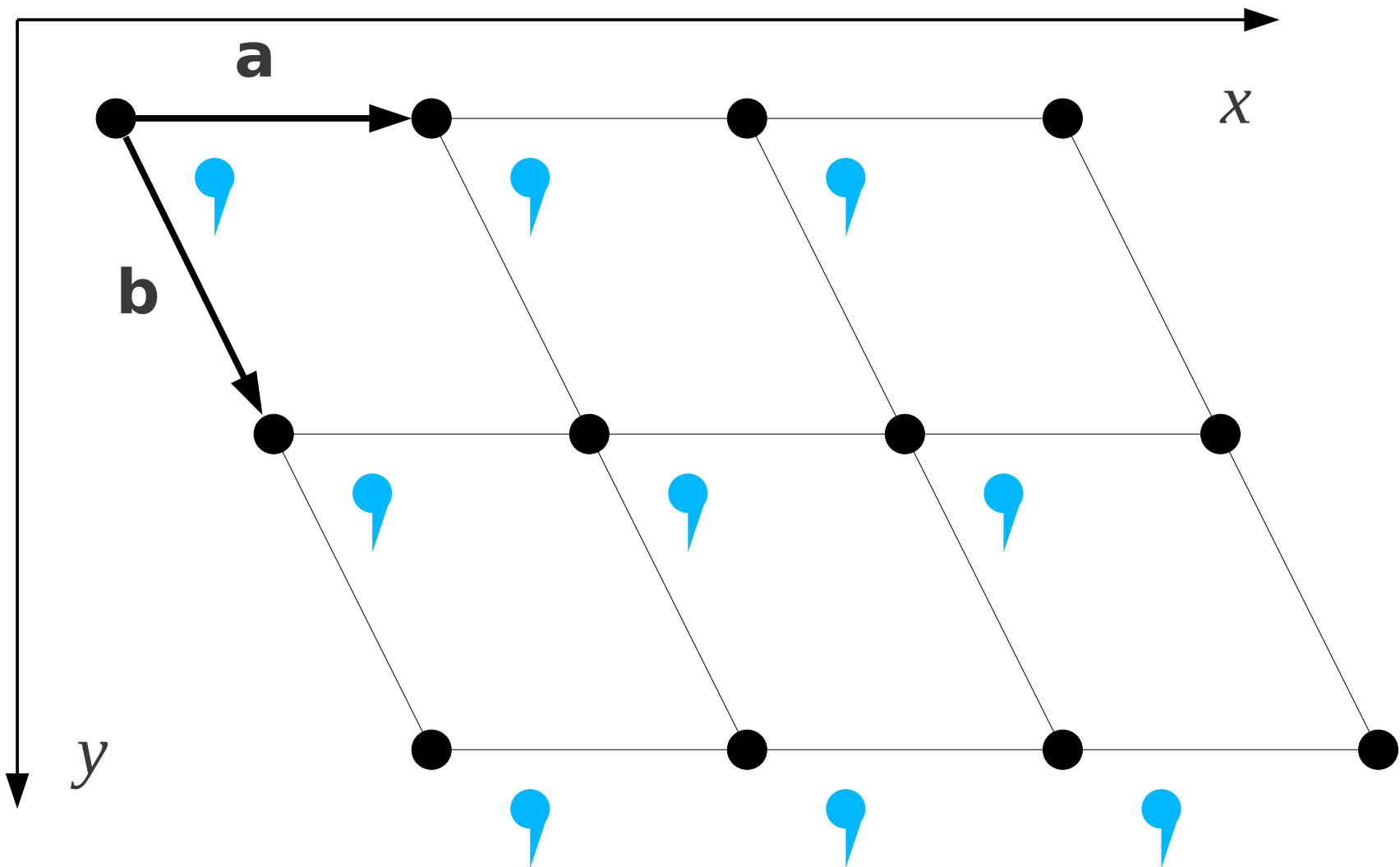


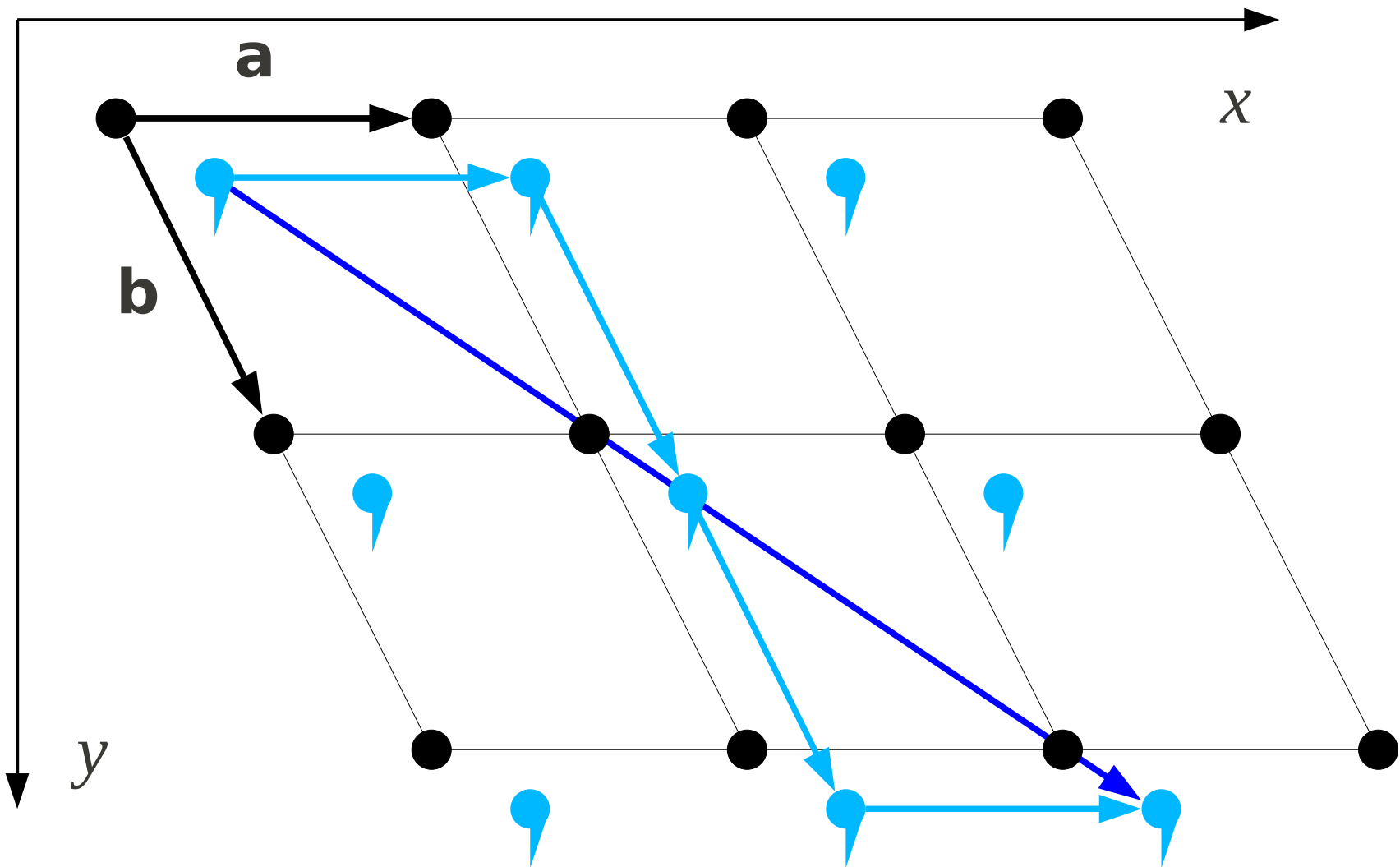
*Makromolekulių struktūros
&
Rentgeno kristalografija
(3)
Kristalų simetrija*

S. Gražulis
2012 m.

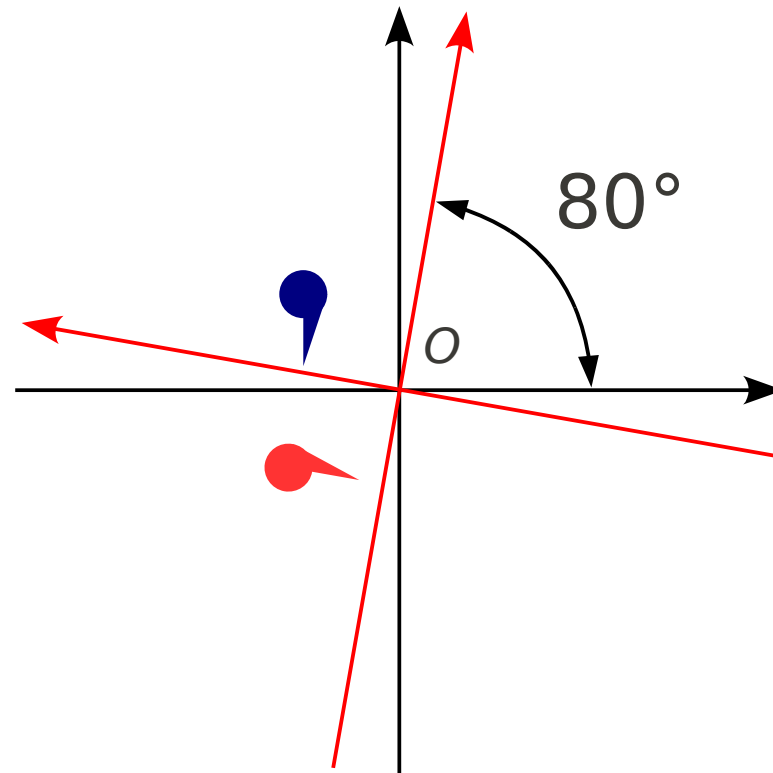
Periodiškumas ir postūmiai



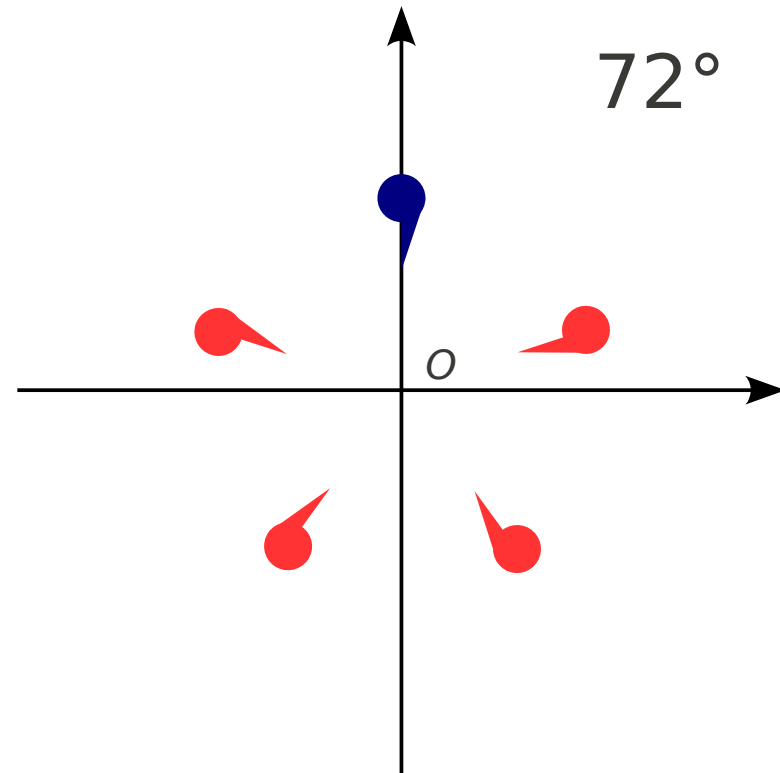
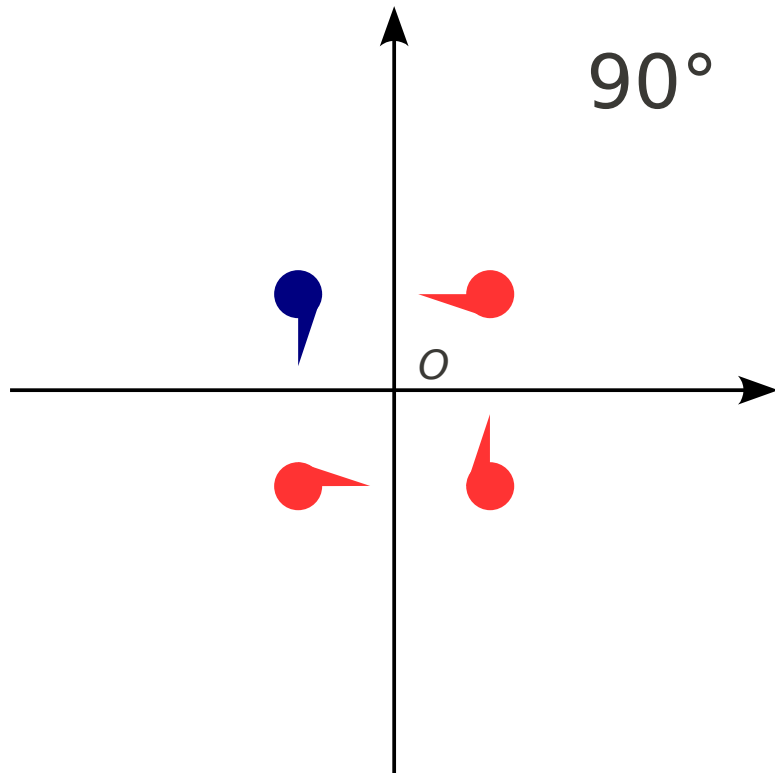
Postūmių grupė



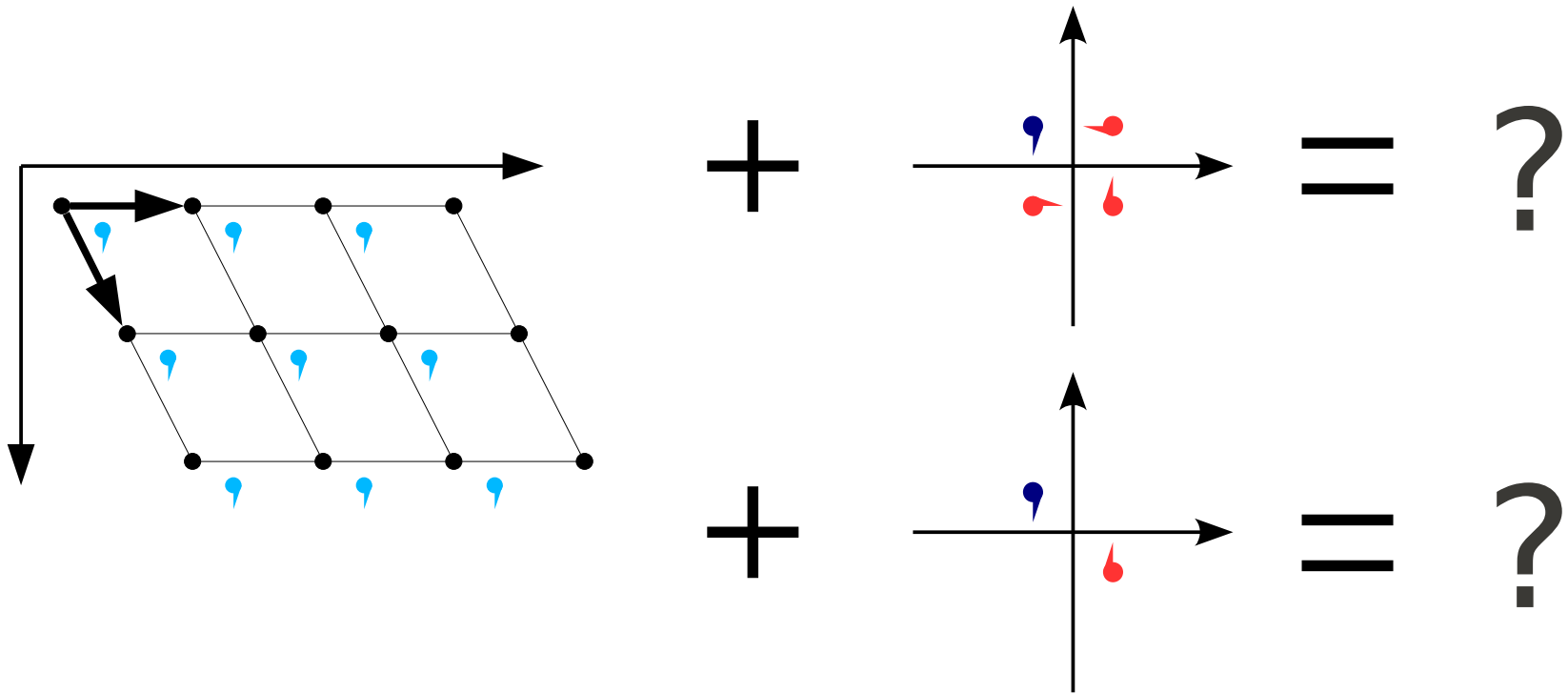
Taškiniai simetrijos elementai



Taškinės grupės

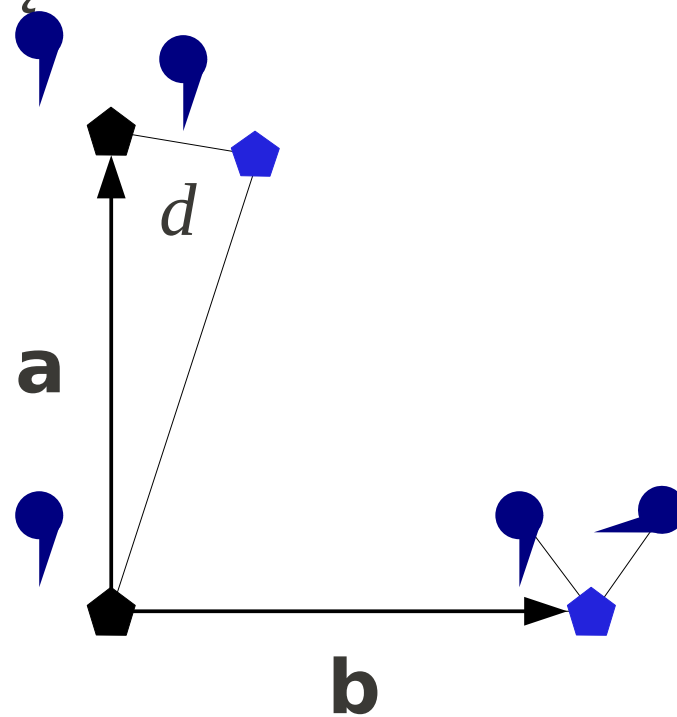


Postūmių ir taškinės grupės kombinacijos = erdvinės grupės



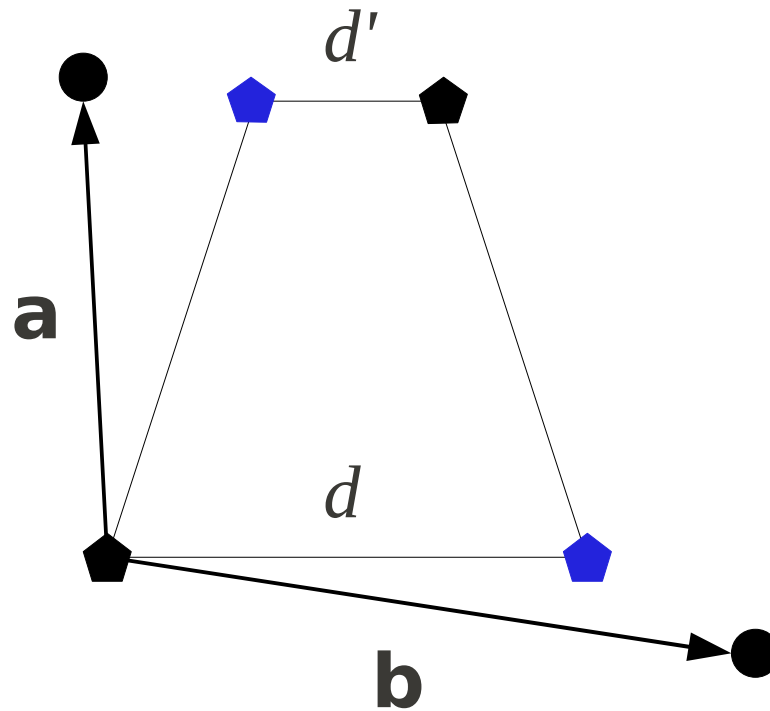
Su translācija saderinami simetrijas elementai

*Kodēl nebūna penkiakampi
snaigi?*

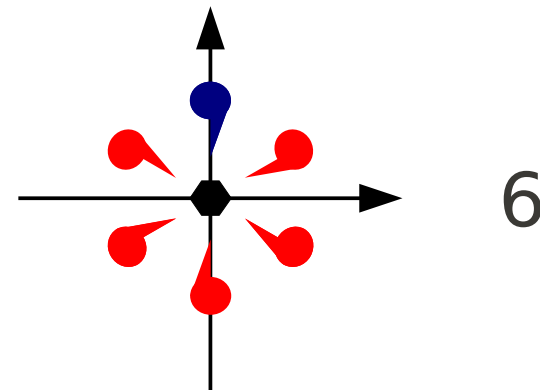
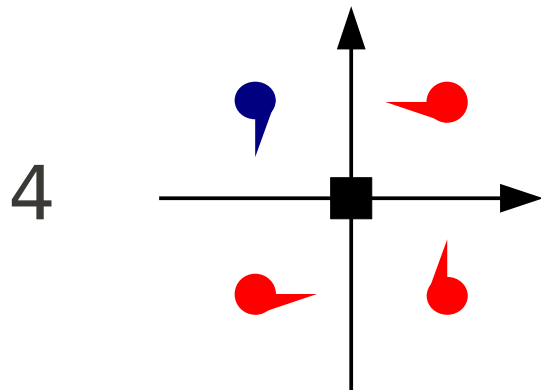
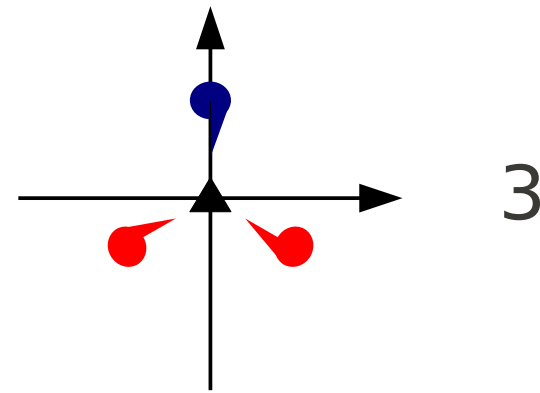
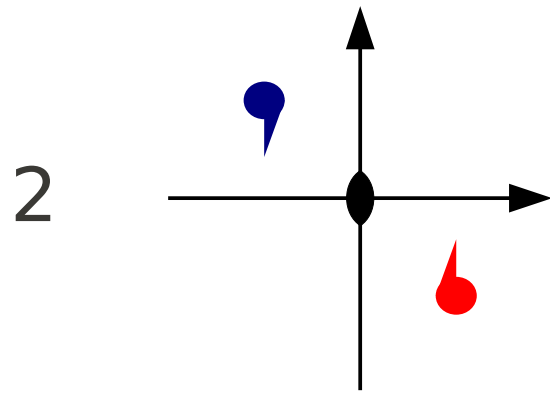


Su translācija saderināmi simetrijas elementai

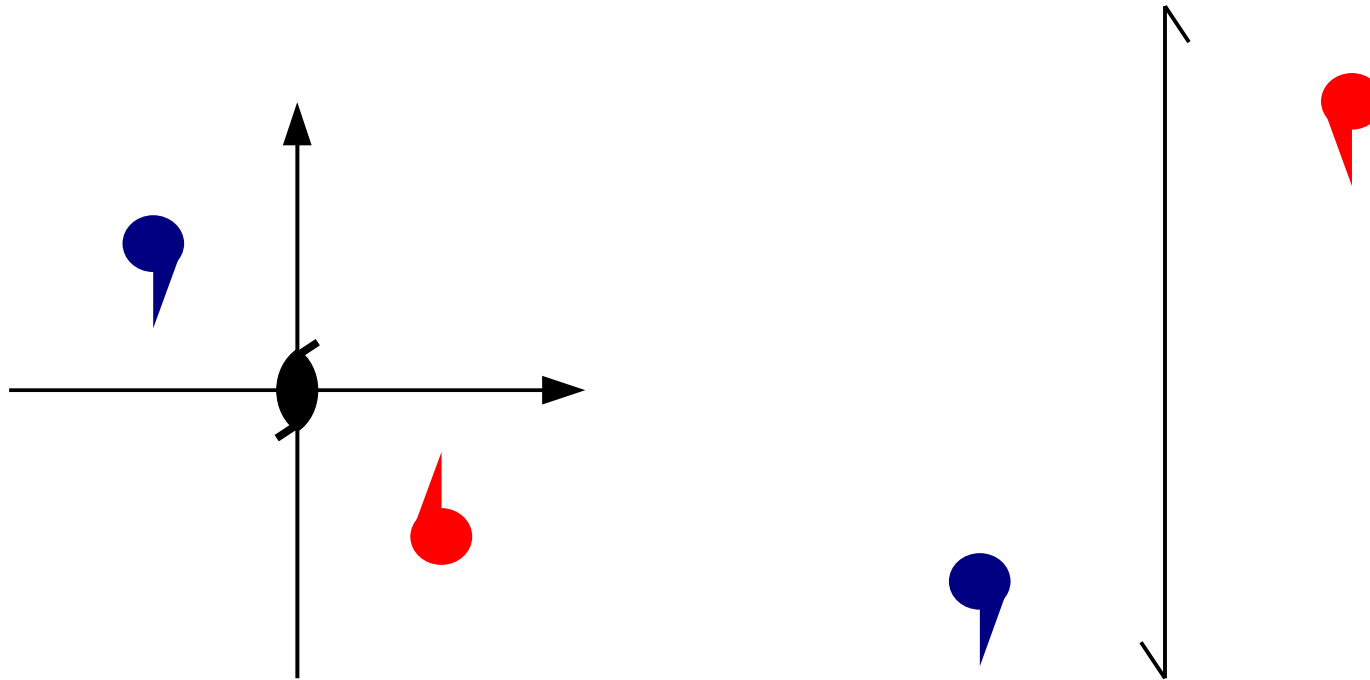
*Kodēl nebūna penkiakampi
snaigi?*



Simetrijas elementai: posūtkio ašys



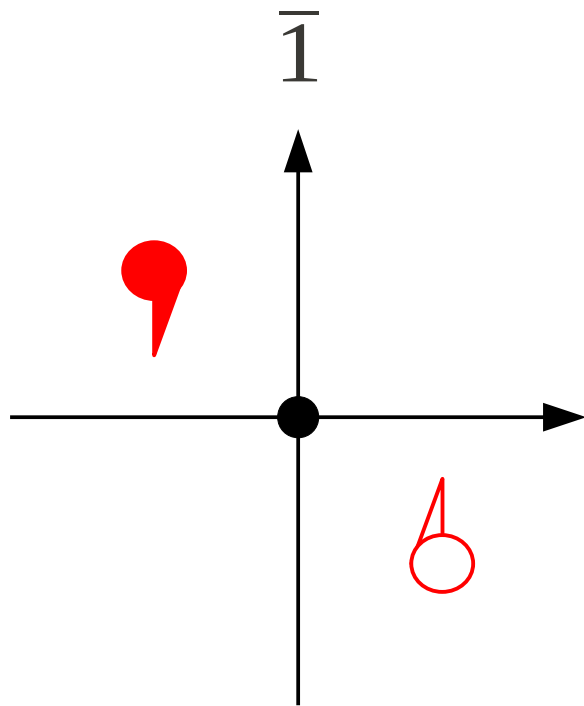
Simetrijos elementai: sraigtinės ašys



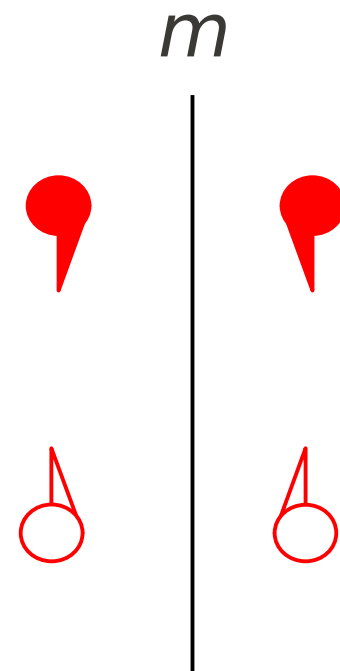
Sraigtinės ašys: 2_1

Kitos galimybės: $3_1, 3_2, 4_1, 4_2, 4_3, 6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5$

Simetrijos elementai: inversijos centrai ir plokštumos

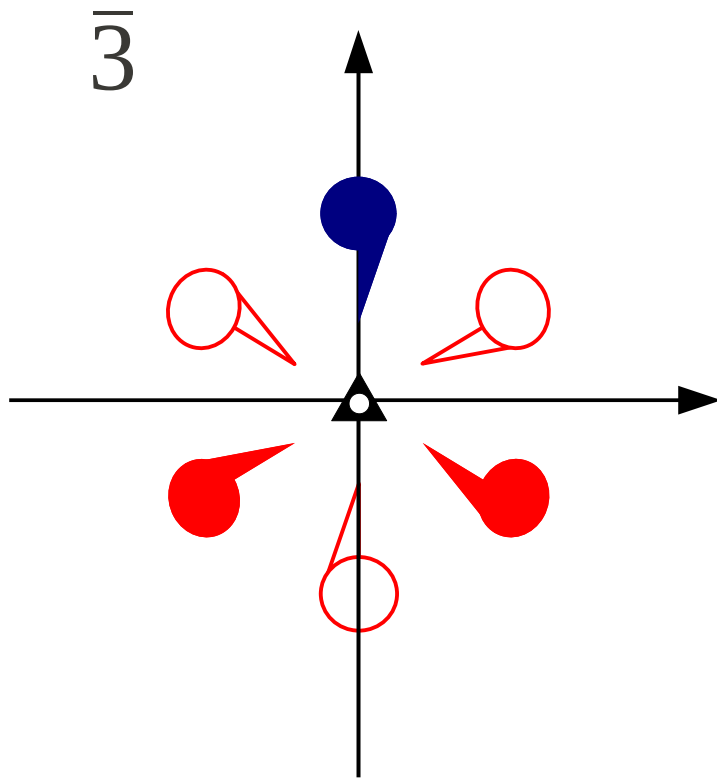


Inversijos (atspindžio) centras

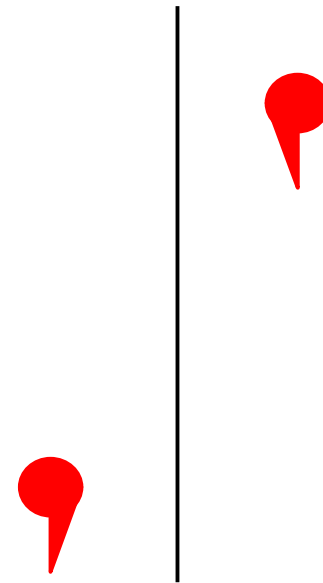


Inversijos (atspindžio) plokštuma

Simetrijos elementai: rotoinversinės ašys ir slydimo plokštumos



Rotoinversinė ašis



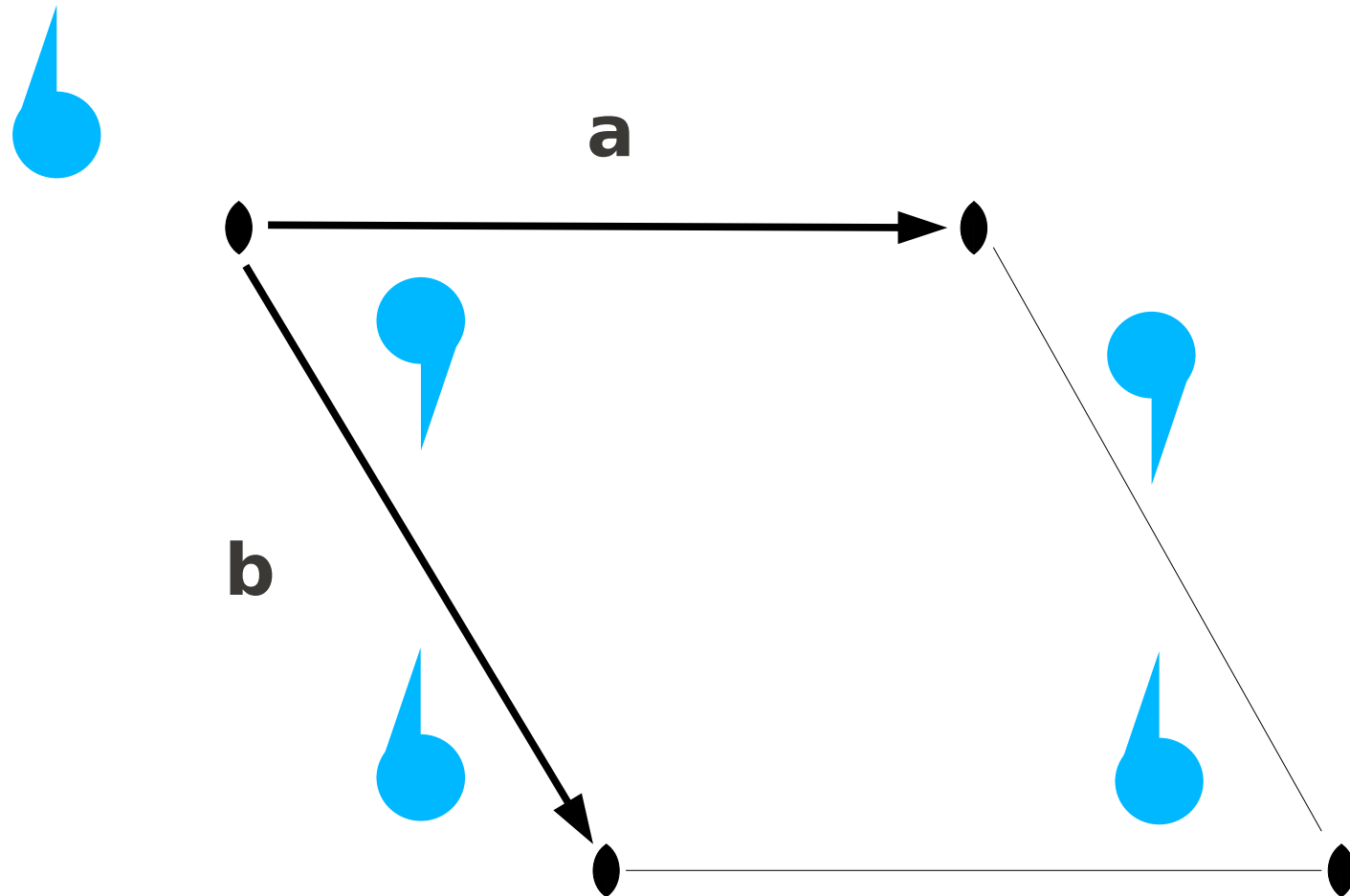
Slydimo plokštuma

Erdvinės simetrijos grupės ir jų nomenklatūra

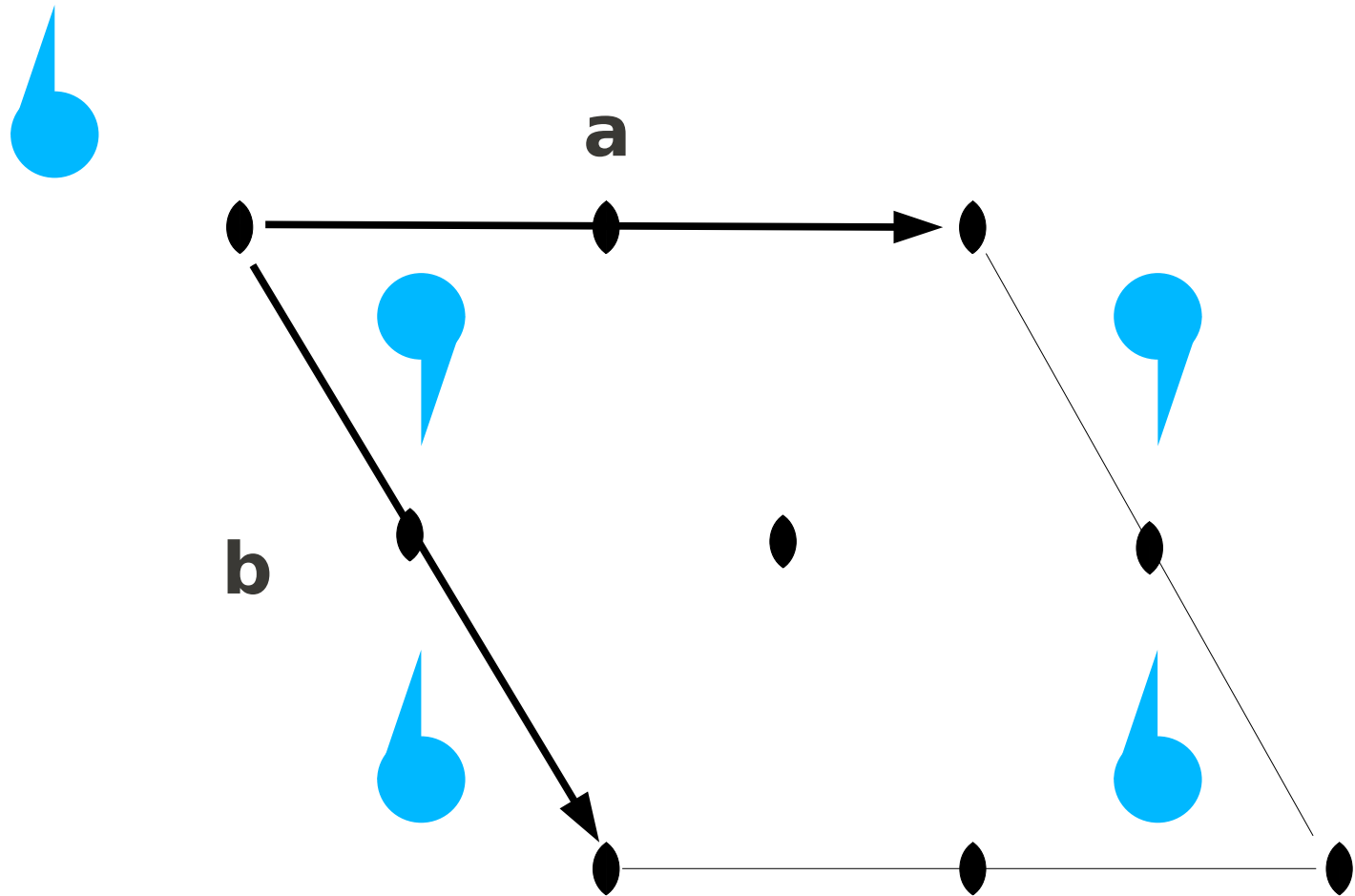
pvz.: $P2_12_12_1$ C2 F432

- 230 erdvinių grupių
- 65 baltymuose sutinkamos erdvinės grupės

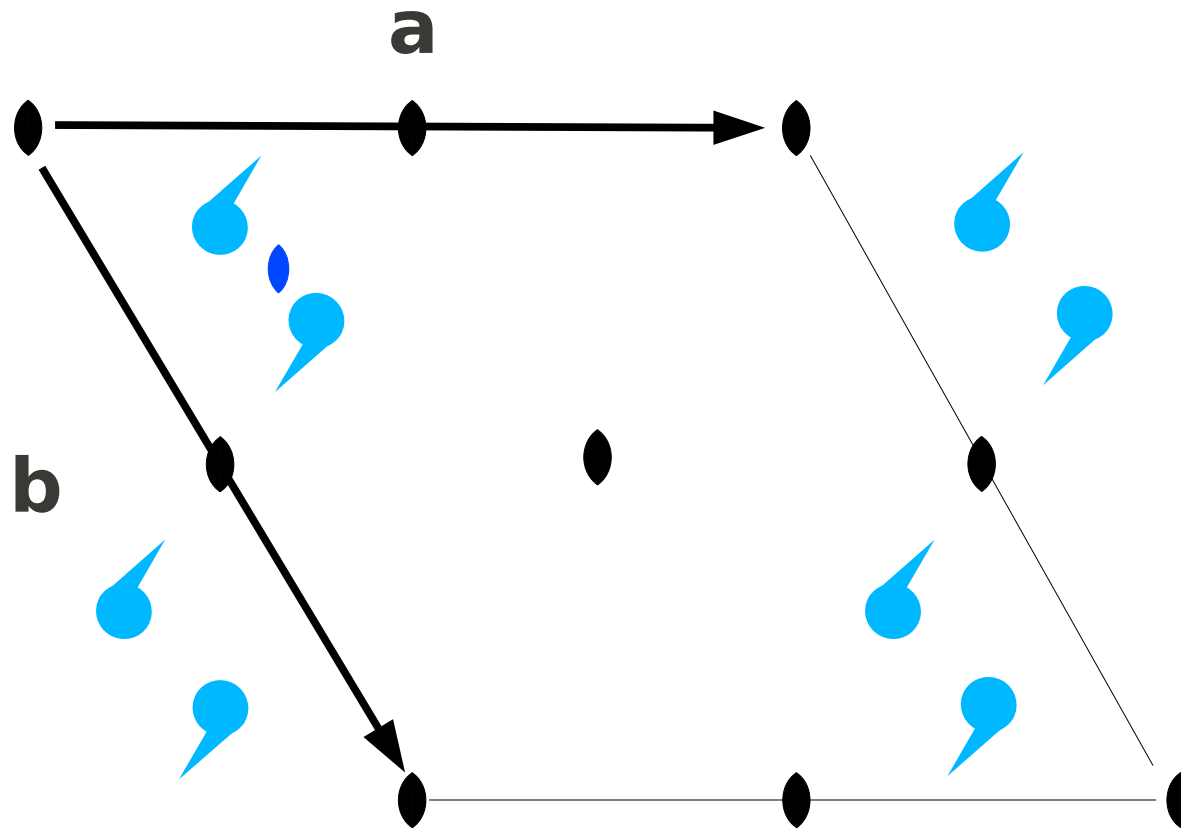
Gardelēs użpildymas



Asimetrinis vienetas



Nekristalografine simetrija



Asimetrinio vieneto ir biologinio multimeru ryšys

- Asimetriniame vienete paprastai būna viena arba kelios baltymo grandinės
- Biologinis multimeras gali sutapti su asimetriniu vienetu, bet gali būti mažesnis arba didesnis ($1/2$, 2 , $1\ 1/2$, ir t.t.)