

# Apkārt atomam centrā simetrizējas kovalentās saites, veidojot kristāla simetriju.

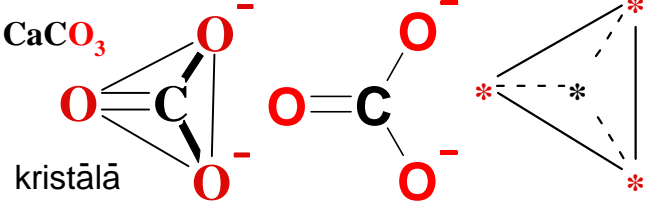
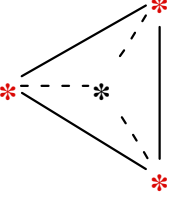
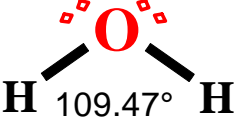
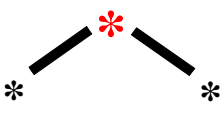
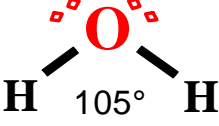
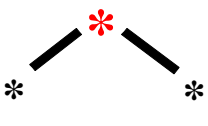
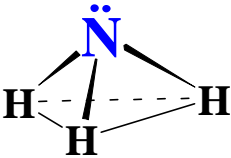
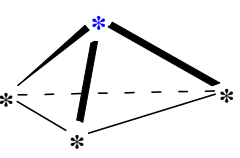
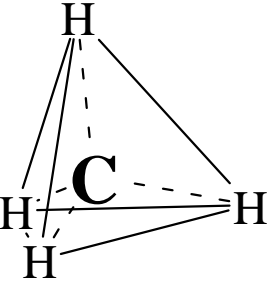
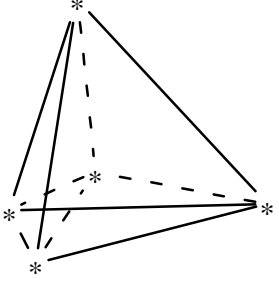
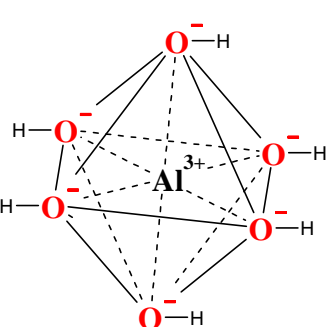
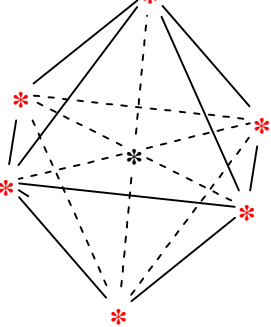
Rentgena kristalogrāfiju lieto molekulu struktūras noteikšanai.

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°	$CO_3^{2-}$		
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

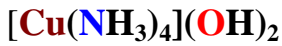
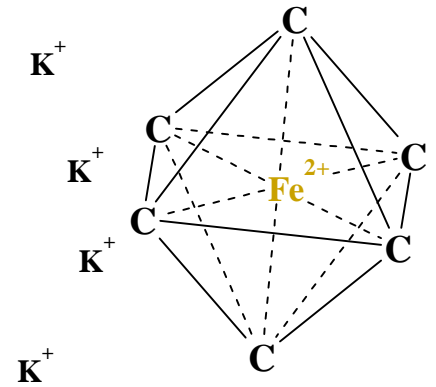
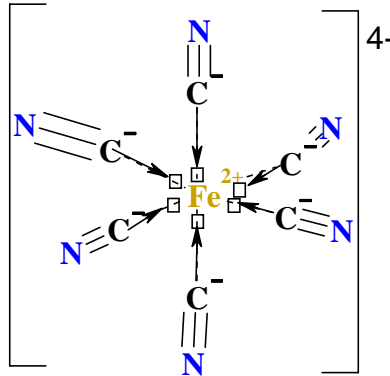


Oktaedrāla vai Heksagonāla ģeometrija :

