

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.911:538.951:539.32

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.04.003

**ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СЖИМАЕМОСТИ
МЕТАЛЛ-ОРГАНИЧЕСКОГО КАРКАСА MIL-69****Игорь Александрович Федоров^{1†}, Дмитрий Васильевич Корабельников²**^{1,2} Кемеровский государственный университет, ул. Красная, 6, 650000, Кемерово, Россия¹ ifedorov@kemsu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6209-9830>² dkorabelnikov@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4625-0913>

Аннотация. В настоящее время металл-органические каркасы активно исследуются как экспериментальными, так и теоретическими методами. Это связано с уникальными свойствами данных соединений, которые представляют интерес для практического применения в различных областях. На основе первопринципных расчетов изучена сжимаемость металл-органического кристаллогидрата $Al(OH)(O_2C-C_{10}H_6-CO_2) \cdot H_2O$ (MIL-69). Расчет был выполнен в рамках теории функционала плотности с использованием метода псевдопотенциала и базиса плоских волн. Для учета ван-дер-ваальсовых сил в кристалле MIL-69 использовалась вычислительная схема DFT-D3(BJ). Вычисленные значения параметров решетки данного кристалла демонстрируют хорошее согласие с имеющимися экспериментальными данными. Для этого каркасного кристалла вычислены зависимости структурных параметров от давления, полный набор упругих постоянных, а также зависимости линейной сжимаемости от направления. Установлено, что под действием давления поведение параметров a и c кристалла MIL-69 является схожим. Параметр решетки b под действием давления уменьшается значительно сильнее. Полученный полный набор упругих постоянных позволил сделать вывод о механической устойчивости кристалла MIL-69. Обнаружена отрицательная линейная сжимаемость MIL-69 и показана её взаимосвязь с особенностями атомной структуры MIL-69 и их барических изменениями. На основании значений упругих постоянных были вычислены базовые механические характеристики данного кристалла. Модуль Юнга, модуль сдвига и коэффициент Пуассона в аппроксимации Фойгта-Реусса-Хилла составляют 40,99 ГПа, 15,88 ГПа и 0,29, соответственно. Установлено, что модули объемного сжатия монокристалла и поликристалла MIL-69 существенно различны. Модуль сдвига почти в два раза меньше модуля сжатия.

Ключевые слова: металл-органический каркас, теория функционала плотности, давление, линейная сжимаемость, упругие постоянные.

Благодарности: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда и Кемеровской области–Кузбасса, проект № 22-22-20026, <https://rscf.ru/project/22-22-20026/> (<https://rscf.ru/en/project/22-22-20026/>). Расчеты были выполнены в центре коллективного пользования «Высокопроизводительные параллельные вычисления» КемГУ.

Для цитирования: Федоров И.А., Корабельников Д.В. Первопринципное исследование сжимаемости металл-органического каркаса MIL-69 // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2023. Т. 20, № 4. С. 448–454. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.04.003.

Original article

**FIRST-PRINCIPLE STUDY OF THE METAL-ORGANIC FRAMEWORK
MIL-69 COMPRESSIBILITY****Igor A. Fedorov^{1†}, Dmitry V. Korabel'nikov²**^{1,2} Kemerovo State University, Krasnaya 6, 650000, Kemerovo, Russia¹ ifedorov@kemsu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6209-9830>² dkorabelnikov@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4625-0913>

Abstract. At present, metal-organic frameworks are being actively studied both experimentally and theoretically. This is due to the unique properties of these compounds, which are of interest for practical applications in various fields. The compressibility of $\text{Al}(\text{OH})(\text{O}_2\text{C}-\text{C}_{10}\text{H}_6-\text{CO}_2)\cdot\text{H}_2\text{O}$ (MIL-69) metal-organic crystalline hydrate was studied on the basis of first-principle calculations. The calculation was performed within the framework of the density functional theory using the pseudopotential method and the plane wave basis. To account for van der Waals forces in the MIL-69 crystal, the DFT-D3(BJ) computational scheme was used. The calculated values of the lattice parameters of this crystal demonstrate good agreement with the available experimental data. For this framework crystal, the pressure dependences of the structural parameters, the full set of elastic constants and the linear compressibility dependences on the direction were calculated. It was found that under pressure, the behavior of parameters a and c of the MIL-69 crystal is similar. The lattice parameter b under pressure decreases much more strongly. The resulting complete sets of elastic constants made it possible to conclude that the MIL-69 crystal is mechanically stable. The negative linear compressibility of MIL-69 was found and its relationship with the features of the atomic structure of MIL-69 and their baric changes was shown. Based on the values of the elastic constants, the basic mechanical characteristics of this crystal were calculated. Young's modulus, shear modulus and Poisson's ratio in the Voigt-Reuss-Hill approximation are 40.99 GPa, 15.88 GPa and 0.29, respectively. It has been established that the bulk moduli of a single crystal and polycrystalline MIL-69 are significantly different. The shear modulus is almost two times less than the bulk modulus.

Keywords: metal-organic framework, density functional theory, pressure, linear compressibility, elastic constants.

Acknowledgements: The study was supported by Russian Science Foundation and Kemerovo region-Kuzbass grant No. 22-22-20026, <https://rscf.ru/project/22-22-20026/> (<https://rscf.ru/en/project/22-22-20026/>). The authors gratefully acknowledge the center for the collective use of «High-Performance Parallel Computing» of the Kemerovo State University for providing the computational facilities.

For citation: Fedorov, I. A., Korabel'nikov, D. V. (2023). First-principle study of the metal-organic framework MIL-69 compressibility. *Fundamental'nye problemy sovremennoy materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 20(4), 448–454. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.04.003.

Введение

Металл-органические каркасы (англ. metal-organic frameworks, MOFs) относятся к классу пористых материалов, которые могут использоваться для хранения и разделения газов, а также в качестве катализаторов [1]. Кроме того, имеется возможность проводить химические реакции внутри пор, а также использовать MOFs для доставки лекарственных препаратов [2].

С момента открытия металл-органических каркасов в начале 1990-х количество новых синтезированных MOFs выросло в геометрической прогрессии. Особенностью металл-органических каркасных структур является наличие органических лигандов (линкеров), которые соединяют между собой неорганические узлы (атомы металлов). Таким образом, MOFs являются пористыми координационными полимерами, для которых жесткость каркаса обеспечивается сильными координационными связями. Данные структуры представляют собой новый этап создания пористых материалов, так как в них можно целенаправленно изменять размеры пор. Это позволяет конструировать материалы с заданными свойствами, что представляет собой важную задачу в материалове-

дении. Также пористые структуры на основе металл-органического каркаса рассматриваются как перспективные материалы для литиевых аккумуляторных батарей [3].

В настоящее время выполнено большое количество экспериментальных и теоретических исследований кристаллических структур MOFs. В работе [4] авторы выполнили обобщение актуальных направлений исследований металл-органических координационных полимеров проводимых в России. В работе [5] представлен обзор основных методов синтеза и диагностики металл-органических каркасных структур. В работе [6] выполнено исследование упругих свойств для ряда MOFs на основе алюминия со стержневыми упаковками атомов.

Исследование механических свойств MOFs представляет определенный интерес, поскольку для многих применений, таких как хранение газа, требуется высокая механическая стабильность сорбента [7]. Известно, что некоторые из металл-органических каркасных структур обладают отрицательной линейной сжимаемостью. Например, в работе [7] выполнено теоретическое систематическое исследование 22 кристаллических MOF и для некоторых из них обнаружена отрицательная линейная сжимае-

мость. Отрицательная линейная сжимаемость (ОЛС) представляет собой интересный эффект, который может иметь практическое применение в виде датчиков и сенсоров. Микроскопическая природа данного явления весьма разнообразна и для интерпретации ОЛС требуется индивидуальный подход. На сегодняшний день известно, что отрицательная линейная сжимаемость может объясняться внутренним строением кристалла и химической связью. Поиск кристаллов с отрицательной линейной сжимаемостью является важной задачей.

