

Ab initio исследование влияния давления на упругие свойства слоистого соединения GaS

© Г.С. Оруджев, Э.К. Касумова

Азербайджанский технический университет,
Баку, Азербайджан

E-mail: horucov@physics.ab.az

(Поступила в Редакцию 14 мая 2013 г.

В окончательной редакции 30 июля 2013 г.)

Из первых принципов в интервале давлений 0–20 ГПа с учетом структурного фазового перехода, происходящего при ~ 3 ГПа, рассчитаны все независимые упругие постоянные соединения GaS, из которых затем вычислены барические зависимости скоростей распространения упругих волн в различных направлениях симметрии. Рассчитаны значения усредненных упругих модулей, модуля Юнга и коэффициента Пуассона и их зависимости от давления.

В настоящей работе из первых принципов в интервале давлений 0–20 ГПа рассчитаны упругие постоянные сульфида галлия. Сульфид галлия кристаллизуется в гексагональной сингонии и имеет пространственную группу симметрии D_{6h}^4 ($P6_3/mmc$) с параметрами $a = 0.358$ nm, $c = 1.55$ nm [1]. Прimitивная ячейка GaS содержит 4 атома галлия и 4 атома серы. Это слоистый кристалл: его структура образуется из четырех слоев типа S–Ga–Ga–S. Каждый атом Ga в слоях тетраэдрически окружен тремя атомами серы и одним атомом галлия. Связь между атомами внутри слоев носит в основном ковалентный характер, а между слоями осуществляется преимущественно ван-дер-ваальсовыми силами.

Упругие постоянные — это фундаментальные характеристики твердого тела, несущие информацию о характере сил межатомного взаимодействия. Они входят в формулы для определения различных термодинамических характеристик кристалла, их зависимостью от давления и температуры во многом определяются особенности протекания деформационных эффектов в слоистых кристаллах [2,3]. Для GaS упругие постоянные были определены неоднократно [4–12]. Однако очень мало данных об их зависимости от внешних факторов [4,9,10,11], а имеющийся материал охватывает не все упругие константы [4,9,10]. Учитывая сказанное, в этой работе мы рассчитали из первых принципов значения и зависимости от давления всех упругих постоянных сульфида галлия, причем при расчетах учитывался фазовый переход, происходящий в структуре кристалла в окрестностях 3 ГПа.

Вычисления проводились в три этапа. На первом — делался самосогласованный расчет и вычислялись волновые функции основного состояния кристалла при некоторых начальных параметрах структуры.

На втором — производилась релаксация и оптимизация геометрии атомной структуры до получения заданного значения давления (тензора напряжения σ) и силы.

На третьем этапе задавалась деформация, которая должна быть малой, чтобы выполнялся обобщенный

закон Гука при заданном давлении:

$$\begin{bmatrix} \Delta\sigma_1 \\ \Delta\sigma_2 \\ \Delta\sigma_3 \\ \Delta\sigma_4 \\ \Delta\sigma_5 \\ \Delta\sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix}, \quad (1)$$

где $\Delta\sigma$ — разность соответствующих компонентов тензоров напряжений, полученных на третьем σ' и втором этапах σ .

Чтобы деформацию удобно было задать, элементарная ячейка кристалла GaS была выбрана в форме прямоугольного параллелепипеда и состояла из 16 атомов: 8 атомов Ga и 8 атомов S. При этом, гексагональная решетка с базисными трансляциями $t_1 = (a, 0, 0)$, $t_2 = (-a/2, b/2, 0)$, $t_3 = (0, 0, c)$, преобразовалась в орторомбическую с базисными трансляциями $t'_1 = (a, 0, 0)$, $t'_2 = (0, b, 0)$, $t'_3 = (0, 0, c)$, где $b = a\sqrt{3}$. Таким образом, 8 атомов новой ячейки — это атомы, входящие в примитивную ячейку, а остальные 8 атомов получаются путем прибавления к ним трансляции $t_1 + t_2(a/2, b/2, 0)$.

