ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

2021. Том 62, № 10 *Октябрь* *DOI: 10.26902/JSC_id85815*

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ К СТАТЬЕ

МОДЕЛИРОВАНИЕ СЖИМАЕМОСТИ ИЗОСТРУКТУРНЫХ ГАЛОГЕНСОДЕРЖАЩИХ КРИСТАЛЛОВ НА МАКРО- И МИКРОУРОВНЯХ

Е.В. Барташевич[1], С.А. Собалев[1], Ю.В. Матвейчук[1], В.Г. Цирельсон[1,2]

[1]*Южно-Уральский государственный университет (НИУ), Челябинск, Россия*
E-mail: bartash@yandex.ru; matveichukyv@susu.ru
[2]*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия*

Таблица S01. Анизотропия модулей упругости и её изменение при гидростатическом сжатии в рядах кристаллов дигалогенидов, гексагалобензолов, галогентринитрометанов и диборида магния

Приложенное давление, ГПа	*Максимальное значение одноосной сжимаемости, UC_{max}, $ТПа^{-1}$*	*Минимальное значение одноосной сжимаемости UC_{min}, $ТПа^{-1}$*	*Анизотропия одноосной сжимаемости A_{UC}*	*Максимальное значение гидростатической сжимаемости HC_{max}, $ТПа^{-1}$*	*Минимальное значение гидростатической сжимаемости HC_{min}, $ТПа^{-1}$*	*Анизотропия гидростатической сжимаемости A_{HC}*
Cl_2						
0 ГПа	196.85	38.15	5.16	44.07	22.25	1.98
1 ГПа	122.25	24.33	5.03	26.60	14.57	1.83
5 ГПа	53.05	10.88	4.88	11.57	6.69	1.73
10 ГПа	30.74	6.74	4.56	7.27	4.34	1.68
20 ГПа	17.04	3.99	4.28	4.53	2.80	1.62
Br_2						
0 ГПа	112.99	22.46	5.03	42.42	12.88	3.29
1 ГПа	75.82	15.86	4.78	28.05	8.66	3.24
5 ГПа	38.14	8.12	4.70	13.13	5.36	2.45
10 ГПа	25.32	5.37	4.71	7.96	3.42	2.33
20 ГПа	15.08	3.35	4.50	4.59	2.23	2.06
I_2						
0 ГПа	86.81	15.99	5.43	38.69	10.92	3.54
1 ГПа	74.02	12.06	6.14	26.21	7.90	3.32
5 ГПа	38.48	6.86	5.61	11.96	4.46	2.68
10 ГПа	23.87	4.77	5.00	7.20	3.19	2.26
20 ГПа	14.15	3.14	4.51	4.05	2.33	1.73
Гексахлорбензол						
0 ГПа	211.86	31.22	6.79	40.57	19.13	2.12
1 ГПа	96.90	18.26	5.31	25.14	11.12	2.26
5 ГПа	33.46	7.97	4.20	11.25	5.06	2.22
10 ГПа	18.82	5.07	3.71	6.99	3.36	2.08
20 ГПа	10.29	3.20	3.21	4.17	2.20	1.89
Гексабромбензол						
0 ГПа	144.93	25.94	5.58	41.53	18.62	2.23
1 ГПа	77.94	15.74	4.95	25.72	10.79	2.38
5 ГПа	30.16	7.21	4.18	11.58	4.77	2.43

© Барташевич Е.В., Собалев С.А., Матвейчук Ю.В., Цирельсон В.Г., 2021

10 ГПа	17.60	4.73	3.72	7.13	3.20	2.23
20 ГПа	10.01	3.09	3.24	4.21	2.18	1.93
Гексаиодбензол						
0 ГПа	83.40	15.23	5.48	35.17	11.25	3.13
1 ГПа	54.47	10.89	5.00	23.41	7.76	3.02
5 ГПа	25.11	6.01	4.18	10.82	4.01	2.70
10 ГПа	15.38	4.26	3.61	6.60	3.01	2.19
20 ГПа	9.26	2.97	3.12	4.08	2.14	1.91
Хлортринитрометан						
0 ГПа	785.11	66.18	11.86	327.00	-103.89	–
Бромтринитрометан						
0 ГПа	1626.02	58.55	27.77	109.67	-22.97	–
Диборид магния [']						
0 ГПа	4.37	2.35	1.86	2.86	1.71	1.67
1 ГПа	4.27	2.33	1.83	2.81	1.68	1.67
5 ГПа	4.08	2.26	1.81	2.74	1.62	1.69
10 ГПа	3.55	1.95	1.82	2.59	1.41	1.84
20 ГПа	3.05	1.73	1.77	2.28	1.24	1.84

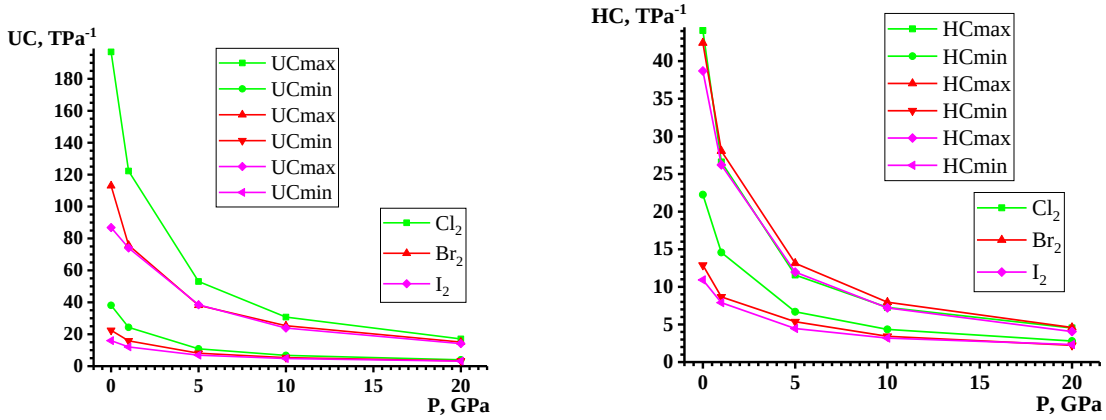


Рисунок S01. Изменение крайних величин одноосной (UC) и гидростатической (HC) сжимаемости кристаллов дигалогенидов при гидростатическом сжатии.

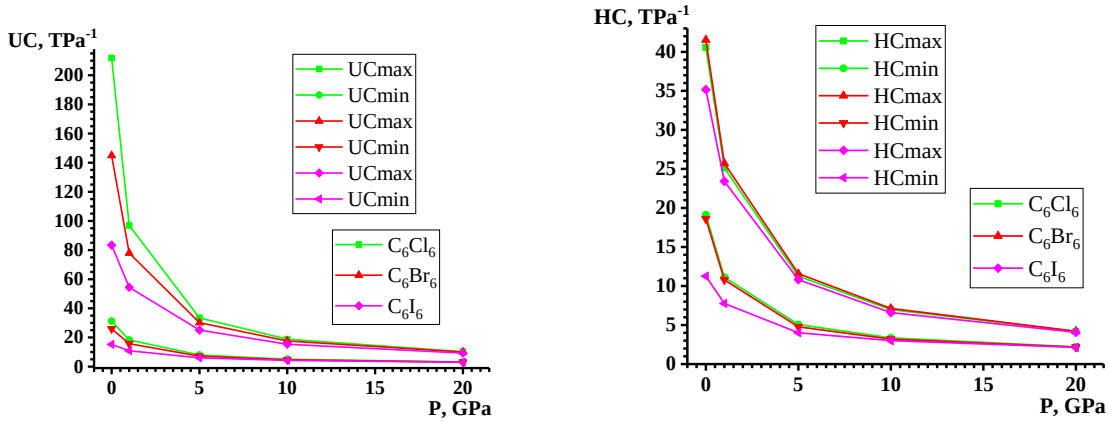


Рисунок S02. Изменение крайних величин одноосной (UC) и гидростатической (HC) сжимаемости кристаллов гексагалогенбензолов при гидростатическом сжатии.

Таблица S02. Значения относительных $\Delta P_q(\mathbf{r}_{bcp})$% и абсолютных $\Delta P_q(\mathbf{r}_{bcp})$ изменений квантового электронного давления в кристаллах C_6Hal_6 с ростом гидростатического сжатия от 0 до 20 ГПа

Критическая точка связи или кольца	$\Delta P_q(\mathbf{r}_{bcp})$, ат. ед.	$\Delta P_q(\mathbf{r}_{bcp})$%
C_6Cl_6		
Ковалентная C–Cl, bcp	0.018	18.9
Галогенная Cl…Cl, bcp	0.007	256.6
Межслоевая Cl…Cl, bcp	0.005	216.4
C_6Br_6		
Ковалентная C–Br, bcp	0.011	18.3
Галогенная Br…Br, bcp	0.005	187.0
Межслоевая Br…Br, bcp	0.004	160.0
C_6I_6		
Ковалентная C–I, bcp	0.007	29.4
Галогенная I…I, bcp	0.002	57.3
Межслоевая I…I, bcp	0.002	109.7

Таблица S03. Значения относительных $\Delta P_q(\mathbf{r}_{bcp})$% и абсолютных $\Delta P_q(\mathbf{r}_{bcp})$ изменений квантового электронного давления в кристаллах $HalC(NO_2)_3$ с ростом гидростатического сжатия от 0 до 10 ГПа

Критическая точка связи (bcp)	$\Delta P_q(\mathbf{r}_{bcp})$, ат. ед.	$\Delta P_q(\mathbf{r}_{bcp})$%
$ClC(NO_2)_3$		
Ковалентная C–Cl	0.017	19.2
Галогенная O_1…Cl	0.008	171.9
Пниктогенная O_2…N	0.004	95.7
$BrC(NO_2)_3$		
Ковалентная C–Br	0.012	18.8
Галогенная O_1…Br	0.005	66.0
Пниктогенная O_2…N	0.004	91.6
$IC(NO_2)_3$		
Ковалентная C–I	0.002	15.9
Галогенная O_1…I	0.004	38.2
Пниктогенная O_2…N	0.004	121.3

Таблица S04. Значения относительных $\Delta P_q(\mathbf{r}_{bcp})$% и абсолютных $\Delta P_q(\mathbf{r}_{bcp})$ изменений квантового электронного давления в кристаллах Hal_2 с ростом гидростатического сжатия от 0 до 20 ГПа

Критическая точка связи	$\Delta P_q(\mathbf{r}_{bcp})$, ат. ед.	$\Delta P_q(\mathbf{r}_{bcp})$%
Cl_2		
Ковалентная Cl–Cl,	0.003	17.9
Галогенная Cl…Cl	0.006	111.6
Внутрислоевая Cl…Cl	0.006	200.6
Межслоевая Cl…Cl	0.005	225.2
Br_2		
Ковалентная Br–Br,	0.001	7.0
Галогенная Br…Br	0.002	39.4
Внутрислоевая Br…Br	0.004	114.4
Межслоевая Br…Br	0.004	192.7
I_2		
Ковалентная I–I,	0.001	29.1
Галогенная I…I	0.001	18.9
Внутрислоевая I…I	0.002	67.0
Межслоевая I…I	0.002	120.0

Таблица S05. Значения относительных ΔIQPF(**r**)% и абсолютных ΔIQPF(**r**) изменений квантового электронного давления в кристаллах C_6Hal_6 с ростом гидростатического сжатия от 0 до 20 ГПа

Критическая точка связи или кольца	ΔIQPF(**r**), ат. ед.	ΔIQPF(**r**)%
C_6Cl_6		
Ковалентная C–Cl, bcp	0.008	1.0
Галогенная Cl…Cl, bcp	0.010	4110.3
Межслоевая Cl…Cl, bcp	0.005	1944.7
C_6Br_6		
Ковалентная C–Br, bcp	0.005	0.6
Галогенная Br…Br, bcp	0.025	2571.0
Межслоевая Br…Br, bcp	0.013	3640.0
C_6I_6		
Ковалентная C–I, bcp	0.013	1.8
Галогенная I…I, bcp	0.103	1631.0
Межслоевая I…I, bcp	0.036	2477.6

Таблица S06. Значения относительных ΔIQPF(***r***)% и абсолютных ΔIQPF(***r***) изменений квантового электронного давления в кристаллах Hal–$C(NO_2)_3$ с ростом гидростатического сжатия от 0 до 10 ГПа

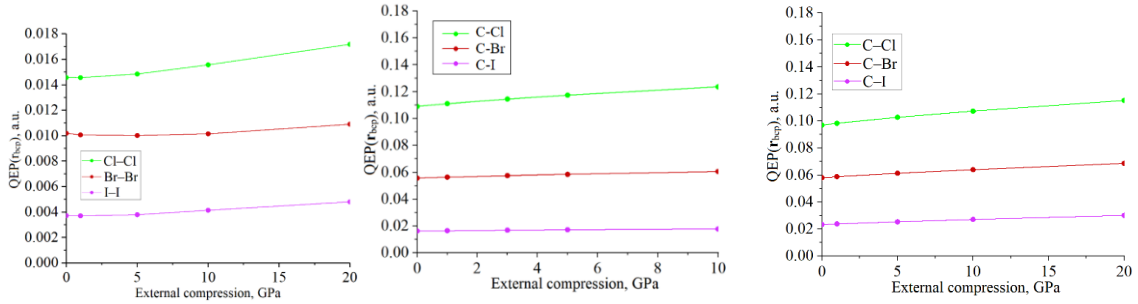
Критическая точка связи (bcp)	ΔIQPF(***r***), ат. ед.	ΔIQPF(***r***)%
$ClC(NO_2)_3$		
Ковалентная C–Cl	0.011	1.4
Галогенная O_1…Cl	0.006	973.5
Пниктогенная O_2…N	0.002	1035.6
$BrC(NO_2)_3$		
Ковалентная C–Br	0.011	1.4
Галогенная O_1…Br	0.013	361.6
Пниктогенная O_2…N	0.001	1113.0
$IC(NO_2)_3$		
Ковалентная C–I	0.006	0.9
Галогенная O_1…I	0.039	292.3
Пниктогенная O_2…N	0.001	2074.5

Таблица S07. Значения относительных ΔIQPF(**r**)% и абсолютных ΔIQPF(**r**) изменений квантового электронного давления в кристаллах Hal_2 с ростом гидростатического сжатия от 0 до 20 ГПа

Критическая точка связи	ΔIQPF(***r***), ат. ед.	ΔIQPF(***r***)%
Cl_2		
Ковалентная Cl–Cl,	0.012	1.9
Галогенная Cl…Cl	0.027	1539.3
Внутрислоевая Cl…Cl	0.010	2033.8
Межслоевая Cl…Cl	0.005	2540.6
Br_2		
Ковалентная Br–Br,	0.002	0.2
Галогенная Br…Br	0.087	887.4
Внутрислоевая Br…Br	0.025	1694.4
Межслоевая Br…Br	0.011	5855.0
I_2		
Ковалентная I–I,	0.018	2.8
Галогенная I…I	0.226	779.8
Внутрислоевая I…I	0.077	1790.6
Межслоевая I…I	0.024	2545.6

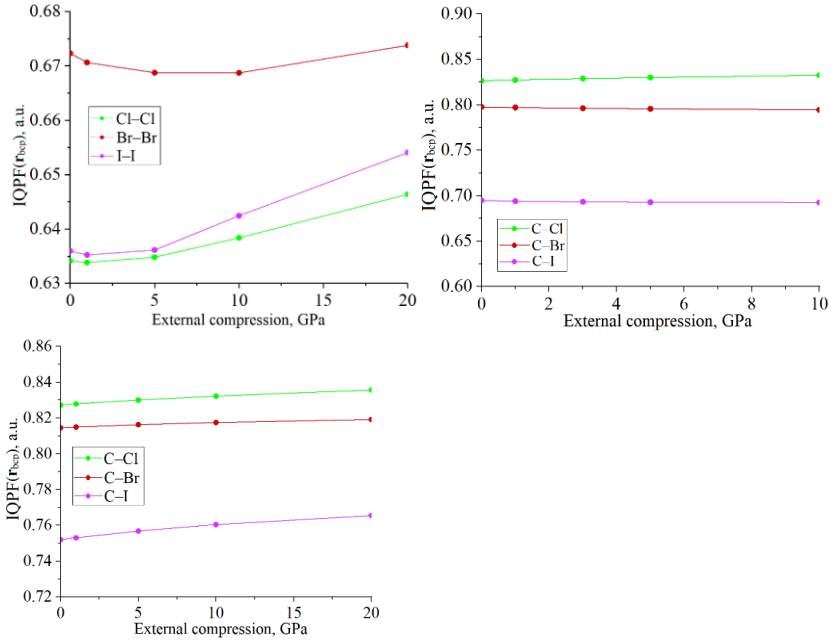
Таблица S08. Значения относительного и абсолютного изменения длин связей в кристаллах Hal_2

	Δr, Å Hal_2	Δr, % Hal_2	Δr, % C_6Hal_6	Δr, % $HalC(NO_2)_3$
Cl				
Ковалентная	-0.011	-0.562	1.970	1.687
Галогенная	-0.512	-16.116	18.476	15.038
Внутрислоевая	-0.641	-17.728	-	-
Межслоевая	-0.635	-16.966	16.642	-
Br				
Ковалентная	-0.008	-0.353	2.226	1.768
Галогенная	-0.408	-12.784	16.851	9.956
Внутрислоевая	-0.593	-16.136	-	-
Межслоевая	-0.737	-18.324	17.479	-
I				
Ковалентная	-0.025	-0.900	2.742	0.923
Галогенная	-0.400	-11.609	13.760	9.655
Внутрислоевая	-0.625	-15.999	-	-
Межслоевая	-0.674	-15.977	16.489	-



a) *b)* *c)*

Рисунок S03. Изменение $P_q(r_{bcp})$ ковалентной связи в кристаллах: a) Hal_2, b) $HalC(NO_2)_3$ и c) C_6Hal_6.



a) *b)* *c)*

Рисунок S04. Изменение $IQPF(r_{bcp})$ ковалентных связей в кристаллах: а) Hal_2, б) $HalC(NO_2)_3$ и в) C_6Hal_6

[i] Y. V. Matveychuk, E. V. Bartashevich, K. K. Skalyova, V. G. Tsirelson Quantum electronic pressure and crystal compressibility for magnesium diboride under simulated compression. Mater. Today Commun., 2021, 26, 101952