

НОВЫЕ МАКРОЦИКЛИЧЕСКИЕ РЕЦЕПТОРЫ НА ПЕРТЕХНЕТАТ- И ПЕРРЕНАТ-ИОНЫ

^a Г.В. Колесников, ^b Г.В. Лавров, ^a Е.А. Катаев, ^b В.Н. Хрусталеv,
^b К.Э. Герман, ^b И.Г. Тананаев, ^a Ю.А. Устынюк

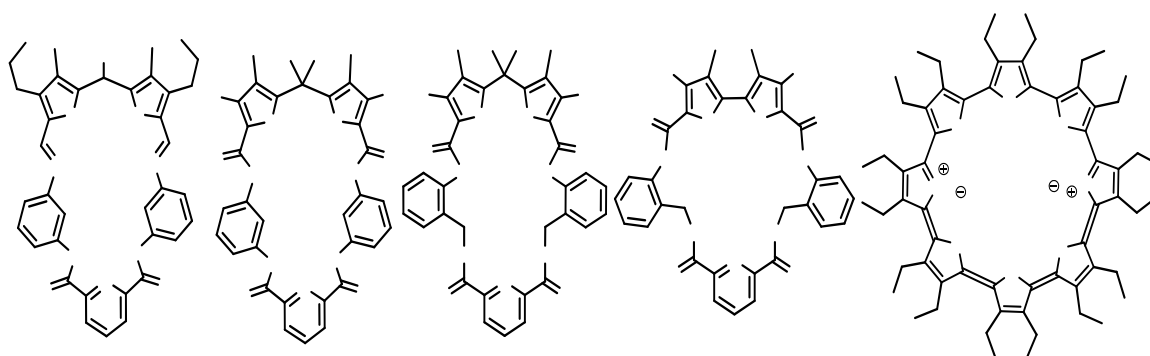
^a МГУ им. М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Ленинские горы, д.1, стр. 3

^b ИИЭОС РАН, 119991 Москва, ул. Вавилова, д. 28

^b ИФХЭ РАН, 119991 Москва, Ленинский проспект, д.31, корп. 4

e-mail: grinjah@gmail.com

Долгоживущий радионуклид ^{99}Tc ($\zeta_{1/2} = 2.13 \times 10^5$ лет) образуется в реакторах атомных электростанций, как один из основных продуктов деления ^{235}U и ^{239}Pu и стабилизируется в процессе переработки ОЯТ в виде пертехнетат-иона $\text{TcO}_4^{(-)}$. Получаемые в специальных генераторах радионуклиды $^{99\text{m}}\text{Tc}$ ($\zeta_{1/2} = 6,02$ час) и ^{188}Re ($\zeta_{1/2} = 17$ час), также выделяемый в виде изоструктурного перренат-иона $\text{ReO}_4^{(-)}$, широко используются в ядерной медицине. Создание эффективных и высокоселективных рецепторов на эти тетраэдрические анионы представляет исключительный интерес для обеих областей применения. На основании результатов суперкомпьютерного моделирования с использованием методов квантовой химии высокого уровня нами осуществлен отбор оптимальных структур искусственных макроциклических рецепторов для этих анионов, разработана стратегия их сборки из укрупненных блоков- предшественников, а затем проведен синтез серии макроциклов с помощью темплатных и бестемплатных методов. Результаты теоретического прогноза подтверждены измерением констант связывания анионов с помощью титрований в УФ-видимой области и ^{99}Tc -ЯМР титрований: полученные рецепторы проявляют высокое сродство к пертехнетат- и перренат-ионам на уровне рекордных значений ($K_a \approx 10^5 \text{ M}^{-1}$) и уникальную селективность. Структуры комплексов «хозяин – гость» установлены методами РСА и ЯМР. В экстракционных экспериментах с модельными водными растворами и реальными образцами воды озера Карачай, достигнуто полное извлечение пертехнетата в органическую фазу.



Синтезированные макроциклические рецепторы.