

# ОТЧЕТ О ПРОДЕЛАННОЙ РАБОТЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОБОРУДОВАНИЯ ИВЦ НГУ

## Аннотация

В независимой части элементарной ячейки кристалла индивидуальной L-аскорбиновой кислоты находится 2 молекулы, имеющие разные по знаку эффективные заряды ( $L\text{-asc}^{q+}$  и  $L\text{-asc}^{q-}$ ) [1]. Ранее были проведены дифракционные эксперименты по определению кристаллической структуры сокристалла L-аскорбиновой кислоты с L-серином ( $L\text{-asc-L-ser}$ ) при значениях давлений в диапазоне от 0.0001 ГПа до 6 ГПа с шагом в 0.5-0.9 ГПа. Также было показано, что данное соединение претерпевает фазовый переход. Была сформулирована гипотеза, что данный переход связан с изменением частичного эффективного заряда молекулы L-аскорбиновой кислоты ( $L\text{-asc}$ ). В настоящей работе для сокристаллов  $L\text{-asc-L-ser}$  в каждой точке, отвечающей различным значениям внешнего гидростатического давления, были рассчитаны эффективные заряды по Малликену и Хиршфельду. Затем был проведен анализ корреляции между геометрией и эффективными зарядами молекулы  $L\text{-asc}$  из сокристалла  $L\text{-asc-L-ser}$  с  $L\text{-asc}^{q+}$  и  $L\text{-asc}^{q-}$

## Тема работы

Влияние гидростатического сжатия на распределение эффективного заряда в сокристаллах L-аскорбиновой кислоты с L-серином

## Состав коллектива

Хайновский Марк Андреевич, аспирант, ЛАБМДЭБТИНХИТ НГУ, исполнитель

Архипов Сергей Григорьевич, к.х.н., руководитель

## Информация о грантах

Грант президента № МК-3681.2022.1.3

## Научное содержание работы

### Постановка задачи:

Под термином "соль" в случае молекулярных кристаллов подразумеваются соединения типа  $A^+B^-$ , где обе молекулы являются низкомолекулярными органическими соединениями. Если не происходит перенос протона с молекулы А на молекулу В, а образуется соединение АВ, то такое соединение называют "сокристалл". Однако молекулы, составляющие структуру сокристалла, могут иметь частичный эффективный заряд, поэтому анализ корреляции между конформацией и эффективным зарядом представляет научный интерес.

Один из наиболее распространенных методов механического воздействия – приложение внешнего гидростатического давления. Этот метод широко используется для влияния на межмолекулярные взаимодействия путем изменения межатомных расстояний в кристаллической структуре, в результате чего могут наблюдаться как анизотропное сжатие структуры, так и полиморфное превращение с образованием новой фазы. Совместное использование квантово-химических расчетов и дифракционных экспериментов позволяет уточнить структурные данные, дополнить данные о расположении атомов соответствующей картиной распределения электронной плотности в кристаллах, а также интерпретировать и даже предсказать физические и химические свойства.

### Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы:

Целью научного исследования является путем внешнего воздействия (увеличения давления от 0.0001 ГПа до примерно 6ГПа с шагом в 0.5-0.9ГПа) вызвать структурные превращения в сокристалле L-аскорбиновой кислоты с саркозином (L-asc-NMG) и уточнить ранее полученные структурные данные для сокристалла L-аскорбиновой кислоты L-серина (L-asc-L-ser). Для каждой точки при давлении эффективные заряды молекулы L-asc всеми или некоторыми из следующих методов: по Малликену, Бейдеру, Хиршфельду. Сопоставить геометрию и эффективные заряды молекулы L-asc из сокристаллов с молекулой аскорбиновой кислоты имеющей положительный эффективный заряд  $l\text{-ascq}^+$  в структуре индивидуальной L-аскорбиновой кислоты и с молекулой аскорбиновой кислоты имеющей отрицательный эффективный заряд  $l\text{-ascq}^-$  в структуре индивидуальной L-аскорбиновой кислоты. Структура индивидуальной L-аскорбиновой кислоты имеет 2 молекулы в независимой части элементарной ячейки -  $l\text{-ascq}^+$  и  $l\text{-ascq}^-$ . Это сравнение подтвердит или опровергнет гипотезу о наличии связи между эффективным зарядом L-аскорбиновой кислоты и геометрией этой молекулы.

### **Расчетная часть:**

Квантово-химическое моделирование эволюции электронной структуры сокристалла L-серина и аскорбиновой кислоты и его изменений в условиях повышенного гидростатического давления до и после структурного фазового перехода проведено методом Кона-Шэма с учетом периодичности электронных волновых функций основного состояния и с полной оптимизацией параметров элементарной ячейки с использованием программного пакета CRYSTAL17 [9]. Структурные свойства молекулярных кристаллов во многом, определяются Н-связями, был выбран обменно-корреляционный функционал PBE0, позволяющий адекватно моделировать параметры элементарной ячейки в кристаллах. Использовался базисный набор 6-31G(d,p) из локализованных атомных орбиталей [24]. Внешнее давление соответствовало точкам: 0; 0,65; 1,14; 1,84; 2,36; 2,93; 3,59; 4,60 и 5,30 ГПа, для которых ранее были получены экспериментальные структурные данные. Refcodes в базе данных CCDC: 2321962, 2321963, 2321958, 2321964, 2321961, 2321959, 2321957, 2321960. В данной работе именно эти данные о параметрах элементарной ячейки и координатах атомов были использованы в качестве исходных для моделирования.

Критерий сходимости по энергии для оптимизации геометрии был равен 10<sup>-10</sup>, градиент RMS <0.0003, смещение RMS <0,0006. SHRINK-фактор, определяющий число k точек в обратном пространстве в схеме Пака–Монкхорста [21], в которых была диагонализирована матрица Кона–Шэма, был равен 8 8. Параметр TOLINTEG, отвечающий за значения интегралов перекрывания, был установлен на 6 6 6 6 12 для разумного компромисса между высокой точностью и расчетной стоимостью вычислений [23]. Все расчеты проведены как с введением дисперсионной поправки D3 по Гримме [18], так и без нее. Расчет ИК колебательных частот показал отсутствие мнимых частот.

### **Методы решения задач научного исследования:**

Расчет при стандартных условиях проводился с использованием обменно-корреляционного функционала **B3LYP**[<sup>1</sup>], широко применяющимся для моделирования различных молекулярных кристаллов. Данный функционал позволяет получать параметры геометрии системы, наиболее хорошо согласуемые с референсными.

Для того, чтобы максимально точно описать системы Н-связей, для молекулярных кристаллов широко используется дисперсионная поправка по Гримме (**D3**) [<sup>2</sup>]. Таким образом, конечный функционал принадлежит семейству DFT-D3 - **B3LYP-D3**.

В качестве базиса использовался полноэлектронный базис **6-31G(d,p)**[<sup>3</sup>]. Наличие поляризационных функций необходимо для наиболее приближенному к реальности описанию систем Н-связей. Данный базис также зарекомендовал себя в различных расчетах

молекулярных систем, представляя собой разумный компромисс между вычислительными ресурсами и точностью.

Значение **SHRINK**-фактора, определяющего количество k-точек в обратном пространстве по схеме Монкхорста-Пака<sup>[4]</sup>, было установлено равным 8.

После получения оптимизированной геометрии необходимо провести расчет колебательных частот, чтобы убедиться в отсутствии первых трех мнимых частот, что является критерием оценки качества предлагаемой стратегии расчета.

## Результаты

### Молекулярные расчеты эффективных зарядов при различном давлении

Значения параметров элементарной ячейки, оптимизированные при квантово-химических расчетах, приведены в табл. 1. Поскольку расчеты проводились для структурной модели при 0 К, для сравнения с расчетными значениями при атмосферном давлении были использованы экспериментальные зависимости параметра и объема элементарной ячейки от температуры. Для этого использовались данные серии температурных экспериментов при 100–300 К, экстраполированные к 0К [1].

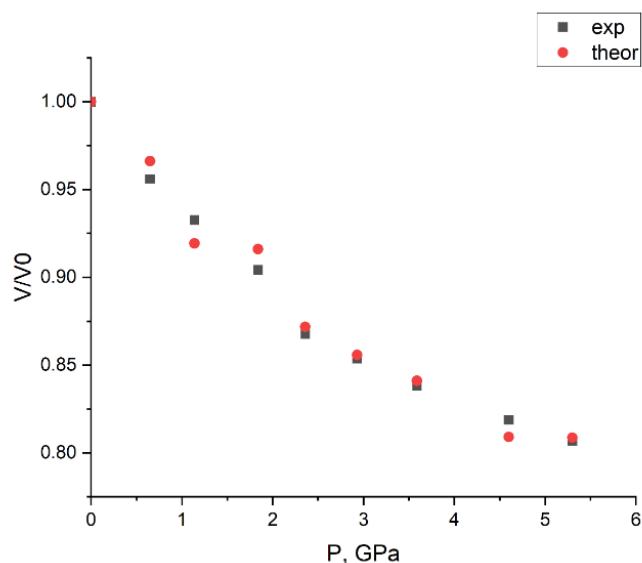
Таблица 1. Сравнение расчетных и экспериментальных параметров элементарной ячейки для L-Ser\_L-asc (ПГС P2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>). Параметры  $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ . Зеленый цвет соответствует экспериментальным данным [1], синий – расчетным данным без D3, красный -расчетным данным с поправкой D3, желтый – данным, полученных экстраполяцией низкотемпературной серии дифракционных экспериментов.

