

01,14

## Упругие свойства поликристаллического Fe: эффект давления

© О.М. Красильников, Ю.Х. Векилов

Национальный исследовательский технологический университет „МИСиС“,  
Москва, Россия

E-mail: omkras@mail.ru

Поступила в Редакцию 15 июля 2025 г.

В окончательной редакции 17 декабря 2025 г.

Принята к публикации 17 декабря 2025 г.

Упругие модули поликристалла (константы Ламе) второго и третьего порядка при давлении  $P$  выражены через производные свободной энергии Гиббса по инвариантам тензора конечных деформаций Лагранжа. Приведены соотношения, связывающие эти константы Ламе с соответствующими упругими постоянными монокристаллических зерен с гексагональной решеткой, составляющих поликристалл. На основе данных по упругим постоянным второго и третьего порядка  $\varepsilon$ -Fe рассчитаны соответствующие константы Ламе поликристаллического Fe в диапазоне давлений от 50 до 340 GPa. С помощью полученных результатов проведен анализ интенсивности различных трехфононных процессов рассеяния в железе и влияние на них давления.

**Ключевые слова:** высокие давления, константы Ламе второго и третьего порядка, трехфононные процессы рассеяния.

DOI: 10.61011/FTT.2026.01.62570.198-25

### 1. Введение

Железо — основной компонент внутреннего ядра Земли, где давление достигает 330–360 GPa. Имеются многочисленные доказательства стабильности эпсилон-фазы железа с гексагональной плотноупакованной (ГПУ) кристаллической решеткой при таких экстремально высоких давлениях и при низких и умеренных температурах [1–4]. Согласно экспериментальным данным, переход Fe из объемно-центрированной кубической (ОЦК) в ГПУ-структуру при комнатной температуре происходит при давлениях 10–18 GPa, и ГПУ-фаза остается устойчивой, по крайней мере, до 400 GPa [3–5]. Знание упругих свойств этой фазы имеет важное значение по многим причинам. Например, упругие свойства железа влияют на распространение сейсмических волн через ядро Земли, и знание их критично для интерпретации сейсмологических данных и понимания внутренней структуры нашей планеты [6]. Исследование упругих свойств поликристаллического железа при сверхвысоких давлениях является перспективной задачей.

Упругие свойства  $\varepsilon$ -Fe изучались в различных экспериментальных и теоретических работах. В работах [7–10] из экспериментов с поликристаллическими образцами  $\varepsilon$ -Fe найдены упругие постоянные второго порядка (SOEC) монокристаллов при различных давлениях. Результаты расчетов SOEC монокристаллического  $\varepsilon$ -Fe в интервале давлений до 400 GPa в рамках теории функционала плотности (DFT) приведены в [11–16]. В работе [16] рассчитаны также и упругие постоянные третьего порядка (TOEC)  $\varepsilon$ -Fe в диапазоне давлений 50–340 GPa. Наряду с SOEC, которые характеризуют линейный упругий отклик материала, упругие постоянные третьего порядка определяют нелинейный от-

клик на конечную деформацию и важны для объяснения ангармонических свойств твердого тела, таких как тепловое расширение, зависимость скорости звука от температуры и приложенной нагрузки, генерации второй гармоники при распространении в твердом теле ультразвуковых волн конечной амплитуды [17–20].

В случае  $\varepsilon$ -Fe речь идет об упругих постоянных твердого тела, находящегося при очень высоком давлении (давление сравнимо с величиной объемного модуля). Давление  $P$  является, наряду с температурой  $T$ , фундаментальной термодинамической переменной. Однако, в отличие от  $T$ , исследования при высоких давлениях долго сдерживались отсутствием возможности как получения статических давлений в мегабарном диапазоне (100 GPa), так и измерения свойств сильно сжатого материала. В настоящее время после изобретения ячейки с алмазными наковальнями (DAC) и появления современных технологий микро-нано-зондирования появилась возможность исследовать состояние вещества за пределами трех мегабар. В результате, количество исследований свойств твердых тел при высоких давлениях растет быстрыми темпами [21].

Давление кардинально изменяет все свойства твердых тел, в том числе упругие — упругие постоянные различных порядков. Упругие постоянные  $n$ -го порядка ( $n \geq 2$ ) определяются как соответствующие частные производные термодинамического потенциала термоупругой среды, подвергнутой малой, но конечной деформации [22]. В переменных  $S$  (энтропия) и  $V$  (объем) термодинамическим потенциалом является внутренняя энергия  $U = U(S, V)$ , в переменных  $T$  и  $V$  — свободная энергия Гельмгольца  $F = F(T, V)$ . Для этих двух случаев (давление отсутствует) стандартное определение упругих

постоянных  $n$ -го порядка ( $n \geq 2$ ) дано в работе [22]:

$$C_{ijkl...}^S = \frac{1}{V_0} \left( \frac{\partial^n U}{\partial \eta_{ij} \partial \eta_{kl} \dots} \right)_S, \quad (1)$$

$$C_{ijkl...}^T = \frac{1}{V_0} \left( \frac{\partial^n F}{\partial \eta_{ij} \partial \eta_{kl} \dots} \right)_T, \quad (2)$$

Здесь  $C_{ijkl...}^S$  и  $C_{ijkl...}^T$  — соответственно адиабатические и изотермические упругие постоянные при  $P = 0$ ,  $\eta_{ij}$  — компоненты тензора конечных деформаций Лагранжа [17],  $V_0$  — объем в исходном (недеформированном) состоянии. Производные вычисляются при постоянной энтропии  $S$  и температуре  $T$ .

В переменных  $S$  и  $P$  термодинамическим потенциалом служит энтальпия  $H(S, P)$ , а в переменных  $T$  и  $P$  — свободная энергия Гиббса  $G(T, P)$ . Поэтому адиабатические и изотермические упругие постоянные различного порядка предварительно нагруженного кристалла (при давлении  $P$ ) можно определить, как соответствующие производные энтальпии  $H$  и потенциала Гиббса  $G$  по компонентам  $\eta_{ij}$  [23–25]:

$$\tilde{C}_{ijkl...}^S = \frac{1}{V_0} \left( \frac{\partial^n H}{\partial \eta_{ij} \partial \eta_{kl} \dots} \right)_S, \quad (3)$$

$$\tilde{C}_{ijkl...}^T = \frac{1}{V_0} \left( \frac{\partial^n G}{\partial \eta_{ij} \partial \eta_{kl} \dots} \right)_T, \quad (4)$$

Эти постоянные называют „эффективными“ упругими постоянными, чтобы подчеркнуть, что они определяются не только межатомным взаимодействием (производными  $n$ -го порядка свободной (внутренней) энергии по компонентам тензора деформации  $\eta_{ij}$ ), но и непосредственно внешней нагрузкой [23,25]. Они полностью определяют упругие свойства нагруженного кристалла: соотношение напряжения Коши (true stress) — деформация  $\eta_{ij}$ , уравнение малых колебаний, условия устойчивости [17,26]. В случае гидростатического давления постоянные (3) и (4) обладают полной фогтовской симметрией к перестановке индексов [17]. При  $P = 0$  упругие постоянные (3) и (4) совпадают с постоянными для ненагруженного кристалла (1) и (2). Далее, говоря об упругих постоянных, мы будем иметь в виду постоянные (4).

В поликристаллическом состоянии материал можно рассматривать как изотропный агрегат монокристаллических зерен. Соответственно, упругие модули поликристалла (константы Ламе) можно получить путем усреднения тензора упругих постоянных соответствующего порядка по всем ориентациям монокристаллических зерен. В работах [27–30] получены соотношения, связывающие константы Ламе второго (SOLC) и третьего порядка (TOLC) с упругими постоянными 2-го и 3-го порядка кристалла произвольной симметрии (давление отсутствует), а также рассмотрен частный случай монокристаллических зерен кубической симметрии.

В настоящей работе приведены выражения для констант Ламе 2-го и 3-го порядка через упругие постоянные монокристаллических зерен гексагональной

симметрии, составляющих поликристалл, находящийся при высоком давлении. На основе этих соотношений, с использованием данных по упругим постоянным  $\varepsilon$ -Fe [16], рассчитаны SOLC и TOLC поликристаллического Fe в широком интервале давлений (50–340 GPa). Оценено также влияние различных трехфоновных процессов рассеяния на ангармоническое поведение  $\varepsilon$ -Fe. Полученные результаты важны для интерпретации сейсмических исследований, позволяют глубже понять механизмы фазовых переходов, происходящих при высоких давлениях, способствуют разработке новых материалов, способных выдерживать экстремальные внешние воздействия, такие как высокие давления и температуры.

## 2. Основные определения и соотношения

Рассмотрим изотропное твердое тело (поликристалл) в равновесном состоянии при давлении  $P$  и температуре  $T$ . При заданных  $P$  и  $T$  состояние системы описывается свободной энергией Гиббса  $G$ . Пусть поликристалл подвергается малой, но конечной деформации, описываемой тензором Лагранжа с компонентами  $\eta_{ij}$ . Величина  $G$  не должна зависеть от выбора системы координат. Она инвариантна относительно вращения и перемещения деформированного тела как целого. Это возможно, если  $G$  является функцией инвариантов тензора деформации. Главные инварианты тензора деформации имеют вид [19]

$$I_1 = \text{tr}(\eta) = \eta_{11} + \eta_{22} + \eta_{33}, \quad (5a)$$

$$I_2 = \frac{1}{2} [(\text{tr} \eta)^2 - \text{tr} \eta^2] \\ = (\eta_{11}\eta_{22} - \eta_{12}^2) + (\eta_{11}\eta_{33} - \eta_{13}^2) + (\eta_{22}\eta_{33} - \eta_{23}^2), \quad (5b)$$

$$I_3 = \det \eta \\ = \eta_{11}\eta_{22}\eta_{33} + 2\eta_{23}\eta_{13}\eta_{12} - \eta_{11}\eta_{23}^2 - \eta_{22}\eta_{13}^2 - \eta_{33}\eta_{12}^2. \quad (5c)$$

Поскольку деформации являются малыми, разложим  $G$  в ряд по инвариантам (5) вблизи недеформированного состояния. Так как недеформированное состояние считается равновесным, то  $\left(\frac{\partial G}{\partial I_1}\right)_0 = 0$ . Поэтому разложение начинается с квадратичных членов. Коэффициенты этого разложения представляют собой коэффициенты Ламе 2-го и 3-го порядка.

Из инвариантов (5) можно создать два квадратичных скаляра ( $I_1^2, I_2$ ), и три кубических ( $I_1^3, I_1 I_2, I_3$ ). По аналогии с [19] получим

$$\left. \begin{aligned} \mu &= -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial G}{\partial I_2} \right)_0, \\ \lambda + 2\mu &= \left( \frac{\partial^2 G}{\partial I_1^2} \right)_0 \\ \left( \frac{\partial G}{\partial I_3} \right)_0 &= n = A, \quad \left( \frac{\partial^2 G}{\partial I_1 \partial I_2} \right)_0 = -4m = -2A - 4B \\ \left( \frac{\partial^3 G}{\partial I_1^3} \right)_0 &= 4m + 2l = 2A + 6B + 2C \end{aligned} \right\}. \quad (6)$$

Здесь  $\lambda$  и  $\mu$  — константы Ламе 2-го порядка;  $l, m, n$  — константы Ламе 3-го порядка в определении Мурнага [31],  $A, B, C$  — в определении Ландау–Лифшица [32]. Константы Ламе (6) представляют собой производные потенциала Гиббса соответствующего порядка, а не свободной энергии Гельмгольца, как в [31,32]. Конечно, при  $P = 0$  эти определения совпадают.

Выражение для свободной энергии Гиббса, отнесенное к единице объема, с учетом вклада 3-го порядка имеет вид

$$\frac{\Delta G}{V_0} = \frac{1}{2} (\lambda + 2\mu) I_1^2 - 2\mu I_2 + \frac{1}{3} (l + 2m) I_1^3 - 2m I_1 I_2 + n I_3, \quad (7)$$

где  $\Delta G = G(P, T, \eta) - G(P, T, 0)$ ,  $V_0$  — объем тела в недеформированном состоянии. В этом приближении упругие свойства изотропного тела характеризуются пятью константами. Чаще всего в качестве констант Ламе 3-го порядка используют аналогичные величины в определении Тоупина и Бернштейна —  $\nu_1, \nu_2, \nu_3$  [33], связанные с  $l, m, n$  соотношениями [28]:

$$\left. \begin{aligned} \nu_1 &= 2(l - m) + n = 2C \\ \nu_2 &= m - \frac{1}{2}n = B \\ \nu_3 &= \frac{1}{4}n = \frac{1}{4}A \end{aligned} \right\}. \quad (8)$$

При таком выборе констант Ламе все они совпадают с независимыми упругими постоянными изотропного твердого тела [28]:

$$\lambda = \tilde{C}_{12}^*, \quad \mu = \tilde{C}_{44}^*, \quad \nu_1 = \tilde{C}_{123}^*, \quad \nu_2 = \tilde{C}_{144}^*, \quad \nu_3 = \tilde{C}_{456}^*. \quad (9)$$

Здесь упругие постоянные изотропного твердого тела даны в обозначениях Фогта (1 1 – 1, 2 2 – 2, 3 3 – 3, 2 3 – 4, 1 3 – 5, 1 2 – 6).

### 3. Методика и детали расчета

Поликристаллический образец железа при высоком давлении представляет собой совокупность большого числа монокристаллических зерен с ГПУ-структурой. Зерна произвольно ориентированы, их размеры пренебрежимо малы по сравнению с размерами образца, но достаточно велики, чтобы обладать объемно-упругими свойствами. Следуя Фогту [23], считаем, что все монокристаллические зерна в поликристалле находятся в одном и том же деформированном состоянии, поэтому упругие константы такого материала описываются тензором упругих постоянных соответствующего порядка, усредненному по всем направлениям.

Для нахождения изотропных средних значений упругих постоянных 2-го и 3-го порядка поликристаллического  $\varepsilon$ -Fe воспользуемся результатами недавно опубликованной работы [34]. В ней разработаны численные алгоритмы символьных вычислений эффективных упругих постоянных второго–шестого порядка для поликристаллических агрегатов, имеющих симметрию любого класса, в т.ч. и полную изотропию. Предыдущие

изотропные средние значения были ограничены 4-м порядком (см. [35]), поэтому полученные в работе [34] результаты существенно расширяют возможности исследования нелинейной упругости поликристаллических материалов [36].

В приложении Appendix D (см. [34]) приведены выражения для изотропных средних значений упругих постоянных в случае произвольной симметрии кристаллитов. Учитывая соотношения между упругими постоянными для гексагональной структуры (классы 622, 6 $\bar{2}m$ , 6/ $mmm$ ) (Appendix A, [34]), получим для констант Ламе (9) поликристаллического железа при давлении  $P$  и температуре  $T$ :

$$\lambda = \tilde{C}_{12}^* = \frac{1}{15} (\tilde{C}_{11} + 5\tilde{C}_{12} + 8\tilde{C}_{13} + \tilde{C}_{33} - 4\tilde{C}_{44}); \quad (10)$$

$$\mu = \tilde{C}_{44}^* = \frac{1}{15} (3.5\tilde{C}_{11} - 2.5\tilde{C}_{12} - 2\tilde{C}_{13} + \tilde{C}_{33} + 6\tilde{C}_{44}); \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \nu_1 = \tilde{C}_{123}^* &= \frac{1}{105} (-\tilde{C}_{111} + 10\tilde{C}_{112} + 3\tilde{C}_{113} + 11\tilde{C}_{122} \\ &+ 63\tilde{C}_{123} + 18\tilde{C}_{133} - 84\tilde{C}_{144} + 12\tilde{C}_{155} + \tilde{C}_{333} - 12\tilde{C}_{344}); \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \nu_2 = \tilde{C}_{144}^* &= \frac{1}{105} (2.5\tilde{C}_{111} + 3\tilde{C}_{112} + 13.5\tilde{C}_{113} + 0.5\tilde{C}_{122} \\ &- 24.5\tilde{C}_{123} + 4\tilde{C}_{133} + 56\tilde{C}_{144} - 16\tilde{C}_{155} + \tilde{C}_{333} + 2\tilde{C}_{344}); \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \nu_3 = \tilde{C}_{456}^* &= \frac{1}{210} (8.5\tilde{C}_{111} - \tilde{C}_{112} - 15\tilde{C}_{113} - 9.5\tilde{C}_{122} \\ &+ 21\tilde{C}_{123} - 6\tilde{C}_{133} - 63\tilde{C}_{144} + 45\tilde{C}_{155} + 2\tilde{C}_{333} + 18\tilde{C}_{344}). \end{aligned} \quad (14)$$

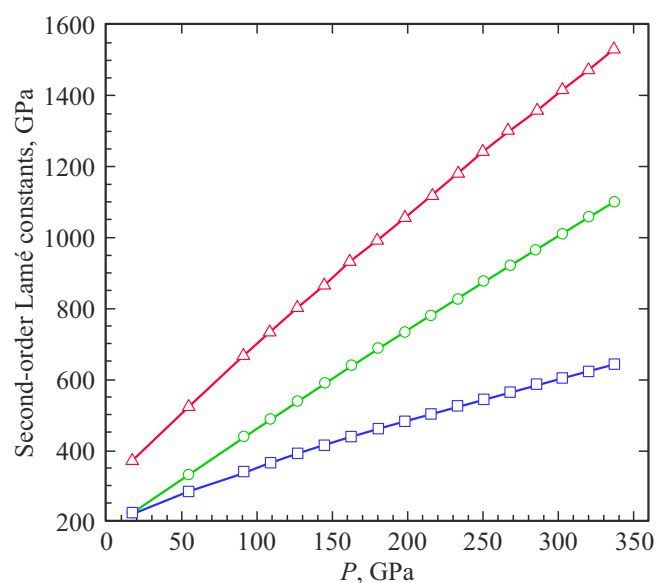
Здесь  $\tilde{C}_{\alpha\beta}$  — упругие постоянные (4) (точка означает, что здесь возможны упругие постоянные как 2-го, так и 3-го порядка).

Формулы (10)–(14) полностью совпадают с полученными ранее соотношениями для констант Ламе 2-го и 3-го порядка изотропных агрегатов гексагональных кристаллов [37] (формулы (24)–(28)), если учесть, что  $C_{222} = C_{111} + C_{112} - C_{122}$  (Appendix A, [34]).

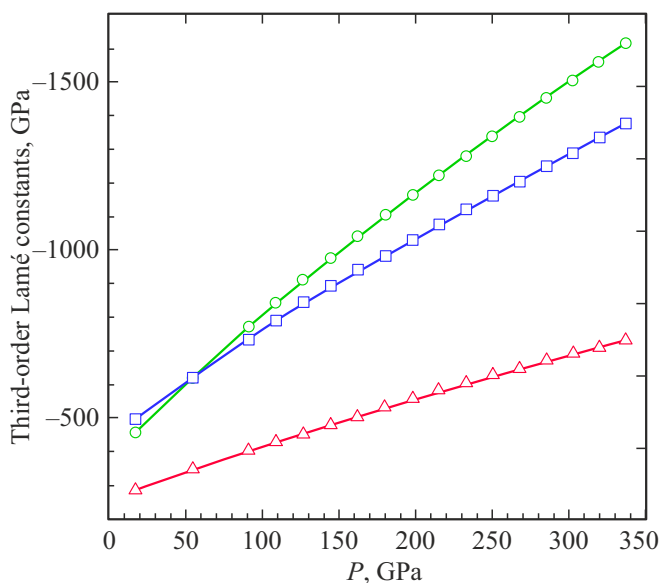
Нужно отметить, что полученные нами ранее в работах [35] и [38] аналогичные соотношения для констант Ламе 4-го порядка поликристаллов с зернами кубической и гексагональной симметрии также полностью совпадают с соотношениями, следующими из Appendix B, [34].

### 4. Результаты расчета и их обсуждение

В работе [16] в рамках теории функционала плотности (DFT) рассчитаны упругие постоянные 2-го и 3-го порядка (см. формулу (4)) ГПУ железа в интервале давлений 50–340 ГПа при  $T = 0$  К. Используя эти данные и соотношения (10)–(14), найдем значения констант Ламе в указанном интервале давлений. Полученные



**Рис. 1.** Зависимость от давления модуля всестороннего сжатия  $K = \lambda + (2/3)\mu$ , а также  $\lambda$  и  $\mu$ . Треугольники —  $K$ ; круги —  $\lambda$ ; квадраты —  $\mu$ .



**Рис. 2.** Зависимость от давления констант Ламе 3-го порядка. Треугольники —  $\nu_1$ ; круги —  $\nu_2$ ; квадраты —  $\nu_3$ .

результаты показаны на рис. 1 и 2, а часть из них приведена в табл. 1.

Видно, что во всем исследованном интервале давлений константы  $\lambda$  и  $\mu$  положительны, а все константы Ламе 3-го порядка имеют отрицательные значения. С ростом давления все константы 2-го и 3-го порядка увеличиваются по абсолютной величине. При этом зависимость всех констант Ламе от давления близка к линейной.

Ключевую роль при объяснении ряда свойств твердых тел, таких как теплопроводность, температурные

**Таблица 1.** Результаты расчетов констант Ламе (GPa) в поликристаллическом железе

| $P$ , GPa | $K$   | $\lambda$ | $\mu$ | $\nu_1$ | $\nu_2$ | $\nu_3$ |
|-----------|-------|-----------|-------|---------|---------|---------|
| 54.27     | 521.3 | 331.8     | 284.3 | -348.4  | -622.3  | -623.0  |
| 90.67     | 664.3 | 438.2     | 339.1 | -401.8  | -772.1  | -736.2  |
| 126.6     | 799.6 | 540.0     | 389.5 | -451.1  | -910.2  | -840.9  |
| 162.1     | 929.7 | 638.5     | 436.9 | -500.5  | -1041   | -940    |
| 197.4     | 1056  | 734.8     | 481.3 | -554.6  | -1163   | -1028   |
| 232.4     | 1178  | 829.0     | 523.7 | -602.8  | -1280   | -1117   |
| 267.3     | 1298  | 921.6     | 564.2 | -647.0  | -1393   | -1203   |
| 302.1     | 1415  | 1013      | 602.9 | -687.5  | -1504   | -1290   |
| 319.4     | 1473  | 1059      | 621.7 | -709.5  | -1560   | -1333   |
| 336.6     | 1531  | 1104      | 640.5 | -729.4  | -1616   | -1375   |

**Таблица 2.** Относительная интенсивность трехфононных процессов рассеяния в поликристаллическом железе

| $P$ , GPa | $d/c$ | $d/b$ | $b/c$ |
|-----------|-------|-------|-------|
| 54.27     | 401   | 151.0 | 2.65  |
| 126.6     | 381   | 148.4 | 2.57  |
| 197.4     | 369   | 147.5 | 2.50  |
| 267.3     | 361   | 147.4 | 2.45  |
| 336.6     | 355   | 147.3 | 2.41  |

зависимости теплоемкости и скорости звука играют трехфононные процессы рассеяния. Используя соотношения (A1)–(A4) (см. Приложение), оценим интенсивность этих процессов в поликристаллическом железе при высоких давлениях. В табл. 2 приведены отношения интенсивностей различных трехфононных процессов рассеяния в интервале давлений 50–340 GPa.

Видно, что решающее значение в объяснении ангармонических свойств железа при высоких давлениях имеет процесс  $d$  (A4),  $(L+L \leftrightarrow L)$ . Два других процесса —  $b$  (A2) и  $c$  (A3) — гораздо менее эффективны.

С ростом давления интенсивности трехфононного рассеяния  $b$ ,  $c$  и  $d$  монотонно увеличиваются примерно в одинаковой степени:

$$\frac{b(337)}{b(54)} = 5.2; \quad \frac{c(337)}{c(54)} = 5.7; \quad \frac{d(337)}{d(54)} = 5.0.$$

## 5. Заключение

Константы Ламе 2-го и 3-го порядка при произвольном давлении  $P$  определены методом разложения свободной энергии Гиббса по инвариантам тензора конечных деформаций Лагранжа. Для изотропного агрегата монокристаллических зерен с гексагональной структурой получены соотношения, связывающие константы Ламе 2-го и 3-го порядка с соответствующими упругими постоянными кристаллитов. С использованием данных по упругим постоянным  $\varepsilon$ -Fe вычислены константы Ламе 2-го и 3-го порядка поликристаллического железа

в диапазоне давлений от 50 до 340 ГПа. С давлением все константы 2-го и 3-го порядка растут по абсолютной величине по закону, близкому к линейному. В данном интервале давлений также оценен вклад различных трехфононных процессов рассеяния в ангармонические свойства поликристаллического железа.

Полученные в работе результаты важны для интерпретации геофизических исследований и способствуют разработке новых материалов, пригодных для работы в экстремальных условиях (высокие давления и температуры).

## Приложение

Кубический ангармонический член в разложении упругой энергии можно связать с интенсивностями трехфононного рассеяния (the three-phonon scattering strengths)  $[\overline{A^{ss's''}}]^2$  [39], которые описывают в изотропной континуальной модели следующие возможные процессы рассеяния акустических фононов [39]:

$$T+T \leftrightarrow L; \quad T+L \leftrightarrow L; \quad T+T \leftrightarrow T; \quad L+L \leftrightarrow L,$$

где T и L — поперечные и продольные акустические фононы соответственно.

В терминах изотропных упругих констант величины  $[\overline{A^{ss's''}}]^2$  имеют вид [39]

$$a = [\overline{A^{TTT}}]^2 = 0, \quad (A1)$$

$$b = [\overline{A^{TLL}}]^2 = 0.0255(A + 3\mu)^2 + 0.1333(\lambda + 2B)^2 + 0.0593(A + 3\mu)(\lambda + 2B), \quad (A2)$$

$$c = [\overline{A^{TTL}}]^2 = 0.1333[\lambda^2 + 1.5B(\lambda + B)] + (A + 4\mu) \times [0.0124(A + 4\mu) + 0.0222(\lambda + 2B)], \quad (A3)$$

$$d = [\overline{A^{LLL}}]^2 = [3\lambda + 6\mu + 2(A + 3B + C)]^2. \quad (A4)$$

Здесь A, B и C — константы Ламе 3-го порядка в определении Ландау–Лифшица, связанные с  $\nu_1, \nu_2, \nu_3$  соотношением (8). Из (A1) следует, что в модели изотропного континуума интенсивность рассеяния для процесса  $T+T \leftrightarrow T$  равна нулю.

## Благодарности

Ю.Х. Векилов также благодарит за финансовую поддержку Российский научный фонд (проект № 22-12-00193).

## Финансирование работы

Работа выполнена при финансовой поддержке федеральной программы академического лидерства „Приоритет 2030“ (стратегический проект МИСиС „Квантовый интернет“).

## Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] L. Stixrude, R.E. Cohen. *Sci.* **267**, 5206, 1972 (1995).
- [2] X. Sha, R.E. Cohen. *Geophys. Res. Lett.* **37**, 10, L10302 (2010).
- [3] A.P. Jephcoat, H.K. Mao, P.M. Bell. *J. Geophys. Res.: Solid Earth* **91**, B5, 4677 (1986).
- [4] R.D. Taylor, M.P. Pasternak, R. Jeanloz. *J. Appl. Phys.* **69**, 8, 6126 (1991).
- [5] L. Stixrude. *Phys. Rev. Lett.* **108**, 5, 055505 (2012).
- [6] X. Song. *Rev. Geophys.* **35**, 3, 297 (1997).
- [7] A.K. Singh, H.K. Mao, J. Shu, R.J. Hemley. *Phys. Rev. Lett.* **80**, 10, 2157 (1998).
- [8] S. Merkel, J.F. Shu, P. Gillet, H. Mao, R.J. Hemley. *J. Geophys. Res.: Solid Earth* **110**, B5, B05201 (2005).
- [9] D. Antonangeli, F. Occelli, H. Requardt, J. Badro, G. Fiquet, M. Krisch. *Earth Planet. Sci. Lett.* **225**, 1–2, 243 (2004).
- [10] W.L. Mao, V.V. Struzhkin, A.Q.R. Baron, S. Tsutsui, C.E. Tommaseo, H.-R. Wenk, M.Y. Hu, P. Ghow, W. Sturhahn, J. Shu, R.J. Hemley, D.L. Heinz, H.-K. Mao. *J. Geophys. Res.: Solid Earth* **113**, B9, B09213 (2008).
- [11] G. Steinle-Neumann, L. Stixrude, R.E. Cohen. *Phys. Rev. B* **60**, 2, 791 (1999).
- [12] C. Asker, L. Vitos, I.A. Abrikosov. *Phys. Rev. B* **79**, 21, 214112 (2009).
- [13] L. Vočadlo, D.P. Dobson, I.G. Wood. *Earth Planet. Sci. Lett.* **288**, 3–4, 534 (2009).
- [14] X. Sha, R.E. Cohen. *Phys. Rev. B* **81**, 9, 094105 (2010).
- [15] B. Martorell, J. Brodholt, I.G. Wood, L. Vočadlo. *Earth Planet. Sci. Lett.* **365**, 143 (2013).
- [16] O.M. Krasilnikov, A.V. Lugovskoy, V. Dikan, M.P. Belov, Y.Kh. Vekilov, I.A. Abrikosov. *Phys. Rev. B* **99**, 18, 184101 (2019).
- [17] D.C. Wallace. In: *Solid State Physics*, v. 25 / Eds H. Ehrenreich, F. Seitz, D. Turnbull. Academic Press, N.Y. (1970). P. 301.
- [18] О.В. Руденко, С.И. Солуян. *Теоретические основы нелинейной акустики*. Наука, М. (1975). 287 с. [O.V. Rudenko, S.I. Soluyan. *Theoretical Foundations of Nonlinear Acoustics*. Plenum, Consultants Bureau, New York (1977).]
- [19] Л.К. Зарембо, В.А. Красильников. *УФН* **102**, 12, 549 (1970). [L.K. Zarembo, V.A. Krasil'nikov. *Sov. Phys. – Usp.* **13**, 6, 778 (1971).]
- [20] Y. Hiki. *Annu. Rev. Mater. Sci.* **11**, 1, 51 (1981).
- [21] H.-K. Mao, X.-J. Chen, Y. Ding, B. Li, L. Wang. *Rev. Mod. Phys.* **90**, 1, 015007 (2018).
- [22] K. Brugger. *Phys. Rev.* **133**, 6A, A1611 (1964).
- [23] G.R. Barsch, Z.P. Chang. *J. Appl. Phys.* **39**, 7, 3276 (1968).
- [24] S.L. Qiu, P.V. Marcus. *Phys. Rev. B* **68**, 5, 054103 (2003).
- [25] Ю.Х. Векилов, О.М. Красильников, А.В. Луговской. *УФН* **185**, 11, 1215 (2015). [Yu.Kh. Vekilov, O.M. Krasilnikov, A.V. Lugovskoy. *Phys. – Usp.* **58**, 11, 1106 (2015).]
- [26] O.M. Krasilnikov, Yu.Kh. Vekilov, S.I. Simak. *Phys. Rev. B* **105**, 22, 226101 (2022).
- [27] G.R. Barsch. *J. Appl. Phys.* **39**, 8, 3780 (1968).
- [28] W. Wasserbach. *Physica Status Solidi B* **159**, 2, 689 (1990).
- [29] V.A. Lubarda. *J. Mech. Phys. Solids* **45**, 4, 471 (1997).

- [30] D.N. Blaschke. J. Appl. Phys. **122**, 14, 145110 (2017).
- [31] F.D. Murnaghan. Finite Deformations of an Elastic Solid. John Wiley & Sons, New York (1951).
- [32] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теория упругости. Наука, М. (1987). 248 с. [L.D. Landay, E.M. Lifshitz. Theory of Elasticity. Paperback Bunko (1984).]
- [33] R.A. Toupin, B. Bernstein. J. Acoust. Soc. Am. **33**, 2, 216 (1961).
- [34] R.S. Telyatnik. Acta Crystallographica A **80**, 6, 394 (2024).
- [35] O.M. Krasilnikov, Yu.Kh. Vekilov. Phys. Rev. B **100**, 13, 134107 (2019).
- [36] J.D. Clayton. Acta Crystallographica A **81**, 1, 1 (2025).
- [37] O.M. Krasilnikov, A.V. Lugovskoy, Yu.Kh. Vekilov, Yu.E. Lozovik. Mater. Des. **139**, 1 (2018).
- [38] О.М. Красильников, Ю.Х. Векилов. ФТТ **66**, 4, 505 (2024). [O.M. Krasilnikov, Yu.Kh. Vekilov. Phys. Solid State **66**, 4, 489 (2024).]
- [39] G.P. Srivastava. The Physics of Phonons. Taylor & Francis Group, New York (1990). 421 p.

*Редактор Е.В. Толстякова*