Исследование структуры GaS под давлением выявило наличие фазовых переходов [4,13–17]. Shinriki и др. в [13] сообщили о существовании фазового перехода при 1.8 ГПа, наблюдаемого на поликристаллических образцах сульфида галлия методом дифракции рентгеновских лучей. Измерив методом бриллюэновского рассеяния вплоть до 17.5 ГПа барическую зависимость упругих постоянных C_{11} и C_{33} монокристалла GaS, Polian и др. [4] обнаружили, что примерно ниже и выше (1.0–2.0) ГПа C_{33} по-разному зависит от давления. Рентгеновское исследование структуры монокристалла GaS до 6.5 ГПа при комнатной температуре [14] также показало наличие обратимого структурного фазового перехода выше 3 ГПа без изменения пространственной группы симметрии, при этом атомы галлия меняли свои позиции с $4(f)$ ($2/3, 1/3, z$) на $4(e)$ ($0, 0, z$).

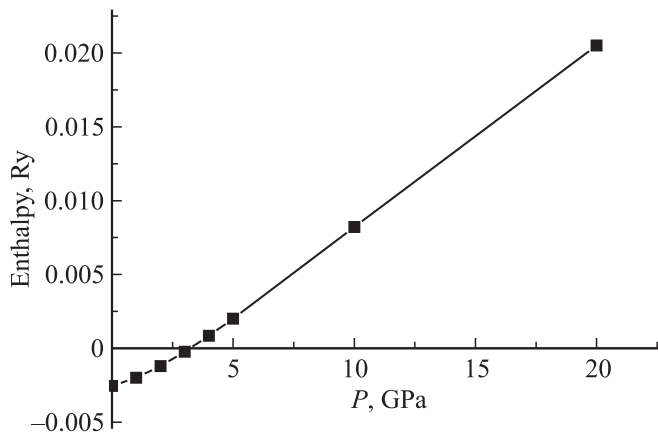


Рис. 1. Зависимость разности энтальпий структур P1 и P2 соединения GaS от давления.

Однако авторам [14] не удалось точно определить давление этого перехода. Этим же методом Pellicer и др. [15] установили, что фазовый переход происходит при давлении 2.7 ± 0.3 GPa. Но ниже 35 GPa они не заметили какого-либо признака на переход в структуру NaCl, как это наблюдалось в GaSe и InSe. По словам автора [16], несмотря на то, что выше 2.7 GPa начинается GaS-II-фаза, он для сравнения изучил из первых принципов влияние давления на структурные и электронные свойства первой фазы в интервале 0–15 GPa и второй фазы в интервале 0–30 GPa. Так как обе фазы в широком интервале давлений имели практически одинаковую энтальпию, попытки автора [16] установить давление фазового перехода оказались неудачными. В [17] в результате первопринципных исследований изменений фазовой стабильности политипов GaS вплоть до 1000 GPa, установлено, что с увеличением давления фазовая стабильность сульфида галлия изменяется в последовательности β -GaS \rightarrow GaS-II \rightarrow GaS со структурой NaCl \rightarrow GaS со структурой цинковой обманки \rightarrow GaS со структурой CsCl, с давлениями перехода 2, 19, 75 и 680 GPa соответственно.

В своей работе мы рассмотрели область давлений 0–20 GPa, т.е. область первого фазового перехода. Были исследованы две структуры сульфида галлия β -GaS и GaS-II. В первой (далее структура P1) атомы галлия занимали позиции $4(f)$ ($2/3, 1/3, z$), во второй (далее структура P2) — $4(e)$ ($0, 0, z$). Чтобы найти давление фазового перехода использовалась зависимость разности энтальпий первой и второй структуры ($\Delta H = H_{P1} - H_{P2}$) от давления, как показано на рис. 1. Из точки пересечения кривой с осью давлений мы установили, что переход из первой фазы во вторую происходит при ~ 3 GPa (точнее 3.166 GPa). В первой фазе анионы одного слоя находятся на одной оси с катионами другого слоя. Во второй — катионы соседних слоев располагаются на одной линии, но между анионами существует небольшое смещение. После фазового перехода число атомов серы, окружающих атом галлия возрастает от четырех до шести.