| P,<br>ГПа                                       | a     | b     | c      | V, Å <sup>3</sup> |
|---|-------|-------|--------|-------------------|
| Фаза низкого давления L-Ser_L-asc               |       |       |        |                   |
| 0   | 5.341 | 8.763 | 25.764 | 1205.70           |
|   | 5.352 | 8.768 | 25.594 | 1200.99           |
|   | 5.186 | 8.647 | 25.062 | 1123.69           |
|   | 5.282 | 8.729 | 25.562 | 1178.36           |
| 0.65  | 5.244 | 8.666 | 25.367 | 1152.73           |
|   | 5.261 | 8.728 | 25.268 | 1160.27           |
| 1.14  | 5.191 | 8.607 | 25.170 | 1124.52           |
|   | 5.174 | 8.509 | 25.080 | 1104.15           |
| 1.84  | 5.124 | 8.494 | 25.050 | 1090.21           |
|   | 5.143 | 8.628 | 24.794 | 1100.20           |
| Фаза высокого давления L-Ser_L-asc <sup>P</sup> |       |       |        |                   |
| 2.36  | 5.125 | 8.417 | 24.250 | 1046.07           |
|   | 5.147 | 8.380 | 24.275 | 1047.01           |
| 2.93  | 5.099 | 8.382 | 24.084 | 1029.29           |
|   | 5.131 | 8.358 | 23.967 | 1027.77           |
| 3.59  | 5.070 | 8.339 | 23.903 | 1010.62           |
|   | 5.104 | 8.309 | 23.821 | 1010.11           |
| 4.60  | 5.041 | 8.303 | 23.585 | 987.12            |
|   | 5.049 | 8.226 | 23.402 | 971.73            |
| 5.30  | 5.012 | 8.259 | 23.500 | 972.77            |
|   | 5.039 | 8.278 | 23.284 | 971.19            |

Сравнение результатов расчета параметров и объема элементарной ячейки с экспериментальными значениями показало, что их лучшее совпадение достигается без использования в расчете дисперсионной поправки.

Так как эмпирическая дисперсионная поправка не изменяет волновую функцию системы, а лишь добавляет вклад в общую энергию, можно прийти к выводу, что функционалы семейства PBE без дисперсионной поправки более точно описывают структурные свойства органических кристаллов, тогда как дисперсионные поправки склонны переоценивать вклад Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий.

Изменение относительного объема для экспериментальных и теоретических данных (без D3) позволяют говорить об адекватном моделировании структурных особенностей



сокристаллов (Рис 1.). Скачок удельного объема между 1.84 и 2.36 ГПа соответствует фазовому переходу между фазами L-ser\_L-asc и L-Ser\_L-asc<sup>P</sup>.

Рис 1. Изменение относительного объема сокристалла L-ser\_L-asc при гидростатическом сжатии для экспериментальной серии [1] и расчетных данных (6-31G(d,p) PBE0)

В результате фазового перехода происходит поворот -ОН фрагмента боковой группы L-аскорбиновой кислоты с разрывом и образованием новых Н-связей (рис. 2) [1]

