

Apkārt atomam centrā simetrizējas kovalentās saites, veidojot kristāla simetriju.

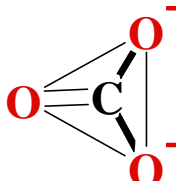
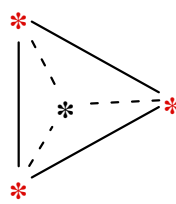
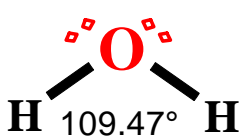

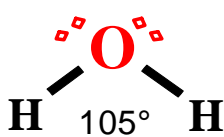

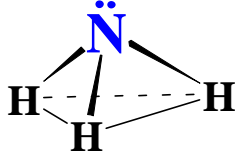
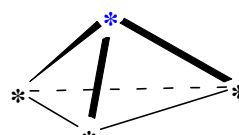
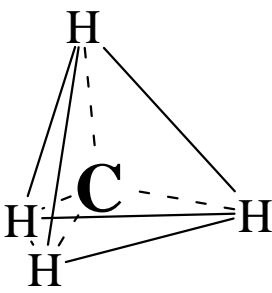
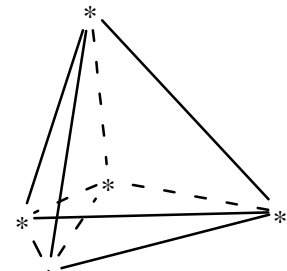
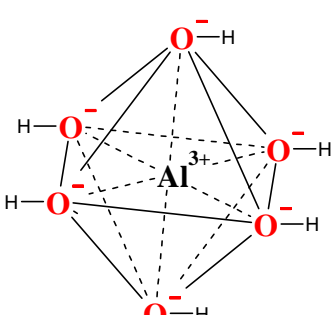
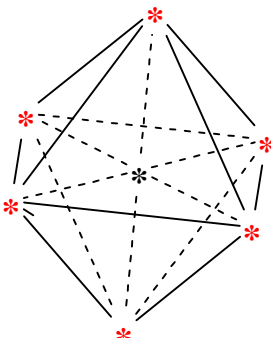
Rentgena kristalogrāfiju lieto molekulu struktūras noteikšanai.

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

Atoma punktu struktūrā apraksta ar tā Milera 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-}		
leņķiska 109.47° 0° C ρ=0.9167 g/mL; blīvums -100° C ρ=0.9257 g/mL; blīvums	ledus H_2O		
leņķiska 105° 0° C ρ=0.9998425 g/mL; blīvums +3.89° C ρ=0.9999999 g/mL; blīvums +25° C ρ=0.9970479 g/mL; blīvums	ūdens H_2O		
trigonāla piramidāla	$:NH_3$		
tetraedrāla, tetragonāla	CH_4		
oktaedrāla, heksagonāla bipiramidāla	$[Al(OH)_6]^{3-}$		

Atoma centrālā simetrijas ģeometrija koordinatīvā savienojumā



Kālija hekso ciano ferrāts(II)

Donoru-akceptoru saite

Atomi ar nedalītu elektronu pari : ir

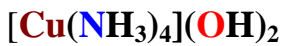
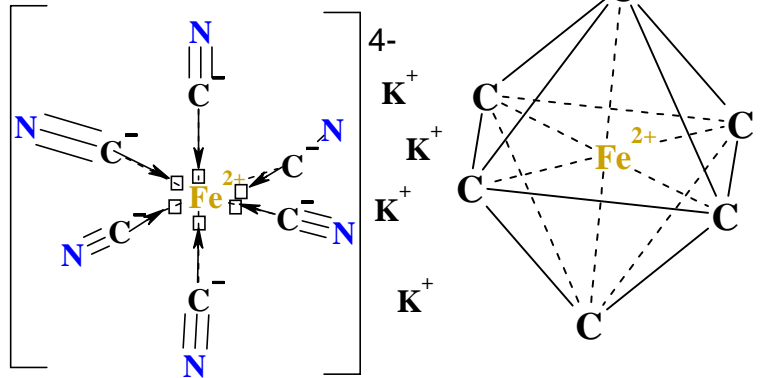
donori : $\rightarrow \square$ akceptors centrālais atoms

ar 6 neaizpildītām \square orbitalēm akceptē 6 pārus :

akceptors $\square\square Fe^{2+} \square\square$ akceptors un donors $N\equiv C^- : \rightarrow \square Fe^{2+} \square \leftarrow : C\equiv N$ donors;

Oktaedrāla vai Heksagonāla ģeometrija :

Bipiramidāla



tetra amino vara(II) hidroksīds

Donoru-akceptoru saite

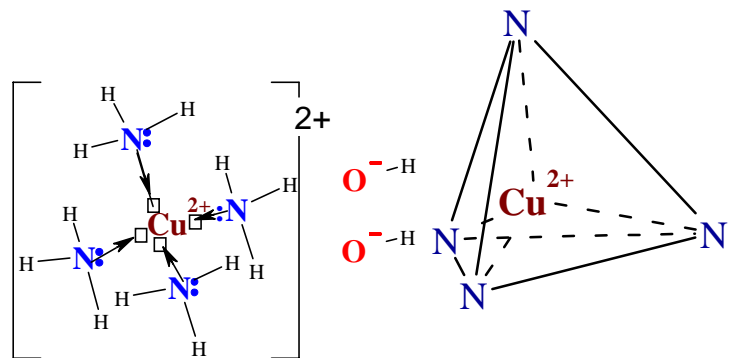
Atomi ar nedalītu elektronu pari : ir

donori : $\rightarrow \square$ akceptors centrālais atoms

ar 4 neaizpildītām \square orbitalēm akceptē 4 pārus :

akceptors $\square\square Cu^{2+} \square\square$ akceptors un donors $H_3N: \rightarrow \square Cu^{2+} \square \leftarrow :NH_3$ donors ;

Tetraedrāla vai Tetragonāla ģeometrija :



di amino sudraba(I) hlorīds

Donoru-akceptoru saite

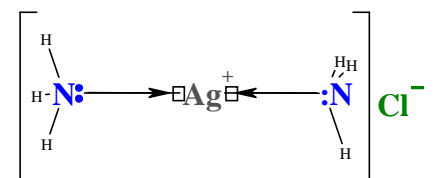
Atomi ar nedalītu elektronu pari : ir

donori : $\rightarrow \square$ akceptors centrālais atoms

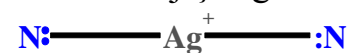
ar 2 neaizpildītām \square orbitalēm akceptē 2 pārus :

akceptors $\square Ag^+ \square$ akceptors un donors $H_3N: \rightarrow \square Ag^+ \square \leftarrow :NH_3$ donors ;

Lineāra vai nūjiņas ģeometrija :

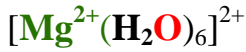


Lineāra vai nūjiņas ģeometrija



Galvenie elektronu pāru donor atomi ir **N:** un **: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

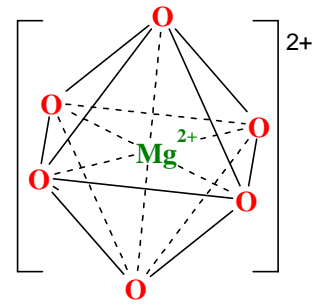
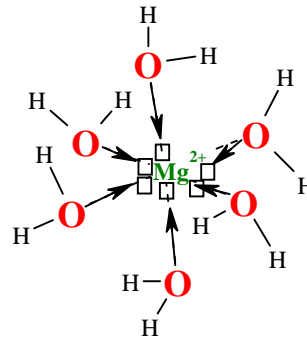
Nedalīta elektronu pāru : īpašnieki atomi $:O:$ ir donori $O: \rightarrow \square$ akseptori centrālā atoma K^+

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 ;

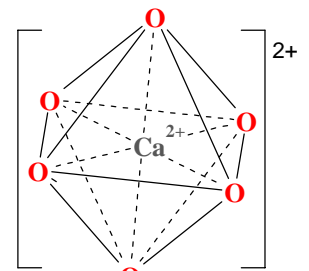
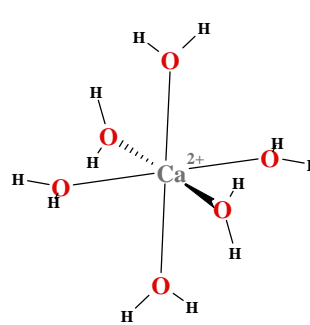
Oktaedrālā vai Heksagonālā ģeometrija :

Bipiramidāla



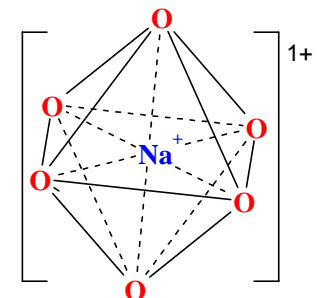
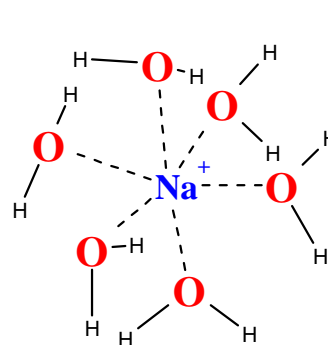
Oktaedrālā vai Heksagonālā ģeometrija :

Bipiramidāla



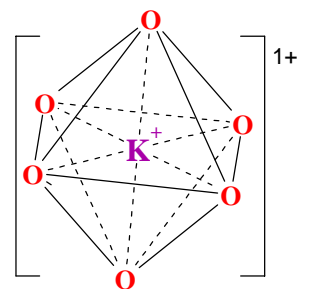
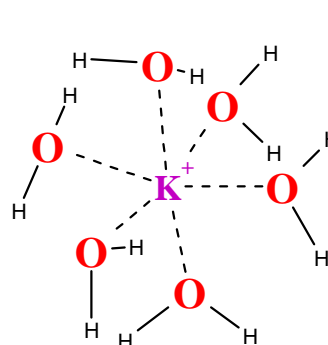
Oktaedrālā vai Heksagonālā ģeometrija :

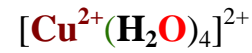
Bipiramidāla



Oktaedrālā vai Heksagonālā ģeometrija :

Bipiramidāla





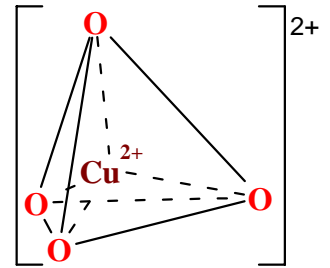
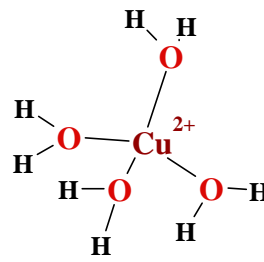
tetra akva vara(II) katjons

Donoru-akceptoru saite

Atomi ar nedalītu elektronu pari : ir

donori **O:** → □ akceptors centralais atoms **Cu²⁺**
ar 4 neaizpildītām □ orbitalēm akceptē 4 pārus :

akceptors □ □ **Cu²⁺** □ □ akceptors un
donors **H₂O:** → □ **Cu²⁺** □ ← **:OH₂** donors ;



Tetraedrāla vai Tetragonāla ģeometrija : :



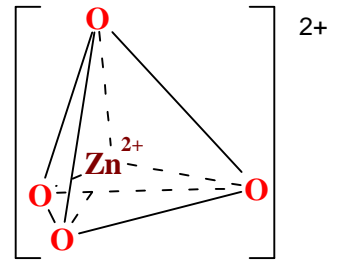
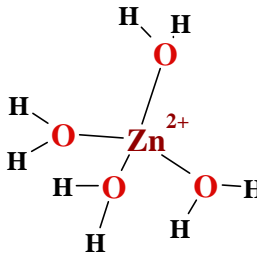
tetra akva cinka(II) katjons

Donoru-akceptoru saite

Atomi ar nedalītu elektronu pari : ir

donori **O:** → □ akceptors centralais atoms **Zn²⁺**
ar 4 neaizpildītām □ orbitalēm akceptē 4 pārus :

