

## О ВЛИЯНИИ СПИН-ОРБИТАЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА СТРУКТУРНУЮ СТАБИЛЬНОСТЬ, ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ И ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА СВИНЦА ПОД ДАВЛЕНИЕМ

## THE EFFECT OF SPIN-ORBIT INTERACTION ON THE STRUCTURAL STABILITY, THERMODYNAMIC AND TRANSPORT PROPERTIES OF LEAD UNDER PRESSURE

*Н. А. Смирнов*

*N. A. Smirnov*

Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики, г. Снежинск, Россия

Russian Federal Nuclear Center - All-Russian Scientific Research Institute of Technical Physics, Snezhinsk, Russia

В представленной работе, с помощью первопринципного метода расчета зонной структуры кристаллов FP-LMTO, исследовалась роль спин-орбитального (SO) взаимодействия электронов в релятивистских расчетах структурной стабильности, фононного спектра, упругих, термодинамических, и транспортных свойств кристаллов свинца под давлением. Вычисления выполнены для трех известных полиморфных модификаций свинца гцк (fcc), гпу (hcp) и оцк (bcc) в обобщенном градиентном приближении с использованием обменно-корреляционного функционала PBEsol. Проведенные вычисления показывают, что, в сравнении со скалярно-релятивистским расчетом, учет SO эффектов слабо влияет на сжимаемость Pb. В тоже время, при вычислениях фононного спектра и транспортных свойств роль SO эффектов достаточно высока, по крайней мере, для  $P \leq 150$  GPa. При более высоком давлении вклад от SO взаимодействия постепенно падает, однако не исчезает совсем. Что касается относительной структурной стабильности, то учет SO эффектов слабо влияет на значение давления fcc→hcp структурного перехода, но гораздо более сильно на давление hcp→bcc перехода.

The paper investigates the role of spin-orbit interaction in the prediction of structural stability, lattice dynamics, elasticity, thermodynamic and transport properties of lead under pressure with the FP-LMTO method for the first-principles band structure calculations. Our calculations were carried out for three polymorphous lead modifications (fcc, hcp and bcc) in generalized gradient approximation with the exchange-correlation functional PBEsol. They suggest that compared to the scalar-relativistic calculation, the SO effects insignificantly influence on the compressibility of Pb. At the same time, in the calculation of phonon spectra and transport properties, the role of SO interaction is rather high, at least, for  $P \leq 150$  GPa. At higher pressures the contribution from SO interaction reduces but not vanishes. As for the relative structural stability, our studies show that SO effects influence weakly the pressure of the fcc→hcp structural transition and much higher the pressure of the hcp→bcc transition.

Одним из интересных примеров металлов, в которых проявляется влияния спин-орбитального взаимодействия, является свинец [1–3]. При нормальных условиях Pb обладает простой гранецентрированной кубической кристаллической структурой. Экспериментальные данные по дисперсии фононного спектра несжатого свинца показывают наличие ряда аномалий [4, 5]. Как было продемонстрировано в различных расчетах методом функционала плотности, воспроизвести эти аномалии с

хорошей степенью точности возможно только в релятивистских расчетах с учетом спин-орбитального взаимодействия [1–3]. Стоит отметить, что разница в значениях рассчитанных фононных частот с учетом и без учета SO взаимодействия может достигать несколько десятков процентов [1]. При этом, влияние SO эффектов на свойства основного состояния свинца, а именно равновесный удельный объем  $V_0$  и объемный модуль сжатия  $B_0$ , незначительное [1–3].

Эксперименты по рентгеноструктурному анализу показывают, что при сжатии в свинце происходят два структурных перехода  $fcc \rightarrow hcp$  и  $hcp \rightarrow bcc$  при давлениях  $P \approx 13$  ГПа и  $P \approx 109$  ГПа, соответственно [6–9]. Дальнейшее сжатие этого металла вплоть до 272 ГПа не выявило каких-либо структурных изменений [7, 8]. Первопринципные расчеты относительной устойчивости  $fcc$ ,  $hcp$  и  $bcc$  структур свинца методом псевдопотенциала с учетом SO взаимодействия были выполнены в работе [10], где было достигнуто достаточно хорошее согласие с экспериментом. Хотя авторы [10] отмечают влияние спин-орбитального взаимодействия на относительную устойчивость различных кристаллических структур Pb, однако из этой статьи неясно, как именно повлияет учет SO эффектов на давления структурных переходов. Несколько подробнее этот вопрос освещен в более ранней работе [11], где расчеты были выполнены в приближении сильной связи методом LMTO-TB. Авторы [11] отмечают, что, во-первых, отсутствие релятивистских эффектов неправильно воспроизводит равновесную кристаллическую структуру (структура алмаза вместо  $fcc$ ), во-вторых, по сравнению с обычными скалярно-релятивистскими вычислениями, учет SO взаимодействия значительно улучшает согласие между экспериментом и расчетом величины давления  $fcc \rightarrow hcp$  перехода.

Экспериментальные исследования границ структурных переходов в свинце с ростом давления и температуры были проведены в работах по статическому сжатию этого металла [6,12]. В экспериментах [6] изучалось поведение границы раздела  $fcc$ - $hcp$  фаз в интервале температур от комнатной до  $T \approx 800$  К. Было показано, что для данного температурного интервала, эта граница на  $PT$ -диаграмме проходит почти вертикально, то есть давление  $fcc \rightarrow hcp$  перехода практически не меняется с ростом температуры. В работе [12] была получена граница сосуществования фаз  $hcp$  и  $bcc$  на  $PT$ -диаграмме свинца при температурах выше 1800 К. Линия раздела имеет отрицательный наклон и тройную точку  $hcp$ - $bcc$ -жидкость при  $P \approx 39$  ГПа и  $T \approx 2400$  К. Также в [12] была определена кривая плавления свинца до давлений 80 ГПа. На настоящий момент времени не существует каких-либо первопринципных расчетов границ устойчивости различных кристаллических структур сжатого свинца при  $T > 0$ , а также исследований влияния SO взаимодействия на эти границы.

В данной работе мы изучили влияния спин-орбитального взаимодействия на результаты релятивистских расчетов ряда термодинамических, упругих и транспортных свойств, а также относи-

тельной структурной и динамической стабильности свинца в диапазоне давлений от нуля до нескольких сот ГПа. В работе рассмотрены три кристаллические структуры, которые наблюдались в экспериментах, а именно  $fcc$ ,  $hcp$  и  $bcc$ .

В отличие от большинства исследователей, которые использовали для расчетов свойств Pb метод псевдопотенциала, в данной работе вычисления проведены с помощью полноэлектронного полнопотенциального метода FP-LMTO [13]. К валентным электронам были отнесены  $5d$ ,  $6s$  и  $6p$  электроны Pb, полукоровских электронов не выделялось. Равновесное значение параметра  $c/a$   $hcp$  фазы определялось минимизацией зависимости удельной энергии кристалла  $E_{tot}(c/a)$ . Способ учета SO взаимодействия описан в работе [14].

Внутренние параметры метода были подобраны нами так, чтобы обеспечить разумную точность вычислений удельной энергии ( $\sim 0,1$  mRy/atom). Для интегрирования по зоне Бриллюэна при расчетах кубических структур была выбрана сетка в  $k$ -пространстве  $24 \times 24 \times 24$ , для гексагональной –  $24 \times 24 \times 12$ . Таких сеток вполне хватает для достаточно точного определения термодинамических свойств Pb, однако расчет матрицы электрон-фононного взаимодействия требует более густых сеток. Поэтому для вычислений этой величины использовались сетки  $32 \times 32 \times 32$  ( $fcc$ ,  $bcc$  структуры) и  $36 \times 36 \times 18$  ( $hcp$ ). Энергия обрезания при представлении базисных функций в виде набора плоских волн в междоузельной области зависела от степени сжатия кристалла, но всегда была не менее 680 eV. Набор базисных функций ограничивался моментом  $l_{max}^b = 3$ . Для выбора значений таких внутренних параметров метода FP-LMTO, как энергии линейаризации, энергии хвостов и радиус МТ-сферы  $R_{MT}$  применялся подход аналогичный описанному в работе [15]. Расчеты фононных спектров были выполнены в рамках теории линейного отклика реализованной в программе FP-LMTO [13]. В случае определения фононных частот для кубических структур сетка по  $q$ -точкам была выбрана равной  $8 \times 8 \times 8$ , а для гексагональной структуры –  $8 \times 8 \times 6$ . Вклад в свободную энергию от колебаний решетки был определен в квазигармоническом приближении с использованием рассчитанных фононных спектров. Вычисления упругих констант  $fcc$ ,  $hcp$  и  $bcc$  кристаллов Pb проводилось методом, подробно описанным в работе [16]. Наши вычисления также показали, что наиболее подходящим для описания свойств свинца при сжатии является функционал PBEsol, который и использовался в данной работе. Расчет

транспортных свойств, а именно, электросопротивления  $\rho$  и теплопроводности  $w^{-1}$  производился в рамках вариационного приближения низшего порядка LOVA, описанного в работе [18].

Посмотрим, как изменяется фононный спектр свинца с ростом сжатия. На рис. 1 показана плотность состояний фононов (PDOS) *fcc* структуры Pb для двух степеней сжатия и двух вариантов выполненных расчетов.

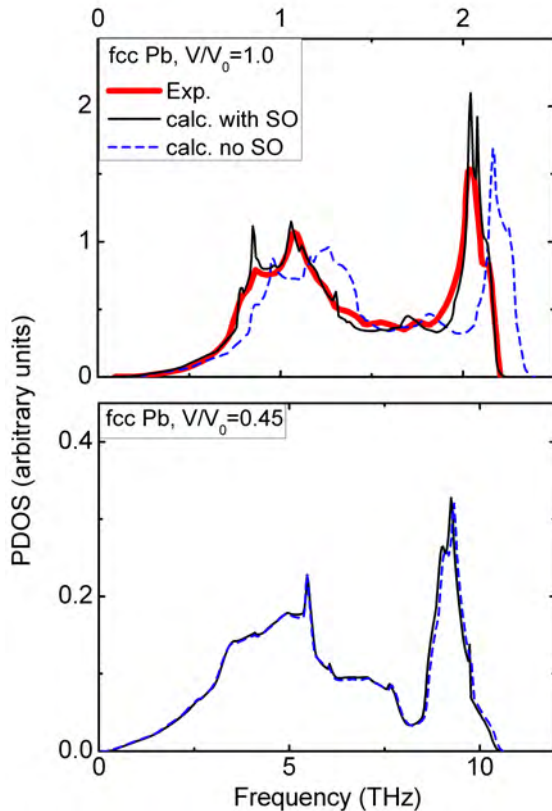


Рис. 1. Плотность состояний фононов *fcc* структуры свинца для двух различных относительных удельных объемов кристалла  $V/V_0$ . Черная и синяя линии – данные наших расчетов с учетом и без учета SO эффектов, толстая красная линия – эксперимент [5] при  $T = 80$  К

Видно (рис. 1, верхняя панель), что при  $V/V_0 = 1$ , вычисленная PDOS с учетом SO эффектов заметно лучше согласуется с экспериментом, чем вариант расчета без учета SO. Присутствие спин-орбитального взаимодействия приводит к сдвигу плотности состояний PDOS свинца в сторону более низких частот, что также хорошо согласуется с результатами других первопринципных расчетов [3]. С увеличением сжатия отличия в плотностях состояний фононов для двух типов расчетов уменьшаются и становятся слабо различимыми (рис. 1, нижняя панель). То есть, высокое давление постепенно нивелирует влияние SO

взаимодействия на результаты расчета фононного спектра свинца. Такая тенденция возникает для всех рассмотренных нами структур.

Рассмотрим теперь, как влияют спин-орбитальные эффекты на кривые сжатия свинца и упругие свойства свинца. На рис. 2 представлены результаты расчетов изотерм 300 К для *fcc*, *hcp* и *bcc* фаз свинца с учетом структурных переходов в сравнении с экспериментом. Видно, что результаты для двух типов расчетов находятся очень близко друг к другу и хорошо согласуются с экспериментом. Равновесный удельный объем  $V_r$ , определенный при комнатной температуре, в случае учета SO взаимодействия равен 204,3 а.у.<sup>3</sup>, без SO – 206,8 а.у.<sup>3</sup>, тогда как экспериментальное значение равно 204,8 а.у.<sup>3</sup> [19]. Таким образом, ошибка в определении  $V_r$  составляет менее 1% в обоих случаях.

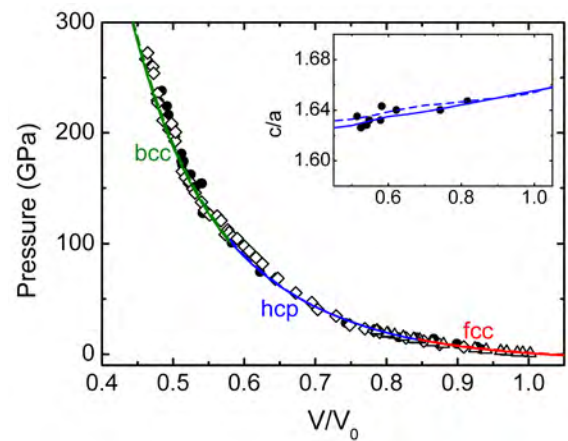


Рис. 2. Кривая сжатия свинца при  $T = 300$  К для трех рассмотренных структур в сравнении с экспериментальными данными. Сплошные линии – расчет с учетом SO, штриховые линии – без учета. Эксперимент: ● – [7], ◇ – работа [8], △ – [6]. На вставке показана зависимость параметра  $c/a$  *hcp* структуры от  $V/V_0$  в сравнении с экспериментом [7]

На вставке к рис. 2 показана также зависимость параметра  $c/a$  *hcp* структуры Pb в сравнении с экспериментом. Видно слабое отличие в результатах двух типов расчетов и хорошее согласие с экспериментальными данными. При комнатной температуре значения  $B_0$  в расчете с учетом SO эффектов равно 40,8 ГПа, без учета SO – 41 ГПа, экспериментальное значение  $B_0 = 41,2$  ГПа [19]. Учет SO взаимодействия достаточно слабо влияет на величину  $B_0(T)$ , так для  $T = 400$  К разница в значениях для двух типов расчетов составляет всего около 2%. Таким образом, можно констатировать, что вклад спин-орбитальных эффектов в кривые

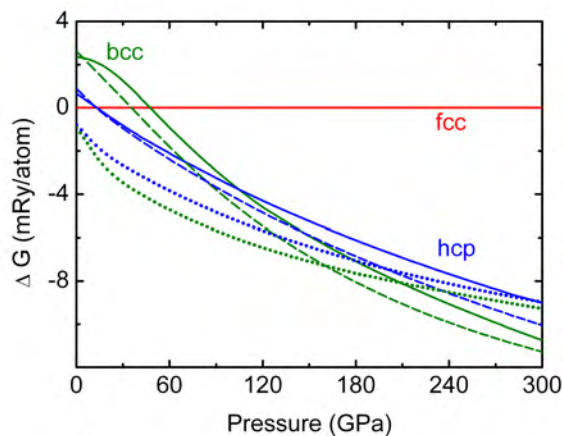


Рис. 3. Разность потенциалов Гиббса *fcc*, *hcp* и *bcc* структур Pb в зависимости от давления при  $T = 0$  К (без учета нулевых колебаний). Сплошные линии – расчет с учетом SO эффектов, штриховые линии – без учета SO, точечная линия – нерелятивистский (NR) расчет

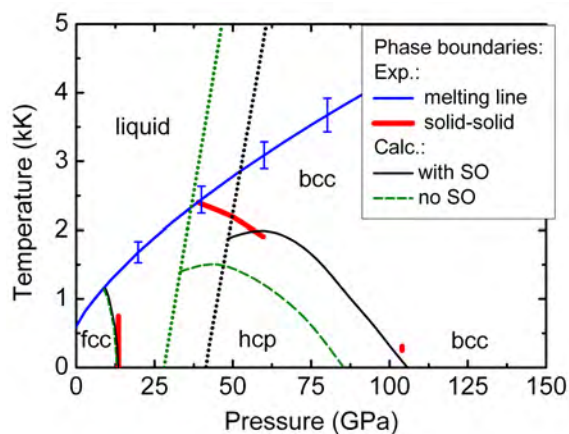


Рис. 4.  $PT$ -диаграмма Pb. Синяя линия – экспериментальная кривая плавления [12], красные линии – границы раздела фаз (*fcc-hcp* и *hcp-bcc*) определенные в экспериментах [6, 12]. Сплошные черные линии – наш расчет границ раздела кристаллических структур с учетом SO эффектов, штриховые зеленые линии – без учета SO. Точечные линии – границы динамической устойчивости *bcc* структуры Pb в расчете с SO (черная линия) без SO (зеленая линия)

сжатия и зависимость модуля  $B_0$  от температуры достаточно слабый. Несколько большее влияние оказывает SO взаимодействие на упругие константы. Так при  $V/V_0 = 1$  и  $T = 0$  К расчеты с учетом SO дают следующие значения констант для *fcc* Pb:  $C' = 5,59$  и  $C_{44} = 19,98$  ГПа ( $C' = (C_{11} - C_{12})/2$ ). В то время, как для вычислений без SO получается  $C' = 5,75$  и  $C_{44} = 22,25$  ГПа. Разница составляет 3% и 11% для  $C'$  и  $C_{44}$ , соответственно. В эксперименте [20] были получены значения  $C' = 5,06$  и  $C_{44} = 19,42$  ГПа. Видно, что расчеты с SO эффектами лучше согласуются с экспериментальными данными. С ростом сжатия значения  $C_{ij}$  для двух типов расчетов постепенно сближаются.

Обратимся теперь к относительной структурной стабильности Pb под давлением. На рис. 3 мы привели результаты трех типов расчетов: NR – нерелятивистских и релятивистских с учетом и без SO эффектов. Показана разность потенциалов Гиббса, рассмотренных нами структур при  $T = 0$  К до  $P = 300$  ГПа. Как уже отмечалось ранее в работе [11], в отсутствие релятивистских эффектов не удастся правильно воспроизвести равновесную кристаллическую структуру. Из рис. 3 видно, что наименьшей энергией при  $P = 0$  в NR расчетах обладает *bcc* структура Pb. С ростом давления она остается энергетически наиболее стабильной, по крайней мере, до  $P = 300$  ГПа. Кроме этого, *hcp* фаза является более выгодной по сравнению с *fcc* структурой. Учет релятивистских эффектов радикально меняет картину относительной стабильно-

сти. В результате получается правильная последовательность структурных переходов  $fcc \rightarrow hcp \rightarrow bcc$ , как в расчетах с SO взаимодействием, так и без него (рис. 3). В табл. 1 приведены результаты вычислений давления переходов  $P_{tr}$  в сравнении с экспериментальными данными. Отметим, что учет SO эффектов слабо влияет на значение давление  $fcc \rightarrow hcp$  перехода, оба способа дают примерно одинаковую величину, которая хорошо согласуется с экспериментом. Однако, в случае структурного перехода  $hcp \rightarrow bcc$ , значения  $P_{tr}$  с учетом и без учета SO эффектов заметно отличаются, примерно на 20%. Добавка SO эффектов приводит к гораздо более лучшему согласию расчета с экспериментальными данными (табл. 1).

Таблица 1

Давления структурных переходов  $P_{tr}$  (в ГПа), полученные в двух типах расчетов ( $T = 0$  К) в сравнении с экспериментом при комнатной температуре

	Тип расчета	Давление перехода, $P_{tr}$ (ГПа)	
		<i>fcc</i> → <i>hcp</i>	<i>hcp</i> → <i>bcc</i>
Расчет	no SO	12,8	85
	SO	13,2	104,5
Эксп.	–	13±1 [6]	109 [9] 104 [12]

Опираясь на вычисленные при  $T = 0$  К внутренние энергии и фононные спектры *fcc*, *hcp* и *bcc* фаз Pb, нами были определены границы существования рассмотренных структур в квазигармоническом приближении для температур отличных от нуля. На рис. 4 показана *PT*-диаграмма свинца до давлений 150 ГПа.

Как видно из рис. 4, линии раздела *fcc* и *hcp* фаз с учетом и без учета SO взаимодействия практически совпадают и хорошо согласуются с экспериментальной границей, определенной в работе [6]. Небольшое уменьшение давления перехода при  $T > 800$  К возможно связано с недостаточно точным расчетом вклада от ангармонических эффектов в квазигармоническом приближении (не учитывается фонон-фононное взаимодействие). Однако, не исключено, что такое уменьшение давления будет наблюдаться и в эксперименте, если провести его при более высоких температурах.

Более сложная ситуация наблюдается с линией раздела *hcp*-*bcc* фаз свинца (рис. 4). Выполненные расчеты показали, что *bcc* структура динамически неустойчива при относительно небольших сжатиях ( $V/V_0 > 0,7$ ) и  $T = 0$  К. Это приводит к тому, что на *PT*-диаграмме существует область давлений, в которой нельзя определить квазигармонический вклад от теплового движения ядер в энергию системы для *bcc* структуры. Здесь необходимо более точно учитывать ангармонические эффекты, которые динамически стабилизируют *bcc* структуру при высоких температурах, как это происходит, например, в титане, цирконии. В данной работе мы ограничиваемся квазигармоническим приближением, поэтому точечными линиями на рис. 4 указаны границы динамической устойчивости *bcc* Pb, левее которой линию раздела *hcp*-*bcc* фаз мы построить не можем. Эта граница отличается для расчетов с учетом SO эффектов и без них, так как несколько отличаются значения  $V/V_0$ , при которых эта структура становится неустойчивой. Из рис. 4 видно, что линии раздела *hcp*-*bcc* структур для двух типов расчетов имеют очень схожий наклон, но заметно отличаются по давлениям. При температурах выше 1400 К и  $P < 60$  ГПа у обеих кривых меняется знак наклона, что связано со смягчением фононного спектра *bcc* структуры рядом с областью ее динамической неустойчивости. Видно, что, в целом, линия раздела для расчетов с учетом SO взаимодействия более хорошо согласуется с экспериментальными данными. Однако, для того чтобы корректно определить эту линию при  $T > 1500$  К необходимо выйти за рамки ква-

зигармонического приближения, поскольку в этой области температур дополнительный энтропийный вклад от колебаний решетки может коренным образом изменить результаты вычислений.

Перейдем к рассмотрению зависимости транспортных свойств свинца (электросопротивление  $\rho$  и теплопроводность  $w^{-1}$ ) от степени сжатия кристалла. На рис. 5 показана зависимость  $\rho$  от давления при комнатной температуре до  $P = 100$  ГПа ( $V/V_0 > 0,58$ ) с учетом структурного перехода *fcc*→*hcp*. Видно, что с увеличением давления электросопротивление свинца значительно уменьшается, а кривые  $\rho(P)$  вычисленные с SO взаимодействием и без него постепенно сближаются. Такое сближение обусловлено уменьшением при сжатии отличий в фононном и электронном спектре кристалла для двух типов расчетов. На границе *fcc*→*hcp* перехода  $\rho$  претерпевает характерный скачок. Результаты расчетов относительного электросопротивления  $\rho/\rho_0$  в окрестности структурного перехода сравниваются с имеющимися экспериментальными данными работ [21, 22] на вставке к рис. 5. Можно заметить, что расчеты без учета SO эффектов значительно недооценивают сопротивление свинца, а также величину скачка в  $\rho/\rho_0(P)$  при переходе. В тоже время, включение SO взаимодействия значительно улучшает ситуацию.

Далее рассмотрим, как изменяются величины  $\rho$  и  $w^{-1}$  для более высокой степени сжатия ( $V/V_0 < 0,58$ ). При  $P > 100$  ГПа термодинамически наиболее выгодной является *bcc* структура Pb. Поэтому на рис. 6 представлены зависимости  $\rho$  и  $w^{-1}$  от  $P$  для этой структуры в случае двух типов выполненных расчетов. Из этого рисунка видно, что с ростом давления результаты вычислений с SO взаимодействием и без него постепенно сближаются. Различия для  $P = 700$  ГПа составляют всего около 8 %, тогда как при нормальных условиях разница была  $\geq 30$  %. Остающееся отличие для таких высоких давлений связано, в основном, с разницей в значении средней скорости электронов  $\langle v_x^2 \rangle$  входящей в формулы для определения  $\rho$  и  $w^{-1}$  (см. работу [17]). Эта скорость определяется усреднением производной от зонной энергии по волновому вектору  $\mathbf{k}$ ,  $v_{nk} = \partial \epsilon_{nk} / \partial \mathbf{k}$ , то есть напрямую зависит от ширины соответствующей зоны  $n$ . Как показывают наши вычисления, несмотря на выравнивание плотности состояний электронов в окрестности  $E_F$  при расчетах с учетом SO эффектов и без них, ширины зон несколько отличаются, это и приводит к указанным выше различиям в 8 %. По наблю-

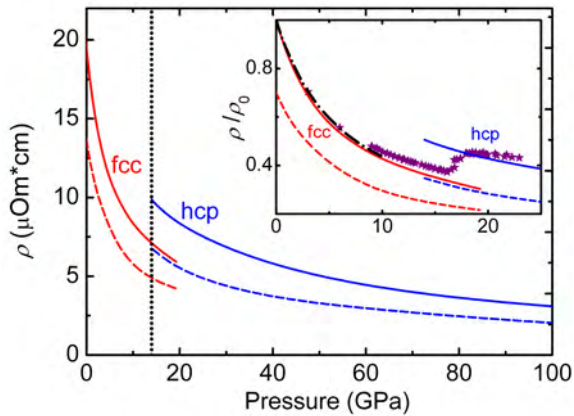


Рис. 5. Зависимость электросопротивления  $\rho$  от давления для *fcc* и *hcp* структур свинца при комнатной температуре. Сплошные линии – расчет с учетом SO эффектов, штриховые линии – без учета. Вертикальная точечная линия – экспериментальное давление *fcc*→*hcp* перехода. На вставке представлены зависимости  $\rho/\rho_0(P)$ , где звездами показаны экспериментальные данные [21], штрих-пунктирной линией – аппроксимация эксперимента [22].  $\rho_0$  – сопротивление при  $P = 0$ ,  $T = 300$  К

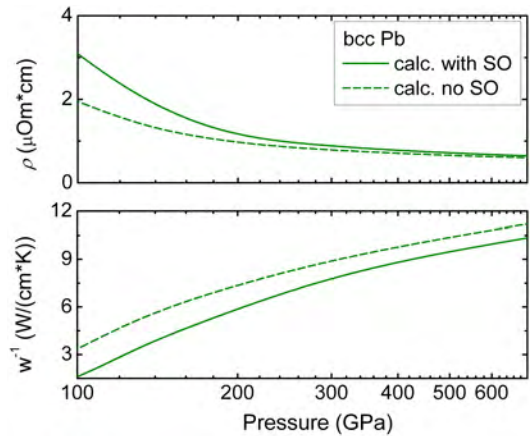


Рис. 6. Изменение сопротивления  $\rho$  (верхняя панель) и теплопроводности  $w^{-1}$  (нижняя панель) *bcc* структуры свинца при комнатной температуре с ростом давления. Сплошные линии – расчет с учетом SO взаимодействия, штриховые линии – без учета SO

даемой на рис. 6 тенденции можно предположить, что дальнейшее сжатие свинца будет приводить к постепенному уменьшению указанной отличий.

### Список литературы

1. Dal Corso A. *Ab initio* phonon dispersions of face centered cubic Pb: effects of spin-orbit coupling // J. Phys.: Condens. Matter. 2008. Vol. 20. 445202.
2. Verstraete M. J., Torrent M., Jollet F., Zerah G., Gonze X. Density functional perturbation theory with spin-orbit coupling: Phonon band structure of lead // Phys. Rev. B. 2008. Vol. 78. 045119.
3. Heid R., Bohnen K.-P., Sklyadneva I. Yu., Chulkov E. V. Effect of spin-orbit coupling on the electron-phonon interaction of the superconductors Pb and Tl // Phys. Rev. B. 2010. Vol. 81. 174527.
4. Brockhouse B. N., Arase T., Cagliotti G., Rao K. R., Woods A. D. B. Crystal Dynamics of Lead. I. Dispersion Curves at 100 °K // Phys. Rev. 1962. Vol. 128. P. 1099–1111.
5. Stedman R., Almqvist L., Nilsson G. Phonon-Frequency Distributions and Heat Capacities of Aluminum and Lead // Phys. Rev. 1967. Vol. 162. P. 549–557.
6. Kuznetsov A., Dimitriev V., Dubrovinsky L., Prakashenka V., Weber H.-P. FCC-HCP phase

boundary in lead // Solid State Commun. 2002. Vol. 122, P. 125–127.

7. Mao H. K., Wu Y., Shu J. F., Hu J. Z., Hemley R. J., Cox D. E. High-pressure phase transition and equation of state of lead to 238 GPa // Solid State Commun. 1990. Vol. 74. P. 1027–1029.

8. Vohra K., Ruoff A. L. Static compression of metals Mo, Pb, and Pt to 272 GPa: Comparison with shock data // Phys. Rev. B. 1990. Vol. 42, P. 8651–8654.

9. Vanderborgh C. A., Vohra Y. K., Xia H., Ruoff A. L. Bcc lead at 109 GPa: Diffraction studies to 208 GPa // Phys. Rev. B. 1990. Vol. 41. P. 7338–7340.

10. Liu A. Y., Garcia A., Cohen M. L., Godwal B. K., Jeanloz R. Theory of high-pressure phases of Pb // Phys. Rev. B. 1991. Vol. 43. P. 1795–1798.

11. Christensen N. E., Satpathy S., Pawlowska Z. First-principles theory of tetrahedral bonding and crystal structure of lead // Phys. Rev. B. 1986. Vol. 34. P. 5977–5980.

12. Dewaele A., Mezouar M., Guignot N., Loubeyre P. Melting of lead under high pressure studied using second-scale time-resolved x-ray diffraction // Phys. Rev. B. 2007. Vol. 76. 144106.

13. Savrasov S. Yu. Linear-response theory and lattice dynamics: A muffin-tin-orbital approach // Phys. Rev. B. 1996. 54. P. 16470–16486.

14. Koelling D. D., Harmon B. N. A technique for relativistic spin-polarised calculations // *J. Phys. C: Solid State Phys.* 1977. Vol. 10. P. 3107–3114.
15. Smirnov N. A. Ab initio calculations of the elastic and thermodynamic properties of gold under pressure // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2017. Vol. 29. P. 105402.
16. Sin'ko G. V., Smirnov N. A. Ab initio calculations of elastic constants and thermodynamic properties of bcc, fcc, and hcp Al crystals under pressure // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2002. Vol. 14. P. 6989–7005.
17. Perdew J. P., Ruzsinszky A., Csonka G. I., Vydrov O. A., Scuseria G. E., Constantin L. A., Zhou X., Burke K. Restoring the Density-Gradient Expansion for Exchange in Solids and Surfaces // *Phys. Rev. Lett.* 2008. Vol. 100. P. 136406.
18. Pinski F. J., Allen P. B., Butler W. H. Calculated electrical and thermal resistivities of Nb and Pd // *Phys. Rev. B.* 1981. Vol. 23. P. 5080–5096.
19. Strässle Th., Klotz S., Kunc K., Pomjakushin V., White J. S. Equation of state of lead from high-pressure neutron diffraction up to 8.9 GPa and its implication for the NaCl pressure scale // *Phys. Rev. B.* 2014. Vol. 90. P. 014101.
20. Waldorf D. L., Alers G. A. Low-Temperature Elastic Moduli of Lead // *J. Appl. Phys.* 1962. Vol. 33. P. 3266–3269.
21. Balchan A. S., Drickamer H. G. High Pressure Electrical Resistance Cell, and Calibration Points above 100 Kilobars // *Rev. Sci. Instrum.* 1961. Vol. 32. P. 308–313.
22. Eiling A., Schilling J. S. Pressure and temperature dependence of electrical resistivity of Pb and Sn from 1-300 K and 0-10 GPa-use as continuous resistive pressure monitor accurate over wide temperature range; superconductivity under pressure in Pb, Sn, and In // *J. Phys. F: Metal Phys.* 1981. Vol. 11. P. 623–639.