

## Kokkuvõte

Nobeli keemiaauhind 1987. aastal anti ühiselt Donald J. Cramile, Jean-Marie Lehnile ja Charles J. Pedersenile "suure selektiivsusega struktuurispetsiifiliste interaktsioonidega molekulide arendamise ja kasutamise eest" nende töö andis tõe supramolekulaarse keemia arengule. Võõrustaja-külalise keemia, supramolekulaarse keemia alamvaldkond, uurib keerulisi koostoimeid võõrustajamolekulide, nagu makrotsüklid või molekulaarsed puurid, ja külalismolekulide või ionide vahel, mis paiknevad nende õõnsustes. Viimastel aastatel on hemikukurbituriilid (HC), muutunud paljutootavateks võõrustajamolekulideks. Hemikukurbituriilid, makrotsükliliste molekulide klass, mida iseloomustab nende ainulaadne kuju, mis meenutab "poolikut" kukurbituriili, on poolsuletud kausitaolise struktuuriga, mille sisemises õõnsuses asetsevad karbonüül- või uurearühmad, mis võimaldavad neil selektiivselt interakteeruda mitmesuguste külalismolekulidega, eriti anioonidega. Hemikukurbituriilid on leidnud kasutust valdkondades nagu anioonide tuvastamine, molekulaarne kapseldamine ja ionide transport, muutes need huvipakkuvaks objektiks supramolekulaarse keemia ja materjaliteaduse valdkonnas. Selle lõputöö käigus viidi läbi arvutuslik uuring, eesmärgiga tuvastada skaleeritav meetod, mis suudab usaldusväärset ennustada anionide ja monobiotinüülitud kiraalne hemikukurbit[8]uriili (mixHC[8]) seondumisafiinsuse järjestust. Kuigi soovitud anioonide järjestust ei saavutatud, andis uuring parema ülevaate sidumisafiinsuse järjestust mõjutavatest teguritest.