

# Kiraalse isatiini derivaadi monokristall-röntgendifraktsioon analüüs Bruker Smart X2S ja Rigaku Compact HomeLab difraktomeetritega

Magistritöö

Töö autor: Sandra Kaabel

Juhendaja: Riina Aav, keemiainstituut, dotsent

Kaasjuhendajad: Kaja Ilmarinen (keemiainstituut, teadur) ja Priit Eek (keemiainstituut, doktorant)

## Lühikokkuvõte

Antud magistritöö raames võrreldi kahe difraktomeetri Bruker Smart X2S ning Rigaku Compact HomeLab edukust kiraalse isatiini derivaadi kristallstruktuuri ning absoluutse konfiguratsiooni lahendamisel monokristall-röntgendifraktsioon analüüsiga. Saavutati kristallstruktuurid  $R_1$  [ $F^2 > 2\sigma(F^2)$ ] väärtustega 0,037 ning 0,039 vastavalt Bruker Smart X2S ning Rigaku Compact HomeLab aparatuuridel kogutud difraktsiooniandmetest. Uuritav aine kristalliseerus ortogonaalses süngoonias  $P2_12_12_1$  ruumigrupis. Kristallstruktuuri ehitust mõjutavad enim nõrgad vesiniksidemed aromaatses süsteemiga seotud vesinike ning karbonüülsete hapnike vahel. Absoluutne konfiguratsioon stereogeensel tsentril määrati anomaalse signaali alusel. Enantiomeerses liias on kristallides  $S$  konfiguratsioonis isomeer. Rigaku Compact HomeLab difraktomeetriga kogutud difraktsiooniandmetelt õnnestus modelleerida struktuur kaksikkristallina, milles sisaldub 1-5%  $R$  konfiguratsioonis isomeeri.