Упругие постоянные были рассчитаны методом теории функционала плотности (DFT) [18] в базе плоских волн. Расчеты проводились с использованием параллельной версии программы ABINIT [19] в Азербайджанском Национальном GRID-сегменте [20]. Обменно-корреляционный потенциал рассматривался в приближении локальной электронной плотности (LDA) [21]. Для описания электрон-ионного взаимодействия были выбраны нормсохраняющие ионные псевдопотенциалы Hartwigsen–Goedecker–Hutter: 31ga.3.hgh и 16s.6.hgh [22], при этом в качестве базисного набора для разложения волновых функций использовали плоские волны с максимальной кинетической энергией 80 Ry. Применялись электронные конфигурации $[\text{Ar}]3d^{10} + 4s^24p^1$ и $[\text{Ne}] + 3s^23p^4$ соответственно для атомов галлия и серы. Для интегрирования по зоне Бриллюэна, по методу Monkhorst–Pack [23] была сгенерирована сетка k -точек $8 \times 8 \times 1$. При оптимизации геометрии структуры параметры атомной конфигурации и решетки итерационно изменялись до тех пор, пока силы, действующие на атомы в ячейке, не стали ниже заданного порогового значения $5 \cdot 10^{-7}$ Ry/Å, а точность установленного давления

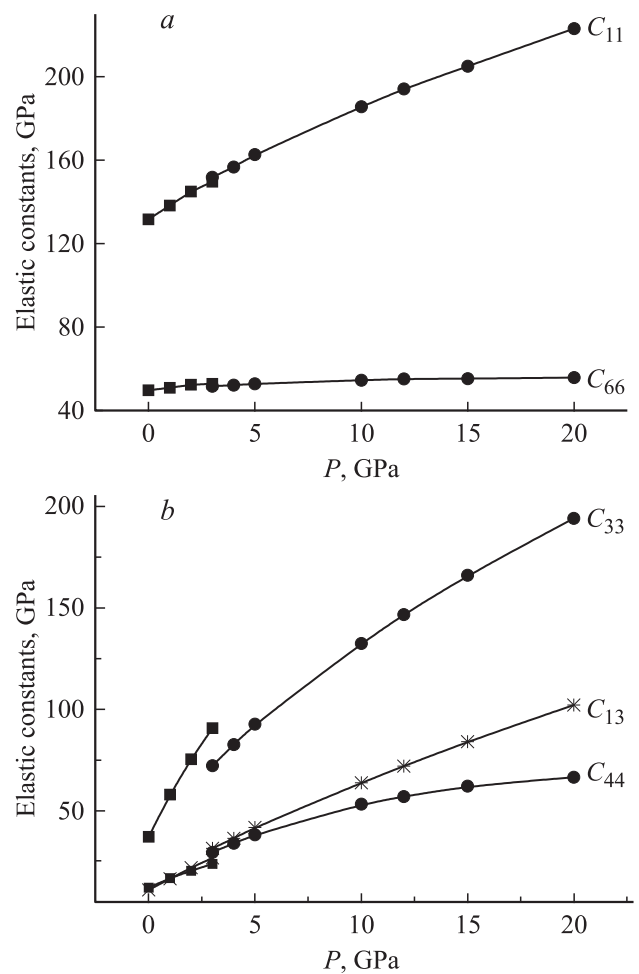


Рис. 2. Зависимости от давления упругих постоянных GaS. (квадратики и крестики — первая фаза; кружки и звездочки — вторая фаза).

Таблица 1. Параметры решетки и структурные атомные параметры сульфида галлия

P , GPa	a , Å		c , Å		γ (Ga)		γ (S)	
Структура $P1$								
0	теория	эксп.	теория	эксп.	теория	эксп.	теория	эксп.
	3.493	3.585(4) ^[14]	15.062	15.53(4) ^[14]	0.17157	0.1708 ^[26]	0.60149	0.6019 ^[26]
	3.425 ^[12]	3.592 ^[26]	15.155 ^[12]	15.466 ^[26]	0.17279 ^[25]	0.1710 ^[27]	0.60330 ^[25]	0.6016 ^[27]
	3.463 [*]	3.587 ^[27]	15.336 [*]	15.492 ^[27]				
	3.641 ^{**)}		15.514 ^{**)}					
1	3.477		14.787		0.17038		0.59885	
2	3.463		14.601		0.16964		0.59705	
3	3.449		14.460		0.16911		0.59567	
Структура $P2$								
3	3.459	3.547(3) ^[14]	14.270	14.74(2) ^[14]	0.16804		0.59409	
4	3.448		14.127		0.16747		0.59276	
5	3.437	3.521(2) ^[14]	14.006	14.42(2) ^[14]	0.16701		0.59164	
10	3.389		13.570		0.16555		0.58770	
12	3.372		13.442		0.16518		0.58658	
15	3.348		13.280		0.16477		0.58517	
20	3.312		13.061		0.16429		0.58329	

Примечание. *) — [25], приближение LDA.

**) — [25], приближение GGA.

Таблица 2. Упругие постоянные GaS при атмосферном давлении

C_{ij} , GPa	Метод				Метод			УЗ метод		Теория			
	бриллюэновского рассеяния				рассеяния нейтронов					Модельные расчеты		Из первых принципов	
	[4]	[5]	[6]	[7]	[5]	[8]	[5]*	[9]	[11]	[10]	[10]**	[12]	наши
C_{11}	122	121	121.6	157	118	155	117	123.3	157	—	—	129.6	131.6
C_{33}	38	38	37.9	35.8	—	36.4	37.6	38.5	38.7	38.5	53.3	35.6	36.9
C_{44}	9.8	9.8	9.5	8.1	12.7	13.3	13.9	0.96	11	5.1	9.06	9.46	11.8
C_{12}	33.4	34	35.2	33.2	—	—	37.6	34.7	34	—	—	34.4	32.2
C_{13}	8.9	11	11.4	15	—	—	—	12.7	13.5	—	—	9.9	10.6

Примечание. * — значения, пересчитанные на основании экспериментальных данных работы [8].

** — значения, рассчитанные с использованием силовых констант из [24].

при этом не превышала $5 \cdot 10^{-5}$ GPa. Оптимизированные параметры решетки и структурные атомные параметры сульфида галлия до и после фазового перехода приведены в табл. 1.

Для определения упругих постоянных C_{11} , C_{12} и C_{13} рассматривалась деформация вдоль оси a (b), для C_{33} — деформация вдоль оси c , а для определения упругой постоянной C_{44} задавалась деформация сдвига между осями a (b) и c . Деформация принималась равной $\varepsilon = 0.001$. Далее, используя разность тензоров напряжений $\Delta\sigma$, полученных на третьем и втором этапах, из закона Гука (1) вычислялись упругие постоянные. Табл. 2 демонстрирует хорошее согласие полученных при 0 GPa результатов с известными экспериментальными (при атмосферном давлении) и теоретическими данными. Вследствие того, что силы связей между атомами внутри слоя намного превышают таковые между атомами соседних слоев,

C_{11} и C_{12} , характеризующие внутрислоевую связь, по значению намного больше остальных. Расхождение в значениях постоянной C_{11} обсуждено в работе [5]. Высокое значение константы C_{33} в [10] авторы объясняют чрезмерно высокими значениями межслоевых сил сжатия, принятыми в модели Wieteng в [24], а столь малое значение C_{44} ([10]**) — пренебрежением кулоновских сил взаимодействия в central force model. Что же касается различия между нашими данными и [12] — это объяснимо тем, что автор [12] рассчитал упругие константы из фононного спектра и использовал псевдопотенциалы Troullier-Martins.

На рис. 2 приведены зависимости упругих постоянных GaS от давления в интервале 0–20 GPa. Из рисунка видно, что с увеличением давления упругие постоянные монотонно возрастают, причем межслоевые константы по сравнению с внутрислоевыми сильнее зависят от

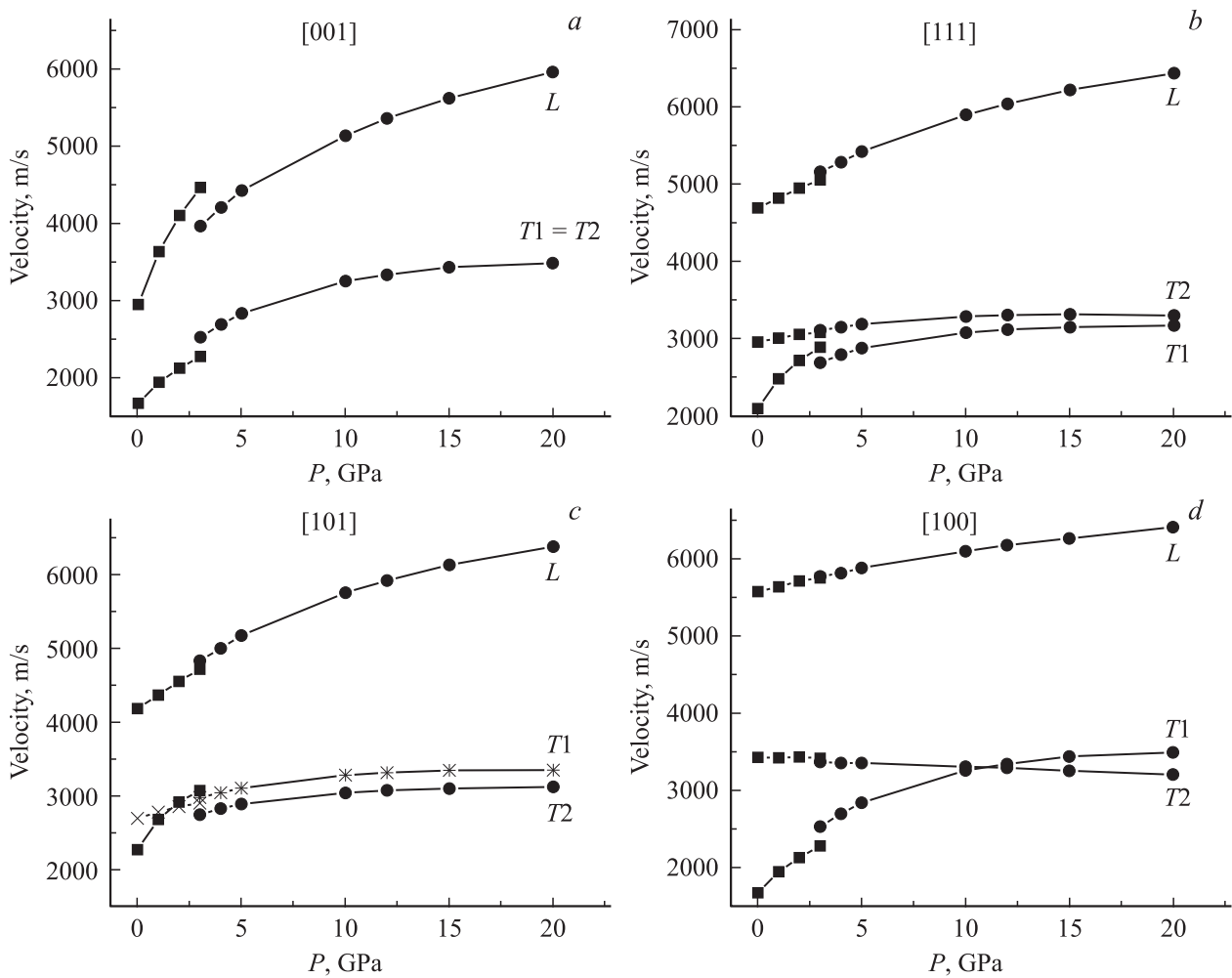


Рис. 3. Барическая зависимость скоростей распространения продольных и поперечных упругих волн в направлениях [001] *a*), [111] *b*), [101] *c*) и [100] *d*). (квадратики и крестики — первая фаза; кружки и звездочки — вторая фаза; *L* — продольная волна; *T1* — поперечная волна, поляризованная вдоль оси *C*, *T2* — поперечная волна, поляризованная перпендикулярно оси *C*).

давления. Согласно [4] в интервале 0–17 ГПа упругая постоянная C_{11} изменяется с коэффициентом 1.9, а C_{33} — с 4.5. По нашим расчетам в этом интервале коэффициенты относительного изменения для: C_{11} — 1.6, C_{66} — 1.1, C_{33} — 4.8, C_{13} — 8.5, C_{44} — 5.4. Т.е., ангармонизм сил связи между слоями существенно больше ангармонизма внутрислоевых сил [2].

При фазовом переходе значения упругих постоянных C_{11} , C_{13} и C_{44} увеличиваются, а значения постоянных C_{33} и C_{66} уменьшаются, причем значение C_{33} уменьшается резко (рис. 2).

В табл. 3 приведены результаты имеющихся исследований по измерению зависимости упругих констант GaS от давления. Наши результаты согласуются с литературными. Очень низкое значение наклона для постоянной C_{33} , объясняется отрицательной кривизной при нулевом давлении, наблюдаемой на кривой $C_{33}(P)$ в [4].

Рассчитанные значения упругих констант использованы для определения скоростей распространения упругих волн вдоль направлений симметрии [001], [100], [101],

[110], [111] (в направлениях [100] и [110] скорости имеют одинаковые значения). В рассмотренных направлениях скорость всех волн монотонно увеличивается, кроме скорости поперечной волны, распространяющейся в направлении [100] и поляризованной перпендикулярно гексагональной оси, которая слегка уменьшается с увеличением давления, (рис. 3).

Таблица 3. Изменение упругих постоянных GaS с давлением

Литература	dC_{ik}/dP				
	C_{11}	C_{66}	C_{33}	C_{13}	C_{44}
[4]	6.5	—	7.9	—	—
[9]	—	—	—	—	—
1	—	2.3 ± 0.2	21.2 ± 0.6	—	—
2	9.8 ± 1.2	2.5 ± 0.2	24.2 ± 0.7	—	—
[10]	—	—	—	—	4.1
Наши	6.6	1.2	20.7	15.5	4.6

Таблица 4. Параметры, удовлетворяющие уравнениям состояния Birch, Murnaghan и Keane

Структура P1	B_0 , GPa	B'_0	B''_0	E_{\min} , Ry	V_0 , Å ³
1 st order Birch EOS	32.0	11.17	—	−200.81131	317.78
2 nd order Birch EOS	32.7	9.48	−0.012	−200.81132	317.77
Murnaghan EOS	32.7	9.28	—	−200.81132	317.81
Keane EOS	31.1	9.63	−0.008	−200.81132	317.77
Экспериментальные данные					
[4]	29.3	—	—	—	—
[5]	30.3	—	—	—	—
[9]	31.2	—	—	—	—
[11]	33.3	—	—	—	—
[15]	37	5.2	—	—	—
Структура P2					
1 st order Birch EOS	32.0	8.20	—	−200.80978	317.82
2 nd order Birch EOS	32.5	7.87	−0.064	−200.80986	317.79
Murnaghan EOS	34.3	6.34	—	−200.81015	317.83
Keane EOS	34.4	6.33	—	−200.81012	317.78
Экспериментальные данные					
[15]	50	4.3	—	—	—

Таблица 5. Усредненные упругие модули, модуль Юнга и коэффициент Пуассона для кристалла GaS

P , GPa	B_F , GPa	G_F , GPa	B_R , GPa	G_R , GPa	B_H , GPa	G_H , GPa	E , GPa	ν
Структура P1								
0	45.2	31.1	29.8	19.5	37.5	25.3	75.9	0.220
1	52.4	34.5	42.4	25.8	47.4	30.1	84.8	0.230
2	59.1	37.3	52.1	30.3	55.6	33.8	92.4	0.239
3	64.9	39.5	60.0	34.0	62.4	36.7	98.4	0.247
Структура P2								
3	66.3	39.7	56.8	35.9	61.6	37.8	99.2	0.251
4	71.6	42.0	63.7	39.3	67.7	40.6	105	0.255
5	77.5	44.3	70.6	42.3	74.1	43.3	112	0.260
10	101	52.1	97.5	51.4	99.3	51.7	133	0.280
12	110	54.2	107	53.6	108	53.9	140	0.288
15	122	56.7	120	56.1	121	56.4	147	0.299
20	141	59.3	140	58.6	141	58.9	156	0.316

Как видно из рис. 3, во всех направлениях значения продольных волн больше, чем значения поперечных. В свою очередь, значения скоростей поперечных волн, поляризованных перпендикулярно гексагональной оси (T_2), больше таковых, поляризованных параллельно ей (T_1). В направлении [100] различие между скоростями поперечных волн при 0 GPa существенно, однако с ростом давления скорость T_1 -волны увеличивается, а T_2 -волны — уменьшается. При давлении ~ 11 GPa их значения приравниваются и при больших давлениях скорость T_1 -волны становится больше. В направлении [001] скорости поперечных волн равны.

В первой фазе изменение под давлением скоростей волн, рассчитываемых из упругих постоянных C_{33} и C_{44} , характеризующих межслоевое взаимодействие, сильнее, чем изменение других скоростей. Однако после фазо-

вого перехода наблюдается смягчение упругих постоянных, а, следовательно, скоростей упругих волн. При 0 GPa значения скоростей составили: в направлении [001] $v_L = 2948$, $v_{T_2} = v_{T_1} = 1667$; в направлении [100] $v_L = 5566$, $v_{T_2} = 3420$ и $v_{T_1} = 1667$ в единицах m/s. В направлении [101] скорость продольной волны составила $v_L = 4180$ m/s. Полученные результаты хорошо согласуются с имеющимися литературными данными [6,9,11,12].

Из значений полной энергии и объема, по уравнениям состояния (EOS — equation of state) Birch первого и второго порядков (1st, 2nd order) [28], Murnaghan [29] и Keane [30] были получены значения модуля всестороннего сжатия B_0 , его производных B'_0 , B''_0 , минимального значения полной энергии E_{\min} и минимального объема рассматриваемой элементарной ячейки V_0 в равновесном состоянии, которые представлены в табл. 4.

Сравнение параметров адекватных уравнений состояния показывает, что обе фазы энергетически близки, однако энергия основного состояния структуры $P2$ ниже (см. табл. 4). Как видно из этой таблицы результаты наших расчетов находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными, за исключением работы [15].

В табл. 5 приведены значения усредненных упругих модулей, рассчитанные известными методами усреднения по Фойгту (B_F , G_F), Ройсу [31] (B_R , G_R) и Хиллу [32] (B_H , G_H) в интервале давлений 0–20 ГПа с учетом фазового перехода (B — модуль всестороннего сжатия, G — модуль сдвига). Здесь также приведены рассчитанные значения модуля Юнга E и коэффициента Пуассона ν .

Данные табл. 5 показывают, что с ростом давления упругие модули GaS увеличиваются, причем выше 10 ГПа значения адекватных модулей почти приравниваются. Наблюдается также рост модуля Юнга и коэффициента Пуассона с давлением.

Таким образом, из первых принципов в интервале давлений 0–20 ГПа с учетом структурного фазового перехода, происходящего при ~ 3 ГПа, рассчитаны все упругие постоянные кристалла GaS. Установлено, что с ростом давления упругие константы монотонно увеличиваются, причем изменение межслоевых констант превышает изменение внутрислоевых. Из упругих констант определены скорости упругих волн вдоль различных направлений симметрии. Кроме скорости поперечной волны, распространяющейся в направлении [100] и поляризованной перпендикулярно гексагональной оси, которая слегка уменьшается с увеличением давления, скорость волн во всех других направлениях монотонно увеличивается. Приведены значения усредненных упругих модулей, модуля Юнга и коэффициента Пуассона, которые также увеличиваются с давлением.

Список литературы

- [1] R.W.G. Wysof. Crystal Structure. Interscience, N.Y. (1965).
- [2] Н. Абдуллаев. ФТТ **48**, 623 (2006).
- [3] Г.И. Беленький, Э.Ю. Салаев, Р.А. Сулейманов. УФН **155**, 89 (1988).
- [4] A. Polian, M. Besson, M. Grimsditch, H. Vogt. Phys. Rev. B **25**, 2767 (1982).
- [5] A. Polian, M. Grimsditch, M. Fisher, M. Gattulle. J. Physique — LETTRES **43**, L-405, (1982).
- [6] Y. Honma, M. Yamada, K. Yamamoto, K. Abe. J. Phys. Soc. of Jpn **52**, 2777, (1983).
- [7] Ch. Hamaguchi, K. Wasa, M. Yamawaki. III Int. Conf. Phonon Scattering in Condensed Matter, Providence 1979/Ed. H.J. Maris, Plenum Press (1980). p. 441.
- [8] B.M. Powell, S. Jandl, J.L. Brebner, F. Levy. J. Phys. C **10**, 3039, (1977).
- [9] M. Gattulle, M. Fischer, A. Chevy. Phys. Status. Solidi. B **119**, 327 (1983).
- [10] M. Gattulle, M. Fischer. Phys. Status. Solidi B **121**, 59 (1984).
- [11] V. Farajov, R. Akdeniz, E. Kasumova. Int. Sci. Conf. UNITECH'03 — Gabrovo proceedings. Technical University of Gabrovo, Bulgaria (20-21 November 2003) II, 333 (2003).
- [12] З. Джахангирли. ФТТ **54**, 1024 (2012).
- [13] H. Shinriki, K. Takemura, K. Asaumi, S. Minomura. 19th Eur. High Pressure Conf. Abstracts 15 (1981).
- [14] H. D'Amour, W.B. Holzapfel, A. Polian, A. Chevy. Solid State Commun. **44**, 853 (1982).
- [15] J. Pellicer-Porres, E. Machado-Charry, A. Segura, S. Gilliland, E. Canadell, P. Ordejon, A. Polian, P. Munsch, A. Chevy, N. Guignot. Phys. Status Solidi B **244**, 169 (2007).
- [16] E. Machado-Charry. First principles calculations of surfaces and layered materials. Thesis to apply for the degree of Doctor at the Universitat Autònoma de Barcelona in the Theoretical and Computational Chemistry Program (2007).
- [17] B. Wen, R. Melnik, Sh. Yao, T. Li. Mater. Sci. Semiconductor Proc. **13**, 295 (2010).
- [18] P. Hohenberg, W. Kohn. Phys. Rev. **136**, B864 (1964).
- [19] X. Gonze, J.-M. Beuken, R. Caracas, F. Detraux, M. Fuchs, G.-M. Rignanese, L. Sindic, M. Verstraete, G. Zerath, F. Jollet, M. Torrent, A. Roy, M. Mikami, Ph. Ghosez, J.-Y. Raty, D.C. Allan. Comput. Mater. Sci. **25**, 478 (2002).
- [20] www.azgrid.org
- [21] W. Kohn, L.J. Sham. Phys. Rev. **140**, A1133 (1965).
- [22] C. Hartwigsen, S. Goedecker, J. Hutter. Phys. Rev. B **58**, 3641 (1998).
- [23] H.J. Monkhorst, J.D. Pack. Phys. Rev. B **13**, 5188 (1976).
- [24] G. Lucazeau. Solid State Commun. **18**, 917 (1976).
- [25] B. Erdinc, H. Akkus, K. Goksen. Gazi University J. Sci. **23**, 413 (2010).
- [26] E. Aulich, J.L. Brebner, E. Mooser. Phys. Status Solidi **31**, 129 (1969).
- [27] A. Kuhn, A. Chevy, R. Chevalier. Acta Crystallogr. B **32**, 983 (1976).
- [28] F. Birch. J. Geophys. Res. **57**, 227 (1952).
- [29] F.D. Murnaghan. Finite Deformation of an Elastic Solid. Wiley; N.Y. (1951). 140 с.
- [30] A. Keane. Australian J. Phys. **7**, 323 (1954).
- [31] Т.Д. Шермергор. Теория упругости микронеоднородных сред. Наука, М. (1977). 400 с.
- [32] R. Hill. Proc. Phys. Soc. A **65**, 349 (1952).