**Применение методов политермической рентгеновской дифракции для поиска новых соединений с аномальным тепловым расширением**

***Кендин М.П.1,2, Шаульская М.Д.2, Цымбаренко Д.М.2***

*Аспирант, 2 год обучения*

*1Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*факультет наук о материалах, Москва, Россия*

*2Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail:* [*mr.kendin@mail.ru*](mailto:ivanov@yandex.ru)

Материалы, демонстрирующие необычную структурную динамику и термомеханический отклик, представляют прикладную ценность для создания микромашин и микроактуаторов, а также для электронных компонентов с переменной емкостью. Целью настоящей работы является рентгеноструктурное исследование систем на основе пропионатов (Prop– = C2H5COO–) металлов, поскольку для подобных соединений ранее сообщалось о существовании структурных фазовых переходов, в том числе связанных с возникновением сегнетоэлектрических свойств в низкотемпературной фазе.

В рамках работы получено большое семейство моно- и смешаннометаллических пропионатов металлов молекулярного и полимерного строения. В исследуемых системах обнаружен ряд кристаллических фаз, которые, согласно данным рентгеновской дифракции и полного рентгеновского рассеяния, демонстрируют необычную структурную динамику, обусловленную конформационным вращением алифатических групп в анионных лигандах. Анализ дифракционных данных был выполнен с применением оригинального алгоритма реставрации, позволяющего уменьшить размытие сигнала за счет приборного уширения и немонохроматичности первичного пучка.

Для пропионатов РЗЭ обнаружено семейство соединений [Ln2(H2O)2Prop6]∞ слоистого строения, представленное тремя структурными типами (**I**, **II** и **III**), для которых по данным политермической рентгеновской дифракции на порошках и монокристаллах выявлено анизотропное тепловое расширение. В частности, соединения типа **I** в триклинной модификации демонстрируют колоссальные отрицательные (–430 МК–1) и положительные (+900 МК–1) значения линейных КТР вдоль главных осей, входящие в десятку рекордных среди материалов с аномальным тепловым расширением [1].

Среди смешаннометаллических пропионатов синтезирован трехмерный координационный полимер состава [HKCu2Prop6]∞, претерпевающий сверхструктурное упорядочение мартенситного типа в диапазоне температур 195–200 K, которое, однако, не оказывает влияния на энергию обмена внутри «китайских фонариков» (2J ~ –333 см–1) [2]. Дополнительно в работе были обнаружены фазовые переходы типа порядок-беспорядок для ряда пропионатов металлов молекулярного и ионного строения.

Таким образом, в работе проведено подробное кристаллохимическое исследование систем на основе пропионатов РЗЭ, для некоторых представителей которых выявлены аномальное тепловое расширение и фазовые переходы.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 22-73-10089.*

**Литература**

1. Kendin, M.; Shaulskaya, M.; Tsymbarenko, D. Polytypism and Packing-Dependent Colossal Positive and Negative Thermal Expansion in a 2D Layered Cerium-Based Coordination Polymer // Cryst. Growth. Des. 2024. Vol. 24. P. 1474–1484.

2. Kendin, M.; Nikiforov, A.; Svetogorov, R.; Degtyarenko, P., Tsymbarenko, D. A 3D-Coordination Polymer Assembled from Copper Propionate Paddlewheels and Potassium Propionate 1D-Polymeric Rods Possessing a Temperature-Driven Single-Crystal-to-Single-Crystal Phase Transition // Cryst. Growt. Des. 2021. Vol. 21. P. 6183–6194.