

ISSN (Print) 2616-6836  
ISSN (Online) 2663-1296

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің

# ХАБАРШЫСЫ

---

**BULLETIN**

of L.N. Gumilyov Eurasian  
National University

**ВЕСТНИК**

Евразийского национального  
университета имени Л.Н. Гумилева

**ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ** сериясы

**PHYSICS. ASTRONOMY** Series

Серия **ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ**

№3(132)/2020

1995 жылдан бастап шығады

Founded in 1995

Издается с 1995 года

Жылына 4 рет шығады

Published 4 times a year

Выходит 4 раза в год

**Нұр-Сұлтан, 2020**

**Nur-Sultan, 2020**

**Нур-Султан, 2020**

*Бас редакторы:*  
ф.-м.ғ.д., профессор, Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ  
**А.Т. Ақылбеков** (Қазақстан)

*Бас редактордың орынбасары*

**Гиниятова Ш.Г.** ф.-м.ғ.к., доцент  
Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ (Қазақстан)

*Редакция алқасы*

<b>Арынгазин А.Қ.</b>	ф.-м.ғ. докторы, Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ(Қазақстан)
<b>Алдонгаров А.А.</b>	PhD, Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
<b>Балапанов М.Х.</b>	ф.-м.ғ.д., проф., Башқұрт мемлекеттік университеті (Ресей)
<b>Бахтизин Р.З.</b>	ф.-м.ғ.д., проф., Башқұрт мемлекеттік университеті (Ресей)
<b>Даулетбекова А.Қ.</b>	ф.-м.ғ.к., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
<b>Ержанов Қ.К.</b>	ф.-м.ғ.к., PhD, Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
<b>Жүмаділов Қ.Ш.</b>	PhD, Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
<b>Здоровец М.</b>	ф.-м.ғ.к., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ(Қазақстан)
<b>Қадыржанов Қ.К.</b>	ф.-м.ғ.д., проф., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
<b>Кайнарбай А.Ж.</b>	ф.-м.ғ.к., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
<b>Козловский А.Л.</b>	PhD, Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
<b>Кутербеков Қ.А.</b>	ф.-м.ғ.д., проф., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
<b>Лущик А.Ч.</b>	ф.-м.ғ.д., проф., Тарту университеті (Эстония)
<b>Попов А.И.</b>	ф.-м.ғ.д., проф., Латвия университеті (Латвия)
<b>Морзабаев А.К.</b>	ф.-м.ғ.к., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
<b>Мырзақұлов Р.Қ.</b>	ф.-м.ғ.д., проф., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ(Қазақстан)
<b>Нұрахметов Т.Н.</b>	ф.-м.ғ.д., проф., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
<b>Сауытбеков С.С.</b>	ф.-м.ғ.д., проф., Әл-Фараби атындағы ҚазҰУ (Қазақстан)
<b>Салиходжа Ж.М.</b>	ф.-м.ғ.к., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
<b>Скуратов В.А.</b>	ф.-м.ғ.д., проф., Біріккен ядролық зерттеулер институты (Ресей)
<b>Тлеуқенов С.К.</b>	ф.-м.ғ.д., проф., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
<b>Усеинов А.Б.</b>	PhD, Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
<b>Хоши М.</b>	PhD, проф., Коши университеті (Жапония)
<b>Шункеев Қ.Ш.</b>	ф.-м.ғ.д., проф., Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе мемлекеттік университеті (Қазақстан)

*Редакцияның мекенжайы:* 010008, Қазақстан, Нұр-Сұлтан қ., Сәтбаев к-сі, 2, 402 б., Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті.  
Тел.: +7(7172) 709-500 (ішкі 31-428)  
E-mail: vest\_phys@enu.kz

*Журнал менеджері:* Г. Мендыбаева

**Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің Хабаршысы.**  
**ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ сериясы**

Меншіктенуші: "Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті" Коммерциялық емес акционерлік қоғам

Мерзімділігі: жылына 4 рет. Басуға 28.09.2020 ж. қол қойылды. Жазылу индексі: 76093

Қазақстан Республикасының Ақпарат және коммуникациялар министрлігінде 27.03.2018ж.

№16999-ж тіркеу куәлігімен тіркелген.

Ашық қолданудағы электрондық нұска: <http://bulphysast.enu.kz/>

Типографияның мекенжайы: 010008, Қазақстан, Нұр-Сұлтан қ., Қажымұқан к-сі, 12/1, 102 б., Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті. Тел.: +7(7172)709-500 (ішкі 31-428)

© Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті

*Editor-in-Chief*

Doctor of Phys.-Math. Sciences, Professor, ENU  
**A.T. Akilbekov** (Kazakhstan)

*Deputy Editor-in-Chief*

**Giniyatova Sh.G.**, Candidate of Phys.-Math. Sciences,  
Assoc. Prof., ENU (Kazakhstan)

*Editorial Board*

<b>Aryngazin A.K.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sci., ENU (Kazakhstan)
<b>Aldongarov A.A.</b>	PhD, ENU (Kazakhstan)
<b>Balapanov M.Kh.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., BashSU (Russia)
<b>Bakhtizin R.Z.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., BashSU (Russia)
<b>Dauletbekova A.K.</b>	Candidate of Phys.-Math. Sci., PhD, ENU (Kazakhstan)
<b>Hoshi M.</b>	PhD, Prof., Kyushu University (Japan)
<b>Kadyrghanov K.K.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., ENU (Kazakhstan)
<b>Kainarbay A.Zh.</b>	Candidate of Phys.-Math. Sci., ENU (Kazakhstan)
<b>Kozlovskiy A.L.</b>	PhD, ENU (Kazakhstan)
<b>Kuterbekov K.A.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., ENU (Kazakhstan)
<b>Lushchik A.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., University of Tartu (Estonia)
<b>Morzabayev A.K.</b>	Candidate of Phys.-Math. Sci., ENU (Kazakhstan)
<b>Myrzakulov R.K.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., ENU (Kazakhstan)
<b>Nurakhmetov T.N.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., ENU (Kazakhstan)
<b>Popov A.I.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., University of Latvia (Latvia)
<b>Sautbekov S.S.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., KazNU (Kazakhstan)
<b>Salikhodzha Z. M</b>	Candidate of Phys.-Math. Sci., ENU (Kazakhstan)
<b>Skuratov V.A.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., Joint Institute for Nuclear Research (Russia)
<b>Tleukenov S.K.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., ENU (Kazakhstan)
<b>Useinov A.B.</b>	PhD, ENU (Kazakhstan)
<b>Yerzhanov K.K.</b>	Candidate of Phys.-Math. Sci., PhD, ENU (Kazakhstan)
<b>Zdorovets M.</b>	Candidate of Phys.-Math. Sci., ENU (Kazakhstan)
<b>Zhumadilov K.Sh.</b>	PhD, ENU (Kazakhstan)
<b>Shunkeyev K.Sh.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., Zhubanov University (Kazakhstan)

*Editorial address:* L.N. Gumilyov Eurasian National University, 2, Satpayev str., of. 402,  
Nur-Sultan, Kazakhstan 010008  
Tel.: +7(7172) 709-500 (ext. 31-428)  
E-mail: vest\_phys@enu.kz

*Managing Editor:* G. Mendybayeva

**Bulletin of L.N. Gumilyov Eurasian National University.**  
**PHYSICS. ASTRONOMY Series**

Owner: Non-profit joint-stock company "L.N. Gumilyov Eurasian National University"

Periodicity: 4 times a year. Signed in print 28.09.2020. Subscription index: 76093

Registered by the Ministry of Information and Communication of the Republic of Kazakhstan.

Registration certificate №16999-ж from 27.03.2018.

Available at: <http://bulphysast.enu.kz/>

Address of printing house: L.N. Gumilyov Eurasian National University, 12/1 Kazhimukan str.,  
Nur-Sultan, Kazakhstan 010008;

tel.: +7(7172) 709-500 (ext. 31-428)

*Главный редактор:*  
доктор ф.-м.н., профессор  
**А.Т. Акилбеков**, ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)

*Зам. главного редактора*

**Ш.Г. Гиниятова** к.ф.-м.н., доцент  
ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)

*Редакционная коллегия*

<b>Арынгазин А.К.</b>	д.ф.-м.н., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
<b>Алдонгаров А.А.</b>	PhD, ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
<b>Балапанов М.Х.</b>	д.ф.-м.н., проф., БашГУ (Россия)
<b>Бахтизин Р.З.</b>	д.ф.-м.н., проф., БашГУ (Россия)
<b>Даулетбекова А.К.</b>	д.ф.-м.н., PhD, ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
<b>Ержанов К.К.</b>	к.ф.-м.н., PhD, ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
<b>Жумадилов К.Ш.</b>	PhD, ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
<b>Здоровец М.</b>	к.ф.-м.н., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
<b>Кадыржанов К.К.</b>	д.ф.-м.н., проф., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
<b>Кайнарбай А.Ж.</b>	к.ф.-м.н., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
<b>Козловский А.Л.</b>	PhD, ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
<b>Кутербекоев К.А.</b>	д.ф.-м.н., проф., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
<b>Лущик А.Ч.</b>	д.ф.-м.н., проф., Тартуский университет (Эстония)
<b>Морзабаев А.К.</b>	д.ф.-м.н., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
<b>Мырзакулов Р.К.</b>	д.ф.-м.н., проф., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
<b>Нурахметов Т.Н.</b>	д.ф.-м.н., проф., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
<b>Попов А.И.</b>	д.ф.-м.н., проф., Латвийский университет (Латвия)
<b>Сауытбеков С.С.</b>	д.ф.-м.н., проф., КазНУ им. аль-Фараби (Казахстан)
<b>Салиходжа Ж.М.</b>	к.ф.-м.н., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
<b>Скуратов В.А.</b>	д.ф.-м.н., проф., Объединенный институт ядерных исследований (Россия)
<b>Тлеукиенов С.К.</b>	д.ф.-м.н., проф., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
<b>Усеинов А.Б.</b>	PhD, ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
<b>Хоши М.</b>	PhD, проф., Коши университет (Япония)
<b>Шункеев К.Ш.</b>	д.ф.-м.н., проф., АРГУ имени К. Жубанова (Казахстан)

*Адрес редакции:* 010008, Казахстан, г. Нур-Султан, ул. Сатпаева, 2, каб. 402, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева.

Тел.: (7172) 709-500 (вн. 31-428)

E-mail: vest\_phys@enu.kz

*Менеджер журнала:* Г. Мендыбаева

**Вестник Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева.**

**Серия ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ**

Собственник Некоммерческое акционерное общество "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева"

Периодичность: 4 раза в год. Подписано в печать 28.09.2020 г. Подписной индекс: 76093

Зарегистрирован Министерством информации и коммуникаций Республики Казахстан.

Регистрационное свидетельство №16999-ж от 27.03.2018г.

Электронная версия в открытом доступе: <http://bulphysast.enu.kz/>

Адрес типографии: 010008, Казахстан, г. Нур-Султан, ул. Кажимукана, 12/1, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева. тел.: +7(7172)709-500 (вн. 31-428)

Л.Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІНІҢ  
ХАБАРШЫСЫ. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ сериясы

№3(132)/2020

МАЗМҰНЫ

<i>Жасыбаева М.Б., Есмаханова К.Р.</i> Дарбу түрлендіруі және Фокас-Ленэллс теңдеуінің нақты бір солитонды шешімі	8
<i>Горлачев И., Глуценко Н., Иванов И., Киреев А., Курахмедов А., Платов А., Самбаев У., Здоровец М.</i> Нысаналы атомдарды ауыр иондармен қоздыруға арналған РІХЕ әдісінің шектері	14
<i>Ергалиев Д.С., Әбдірашев Ө.К., Жумабаева А.С.</i> Робототехникалық құрылғылар кешенін ақпараттық-метрологиялық қамтамасыз ету	25
<i>Қаптағай Г., Сандибаева Н., Байжадамова Л., Утебаева А.</i> Сутегін өндірудегі кобальт шпинелінің энергетикалық сипаттамаларын жақсартудағы азоттың рөлі	30
<i>Әбуова А.Ү., Инербаев Т.М., Әбуова Ф.Ү., Сазанбай А., Нураканов А.</i> Төмен өлшемді допирленген термоэлектрикте зарядтау динамикасы	36
<i>Ногай А.А., Стефанович С.Ю., Салиходжа Ж.М., Ногай А.С.</i> Қатты ерітінділеріндегі иондық өткізгіштік және фазалық ауысулар $\text{Na}_3\text{Sc}_{2(1-x)}\text{Yb}_{2x}(\text{PO}_4)_3$	44
<i>Ногай А.С., Ускенбаев Д.Е.</i> Платинасыз катализаторлары бар NaFon мембраналарында поляризациялық және өткізгіш қасиеттері	51
<i>Бимуханов А.Н., Алдонгаров А.А.</i> $\text{Si}(\text{bzimpy})_2$ бейтарап гексакоординация кешенінің дұрыс геометриялық параметрлерін болжау үшін функционалдық үйлесімділік пен тығыздықтың функционалды теориясының негіз жиынтықтарын сынау	59
<i>Базарбек А.Б., Сағатов Н.Е., Инербаев Т.М., Ажилбеков А.Т.</i> Жоғары қысымда никель фосфидтерінің тұрақтылығын алғашқы принципті есептеу	67
<i>Карипбаев Ж.Т., Мусаханов Д.А., Лисицын В.М., Алпысова Г.К., Куженова А., Усеинов А.Б., Абдрахметова А.А., Байжуманов М.Ж.</i> Радиация өрісінде синтезделген YAG:Ce негізіндегі люминофорлардың импульстік фотолюминесценциясы	74

BULLETIN OF L.N. GUMILYOV EURASIAN NATIONAL UNIVERSITY. PHYSICS.  
ASTRONOMY SERIES

№3(132)/2020

CONTENTS

---

<i>Zhassybayeva M.B., Yesmakhanova K.R.</i> Darboux transformation and exact one-soliton solution of the Fokas-Lenells equation	8
<i>Gorlachev I., Gluchshenko N., Ivanov I., Kireev A., Kurakhmedov A., Platov A., Sambayev Ye., Zdorovets M.V.</i> The limits of the PIXE method for excitation of target atoms by heavy ions	14
<i>Yergaliyev D.S., Abdirashev O.K., Zhumabaeva A.S.</i> Information and metrological support for the complex of robotic devices	25
<i>Kaptagay G., Sandibaeva N., Baikadamova L., Utebaeva A.</i> Role of nitrogen for enhancement energetically characteristics in producing hydrogen	30
<i>Abuova A.U., Inerbaev T.M., Abuova F.U., Sazanbay A., Nurakanov A.</i> Charging dynamics in a low-dimensional doped thermoelectric	36
<i>Nogai A.A., Stefanovich S.Yu., Salikhodja J.M., Nogai A.S.</i> Ionic conductivity and phase transitions in solid solutions $\text{Na}_3\text{Sc}_{2(1-x)}\text{Yb}_{2x}(\text{PO}_4)_3$	44
<i>Nogai A.S., Uskenbayev D.E.</i> Polarizing and conductive properties in Nafion membranes with platinum-free catalysts	51
<i>Bimukhanov A.N., Aldongarov A.A.</i> Testing of combinations of Density Functional Theory functionals and basis sets for predicting correct geometrical parameters of neutral hexacoordinated $\text{Si}(\text{bzimpy})_2$ complex	59
<i>Bazarbek A.B., Sagatov N.E., Inerbaev T.M., Akilbekov A.T.</i> First principle calculations of the stability of nickel phosphides at high pressures	67
<i>Karipbaev Zh., Musahanov D., Lisitsyn V., Alpyssova G., Kukenova A., Usseinov A., Abdrakmetova A., Baizhumanov M.</i> Pulsed photoluminescence of YAG: Ce phosphors synthesized in the radiation field	74

