.

### **Część 2**

1. Bazy PDB i CSD – struktury jakiego typu cząsteczek poszukujemy w tych bazach oraz jakie informacje strukturalne możemy uzyskać analizując dane z tych baz?
2. Wyjaśnij znaczenie i wpływ rozdzielczości, parametrów R oraz interpretacji map gęstości elektronowej na wiarygodność danych strukturalnych makromolekuł biologicznych oraz ich możliwe wykorzystanie do procedur dokowania molekularnego.
3. Wyjaśnij na czym polegają poszczególne typy procedur dokowania:
  - a. sztywnego
  - b. półelastycznego
  - c. elastycznego
4. Co to jest funkcja oceny i w jaki sposób na jej podstawie interpretujemy uzyskany wynik dokowania (na przykładzie funkcji PLP programu Gold).
5. Jakie typy niekowalencyjnych oddziaływań międzycząsteczkowych mogą stabilizować kompleks ligand-białko?