

Apkārt atomam centrā simetrizējas kovalentās saites, veidojot kristāla simetriju.

Rentgena kristalogrāfiju lieto molekulu struktūras noteikšanai.

Kristāla izskatu attēlo stereo grafiska tīklojuma veidā tā kā Wulfa režģis vai Lamberta režģis.

Atoma punktu struktūrā apraksta ar tā Millera indeksu.

Rentgena kristalogrāfija proteīniem, DNS, RNS, ogļhidrāti, lipīdi

Simetrizācijas ģeometrija

Simetrijas ģeometrija	Formula	Struktūra	Ģeometrija
lineāra nūja 180°	C_2H_2	$H-C\equiv C-H$	
trigonāla planāra 120°	CO_3^{2-}	<p>CaCO₃</p> <p>kristālā</p>	
leņķiska 109.47°	ledus H_2O	<p>109.47°</p>	
leņķiska 105°	ūdens H_2O	<p>105°</p>	
trigonāla piramidāla	$:NH_3$		
tetraedrāla, tetragonāla	CH_4		
oktaedrāla, heksagonāla bipiramidāla	$[Al(OH)_6]^{3-}$		

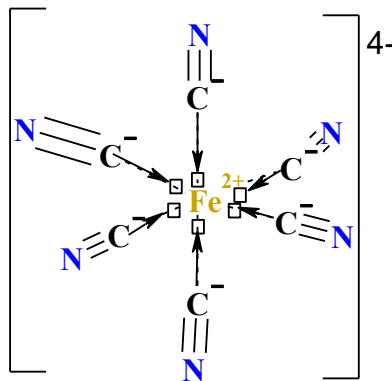
Atoma centrālā simetrijas ģeometrija koordinatīvā savienojumā



Kālija hekso ciano ferāts(II)

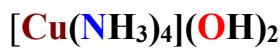
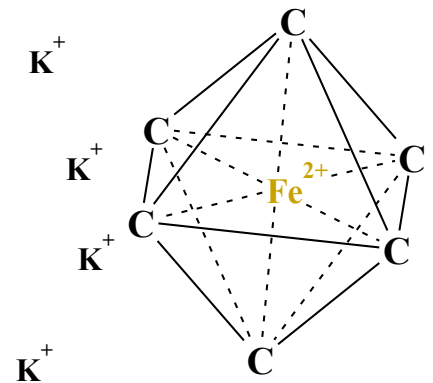
Donoru-akceptoru saite
Atomi ar nedalītu elektronu pāri : ir donori : \rightarrow □ akceptors centrālais atoms

ar 6 neaizpildītām □ orbitālēm akceptē 6 pārus :
akceptors □□□ Fe^{2+} □□□ akceptors un donors
 $\text{N}\equiv\text{C}^- : \rightarrow \square \text{Fe}^{2+} \square \leftarrow : \text{C}\equiv\text{N}$ donors;



Oktaedrāla vai Heksagonāla ģeometrija :

Bipiramidāla

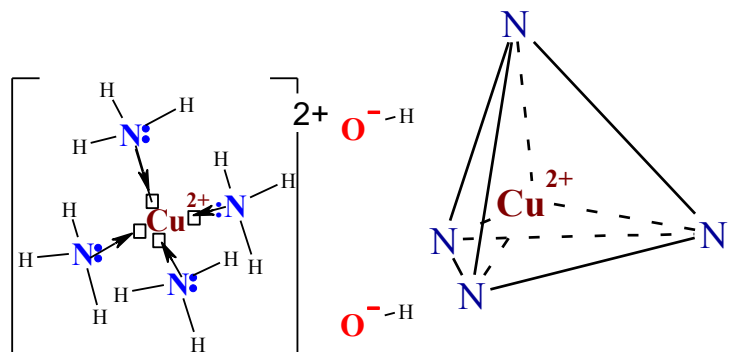


tetra amino vara(II) hidroksīds

Donoru-akceptoru saite

Atomi ar nedalītu elektronu pāri : ir donori : \rightarrow □ akceptors centrālais atoms
ar 4 neaizpildītām □ orbitālēm akceptē 4 pārus :

akceptors □□ Cu^{2+} □□ akceptors un donors $\text{H}_3\text{N} : \rightarrow \square \text{Cu}^{2+} \square \leftarrow : \text{NH}_3$ donors ;