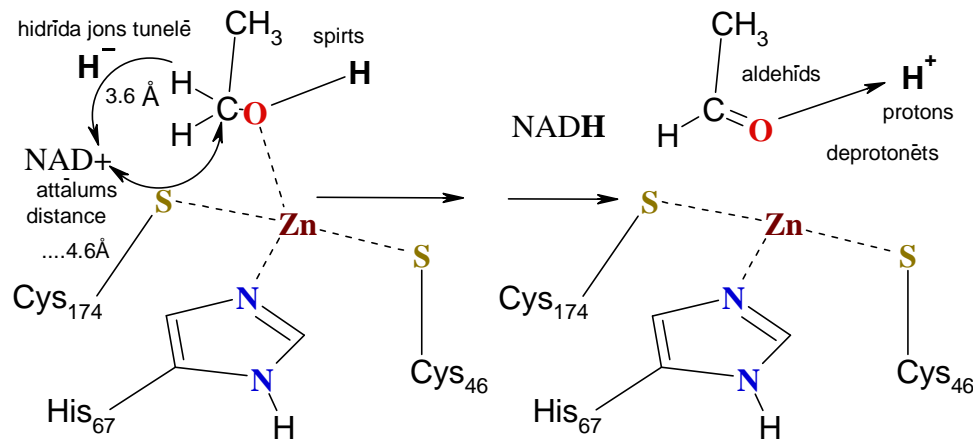
akceptor □ □ **Zn²⁺** □ □ akceptors un
donors **H₂O:** → □ **Zn²⁺** □ ← **:OH₂** donors ;



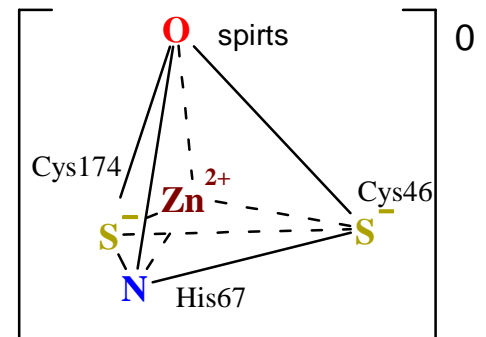
Tetraedrāla vai Tetragonāla ģeometrija : :

Alkohola dehidrogenāze E.1 klase 1HLD.pdb **Zn²⁺** koordinē Cys46-Cys174-His67-spirtu:

$[\text{Zn}^{2+}(\text{S}^-\text{Cys})_2(\text{O}^-\text{spirts})(\text{N}^-\text{His})]$ kompleks neitrāls nulles lādiņš .

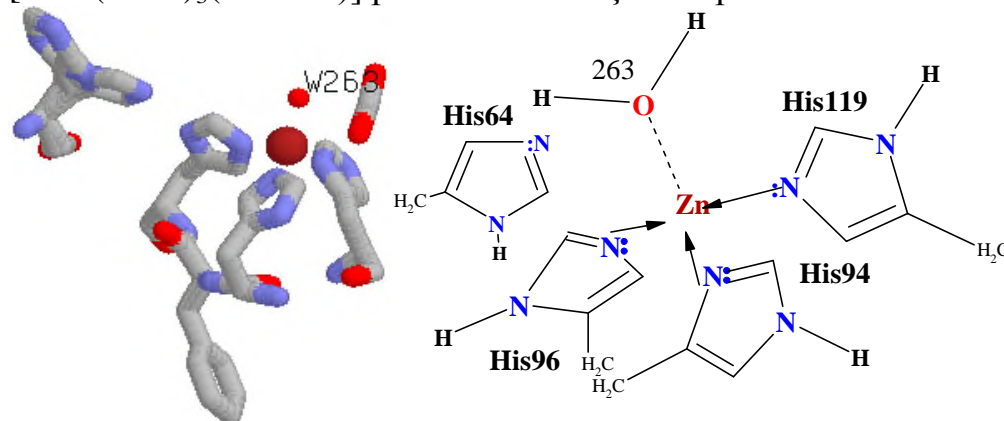


Tetraedrāla vai Tetragonāla ģeometrija :

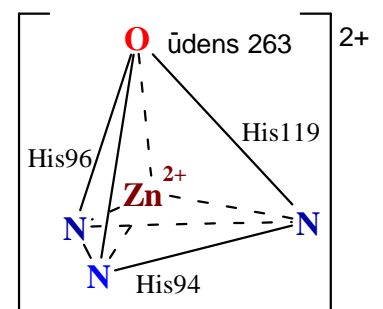


Karboanhidrāze E.2 klase 2VVA.pdb **Zn²⁺** koordinē His96-His94-HisHis119-ūdeni

$[\text{Zn}^{2+}(\text{N}^-\text{His})_3(\text{O}^-\text{ūdens})]$ pozitīvs +2 lādiņš kompleksam.



