

## KOKKUVÕTE

*Cis* ja pööratud *cis*-tsükloheksanopoolkukurbit[6]juriilid on stereoisomeersed makrotsükliilised poolkukurbituriili derivaadid. 2016. aastal kaitstud M. Trunini magistr töö raames oli uuritud nende diastereomeeride tekkimist ning leitud, et enim mõjutab sünteesil nende omavahelist suhet vesinikkloriidi kontsentratsiooni muutmine.<sup>1</sup>

Käesolevas töös interpreeriti Trunini magistr töö raames saadud tulemusi arvutuskeemiliselt. Modelleeriti kloriidiooni mõju tsükloheksanopoolkukurbit[6]juriilide moodustumise erinevatele etappidele. Kõigi uuritud molekulide geomeetriad optimeeriti ja leiti nende energiad. Kõik arvutused sooritati tihedusfunktsionaalide teooria meetodil, kasutades funktsionaali BP86<sup>15-17</sup>, baasikomplekti def2-TZVP<sup>18</sup> ja tarkvarapaketti Turbomole 6.3<sup>22</sup>.

Töö tulemusena selgus, et *cis*-tsükloheksanopoolkukurbit[6]juriil on termodünaamiliselt stabiilsem kui pööratud *cis*-tsükloheksanopoolkukurbit[6]juriil ning kloriidiooni lisamine soodustab *cis* isomeeri teket. Olulisimaks kujunes asendatud poolkukurbit[6]juriilide moodustumise eelviimase etapi ehk oligomeeride tsükliseerumise modelleerimine. Modelleeriti viis isomeerset kuuest metüleensildadega ühendatud *cis*-4,5-tsükloheksanoetüleenuurea monomeerist koosnevat oligomeeri – üks *cis* ja neli *i-cis*-i –, moodustades ahela ühte otsa metüleenrühma lisamisega positiivse laenguga iminiumi. Kloriidiooni lisamine viis kõikide oligomeeride barjäärivaba tsükliseerumiseni ning saadud vaheühendite arvutatud suhtelised energiad erinesid üksteisest vaid kuni 7 kJ·mol<sup>-1</sup> võrra, mis näitab, et see etapp mõjutab enim eri isomeeride tekkimist.