

ПОЛНОЕ РЕНТГЕНОВСКОЕ РАССЕЙАНИЕ И ФУНКЦИЯ ПАРНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ В СТРУКТУРНОМ АНАЛИЗЕ ПОЛИЯДЕРНЫХ КОМПЛЕКСОВ

Цымбаренко Д.М.¹@

¹*Химический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова, Москва 119991,
Россия*

@tsymbarenko@gmail.com; tsymbarenko@inorg.chem.msu.ru

Полиядерные координационные соединения редкоземельных элементов (РЗЭ) привлекают повышенное внимание в последнее время в связи с необычными магнитными и люминесцентными свойствами. В последние годы в координационной химии РЗЭ активно развивается направление создание координационных полимеров и пористых металл-органических координационных полимеров РЗЭ (MOF) с полиядерными вторичными строительными блоками. Высокая структурная гибкость соединений РЗЭ проявляется в большом разнообразии кристаллических структур, проявлению полиморфизма, структурных фазовых переходов. Кроме того, слабость межмолекулярных взаимодействий по сравнению с координационными зачастую приводит к нарушению или полному исчезновению дальнего порядка в структуре. Эти особенности требуют особого подхода к исследованию строения таких соединений.

Метод полного рентгеновского рассеяния (Total x-ray Scattering) с анализом функции парного распределения (Pair Distribution Function) позволяет исследовать строение кристаллических, аморфных материалов и даже растворов. В координационных соединениях РЗЭ тяжелые атомы металла вносят определяющий вклад в PDF, что позволяет извлекать структурную информацию непосредственно из экспериментальных данных. Широкому использованию метода TS-PDF мешают повышенные требования к качеству и полноте данных рентгеновского рассеяния, которые могли быть удовлетворены с использованием жесткого рентгеновского излучения на самых современных синхротронах III и IV поколения. Нами разработаны подходы к получению и анализу данных PDF с использованием лабораторного монокристаллического дифрактометра [1].

Эффективность подхода TS-PDF показана для соединений РЗЭ различной топологии в твердом состоянии и в растворе. Так, изучена самосборка и строение в растворе полиядерных молекулярных

кластеров $[\text{Ln}_4(\text{OH})_4(\text{tfa})_3(\text{deta})_4(\text{detaH}_2)_2](\text{tfa})_3$ [1]. Для цепочечных координационных полимеров $[\text{Ln}_4(\text{OH})_2(\text{Piv})_{10}(\text{H}_2\text{O})_2]_\infty$ исследовано переключение упаковки через промежуточную мезо-кристаллическую фазу [2]. Исследованы различия в структурной динамике двух политипов слоистых пропионатов РЗЭ $[\text{Ln}_2(\text{Prop})_6(\text{H}_2\text{O})_2]_\infty$ [3]. Изучены структурные изменения, происходящие в металл-органических координационных полимерах (MOF) $[(\text{CH}_3)_2\text{NH}]_2[\text{Ln}_2(\text{bdc})_4(\text{DMF})_2](\text{H}_2\text{O})_2$ при удалении молекул гостей [4].

Работа выполнена при поддержке РФФ (проект №22-73-10089)

[1] D. Tsymbarenko et al., 2022, *J. Appl. Cryst.* **55**. 890–900

[2] D. Grebenyuk et al., 2021, *Inorg. Chem.* **60**. 8049–8061

[3] M. Kendin, M. Shaulskaya, D. Tsymbarenko, 2024, *Cryst. Growth Des.* **24**. 1474–1484

[4] D. Grebenyuk et al., 2023. *ACS Omega.* **8**. 50, 48394–48404.