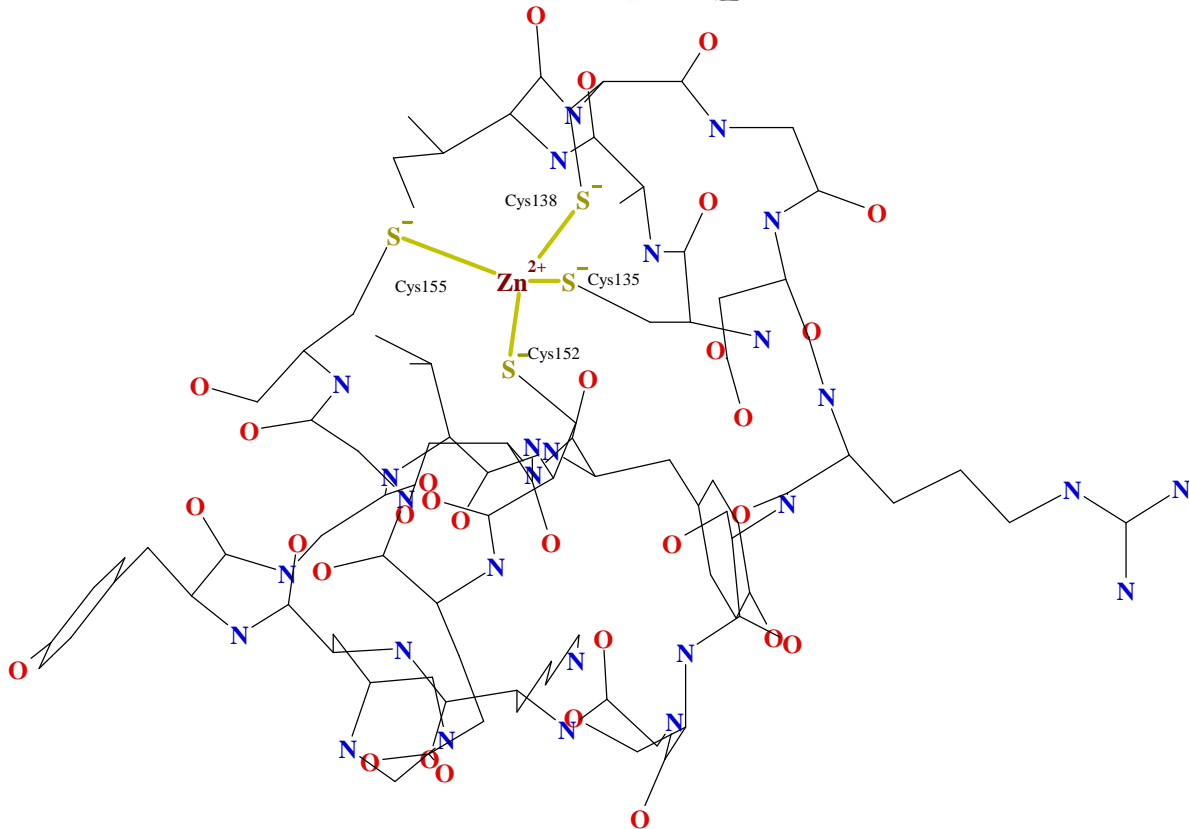
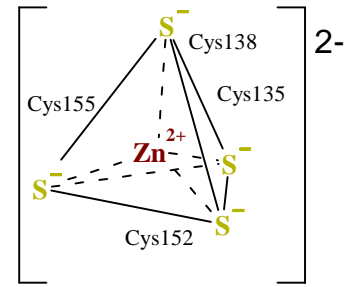
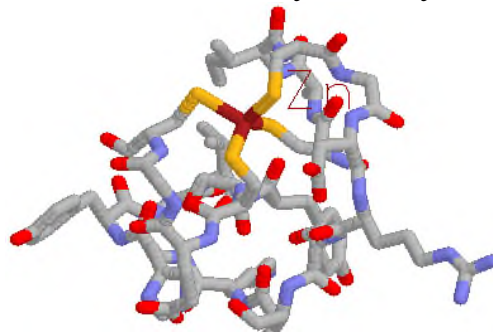
Tetraedrāla vai Tetragonāla ģeometrija



