

## **Изменение структуры кристаллов индия под давлением.**

Г.В. Синько, Н.А. Смирнов

*Российский Федеральный Ядерный Центр - Всероссийский Научно Исследовательский  
Институт Технической Физики (РФЯЦ-ВНИИТФ)  
г.Снежинск*

Представлены результаты первопринципных расчетов методом FPLMTO кривых холодного сжатия кристаллов индия. При нормальных условиях эти кристаллы имеют гранецентрированную тетрагональную структуру (fct). Установлено наличие двух изоструктурных переходов при давлении ~0.4 Мбар и ~2.1 Мбар. Анализируются возможные причины наблюдения в некоторых экспериментах переходов индия под давлением из структуры fct в гранецентрированную орторомбическую структуру.

## **Structural transitions in indium under pressure**

G.V. Sin'ko, N.A. Smirnov

*Russian Federal Nuclear Center - the All-Russian Scientific Research Institute  
of Technical Physics  
Snezhinsk*

Results of ab initio calculations by the FPLMTO method to obtain cold curves for In crystals are presented. Under normal conditions these crystals have a face centered tetragonal structure (fct). Two isostructural transitions at pressures ~0.4 and ~2.1 Mbar were established. Analyzed are possible reasons why some experiments showed In transitions under pressure from the fct structure to a face centered orthorombical structure.