

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 ε -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 ε -Fe изучались в различных экспериментальных и теоретических работах. В работах [7–10] из экспериментов с поликристаллическими образцами ε -Fe найдены упругие постоянные второго порядка (SOEC) монокристаллов при различных давлениях. Результаты расчетов SOEC монокристаллического ε -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) ε -Fe в диапазоне давлений 50–340 GPa. Наряду с SOEC, которые характеризуют линейный упругий отклик материала, упругие постоянные третьего порядка определяют нелинейный от-

клика 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 ε -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-nano-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]:

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

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

Здесь $C_{ijkl\dots}^S$ и $C_{ijkl\dots}^T$ — соответственно адиабатические и изотермические упругие постоянные при $P = 0$, η_{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 энталпия $H(S, P)$, 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 энталпии H и потенциала Гиббса G по компонентам η_{ij} [23–25]:

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

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

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 η_{ij}), но и непосредственно внешней нагрузкой [23,25]. Они полностью определяют упругие свойства нагруженного кристалла: соотношение напряжение Коши (true stress) — деформация η_{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 ϵ -Fe [16], рассчитаны SOLC и TOLC поликристаллического Fe в широком интервале давлений (50–340 GPa). Оценено также влияние различных трехфононных процессов рассеяния на ангармоническое поведение ϵ -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 η_{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]

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

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

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

Поскольку деформации являются малыми, разложим G в ряд по инвариантам (5) вблизи недеформированного состояния. Так как недеформированное состояние считается равновесным, то $(\frac{\partial G}{\partial I_1})_0 = 0$. 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 λ и μ — константы Ламе 2-го порядка; l, m, n — константы Ламе 3-го порядка в определении Мурнагана [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 Тулина и Бернштейна — ν_1, ν_2, ν_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]:

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

Здесь упругие постоянные изотропного твердого тела даны в обозначениях Фогта (11 — 1, 22 — 2, 33 — 3, 23 — 4, 13 — 5, 12 — 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 преобладающими 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 ε -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

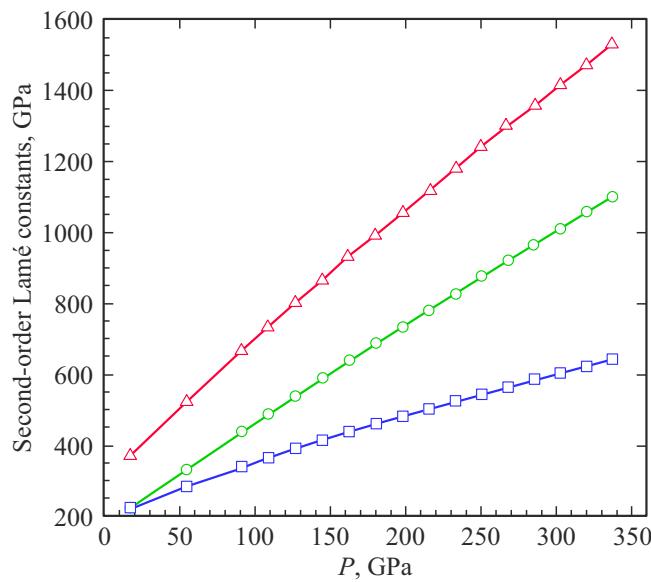


Рис. 1. Зависимость от давления модуля всестороннего сжатия $K = \lambda + (2/3)\mu$, а также λ и μ . Треугольники — K ; круги — λ ; квадраты — μ .

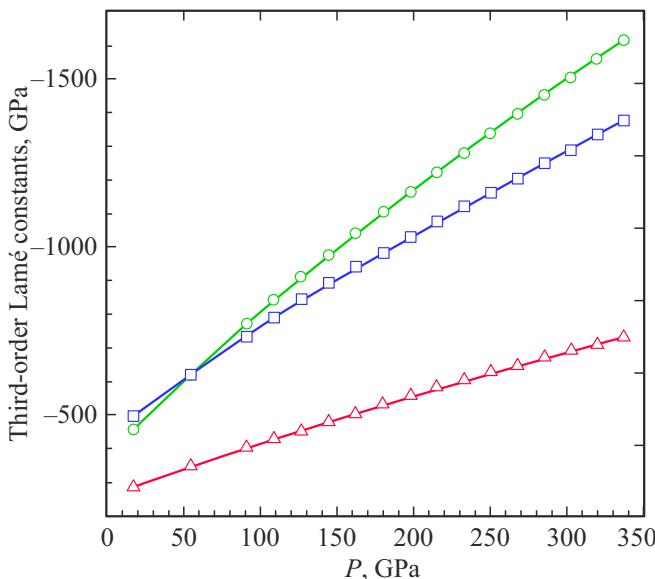


Рис. 2. Зависимость от давления констант Ламе 3-го порядка. Треугольники — ν_1 ; круги — ν_2 ; квадраты — ν_3 .

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

Видно, что во всем исследованном интервале давлений константы λ и μ 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	λ	μ	ν_1	ν_2	ν_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 ϵ -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 ν_1 , ν_2 , ν_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. Ghosh, 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] O.B. 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. Landau, 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] О.М. Красильников, Ю.Кх. Векилов. *Phys. Rev. B* **100**, 13, 134107 (2019).
- [36] J.D. Clayton. *Acta Crystallographica A* **81**, 1, 1 (2025).
- [37] О.М. Красильников, А.В. Луговской, Ю.Кх. Векилов, Ю.Е. Лозовик. *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