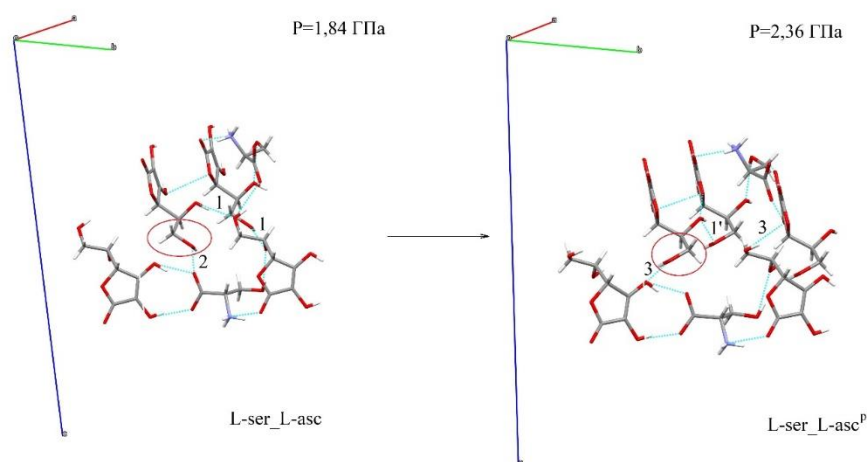
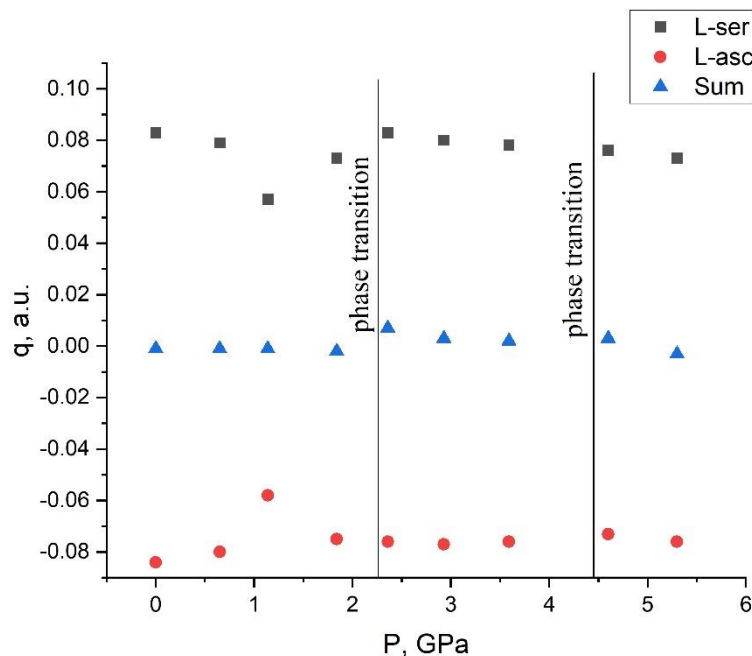


Рис.2 Фрагменты структуры L-ser\_L-asc до фазового перехода (1,84 ГПа) и после фазового перехода (2,36 ГПа). В результате фазового перехода происходят поворот –ОН фрагмента цвиттериона L-серина (фрагмент выделен кружком) и разрыв водородных связей 1 и 2 с образованием новых водородных связей 1' и 3

В то же время из экспериментальных данных, на основе скачкообразного изменения параметра элементарной ячейки  $c$  и, как следствие, объема, можно предположить о наличии второго фазового перехода между 3.59 и 4.60 ГПа. Так как для фазовых переходов характерно перераспределение электронной плотности в кристаллах, структурные изменения будут сопровождаться изменением общего эффективного



заряда сокристалла. Проведен расчет атомных зарядов по Малликену и рассчитан эффективный заряд для сокристаллов L-ser\_L-asc в различных точках внешнего давления (таблица 4). Полученные результаты не позволяют говорить о перезарядке сокристалла, как системы, после достижения внешнего давления 1.84 ГПа (Рис. 2.). Несмотря на это, наблюдается перераспределение атомного заряда по его коформерам (L-ser и L-asc) соответственно.

Рис 4. Распределение эффективного заряда коформеров (L-asc и L-ser) и общего эффективного заряда сокристалла в зависимости от приложенного внешнего давления. Прямые линии соответствуют предполагаемым фазовым переходам.

Изменение эффективного заряда коформеров сокристалла в зависимости от давления свидетельствует о сохранении знака заряда на всем диапазоне давлений. Несмотря на это, «перезарядки» общего эффективного заряда для сокристалла не наблюдается. Несмотря на разницу зарядов при переходе между 1,84 и 2,36 ГПа  $\Delta q^{L-asc}_{1,84 \rightarrow 2,36} = -0,001$   $\Delta q^{L-ser}_{1,84 \rightarrow 2,36} = 0,010$  и  $\Delta q^{L-ser-L-asc}_{1,84 \rightarrow 2,36} = 0,009$ , подобные изменения слишком малы, чтобы можно было говорить о перезарядке. В то же время можно сказать о перераспределении атомных зарядах в сокристалле L-asc-L-ser.

Так, заряд на атомах C9, O9 и H9 в молекуле L-аскорбиновой кислоты изменяется:  $\Delta q^{C9}_{1,84 \rightarrow 2,36} = 0,007$ ,  $\Delta q^{O9}_{1,84 \rightarrow 2,36} = 0,015$  и  $\Delta q^{H9}_{1,84 \rightarrow 2,36} = -0,009$  соответственно. В то же время изменяется заряд на атоме L-серина O1, образующим водородную связь 2, которая разрывается при фазовом переходе  $\Delta q^{O1}_{1,84 \rightarrow 2,36} = -0,019$ . Образование новых связей 3 и 1' сопровождается изменением заряда на атомах O8 и H6 в молекуле L-аскорбиновой кислоты  $\Delta q^{O8}_{1,84 \rightarrow 2,36} = 0,026$   $\Delta q^{H6}_{1,84 \rightarrow 2,36} = 0,034$ . Подобные изменения связаны прежде всего с перераспределением электронной плотности в ходе фазового перехода, что связано со структурными особенностями фазового перехода, а именно поворотом -ОН фрагмента боковой группы L-аскорбиновой кислоты.

Таким образом, изменение связывания в системе L-ser\_L-asc ведет к неизбежному изменению эффективного заряда обоих коформеров, но не ведет к перезарядке сокристалла.

В то же время, между внешними давлениями 4,60 ГПа и 5,30 ГПа также наблюдается смена эффективного заряда, что позволяет нам предположить о наличии второго фазового перехода в системе L-asc-L-ser, уточнение механизма которого может стать отправной точкой для будущих исследований

Таблица 4. Распределение заряда по Малликену

|           | q, a.e.    |            |            |            |            |            |            |            |            |
|-----------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|
| P,<br>ГПа | 0          | 0,65       | 1,14       | 1,84       | 2,36       | 2,93       | 3,59       | 4,60       | 5,30       |
| L-ser     |            |            |            |            |            |            |            |            |            |
| O1        | -<br>0,582 | -<br>0,584 | -<br>0,583 | -<br>0,583 | -<br>0,602 | -<br>0,602 | -<br>0,603 | -<br>0,603 | -<br>0,604 |
| O2        | -<br>0,648 | -<br>0,651 | -<br>0,655 | -<br>0,655 | -<br>0,621 | -<br>0,621 | -<br>0,619 | -<br>0,618 | -<br>0,618 |
| O3        | -<br>0,609 | -0,61      | -<br>0,585 | -<br>0,611 | -0,61      | -<br>0,611 | -<br>0,612 | -<br>0,614 | -<br>0,615 |
| N1        | -<br>0,609 | -<br>0,611 | -<br>0,581 | -<br>0,612 | -<br>0,609 | -<br>0,614 | -<br>0,616 | -0,62      | -<br>0,623 |
| C1        | 0,636      | 0,639      | 0,642      | 0,640      | 0,631      | 0,632      | 0,632      | 0,634      | 0,634      |
| C2        | -<br>0,151 | -<br>0,152 | -<br>0,157 | -0,15      | -<br>0,139 | -<br>0,139 | -<br>0,139 | -<br>0,141 | -<br>0,141 |
| C3        | 0,018      | 0,014      | 0,018      | 0,005      | 0,001      | 0,003      | 0,005      | 0,008      | 0,010      |
| H1A       | 0,398      | 0,398      | 0,388      | 0,401      | 0,399      | 0,399      | 0,399      | 0,399      | 0,400      |
| H1B       | 0,389      | 0,393      | 0,376      | 0,397      | 0,398      | 0,401      | 0,403      | 0,408      | 0,408      |
| H1C       | 0,380      | 0,380      | 0,369      | 0,378      | 0,375      | 0,374      | 0,374      | 0,372      | 0,373      |
| H2        | 0,180      | 0,180      | 0,182      | 0,178      | 0,172      | 0,172      | 0,170      | 0,170      | 0,170      |
| H3A       | 0,167      | 0,168      | 0,162      | 0,169      | 0,164      | 0,165      | 0,165      | 0,166      | 0,166      |
| H3B       | 0,131      | 0,130      | 0,125      | 0,128      | 0,143      | 0,143      | 0,143      | 0,145      | 0,146      |
| H3        | 0,383      | 0,385      | 0,356      | 0,388      | 0,383      | 0,384      | 0,386      | 0,386      | 0,387      |
| L-asc     |            |            |            |            |            |            |            |            |            |
| C4        | 0,615      | 0,613      | 0,605      | 0,608      | 0,623      | 0,62       | 0,619      | 0,616      | 0,617      |
| C5        | 0,194      | 0,199      | 0,177      | 0,202      | 0,192      | 0,207      | 0,209      | 0,219      | 0,22       |
| C6        | 0,326      | 0,329      | 0,375      | 0,338      | 0,35       | 0,339      | 0,34       | 0,336      | 0,338      |
| C7        | 0,049      | 0,042      | 0,012      | 0,031      | 0,045      | 0,044      | 0,042      | 0,041      | 0,040      |
| C8        | 0,143      | 0,141      | 0,142      | 0,135      | 0,087      | 0,086      | 0,087      | 0,087      | 0,087      |
| C9        | -<br>0,003 | 0,001      | 0,02       | 0,016      | 0,023      | 0,025      | 0,025      | 0,026      | 0,028      |
| O4        | -<br>0,556 | -<br>0,557 | -<br>0,564 | -<br>0,558 | -<br>0,556 | -<br>0,556 | -<br>0,557 | -<br>0,559 | -<br>0,559 |
| O5        | -<br>0,626 | -<br>0,628 | -<br>0,614 | -<br>0,631 | -<br>0,633 | -<br>0,635 | -<br>0,636 | -<br>0,638 | -<br>0,638 |
| O6        | -<br>0,599 | -<br>0,601 | -<br>0,589 | -<br>0,604 | -<br>0,672 | -<br>0,673 | -<br>0,675 | -<br>0,680 | -<br>0,680 |
| O7        | -<br>0,484 | -<br>0,483 | -<br>0,474 | -0,48      | -<br>0,497 | -<br>0,498 | -<br>0,499 | -<br>0,501 | -<br>0,503 |
| O8        | -<br>0,639 | -<br>0,641 | -<br>0,619 | -<br>0,644 | -<br>0,618 | -<br>0,619 | -<br>0,619 | -<br>0,622 | -<br>0,621 |
| O9        | -<br>0,627 | -<br>0,631 | -<br>0,624 | -<br>0,638 | -<br>0,623 | -<br>0,623 | -<br>0,623 | -<br>0,624 | -<br>0,622 |
| H5        | 0,385      | 0,386      | 0,364      | 0,389      | 0,397      | 0,398      | 0,4        | 0,403      | 0,401      |

|     |       |       |       |       |       |       |       |       |       |
|-----|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| H6  | 0,402 | 0,404 | 0,397 | 0,406 | 0,440 | 0,441 | 0,443 | 0,448 | 0,447 |
| H7  | 0,164 | 0,167 | 0,176 | 0,171 | 0,16  | 0,161 | 0,161 | 0,163 | 0,164 |
| H8  | 0,394 | 0,398 | 0,389 | 0,404 | 0,406 | 0,407 | 0,408 | 0,411 | 0,409 |
| H8A | 0,123 | 0,123 | 0,123 | 0,125 | 0,148 | 0,148 | 0,149 | 0,151 | 0,152 |
| H9  | 0,374 | 0,376 | 0,369 | 0,379 | 0,370 | 0,370 | 0,370 | 0,372 | 0,370 |
| H9A | 0,161 | 0,16  | 0,152 | 0,154 | 0,141 | 0,14  | 0,137 | 0,146 | 0,145 |
| H9B | 0,12  | 0,122 | 0,125 | 0,122 | 0,141 | 0,141 | 0,143 | 0,132 | 0,129 |

### **Выводы:**

В данной работе установлены закономерности между структурными изменениями в ходе фазового перехода между фазами низкого и высокого давления сокристаллов L-ser\_L-asc и изменением общего эффективного заряда системы.

Так, изменение сетки водородных связей в результате перехода между фазами L-ser\_L-asc и L-ser\_L-asc<sup>P</sup>, которое в свою очередь связано с перераспределением электронной плотности на атомах, участвующих в образовании этих связей, непременно ведет к изменению атомных зарядов коформеров. Подобное изменение зарядов оказывается существенным при образовании новых связей 3 и 1', так как именно они вносят больший вклад в изменение эффективного заряда L-аскорбиновой кислоты. В свою очередь разрыв водородной связи 2 приводит к значительным изменениям эффективного заряда L-серина. Несмотря на то, что в совокупности данные изменения зарядов не ведут к перезарядке сокристалла L-ser\_L-asc в ходе фазового перехода, можно судить о значительности эффекта структурной перестройки сокристалла. Таким образом, высказанное ранее предположение о перезарядке сокристалла в ходе фазового перехода не подтверждается.

Вместе с тем интересным результатом является (пусть и незначительная по величине) смена знака заряда сокристалла между значениями 4,60 ГПа и 5,30 ГПа. Важно отметить, что структурные изменения при таком изменении эффективного заряда незначительны. Поэтому установления причин этого явления может являться отправной точкой для будущих исследований.

### **Эффект от использования кластера в достижении целей работы**

Полученный результат в дальнейшем позволит нам провести расчеты для всех экспериментально полученных при высоком давлении данных с полной оптимизацией геометрии кристалла, для получения точных результатов о зарядовом состоянии конформаций L-asc и сокристалла в целом.

Эффект от использования кластера в достижении целей работы

Все программные расчеты с использованием CRYSTAL17 проведены на кластере НГУ. Это позволяет, с одной стороны, добиться меньшего времени расчета системы, а с другой стороны, позволяет расширить возможности благодаря большим ресурсам кластера.

### **Перечень публикаций:**

- Стендовый доклад: II Школа молодых ученых «Применение синхротронного излучения для решения задач биологии», Новосибирск, 25.10.2023-27.10.2023
- В печать подготовлена статья в ЖСХ



## Список литературы:

1. Архипов С. Получение сокристаллов и солей аминокислот с органическими кислотами и сравнение их структуры и свойств со структурами и свойствами исходных компонентов 2015.
2. Boeyens J. C. A., Ogilvie J. F. Models, mysteries, and magic of molecules / J. C. A. Boeyens, J. F. Ogilvie, Dordrecht: Springer, 2008.
3. Boldyrev V. V. Mechanochemistry and Mechanical Activation // Materials Science Forum. 1996. (225–227). С. 511–520.
4. Boldyreva E. V. High-pressure studies of the hydrogen bond networks in molecular crystals // Journal of Molecular Structure. 2004. № 1–3 (700). С. 151–155.
5. Boldyreva E. V. High-pressure diffraction studies of molecular organic solids. A personal view // Acta Cryst Sect A. 2007. № 1 (64). С. 218–231.
6. Boldyreva E. V. Dynamics of Mechanochemical Processes NATO Science for Peace and Security Series A: Chemistry and Biology / под ред. J. A. K. Howard [и др.], Dordrecht: Springer Netherlands, 2014. С. 77–89.
7. Coduri M. [и др.]. Band Gap Engineering in  $\text{MASnBr}_3$  and  $\text{CsSnBr}_3$  Perovskites: Mechanistic Insights through the Application of Pressure // The Journal of Physical Chemistry Letters. 2019. № 23 (10). С. 7398–7405.
8. Dar S. A. [и др.]. DFT investigation on electronic, magnetic, mechanical and thermodynamic properties under pressure of some  $\text{EuMO}_3$  ( $M = \text{Ga, In}$ ) perovskites // Materials Research Express. 2017. № 10 (4). С. 106104.
9. Dovesi R. [и др.]. Quantum-mechanical condensed matter simulations with CRYSTAL // WIREs Computational Molecular Science. 2018. № 4 (8). С. e1360.
10. Drozd K. V. [и др.]. A combined experimental and theoretical study of miconazole salts and cocrystals: crystal structures, DFT computations, formation thermodynamics and solubility improvement // Physical Chemistry Chemical Physics. 2021. № 21 (23). С. 12456–12470.
11. Evtushenko D. N. [и др.]. A cocrystal of  $\text{L-ascorbic acid}$  with picolinic acid: the role of  $\text{O—H...O}$ ,  $\text{N—H...O}$  and  $\text{C—H...O}$  hydrogen bonds and  $\text{L-ascorbic acid}$  conformation in structure stabilization // Acta Crystallographica Section B Structural Science, Crystal Engineering and Materials. 2020. № 6 (76). С. 967–978.
12. Faridi M. A. [и др.]. Pressure induced band-gap tuning in  $\text{KNbO}_3$  for piezoelectric applications: Quantum DFT-GGA approach // Chinese Journal of Physics. 2018. № 4 (56). С. 1481–1487.
13. Khainovsky M. A., Boldyreva E. V., Tsirelson V. G. Evolution of the Electronic Structure and Elastic Properties of  $\beta$ -glycine under the Influence of External Hydrostatic Pressure: Quantum Chemical Modeling // SIBERIAN JOURNAL OF PHYSICS. 2023. № 1 (18). С. 61–88.
14. Kumar A., Nanda A. In-silico methods of cocrystal screening: A review on tools for rational design of pharmaceutical cocrystals // Journal of Drug Delivery Science and Technology. 2021. (63). С. 102527.
15. Liu Z. [и др.]. DFT study of pressure effects in molecular crystal 4,10-dinitro-2,6,8,12-tetraoxa-4,10-diazatetracyclo-[5.5.0.0<sup>5,9</sup>.0<sup>3,11</sup>]-dodecane // Canadian Journal of Chemistry. 2014. № 7 (92). С. 616–624.
16. Manin A. N. [и др.]. Salicylamide Cocrystals: Screening, Crystal Structure, Sublimation Thermodynamics, Dissolution, and Solid-State DFT Calculations // The Journal of Physical Chemistry B. 2014. № 24 (118). С. 6803–6814.
17. Matveychuk Y. V. [и др.]. Quantum electronic pressure and crystal compressibility for magnesium diboride under simulated compression // Materials Today Communications. 2021. (26). С. 101952.
18. Moellmann J., Grimme S. DFT-D3 Study of Some Molecular Crystals // The Journal of Physical Chemistry C. 2014. № 14 (118). С. 7615–7621.
19. Moggach S. A. [и др.]. How focussing on hydrogen bonding interactions in amino acids can miss the bigger picture: a high-pressure neutron powder diffraction study of  $\epsilon$ -glycine // CrystEngComm. 2015. № 28 (17). С. 5315–5328.

20. Moggach S. A., Parsons S., Wood P. A. High-pressure polymorphism in amino acids // *Crystallography Reviews*. 2008. № 2 (14). С. 143–184.
21. Monkhorst H. J., Pack J. D. Special points for Brillouin-zone integrations // *Physical Review B*. 1976. № 12 (13). С. 5188–5192.
22. Nazir G. [и др.]. Under Pressure DFT Investigations on Optical and Electronic Properties of  $\text{PbZrO}_3$  // *Acta Physica Polonica A*. 2018. № 1 (133). С. 105–113.
23. Pascale F. [и др.]. Strategies for the optimization of the structure of crystalline compounds // *Journal of computational chemistry*. 2022. № 3 (43). С. 184–196.
24. Pritchard B. P. [и др.]. New Basis Set Exchange: An Open, Up-to-Date Resource for the Molecular Sciences Community // *Journal of Chemical Information and Modeling*. 2019. № 11 (59). С. 4814–4820.
25. Richard D., Rendtorff N. M. Kaolin group minerals under pressure: The study of their structural and electronic properties by DFT methods // *Applied Clay Science*. 2022. (219). С. 106444.
26. Schatschneider B. [и др.]. Understanding the Structure and Electronic Properties of Molecular Crystals Under Pressure: Application of Dispersion Corrected DFT to Oligoacenes // *The Journal of Physical Chemistry A*. 2013. № 34 (117). С. 8323–8331.
27. Tariq S. [и др.]. Structural, electronic and elastic properties of the cubic  $\text{CaTiO}_3$  under pressure: A DFT study // *AIP Advances*. 2015. № 7 (5). С. 077111.
28. Tsirelson V. G., Stash A. I., Tokatly I. V. Bonding in molecular crystals from the local electronic pressure viewpoint // *Molecular Physics*. 2016. № 7–8 (114). С. 1260–1269.
29. Voronin A. P., Perlovich G. L., Vener M. V. Effects of the crystal structure and thermodynamic stability on solubility of bioactive compounds: DFT study of isoniazid cocrystals // *Computational and Theoretical Chemistry*. 2016. (1092). С. 1–11.
30. Wan M. [и др.]. Pharmaceutical Cocrystals of Ethenzamide: Molecular Structure Analysis Based on Vibrational Spectra and DFT Calculations // *International Journal of Molecular Sciences*. 2022. № 15 (23). С. 8550.
31. Yang C. [и др.]. Experimental and DFT simulation study of a novel felodipine cocrystal: Characterization, dissolving properties and thermal decomposition kinetics // *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*. 2018. (154). С. 198–206.
32. Yang D. [и др.]. Structural and Computational Insights into Cocrystal Interactions: A Case on Cocrystals of Antipyrine and Aminophenazone // *Crystal Growth & Design*. 2019. № 11 (19). С. 6175–6183.
33. Yaseen M. [и др.]. Phase transition and thermoelectric properties of cubic  $\text{KNbO}_3$  under pressure: DFT approach // *Journal of Materials Research and Technology*. 2021. (11). С. 2106–2113.
34. Zhuravlev Y. N., Atuchin V. V. First-Principle Studies of the Vibrational Properties of Carbonates under Pressure // *Sensors*. 2021. № 11 (21). С. 3644.
-