Tetraedrāla vai Tetragonāla ģeometrija :



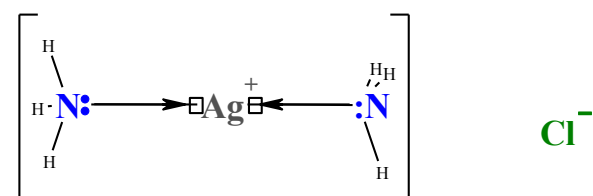
di amino sudraba(I) hlorīds

Donoru-akceptoru saite

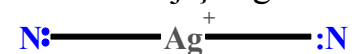
Atomi ar nedalītu elektronu pāri : ir donori : \rightarrow □ akceptors centrālais atoms
ar 2 neaizpildītām □ orbitālēm akceptē 2 pārus :

akceptors □ Ag^+ □ akceptors un donors $\text{H}_3\text{N} : \rightarrow \square \text{Ag}^+ \square \leftarrow : \text{NH}_3$ donors ;

Lineāra vai nūjiņas ģeometrija :



Lineāra vai nūjiņas ģeometrija



Galvenie elektronu pāru donor atomi ir $\text{N} :$ un $:\text{O} :$ divu elektronu pāru īpašnieks skābeklis

Metāla jonu Mg^{2+} , Ca^{2+} , Na^+ , K^+ , , , , , simetrijas ģeometrija cilvēka organismā



heksa akva magnija(II) katjons

Donoru-akceptoru saite

Nedalīta elektronu pāru : īpašnieki atomi $:O:$ ir

donori $O: \rightarrow \square$ akseptori centrālā atoma Mg^{2+}

6 brīvās orbitāles kā pāru : akseptori \square

akceptors $\square \square \square Mg^{2+} \square \square \square$ akceptors un
donors $H_2O: \rightarrow \square Mg^{2+} \square \leftarrow :OH_2$ donors ;



heksa akva kalcija(II) katjons

Donoru-akceptoru saite

Nedalīta elektronu pāru : īpašnieki atomi $:O:$ ir

donori $O: \rightarrow \square$ akseptori centrālā atoma Ca^{2+}

6 brīvās orbitāles kā pāru : akseptori \square

akceptors $\square \square \square Ca^{2+} \square \square \square$ akceptors un
donors $H_2O: \rightarrow \square Ca^{2+} \square \leftarrow :OH_2$ donors ;



heksa akva nātrija(II) katjons

Donoru-akceptoru saite

Nedalīta elektronu pāru : īpašnieki atomi $:O:$ ir

donori $O: \rightarrow \square$ akseptori centrālā atoma Na^+

6 brīvās orbitāles kā pāru : akseptori \square

akceptors $\square \square \square Na^+ \square \square \square$ akceptors un
donors $H_2O: \rightarrow \square Na^+ \square \leftarrow :OH_2$ donors ;



heksa akva kālija(II) katjons

Donoru-akceptoru saite

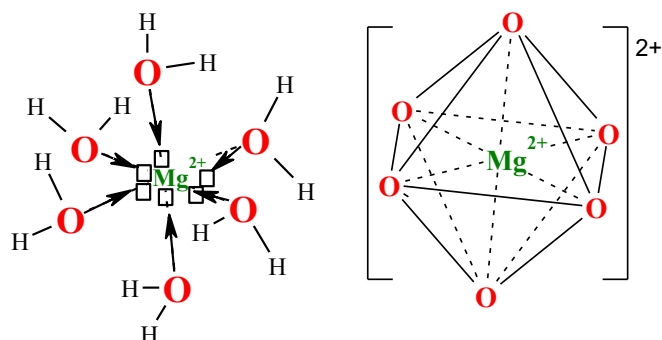
Nedalīta elektronu pāru : īpašnieki atomi $:O:$ ir