Различное сочетание органических лигандов и атомов металлов приводит к большому числу вариантов MOFs структур. В работе [8] впервые был синтезирован $\text{Al}(\text{OH})(\text{O}_2\text{C}-\text{C}_{10}\text{H}_6-\text{CO}_2)\cdot\text{H}_2\text{O}$ (MIL-69) и определена его структура. Авторы установили, что MIL-69 имеет моноклинную кристаллическую структуру (группа симметрии $C2/c$). Упругие свойства и влияние давления на структуру данного кристалла ранее не исследовались. В случае кристаллов имеющих низкую симметрию элементарной ячейки, например моноклинную, направления экстремальных значений (минимальных и максимальных) сжимаемости могут не совпадать ни с одной из кристаллографических осей. Таким образом, для MIL-69 необходимо определить сжимаемость вдоль произвольного направления в кристалле.

Целью настоящей работы является исследование механических свойств каркасного кристалла MIL-69, главным образом его линейной сжимаемости в зависимости от направления.

Метод расчета

Для моделирования физических и химических свойств необходимо знать расположение атомов в кристаллической ячейке. Расчет равновесной структуры кристалла MIL-69 проводился с помощью пакета Quantum ESPRESSO [9]. В результате были оптимизированы как параметры решетки, так и координаты атомов. Полная энергия вычислена с использованием ультрамягких псевдопотенциалов в рамках теории функционала плотности (DFT) в параметризации PBE [10] для обменно-корреляционной энергии. Структура исследуемого кристалла содержит молекулярные лиганды и молекулы воды. Поэтому для учета дисперсионных сил в данном исследовании использовался метод DFT-D3(BJ) [11]. Данная схема использовалась

нами ранее при исследовании свойств различных молекулярных и ионно-молекулярных кристаллов [12-14].

В качестве базисных функций использовались плоские волны с энергией обрезки равной 65 Ry. Для представления зоны Бриллюэна использовался метод Монкхорста-Пака [15] с сеткой состоящей из $2 \times 3 \times 3$ k-точек. Экспериментальные данные [8] использовались в качестве начальной структуры. Ошибка в вычислении полной энергии составила меньше 5 мэВ/атом. Упругие постоянные были вычислены с использованием пакета Thermo_pw [16]. Построение зависимости линейной сжимаемости от направления проводилась с помощью ELATE [17].

Результаты и их обсуждение

Экспериментальное определение положения атомов водорода часто представляет проблему. В работе [8] положения атомов водорода молекул воды и гидроксильных групп не были определены. Выполнив компьютерное моделирование, мы определили данные положения. Проекция фрагментов кристаллической структуры MIL-69 на плоскости ab и ac представлены на рис.1. Хорошо видны крупные поры, внутри которых расположены молекулы воды. Гидроксильные группы соединены с молекулами воды посредством водородных связей $\text{H}\dots\text{Ow}$ с длинами $\sim 1,7$ Å. Органические лиганды соединены с катионами алюминия с помощью координационных связей Al-O ($\sim 1,9$ Å), что обеспечивает существование каркасной структуры типа «wine-rack» для MIL-69.

Вычисленные значения параметров решетки кристалла MIL-69 составляют $a = 23,519$ Å, $b = 7,292$ Å, $c = 6,663$ Å, $\beta = 97,87^\circ$, $V = 1131,8$ Å³. Полученные теоретические значения имеют удовлетворительное согласие с имеющимися экспериментальными данными ($a = 24,598$ Å, $b = 7,531$ Å, $c = 6,547$ Å, $\beta = 106,86^\circ$, $V = 1160,6$ Å³) [8].

