

ВОПРОСЫ К КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЕ

- (1) Перечислить основные этапы в расшифровке структуры белка с помощью рентгеноструктурного анализа (РСА)
- (2) Какая физическая величина (функция) рассчитывается с помощью РСА?
- (3) Какой смысл имеет функция плотности электронов в точке $\rho(\vec{r})$, где $\vec{r} = (x, y, z)$ — точка пространства? В каких физических единицах измеряется?
- (4) 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!)
- (5) Что является результатом удачной расшифровки структуры белка? Как программы представляют на экране монитора функцию плотности электронов в пространстве?
- (6) Перечислить параметры плоской электромагнитной волны. Какой смысл имеет фаза? Что происходит при наложении волн?
- (7) 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?
- (8) 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?
- (9) В чем заключается прямая задача теории рассеяния? Решается ли она?
- (10) Почему кристалл дает многократное усиление сигнала только в отдельных направлениях? При каких условиях возникает усиление сигнала?
- (11) Что такое элементарная ячейка кристалла? Каковы ее параметры?
- (12) Что такое кристаллографические координаты? Написать координаты всех 8 вершин элементарной ячейки в этих координатах.

- (13) Пусть порождающие векторы трансляционных симметрий кристалла — $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$. В каких направлениях относительно них появляются рефлексы (написать условия на вектор рассеяния и его связь с направлением на детектор)
- (14) Как представляются экспериментально полученные данные РСА (привести строку файла “структурных факторов” и объяснить, где что)
- (15) По каким данным рентгеноструктурщики узнают параметры элементарной ячейки и кристаллографическую группу? До или после расшифровки структуры?
- (16) 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?

- (17) Что дает и чего не дает РСА эксперимент для восстановления функции электронной плотности?
- (18) Что такое “разрешение”, приводимое в PDB файлах и статьях? Что можно сказать про структуру с разрешением в 5Å? 3Å? 1,1Å?
- (19) Объяснить, что такое “фазовая проблема”. Разрешима ли она по результатам одного РСА эксперимента? Перечислить методы ее решения. Каким методом решена рекордная структура с разрешением 0,9Å?
- (20) В чем состоят методы изоморфного замещения для решения фазовой проблемы?
- (21) В чем состоят методы аномального рассеяния для решения фазовой проблемы?
- (22) В чем состоят методы молекулярного замещения при решении фазовой проблемы?
- (23) 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?
- (24) Что такое анизотропный температурный фактор?
- (25) Что такое “коэффициент заполнения” в PDB файлах? Привести две причины появления коэффициента заполнения $\neq 1$. Что такое “альтернативные конформации” (alter code в PDB файлах)?
- (26) Стандартный фактор достоверности расшифровки R_{X-ray} — что это такое? Написать и объяснить формулу. В чем причины того, что к близким к нулю значениям этого фактора следует относиться с осторожностью?
- (27) Перечислить стереохимические ограничения, которые могут учитываться в составном факторе достоверности. Что такое “веса составляющих” фактора достоверности и откуда они берутся?

- (28) Объяснить что такое свободный фактор достоверности R_{free} , зачем придуман и чем лучше/хуже R_{X-ray} .
- (29) Объяснить, почему расшифрованных 3D структур белков (<30 тысяч) на порядок меньше, чем последовательностей белков (>500 тысяч).

Кое-что будет добавлено, а именно — вопросы о симметриях, их алгебраической записи, кристаллических конфигурациях атомов.