*Kālija hekso ciano ferāts(II)*

Bipiramidāla

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

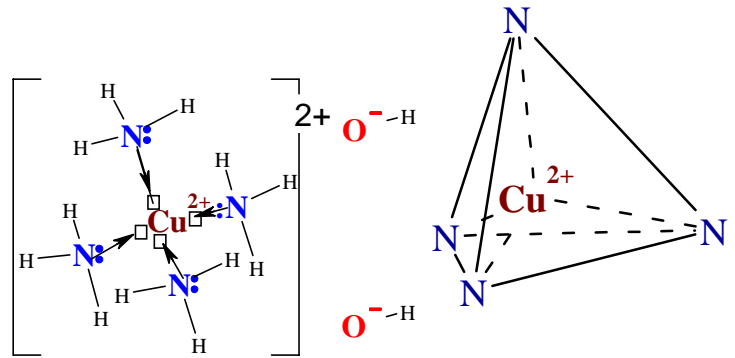


Tetraedrāla vai Tetragonāla ģeometrija :

*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  $H_3N:$   $\rightarrow$  □  $Cu^{2+}$  □  $\leftarrow$  : $NH_3$  donors ;

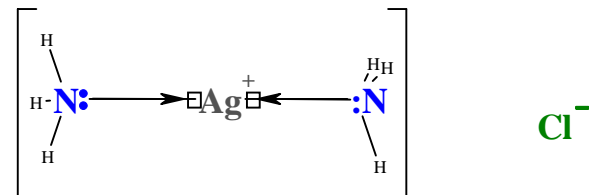


Lineāra vai nūjiņas ģeometrija :

*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  $H_3N:$   $\rightarrow$  □  $Ag^+$  □  $\leftarrow$  : $NH_3$  donor s;

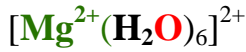


Lineāra vai nūjiņas ģeometrija



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

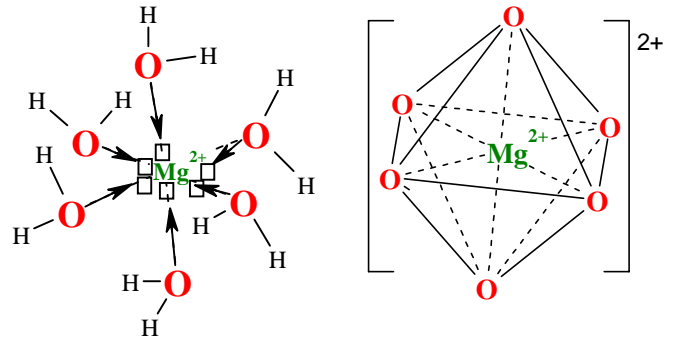
Donoru-akceptoru saite

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

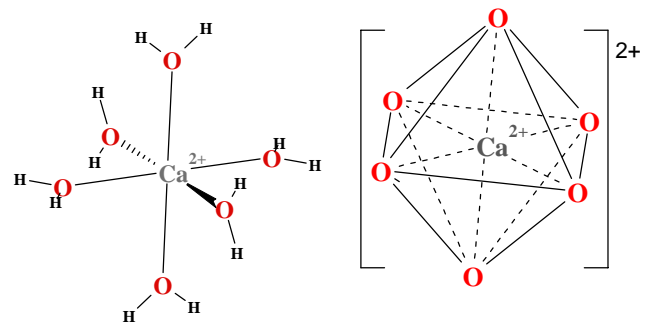
6 brīvās orbitāles kā pāru : akseptori  $\square$

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

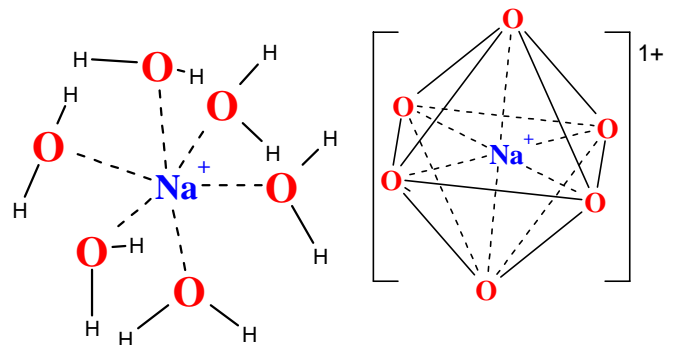
Oktaedrāla vai Heksagonāla ģeometrija :  
Bipiramidāla



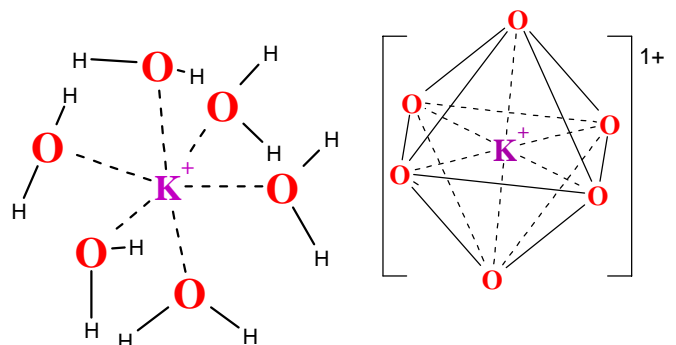
Oktaedrāla vai Heksagonāla ģeometrija :  
Bipiramidāla



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

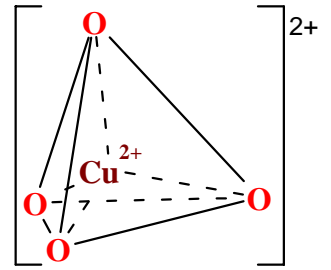
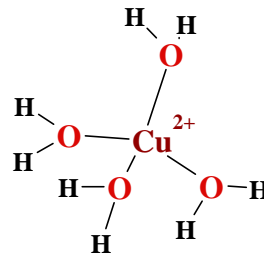
Tetraedrāla vai Tetragonāla ģeometrija : :

Donoru-akceptoru saite

Atomi ar nedalītu elektronu pāri : ir

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

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



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

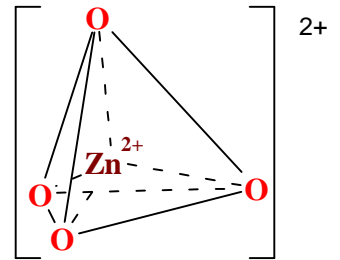
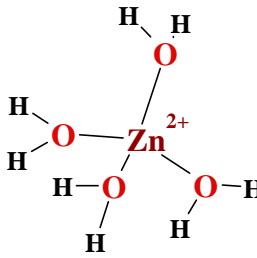
Tetraedrāla vai Tetragonāla ģeometrija : :

Donoru-akceptoru saite

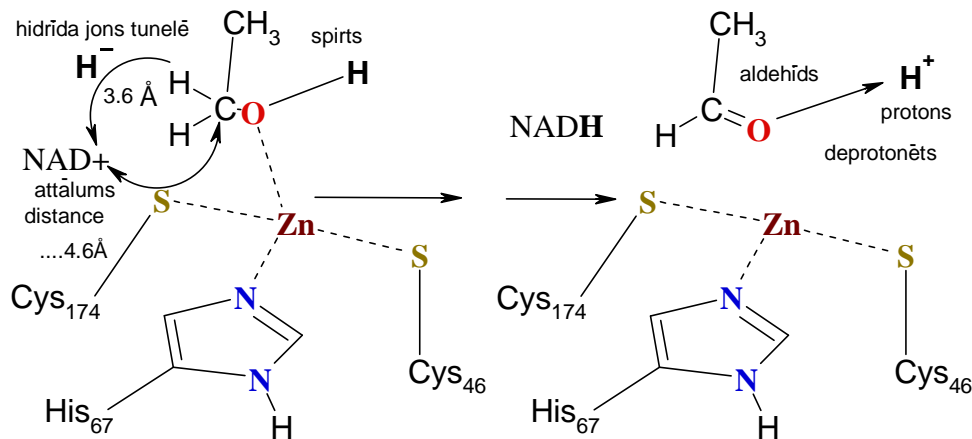
Atomi ar nedalītu elektronu pāri : ir

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

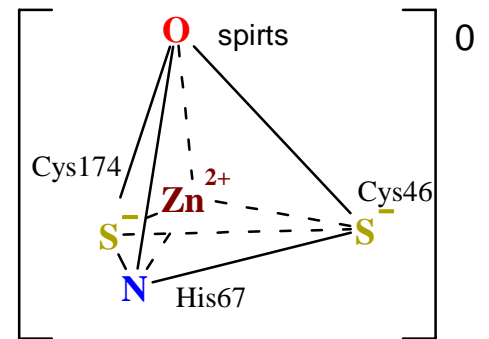
akceptor □ □  $\text{Zn}^{2+}$  □ □ akceptors un  
donors  $\text{H}_2\text{O}:$  → □  $\text{Zn}^{2+}$  □ ←  $:\text{OH}_2$  donors ;



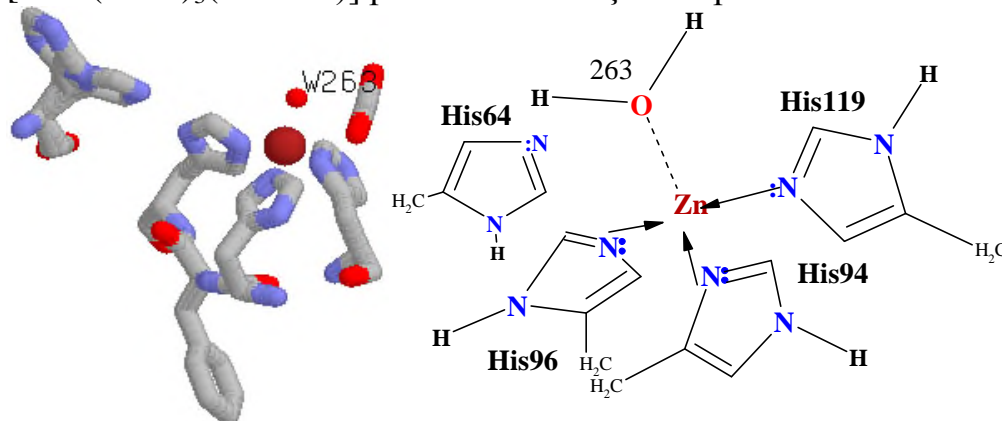
Alkohola dehidrogenāze E.1 klase 1HLD.pdb  $\text{Zn}^{2+}$  koordinē Cys46-Cys174-His67-spirtu:  
 $[\text{Zn}^{2+}(\text{S}^-\text{Cys})_2(\text{O}^-\text{spirts})(\text{N}^-\text{His})]$  kompleksam neitrāls nulles lādiņš .



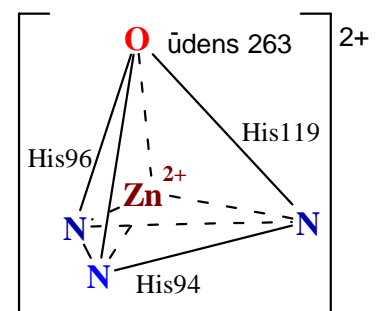
Tetraedrāla vai Tetragonāla ģeometrija :



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



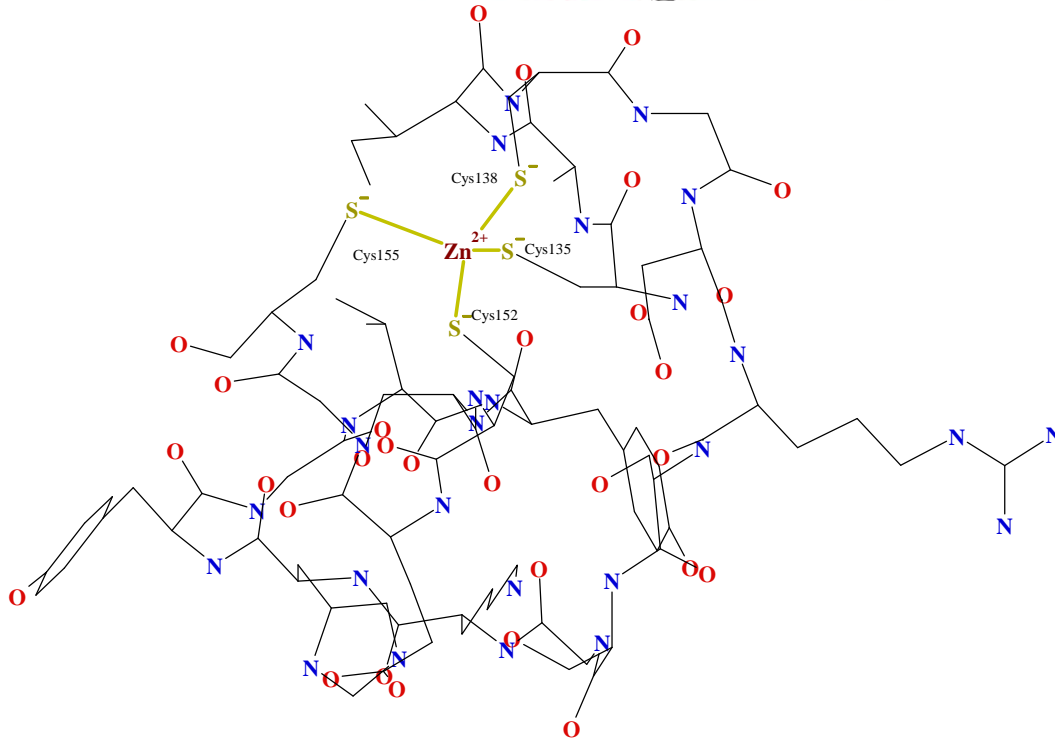
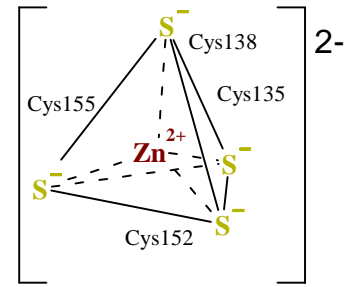
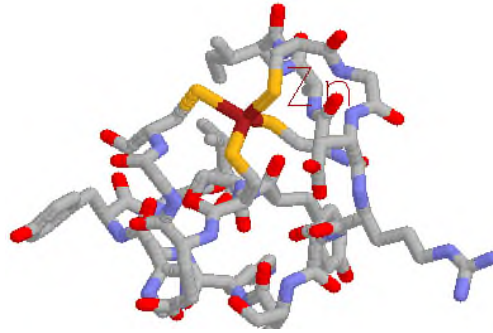
Tetraedrāla vai Tetragonāla ģeometrija



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

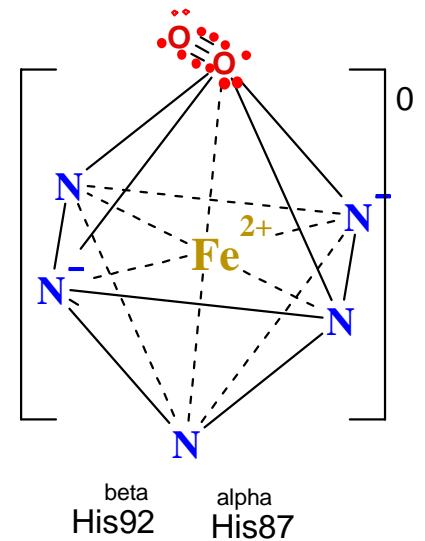
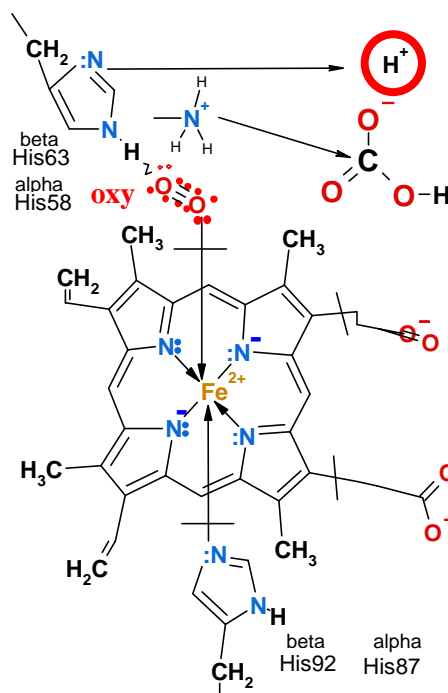
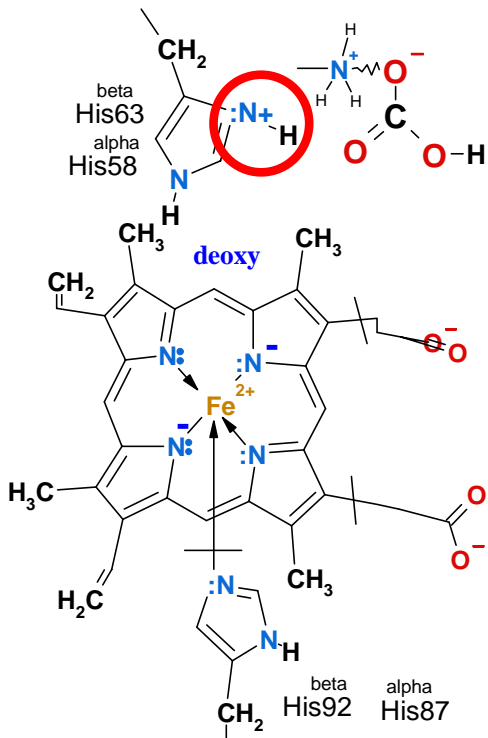
$[Zn^{2+}(S^-Cys)_4]^{2-}$  negatīvs -2 kompleksa lādiņš.

Tetraedrāla vai Tetragonāla ģeometrija

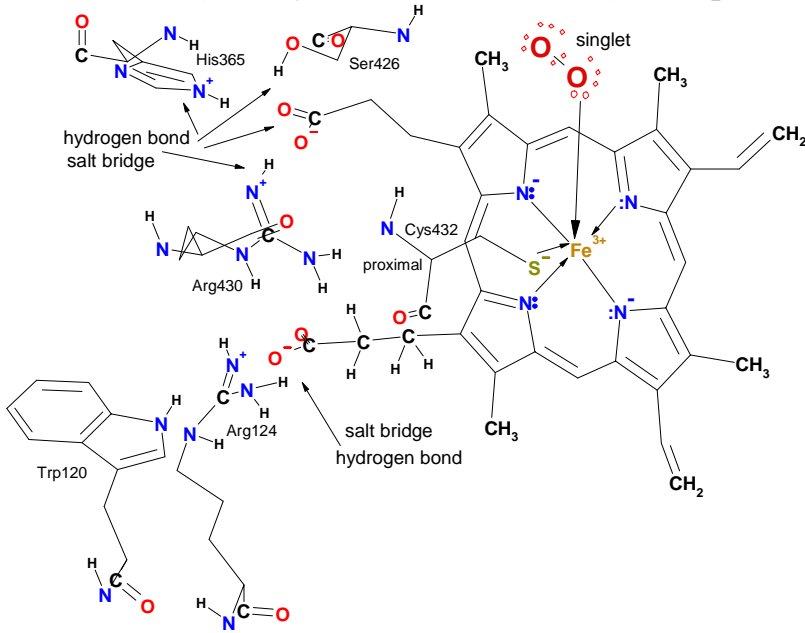


Atspole hemoglobīns deoxy-oxy  $Fe^{2+}$  koordinē hēma  $N^-N-N-N-N$  His63,58- $O\equiv O$  tripleta skābekli  $[Fe^{2+}(N \text{ hēms})_4(N_{\text{His63,58}})(O\equiv O \text{ tripleta skābekli})]$  kompleksa lādiņš neitrāls 0.

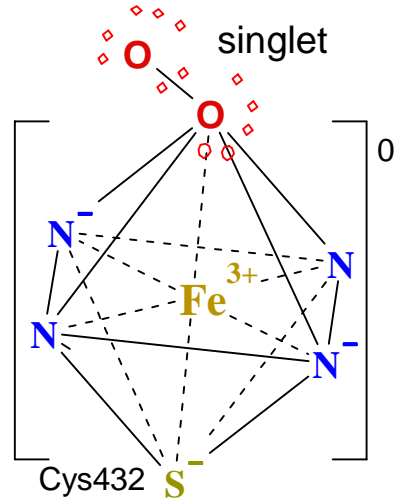
Oktaedrāla, Heksagonāla, Bipiramidāla ģeometrija :



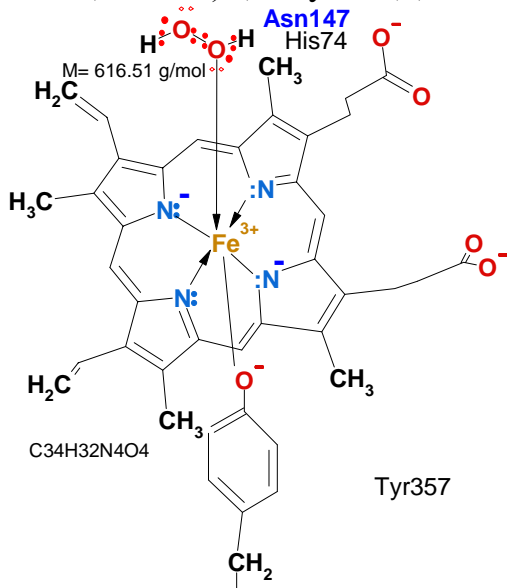
Citohroms P450  $Fe^{3+}$  koordinē hēma  $N-N-N-N$  -  $S^-$  Cys432- $O-O$  **singleta** skābekli  $[Fe^{3+}(N \text{ hēms})_4(S^- \text{ Cys432})(O-O \text{ singleta})]$  kompleksa lādiņš neitrāls 0.



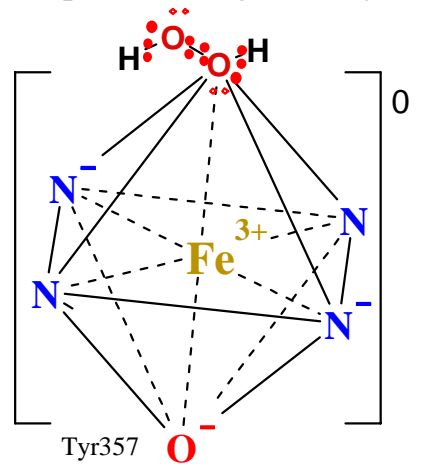
Oktaedrāla, Heksagonāla, Bipiramidāla ģeometrija:



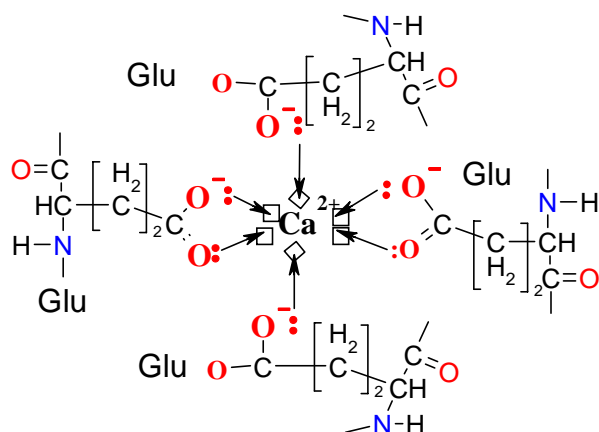
Katalāze (EC 1.11.1.6)  $Fe^{3+}$  koordinē hēma  $N-N-N-N-O^-$ -Tyr357- $HO-OH$  *peroksīdu*  $[Fe^{3+}(N \text{ hēms})_4(O^- \text{ Tyr357})(HO-OH \text{ peroksīds})]$  kompleksa lādiņš neitrāls 0.



Oktaedrāla, Heksagonāla, Bipiramidāla ģeometrija:



Miozīna kontrakciju  $Ca^{2+}$  koordinē četru glutamātu- $COO^-$  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- ...



Oktaedrāla, Heksagonāla, Bipiramidāla ģeometrija:

