

Kristina Juhhimenko

## Titaan TADDOLaate-komplekside arvutuslik uurimus

Juhataja: Irina Osadchuk

### **Kokkuvõte**

Antud töö eesmärkideks olid uurida 5-koordinatiivse titaani TADDOLaate-komplekside geomeetriaid, leida fenüül- ja etüülrühmade rotatsioonibarjäärid ja modelleerida esimesed tsüklopropanooli moodustumise etapid.

Uuring näitas, et bidentaate TADDOL eelistab kompleksis aksiaal-ekvatoriaalset positsiooni ning teised monodentaatsed ligandid eelistavad ekvatoriaalset positsiooni. Organomagneesiumkloriidi kasutamine aitas vältida pseudorotatsiooni ligandide ümberpaigutamise ajal. Tulemuste alusel oli leitud iga isomeeri tekimise tõenäosus Boltzmanni jaotuse kaudu.

Etüül- ja fenüülrühmade pööramine näitas, et nende rühmade liikumine molekulis on steeriliselt takistatud lähedal asuvate ligandide poolt. Need steerilised takistused on töös kirjeldatud.

Samuti modelleeriti tsüklopropanooli moodustumise esimesed etapid ja arvutati reaktsioonis osalevate ühendite energia, mille aluseks oli arvutatud iga etapi energia ja koostatud energia bilanss.

Tulemused langevad kokku eelmiste uuringute tulemustega.