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

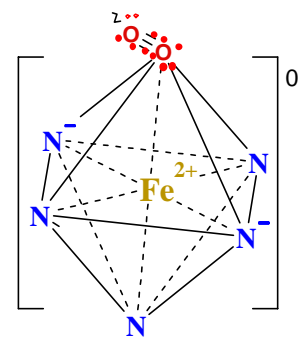
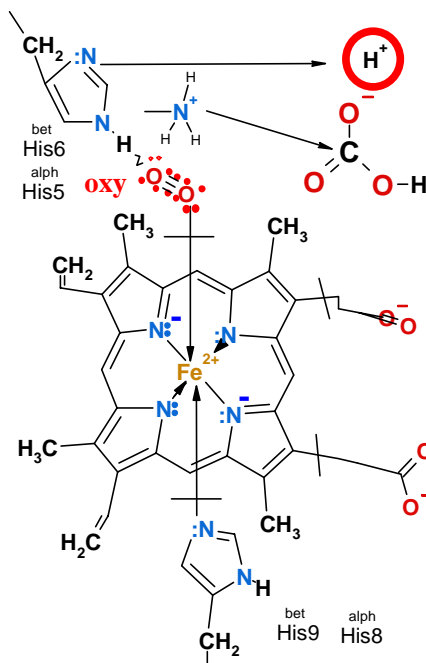
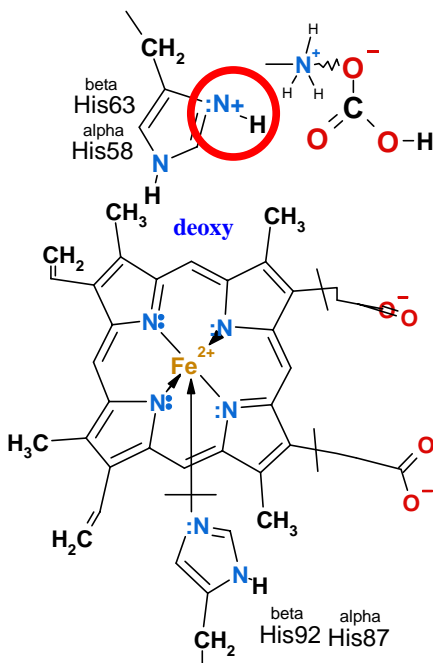
$[Zn^{2+}(S^-Cys)_4]^{2-}$ negatīvs -2 kompleksa lādiņš.

Tetraedrāla vai Tetragonāla ģeometrija

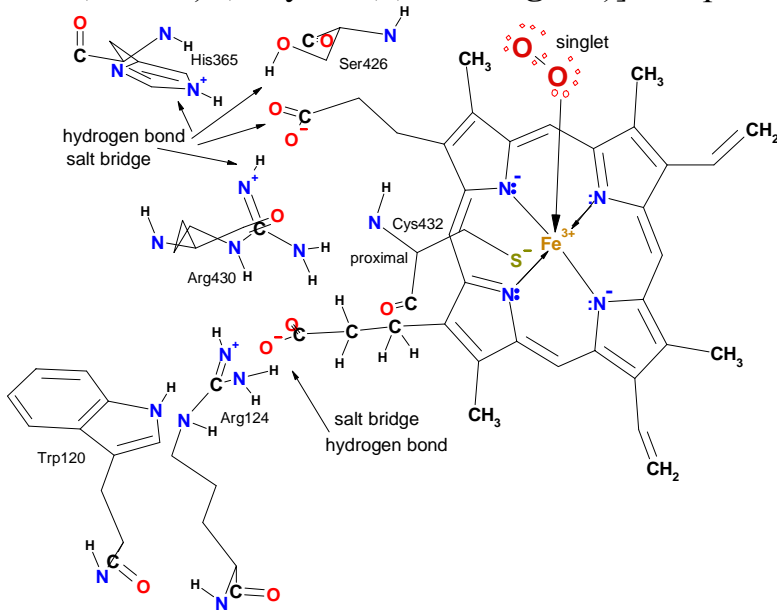


Atspole hemoglobīns deoxy-oxy Fe^{2+} koordinē hēma $N-N-N-N$ His63,58- $O\equiv O$ tripleta skābekli $[Fe^{2+}(Nhēms)_4(N_{His63,58})(O\equiv O \text{ tripleta skābekli})]$ kompleksa lādiņš neitrāls 0.

