

**ZAGADNIENIA DO EGZAMINU DYPLOMOWEGO DLA KIERUNKU  
BIOSCIENCES – STOPIEŃ 2**

**SPECJALNOŚĆ: BIOINFORMATICS**

1. Postulates of quantum mechanics
2. Wave-particle nature of matter and light
3. Exact solutions of the Schrödinger equation
4. Electron spin and the form of the wave function of a multi-electron system
5. Methods of determining approximate wave functions of atoms and multi-electron molecules
6. Hartree-Fock method, orbitals of many-electron atoms and molecules
7. Partition functions in statistical thermodynamics.
8. Ergodic hypothesis.
9. Thermodynamic functions based on partition functions.
10. Molecular mechanics and molecular dynamics
11. Computational methods used in protein global minimum search.
12. Computational methods in bionanotechnology.
13. Intermolecular interactions: components of different nature, predictions of geometries of complexes
14. Types of chemical bonds
15. Phase-boundary interactions - adsorption phenomenon
16. Methods of numerical integration
17. Kinetic and thermodynamic description of catalyzed reactions
18. Mechanisms of catalytic reactions - homogeneous, heterogeneous, enzymatic
19. Photodegradation of organic compounds
20. Applications of nanomaterials
21. Applications of Monte Carlo methods in chemistry
22. Similarity and homology of biological sequences: measures of similarity, sequence alignments, inferring homology
23. Molecular phylogenesis
24. Automation of data processing in bioinformatics
25. Design of biologically active compounds
26. Docking and virtual screening
27. Classifications of chemical reactions
28. Reaction kinetics (rate laws) for different types of chemical reactions
29. The role of water in biochemical reactions
30. Water-protein interactions
31. Enzymes as catalysts
32. Kinetics of enzymatic reactions
33. Inhibition in enzymatic reactions
34. Methods of pharmaceuticals' analysis
35. Analytical procedures in drugs identification (spectrophotometric, colorimetric, potentiometric, etc.)

**ZAGADNIENIA DO EGZAMINU DYPLOMOWEGO DLA KIERUNKU  
BIOSCIENCES – STOPIEŃ 2**

**SPECJALNOŚĆ: MEDICINAL CHEMISTRY**

1. Procedura analizy nieznanej substancji organicznej: Jakie są podstawowe etapy analizy nieznanej substancji organicznej oraz metody stosowane w tym procesie? Jakie techniki spektroskopowe są najczęściej używane do identyfikacji nieznanych substancji organicznych?
2. Związki aromatyczne: Reguła aromatyczności, przykłady związków aromatycznych oraz charakterystyczne reakcje, którym one ulegają.
3. Aminy: Struktura, właściwości oraz reakcje charakterystyczne. Zastosowanie amin w syntezie organicznej.
4. Aminokwasy: Budowa, właściwości oraz reaktywność aminokwasów. Znaczenie aminokwasów w syntezie organicznej.
5. Chiralność związków organicznych: Definicja i przykłady chiralnych związków. Znaczenie chiralności w syntezach chemii organicznej oraz wyzwania i korzyści związane z tworzeniem związków chiralnych, zwłaszcza w kontekście ich zastosowań farmaceutycznych.
6. Stereochemia w chemii organicznej: Definicja stereochemii, jej rodzaje oraz znaczenie w reakcjach chemicznych związków organicznych.
7. Synteza związków aktywnych optycznie: Znane metody syntezy związków chiralnych oraz techniki służące do określania konfiguracji absolutnej syntezowanego związku.
8. Wiązanie wodorowe: Definicja wiązania wodorowego oraz jego znaczenie w chemii organicznej. Jak wiązania wodorowe wpływają na strukturę i właściwości fizykochemiczne związków organicznych? Podaj przykłady.
9. Reakcje odwracalne w chemii organicznej: Definicja reakcji odwracalnych, przykłady oraz sposoby przesuwania równowagi reakcji w kierunku oczekiwanego produktu.
10. Dwuwymiarowe techniki NMR (2D NMR): COSY, HSQC/HMQC, NOESY/ROESY, TOCSY, HMBC, INADEQUATE.
11. Spektroskopia  $^{13}\text{C}$  NMR (specyfika pomiaru, określanie rzędowości atomu węgla-DEPT, APT).
12. Spektroskopia NMR innych jąder niż  $^1\text{H}$  i  $^{13}\text{C}$  ( $^{31}\text{P}$ ,  $^{19}\text{F}$ ,  $^{11}\text{B}$ ,  $^{14}\text{N}$  oraz  $^{29}\text{Si}$  NMR).
13. Układy spinowe pierwszego rzędu (notacja Pople'a, wyznaczanie/obliczanie stałej sprzężenia, analiza multipletów metodą „drzewka”).
14. Określanie masy cząsteczkowej i wzoru sumarycznego z wykorzystaniem spektrometrii masowej.
15. Metody jonizacji w spektrometrii masowej (EI, ESI, CI, APCI, FAB).
16. Fragmentacja wybranych grup związków organicznych w z wykorzystaniem jonizacji EI (ketony, aldehydy, estry, aminy, alkohole, etery).
17. Zastosowanie związków fosforu w chemii organicznej (reakcja Mitsunobu, Wittiga, HWE, Arbuzova).
18. Reakcje cykloaddycji [4+2] i [3+2] w syntezie związków cyklicznych
19. Metody syntez wiązań podwójnych.
20. Reakcje sprzęgania (*cross-coupling*): mechanizmy oraz zastosowania syntetyczne.

21. Syntetyczny potencjał odczynników lito- magnezo- lub miedzioorganicznych oraz mechanizmy ich działania.
22. Metody redukcji metalami przejściowymi oraz wodorkami litu i sodu.
23. Selektywne metody utleniania alkoholi oraz wiązań podwójnych.
24. Teoria orbitali molekularnych w opisie przebiegu reakcji chemicznych.
25. Zastosowanie grup blokujących w syntezie organicznej.