

## RESÜMEE

Käesoleva bakalaureusetöö uurimisobjektiks on tsükloheksanohemikukurbituriilid (cycHC) – makrotsükliilised molekulid, millel on võime moodustada supramolekulaarseid komplekse. Töö eesmärgiks oli sünteesida 6-ühikulisi tsükloheksanohemikukurbituriili isomeere ja uurida nende komplekseerumist. Töö käigus identifitseeriti ja eraldati seni avaldamata *inverted-(all-cis)*-cycHC[6], mis tekib saagisega kuni 33%. Isomeeride tekketingimuste uurimisel leiti, et kõige enam mõjutas diastereomeeride moodustumise selektiivsust soolhappe kontsentratsiooni muutmine. Sidumisomaduste uurimiseks teostati NMR tiitrimised (*all-cis*)-, *i-(all-cis)*- ja (*all-R,R*)- tsükloheksanohemikukurbit[6]uriilide ning nende metüleeritud monomeeridega kasutades külaliskompleksina trifluoroäädikhapet. Job'i katsete järgi selgitati välja interaktsioonide stöhhiomeetria, mis varieerus makrotsükliite puhul sõltuvalt kontsentratsioonist 1:1 ja 1:2 vahel ning oli mono-urea derivaatidega 1:1. Poolkukurbituriilidele määratud assotsiatsioonikonstandid näitasid kooperatiivsust teise happemolekuli liitumisel ja kõige tugevam interaktsioon saadi (*all-cis*)-cycHC[6] diastereomeeriga komplekseerumisel,  $K_{11} = 8 \cdot 10^2$  ja  $K_{12} = 1 \cdot 10^6 \text{ M}^{-1}$ .