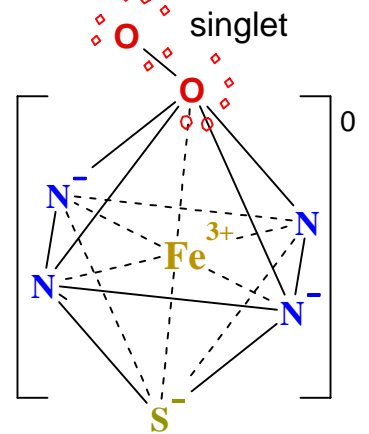
Oktaedrāl, Heksagonāla, Bipiramidāla ģeometrija :



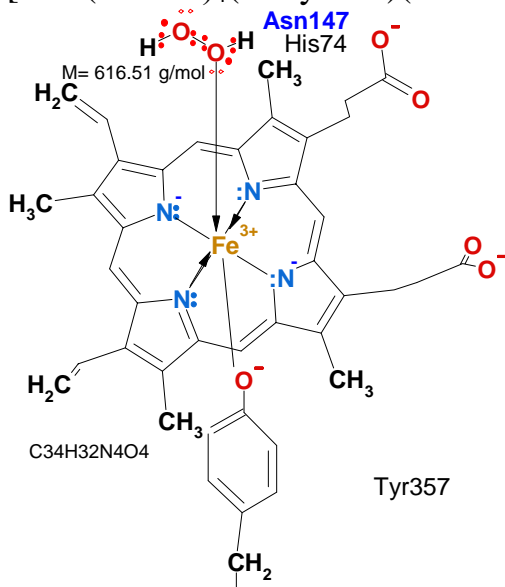
Citohroms P450 Fe^{3+} koordinē hēma $N-N-N-N-S^-$ Cys432- $O-O$ **singleta** skābekli $[Fe^{3+}(Nhēms)_4(S^-Cys432)(O-O \text{ singleta})]$ kompleksa lādiņš neitrāls 0.



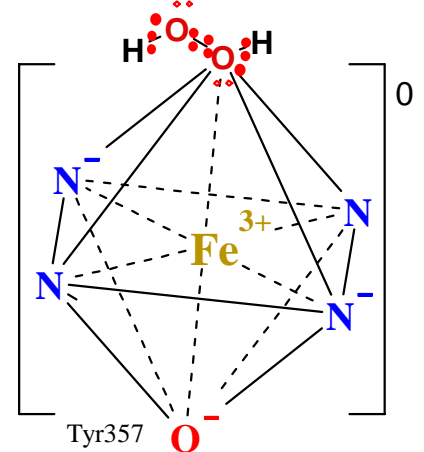
Oktaedrālāl, Heksagonāla, Bipiramidāla ģeometrija:



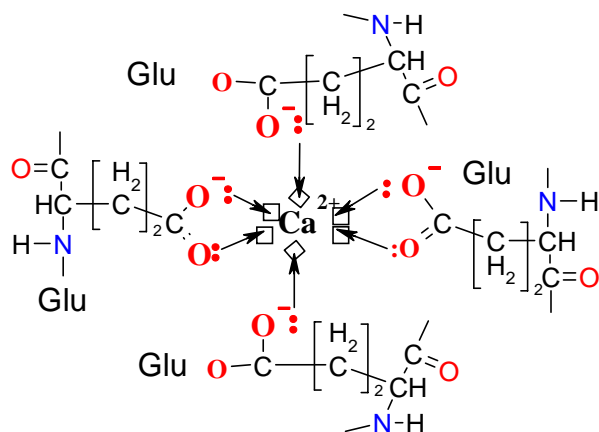
Katalāze (EC 1.11.1.6) Fe^{3+} koordinē hēma $N-N-N-N-O^-$ Tyr357- $HO-OH$ *peroksīdu* $[Fe^{3+}(Nhēms)_4(O^-Tyr357)(HO-OH \text{ peroksīds})]$ kompleksa lādiņš neitrāls 0.



Oktaedrālāl, Heksagonāla, Bipiramidāla ģeometrija:



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



Oktaedrālāl, Heksagonāla, Bipiramidāla ģeometrija:

