

## KOKKUVÕTE

Tsükloheksanohemikukurbit[8]uriil on võõrustaja molekul, mille sisse seonduvad erinevad külalismolekulid ning tekib külalis-võõrustaja kompleks. Töö eesmärk oli uurida külalisioonide seonduvistugevust cycHC[8]-ga. Selleks arvutati suhteline energia metanoolis, dipoolmomendid ning koostati MEP joonised. Samuti leiti cycHC[8] kuju muutus kompleksi tekkides. Elektronstruktuuri väärtused arvutati tihedusfunktsionaalide teooriat kasutades Turbomole 6.6-ga<sup>17</sup> ja MEPid Gaussian09-ga.<sup>23</sup>

Kontrolliti kahte hüpoteesi. Esiteks, mida ühtlasemalt on laeng jaotunud aines, seda väiksem on sidumisenergia ja suurem *Ka* väärtus. Teiseks hüpoteesina kontrolliti, kas väiksema ruumalaga ained seonduvad cycHC[8] kompleksi tugevamalt.

Uurimistöö tulemusena selgus, et kõige negatiivsema sidumisenergia väärtuse andis trifluoroetaanhape ruumalaga 61 Å<sup>3</sup>. Kõrgeima sidumisenergiaga (seonduv kõige nõrgemalt) oli uuritud ainete hulgas heksafluoroisopropanool, selle ruumala on üks suurimaid (88 Å<sup>3</sup>). cycHC[8] kuju muutus kõige rohkem 2,5-dihüdrofuraani ja THF mõjul ning praktiliselt muutumatuks jäi cycHC[8] trifluoroetaanhappe ja heksafluoroisopropanooli seondumise korral.

Huvitavad olid THF ja 2,5-dihüdrofuraani tulemused, kus 2,5-dihüdrofuraan seonduv nõrgemalt, kuid omab väiksemat ruumala ning tänu kaksiksideme elektronegatiivsele tsentrile on laeng jaotunud ühtlasemalt.