На рис.2 представлены зависимости объема и параметров решетки каркасного кристалла MIL-69 от давления. Давление приводит к тому, что объем кристалла убывает практически по линейному закону. Также под действием давления уменьшаются почти по линейному закону параметры кристаллической ячейки. Относительная сжимаемость параметров решетки a и c близка.

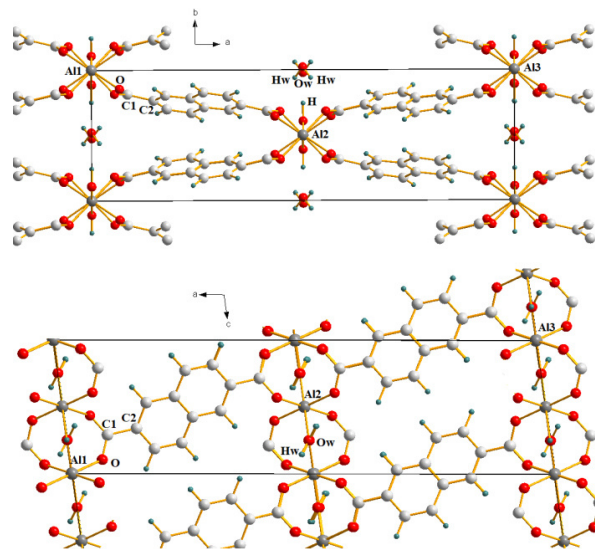


Рис.1. Проекция фрагментов кристаллической структуры MIL-69 на плоскости ab и ac

Fig.1. Projections of the MIL-69 crystal structure fragments onto the ab and ac planes

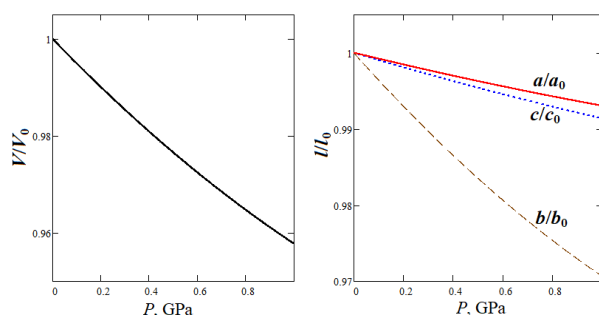


Рис.2. Барические зависимости относительных объема V/V_0 и параметров решетки l/l_0 для металл-органического каркаса MIL-69

Fig.2. Baric dependences of relative volume V/V_0 and lattice parameters l/l_0 for MIL-69 metal-organic framework

При этом необходимо отметить, что под влиянием давления 1 ГПа данные параметры сжались меньше чем на 1 %. Наибольшая сжимаемость имеет место вдоль оси b . Под действием давления 1 ГПа, данный параметр уменьшается на ~ 3 %. Относительно малая сжимаемость вдоль осей a и c обусловлена тем, что жесткие органические лиганды лежат в плоскостях близких к плоскости ac (рис.1). Таким образом, установлено, что сжимаемость каркасного кристалла MIL-69 имеет анизотропию.

Для полного анализа сжимаемости кристалла MIL-69 был вычислен полный набор его упругих постоянных. Кристалл MIL-69 имеет моноклинную симметрию кристаллической ячейки, поэтому его механические свойства ха-

рактеризуют 13 независимых упругих постоянных: $C_{11} = 167,7$, $C_{22} = 24,2$, $C_{33} = 79,9$, $C_{44} = 7,1$, $C_{55} = 34,4$, $C_{66} = 5,3$, $C_{12} = 21,8$, $C_{13} = 42,1$, $C_{23} = 8,9$, $C_{15} = 60,5$, $C_{25} = 6,7$, $C_{35} = 10,1$, $C_{46} = 0,8$ ГПа. Критерии механической устойчивости для кристалла MIL-69 выполняются.