donori $O: \rightarrow \square$ akseptori centrālā atoma K^+

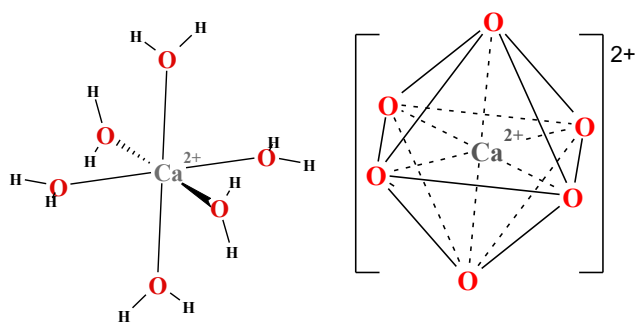
6 brīvās orbitāles kā pāru : akseptori \square

akceptors $\square \square \square K^+ \square \square \square$ akceptors un
donors $H_2O: \rightarrow \square K^+ \square \leftarrow :OH_2$ donors ;

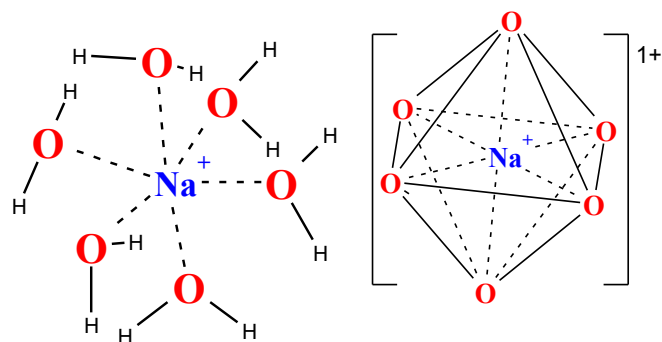
Oktaedrāla vai Heksagonāla ģeometrija :
Bipiramidāla



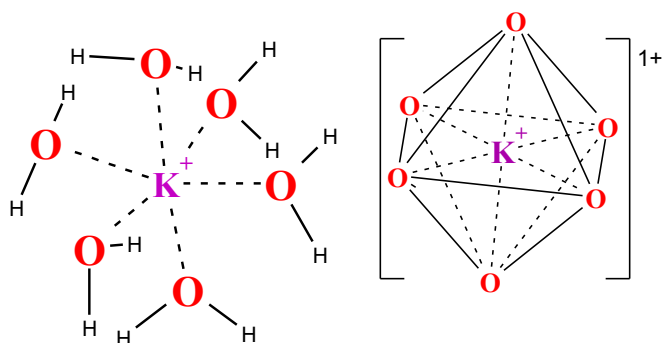
Oktaedrāla vai Heksagonāla ģeometrija :
Bipiramidāla



Oktaedrāla vai Heksagonāla ģeometrija :
Bipiramidāla



Oktaedrāla vai Heksagonāla ģeometrija :
Bipiramidāla



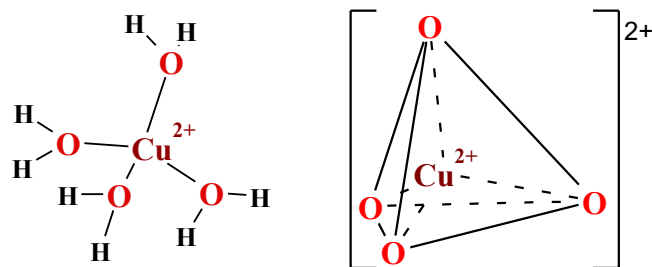
$[\text{Cu}^{2+}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$
tetra akva vara(II) katjons

Tetraedrāla vai Tetragonāla ģeometrija : :

Donoru-akceptoru saite

Atomi ar nedalītu elektronu pāri : ir donori $\text{O}:$ → □ akceptors centrālais atoms Cu^{2+} ar 4 neaizpildītām □ orbitālēm akceptē 4 pārus :

akceptors □ □ Cu^{2+} □ □ akceptors un donors $\text{H}_2\text{O}:$ → □ Cu^{2+} □ ← $:\text{OH}_2$ donors;



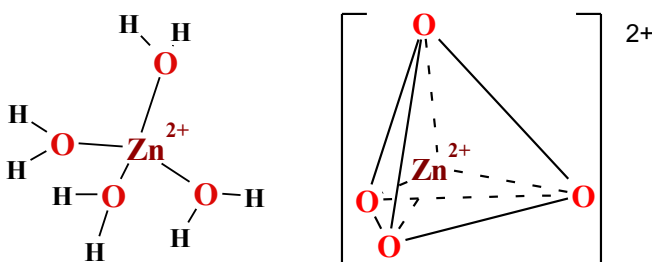
$[\text{Zn}^{2+}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$
tetra akva cinka(II) katjons

Tetraedrāla vai Tetragonāla ģeometrija : :

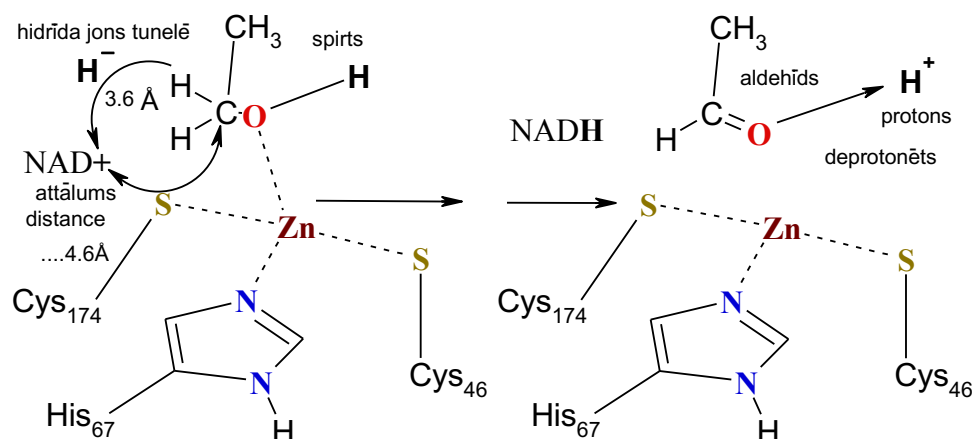
Donoru-akceptoru saite

Atomi ar nedalītu elektronu pāri : ir donori $\text{O}:$ → □ akceptors centrālais atoms Zn^{2+} ar 4 neaizpildītām □ orbitālēm akceptē 4 pārus :

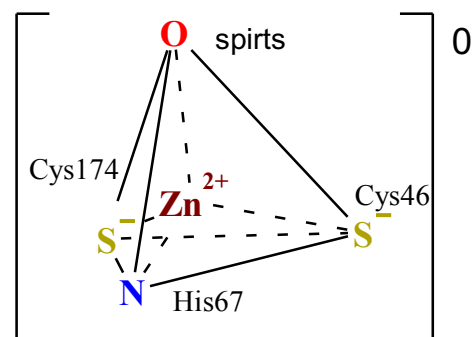
akceptor □ □ Zn^{2+} □ □ akceptors un donors $\text{H}_2\text{O}:$ → □ Zn^{2+} □ ← $:\text{OH}_2$ donors ;



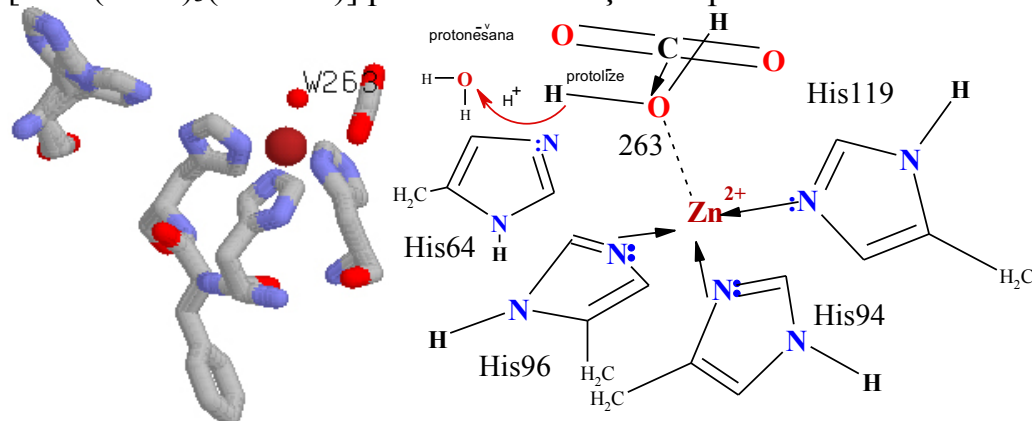
Alkohola dehidrogenāze E.1 klase 1HLD.pdb Zn^{2+} koordinē Cys46-Cys174-His67-spirtu:
 $[\text{Zn}^{2+}(\text{S-Cys})_2(\text{Ospirts})(\text{NHis})]$ kompleksam neitrāls nulles lādiņš .



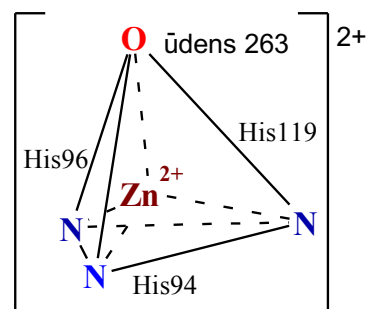
Tetraedrāla vai Tetragonāla ģeometrija :



Karboanhidrāze E.2 klase 2VVA.pdb Zn^{2+} koordinē His96-His94-HisHis119-ūdeni
 $[\text{Zn}^{2+}(\text{NHis})_3(\text{Oūdens})]$ pozitīvs +2 lādiņš kompleksam.



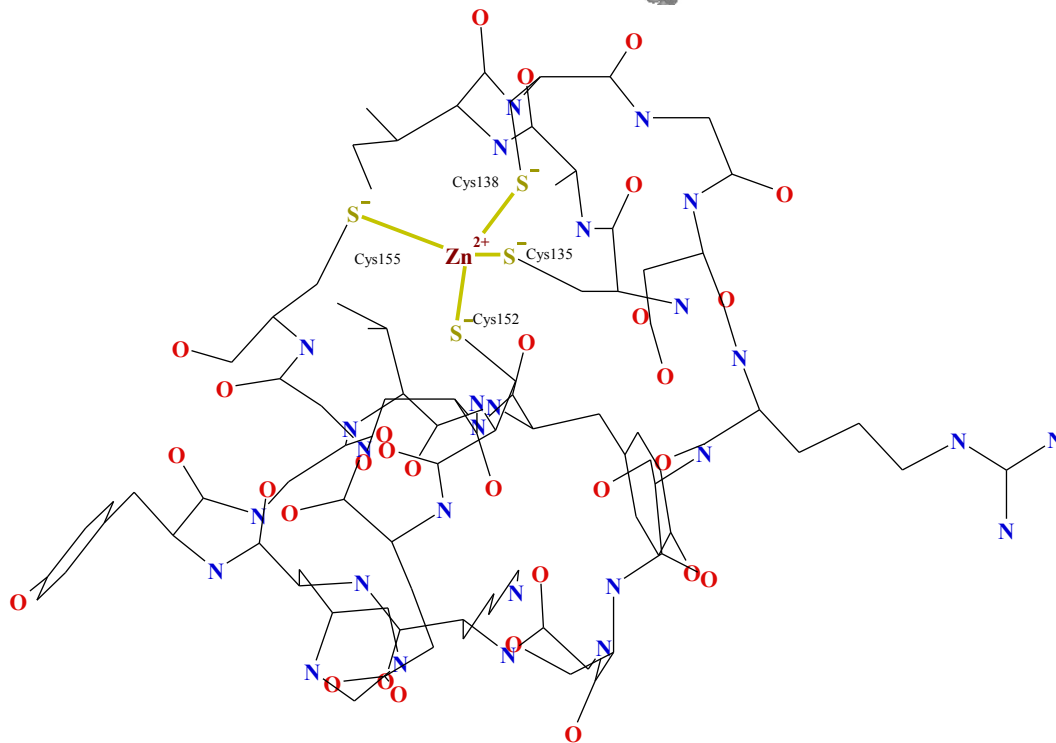
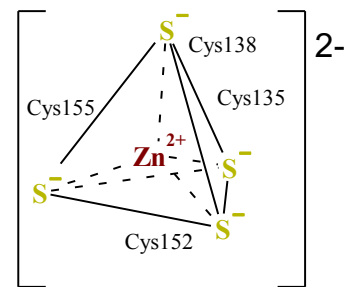
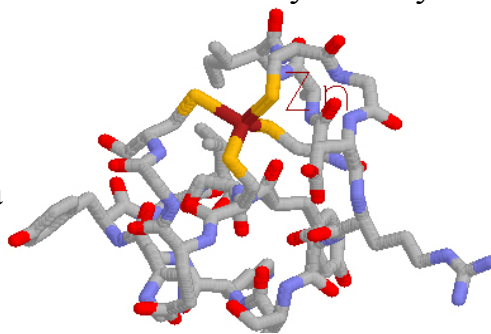
Tetraedrāla vai Tetragonāla ģeometrija



Zn pirkstu motīvs DNS saistīšanai 3DZY.pdb Zn^{2+} koordinē Cys138-Cys135-Cys152-Cys155

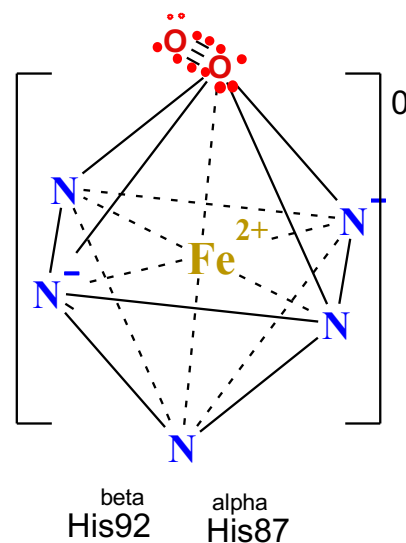
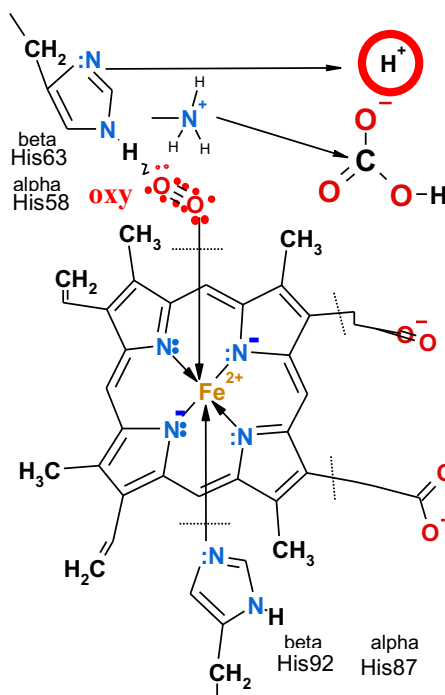
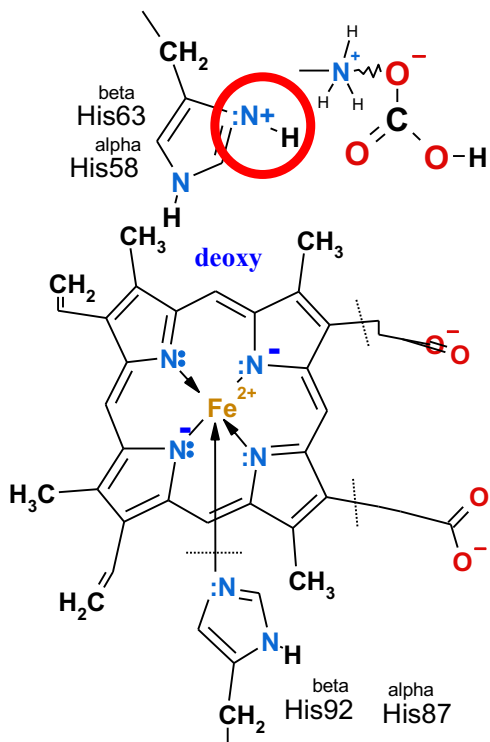
$[Zn^{2+}(S-Cys)_4]^{2-}$ negatīvs -2
kompleksa lādiņš.

Tetraedrāla vai Tetragonāla ģeometrija

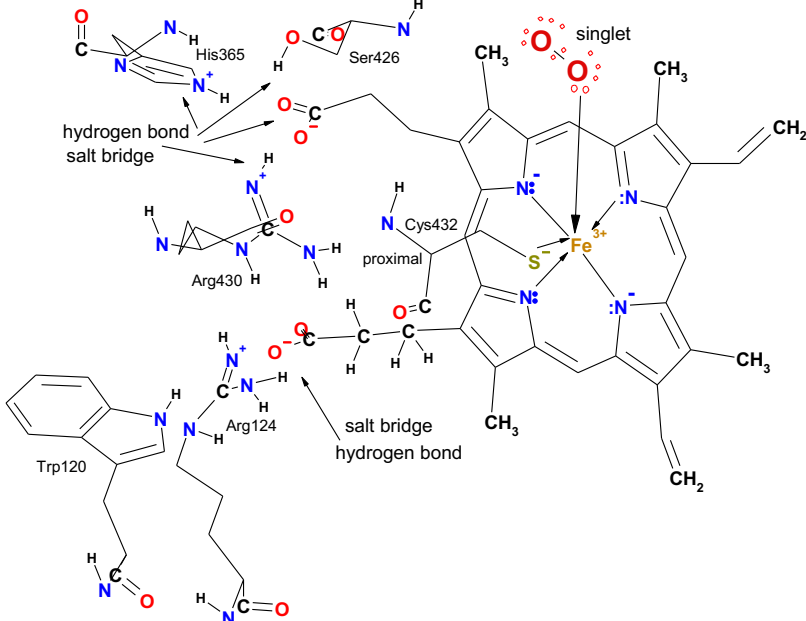


Atspole hemoglobīns deoxy-oxy Fe^{2+} koordinē hēma N-N-N-N-NHis63,58- $O\equiv O$ tripleta skābekli $[Fe^{2+}(N\text{ hēms})_4(N\text{ His63,58})(O\equiv O\text{ tripleta skābekli})]$ kompleksa lādiņš neitrāls 0.

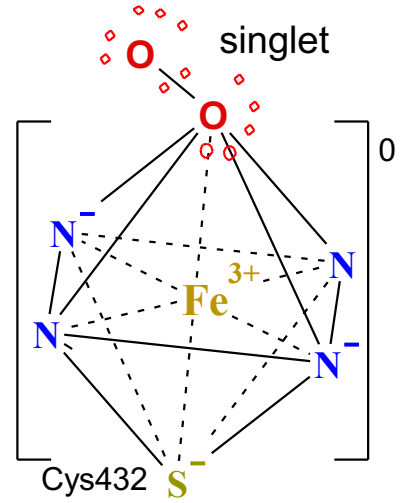
Oktaedrāla, Heksagonāla,
Bipiramidāla ģeometrija :



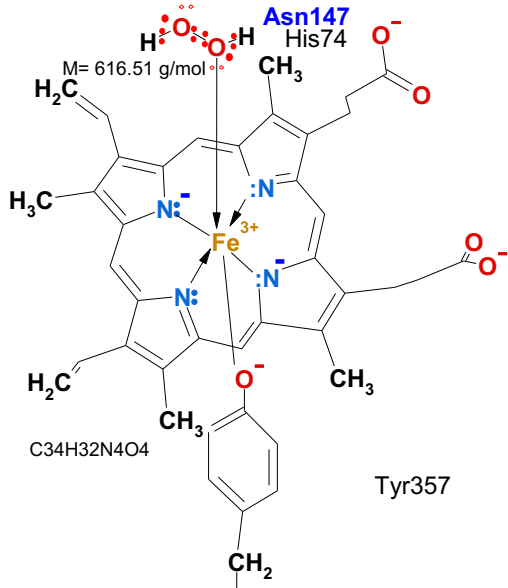
Citohroms P450 Fe^{3+} koordinē hēma $\text{N-N-N-N-S}^- \text{Cys432-O-O}$ **singleta** skābekli $[\text{Fe}^{3+}(\text{N hēms})_4(\text{S}^- \text{Cys432})(\text{O-O singleta})]$ kompleksa lādiņš neitrāls 0.



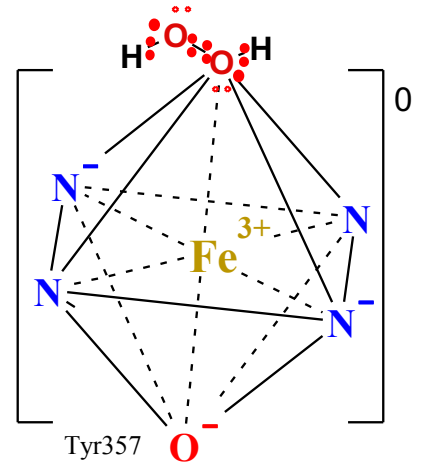
Oktaedrāla, Heksagonāla, Bipiramidāla ģeometrija:



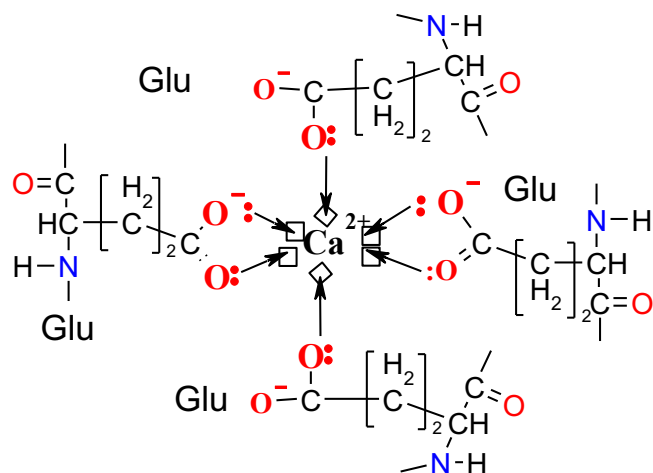
Katalāze (EC 1.11.1.6) Fe^{3+} koordinē hēma $\text{N-N-N-N-O}^- \text{-Tyr357-HO-OH}$ *peroksīdu* $[\text{Fe}^{3+}(\text{N hēms})_4(\text{O}^- \text{Tyr357})(\text{HO-OH peroksīds})]$ kompleksa lādiņš neitrāls 0.



Oktaedrāla, Heksagonāla, Bipiramidāla ģeometrija:



Miozīna kontrakciju Ca^{2+} koordinē četru glutamātu- COO^- karboksilātu sešus *skābekļa* atomus $[\text{Ca}^{2+}(\text{Glu-COO}^-)_4 \text{ ar } 4(\text{Glu-O}^-)_4 \text{ un divi Glu-C=O}]$ kompleksa lādiņš ir mīnus divi 2- ...



Oktaedrāla, Heksagonāla, Bipiramidāla ģeometrija:

