

Töö pealkiri (eesti keeles): Tsükloheksüülhemikukurbit[8]uriili komplekside stabiilsus sõltuvalt külalisaniooni suuruselt

Töö pealkiri (inglise keeles): Dependence of stability of cyclohexylhemicucurbit[8]uril complexes on the size of the guest anion

Autor: Viktoria Tisler

Juhendaja: Mario Öeren

Kokkuvõte

Tsükloheksüülhemikukurbit[8]uriil võib moodustada võõrustaja-külaline komplekse erinevate külalismolekulidega. Antud töö käigus uuriti kommertsiaalsete külalisanioonidega komplekseeruvuse tugevust sõltuvalt külalise suuruselt. Kõik uuringud teostati DFT abil. Kõikide molekulide geomeetriad optimeeriti ja arvutati nende nullpunkt energiad. Vastavad energiad arvutati programmi Turbomole 6.5 abil.

Töö käigus selgus, et kõige tugevamad võõrustaja-külalisaniooni kompleksid moodustuvad vesinikfosfaadi ja oksalaadiga. Kõige nõrgem komplekseerumine oli fosfoanhappe dietüülestri aniooni ja väävelhappe isopropüülestri aniooni korral. Nõrgema komplekseerumise põhjuseks on antud anioonide asendusrühmad ja nende geomeetiline ehitus.

Huvitavaks tulemuseks oli fosforhappe monopropüülestri aniooniga komplekseerumine. Vaatamata sellele, et antud külalisaniooni ruumala oli suur, toimus komplekseerumine tugevalt. Tulemuse põhjuseks on lineaarne propüülrühm, mis ulatub tsüklist „sabana“ välja.