С помощью вычисленных упругих постоянных были установлены зависимости от направления для линейной сжимаемости MIL-69 в различных плоскостях (рис.3). Значения сжимаемости кристалла MIL-69 вдоль кристаллографических осей составляют $\beta_a = 7,12$, $\beta_b = 38,3$, $\beta_c = 10,3$ ТПа $^{-1}$.

Полученные зависимости позволили выявить наличие отрицательной линейной сжимаемости кристалла MIL-69. Необходимо отметить, что направление наибольшей величины отрицательной сжимаемости ($-3,85$ ТПа $^{-1}$) не совпадает ни с одной из кристаллографических осей. Таким образом, только анализ сжимаемостей вдоль кристаллографических осей, полученных при исследовании влияния давления на параметры кристаллической решетки, не всегда позволяет определить данное интересное явление.

Для понимания возникновения отрицательной линейной сжимаемости кристалла MIL-69 необходимо исследовать барическое поведение его микроскопических параметров. На рис.4 для MIL-69 показаны барические зависимости угла α между атомами алюминия ($\angle(\text{Al1}-\text{Al2}-\text{Al3})$), угла β между связью Al1-O и осью b , а также угла φ между C1-C2 и осью b .

Видно, что с ростом давления угол α увеличивается на $\sim 1^\circ$, тогда как углы β и φ уменьшаются на $\sim 0,5^\circ$. Такие изменения углов указывают на вращение органических молекул (линкеров), в результате которого их размеры в направлениях отрицательной сжимаемости увеличиваются. Таким образом, структурный мотив «wine-rack» ведет себя как жесткий каркас, который сжимаясь в одном направлении, расширяется в другом. Важно отметить, что поскольку органические лиганды расположены между осями a и c (рис.1), то наибольшая отрицательная линейная сжимаемость соответствует направлению между этими осями (рис.3).

Объемный модуль сжатия для монокристалла MIL-69 составляет 18,9 ГПа. Модуль всестороннего сжатия поликристалла MIL-69, вычисленный в аппроксимации Фойгта-Реусса-Хилла имеет существенно большую величину (32,7 ГПа). Модуль Юнга, модуль сдвига и ко-

эффицент Пуассона в аппроксимации Фойгта-Реусса-Хилла составляют 40,99 ГПа, 15,88 ГПа и 0.29, соответственно. Таким образом, $B/G \sim 2$.

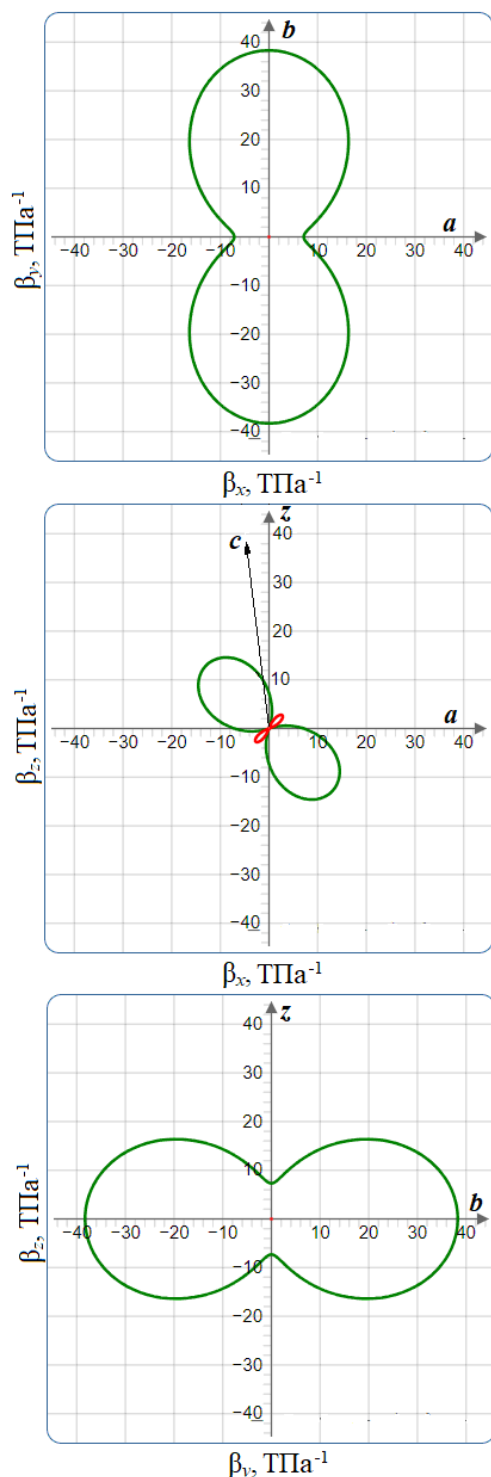


Рис.3. Зависимости от направления для линейной сжимаемости металл-органического каркаса MIL-69 в различных плоскостях

Fig.3. Directional dependencies for linear compressibility of metal-organic frame MIL-69 in different planes

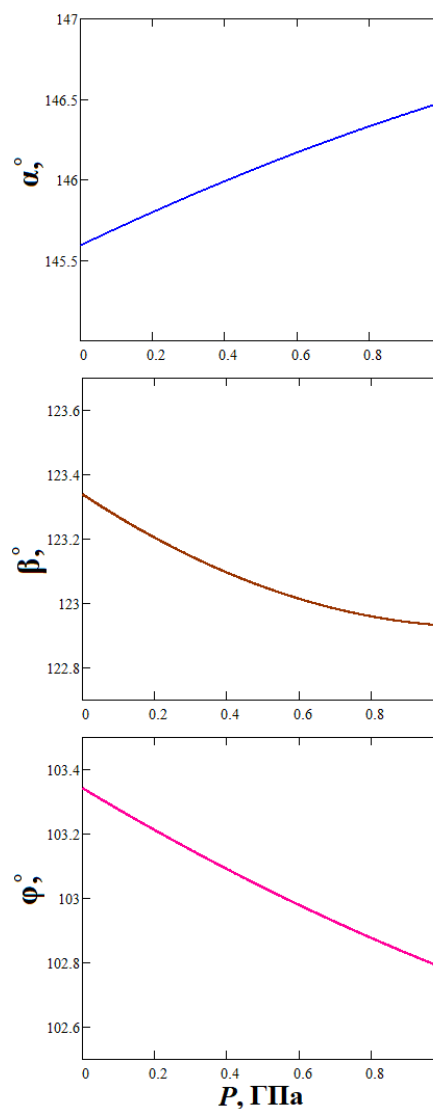


Рис.4. Зависимости углов α , β и φ от давления для металл-органического каркаса MIL-69

Fig.4. Pressure dependences of α , β and φ angles for metal-organic framework MIL-69

Заключение

С помощью компьютерного моделирования, основанного на первопринципных расчетах в рамках теории функционала плотности, проведено исследование механических свойств металл-органического каркасного кристалла MIL-69. Вычислены структурные параметры в зависимости от давления, упругие постоянные, модули упругости и линейные сжимаемости.

Рассчитанные зависимости линейной сжимаемости от направления позволили обнаружить отрицательную линейную сжимаемость кристалла MIL-69. Установлено, что отрицательная линейная сжимаемость возникает в ре-

зультате вращения органических молекул, образующих структурный мотив типа «wine-rack» и скрепленных в жесткий каркас координационными связями с катионами алюминия. Поскольку органические лиганды расположены между осями a и c , то наибольшая отрицательная линейная сжимаемость имеет место между этими осями. Показано, что величина объемного модуля сжатия для поликристалла MIL-69 значительно больше, чем для монокристалла. При этом отношение модуля сжатия к модулю сдвига составляет ~ 2 .

Список литературы

1. Leus K., Liu Y.-Y., Voort P. Van Der. Metal-Organic Frameworks as Selective or Chiral Oxidation Catalysts // *Catalysis Reviews*. 2014. V. 56, N 1. P. 1–56.
2. Красников А.А., Савельева О.В., Воронина Г.А., Курзина И.А. Системы доставки активного компонента (новокаин) на основе ZIF-8 // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2023. Т. 20, № 1. С. 23–32.
3. Han S.A., Qutaish H., Lee J., Park M., Kim J.H. Metal-organic framework derived porous structures towards lithium rechargeable batteries // *EcoMat*. 2023. V. 5, N 2. e12283.
4. Агафонов М.А., Александров Е.В., Артюхова Н.А. и др. Металл-органические координационные полимеры в России: от синтеза и структуры к функциональным свойствам и материалам // *Журнал структурной химии*. 2022. Т. 63, № 5. С. 535–718.
5. Бутова В.В., Солдатов М.А., Гуда А.А., Ломаченко К.А., Lamberti C. Металл-органические каркасные структуры: строение, свойства, методы синтеза и анализа // *Успехи химии*. 2016. Т. 85, № 3. С. 280–307.
6. Салеев В.А., Шипилова А.В. Квантово-механическое моделирование упругих свойств металлоорганических соединений на основе алюминия // *Журнал физической химии*. 2018. Т. 92, № 10. С. 1567–1574.
7. Alexandrov E.V., Goltsev A.V., Eremin R.A., Blatov V.A. Anisotropy of Elastic Properties of Metal-Organic Frameworks and the Breathing Phenomenon // *The Journal of Physical Chemistry C*. 2019. V. 123, N 40. P. 24651–24658.
8. Loiseau T., Mellot-Draznieks C., Muguerra H., Férey G., Haouas M., Taulelle F. Hydrothermal synthesis and crystal structure of a new three-dimensional aluminum-organic framework MIL-69 with 2,6-naphthalenedicarboxylate (ndc), Al(OH)(ndc)·H₂O // *Comptes Rendus Chimie*. 2005. V. 8, N 3–4. P. 765–772.
9. Giannozzi P., Andreussi O., Brumme T., Bunau O. et al. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2009. V. 21. P. 395502.
10. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple // *Phys. Rev. Lett*. 1996. V. 77. P. 3865.
11. Grimme S., Antony J., Ehrlich S., Krieg H. A consistent and accurate *ab initio* parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu // *J. Chem. Phys*. 2010. V. 132. P. 154104.
12. Корабельников Д.В., Федоров И.А., Журавлев Ю.Н. Сжимаемость и электронные свойства цианидов металлов // *Физика твердого тела*. 2021. Т. 63, № 7. С. 874–880.
13. Fedorov I., Korabel'nikov D., Nguyen C., Prosekov A. Physicochemical properties of l- and dl-valine: first-principles calculations // *Amino Acids*. 2020. V. 52. P. 425–433.
14. Федоров И.А., Корабельников Д.В. Первопринципное исследование сжимаемости и электронных свойств кристаллического пурина // *Журнал структурной химии*. 2022. Т. 63, № 10. С. 100125.
15. Monkhorst H.J., Pack J. D. Special points for Brillouin-zone integrations // *Phys. Rev. B*. 1976. V. 13. P. 5188–5192.
16. Thermo_pw: [Электронный ресурс] – Режим доступа https://dalcorsio.github.io/thermo_pw. Дата обращения: 13.06.2023.
17. Gaillac R., Pullumbi P., Coudert F.-X. ELATE: an open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2016. V. 28, N 27. P. 275201.

Информация об авторах

И. А. Федоров – кандидат физико-математических наук, доцент Кемеровского государственного университета.

Д. В. Корабельников – кандидат физико-математических наук, доцент, Кемеровского государственного университета.

References

1. Leus K., Liu, Y.-Y. & Voort, P. Van Der (2014). Metal-Organic Frameworks as Selective or Chiral Oxidation Catalysts. *Catalysis Reviews*, 56(1), 1–56.

2. Krasnikov, A. A., Savelyeva, O. V., Voronova, G. A. & Kurzina, I. A. (2023). Active ZIF-8-based component (novocaine) delivery systems. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 20(1), 23–32. (In Russ.).
3. Han, S. A., Qutaish, H., Lee, J., Park, M. & Kim, J. H. (2023). Metal-organic framework derived porous structures towards lithium rechargeable batteries. *EcoMat.*, 5(2), e12283.
4. Agafonov, M. A., Alexandrov, E. V., Artyukhova, N. A. & Bekmukhamedov, G. E. et al. (2022). Metal-organic frameworks in russia: from the synthesis and structure to functional properties and materials. *Journal of Structural Chemistry*, 63(5), 671–843. (In Russ.).
5. Butova, V. V., Soldatov, M. A., Guda, A. A., Lomachenko, K. A. & Lamberti, C. (2016). Metal-organic frameworks: structure, properties, methods of synthesis and characterization. *Russian Chemical Reviews*, 85(3), 280–307. (In Russ.).
6. Saleev, V. A. & Shipilova, A. V. (2018). Quantum-mechanical modeling of the elastic properties of aluminum-based metal-organic frameworks. *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 92(10), 1940–1946. (In Russ.).
7. Alexandrov, E. V., Goltsev, A. V., Eremin, R. A. & Blatov, V. A. (2019). Anisotropy of Elastic Properties of Metal-Organic Frameworks and the Breathing Phenomenon. *The Journal of Physical Chemistry C*, 123(40), 24651–24658.
8. Loiseau, T., Mellot-Draznieks, C., Muguerra, H., Férey, G., Haouas, M. & Taulelle, F. (2005). Hydrothermal synthesis and crystal structure of a new three-dimensional aluminum-organic framework MIL-69 with 2,6-naphthalenedicarboxylate (ndc), Al(OH)(ndc)·H₂O. *Comptes Rendus Chimie*, 8(3–4), 765–772.
9. Giannozzi, P., Andreussi, O., Brumme, T. & Bunau, O. et al. (2009). Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO. *J. Phys.: Condens. Matter.*, 21, 395502.
10. Perdew, J. P., Burke, K. & Ernzerhof, M. (1996). Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Phys. Rev. Lett.*, 77, 3865.
11. Grimme, S., Antony, J., Ehrlich, S. & Krieg, H. (2010). A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu. *J. Chem. Phys.*, 132, 154104.
12. Korabel'nikov, D. V., Fedorov, I. A. & Zhuravlev, Yu. N. (2021). Compressibility and Electronic Properties of Metal Cyanides. *Phys. Solid State*, 63, 874–880. (In Russ.).
13. Fedorov, I., Korabel'nikov, D., Nguyen, C. & Prosekov, A. (2020). Physicochemical properties of l- and dl-valine: first-principles calculations. *Amino Acids*, 52, 425–433.
14. Fedorov, I. A. & Korabelnikov, D. V. (2022). Ab initio study of the compressibility and electronic properties of crystalline purine. *Journal of Structural Chemistry*, 63(10), 1670–1677. (In Russ.).
15. Monkhorst, H. J. & Pack, J. D. (1976). Special points for Brillouin-zone integrations. *Phys. Rev. B*, 13, 5188–5192.
16. Thermo_pw: [Electronic resource] – Access mode https://dalcorso.github.io/thermo_pw. Date of the application: June 13, 2023.
17. Gaillac, R., Pullumbi, P. & Coudert, F.-X. (2016). ELATE: an open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors. *Journal of Physics: Condensed Matter.*, 28(27), 275201.

Information about the authors

I. A. Fedorov – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Kemerovo State University.

D. V. Korabel'nikov – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Kemerovo State University.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 13.06.2023; одобрена после рецензирования 10.07.2023; принята к публикации 31.07.2023.

The article was received by the editorial board on 13 June 23; approved after reviewing 10 July 23; accepted for publication 31 July 23.