ВЕСТНИК ЕВРАЗИЙСКОГО НАЦИОНАЛЬНОГО УНИВЕРСИТЕТА  
ИМЕНИ Л.Н.ГУМИЛЕВА. Серия ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ

№3(132)/2020

СОДЕРЖАНИЕ

<i>Жасыбаева М.Б., Есмаханова К.Р.</i> Преобразование Дарбу и точное односолитонное решение уравнения Фокаса-Ленэллса	8
<i>Горлачев И., Глуценко Н., Иванов И., Киреев А., Курахмедов А., Платов А., Самбаев Е., Здоровец М.</i> Пределы определения РИХЕ метода при возбуждении атомов мишени тяжелыми ионами	14
<i>Ергалиев Д.С., Абдирашев О.К., Жумабаева А.С.</i> Информационно-метрологическое обеспечение комплекса робототехнических устройств	25
<i>Каптагай Г., Сандибаева Н., Байкадамова Л., Утебаева А.</i> Роль азота в совершенствовании энергетических характеристик шпинели кобальта для производства водорода	30
<i>Абуова А.У., Инербаев Т.М., Абуова Ф.У., Сазанбай А., Нураканов А.</i> Зарядовая динамика в низкоразмерном допированном термоэлектрике	36
<i>Ногай А.А., Стефанович С.Ю., Салиходжа Ж.М., Ногай А.С.</i> Ионная проводимость и фазовые переходы в твердых растворах $\text{Na}_3\text{Sc}_{2(1-x)}\text{Yb}_{2x}(\text{PO}_4)_3$	44
<i>Ногай А.С., Ускенбаев Д.Е.</i> Поляризационные и проводящие свойства в мембранах типа NaFоп с безплатиновыми катализаторами	51
<i>Бимуханов А.Н., Алдонгаров А.А.</i> Тестирование комбинаций функционалов и базисных наборов теории функционала плотности для предсказания правильных геометрических параметров нейтрального гексакоординационного комплекса $\text{Si}(\text{bzimpy})_2$	59
<i>Базарбек А.Б., Сагатов Н.Е., Инербаев Т.М., Акилбеков А.Т.</i> Первопринципные расчеты стабильности фосфидов никеля при высоких давлениях	67
<i>Карипбаев Ж.Т., Мусаханов Д.А., Лисицын В.М., Алтысова Г.К., Куженова А., Усеинов А.Б., Абдрахметова А.А., Байжуманов М.Ж.</i> Импульсная фотолуминесценция синтезированных в поле радиации люминофоров на основе YAG:Ce	74

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің хабаршысы. Физика. Астрономия сериясы, 2020, том 132, №3, 67-73 беттер  
<http://bulphysast.enu.kz>, E-mail: vest\_phys@enu.kz

МРНТИ: 29.05.15

А.Б. Базарбек<sup>1</sup>, Н.Е. Сагатов<sup>2</sup>, Т.М. Инербаев<sup>1,2</sup>, А.Т. Акилбеков<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

<sup>2</sup> Институт геологии и минералогии им. В.С.Соболева, Новосибирск, Россия  
(E-mail: <sup>1</sup> asyl.bazarbek.92@mail.ru, <sup>2</sup> sagatinho23@gmail.com, <sup>1,2</sup> talgat.inerbaev@gmail.com,  
<sup>1</sup> akilbekov\_at@enu.kz)

### Первопринципные расчеты стабильности фосфидов никеля при высоких давлениях

**Аннотация:** в данной статье методами компьютерного моделирования на основе теории функционала плотности (DFT) были проведены первичные расчеты по предсказанию кристаллических структур и относительной энергетической стабильности соединений в бинарной системе Ni–P в интервале давлений 200-400 ГПа. Необходимо отметить, что расчеты проводились без учета колебаний атомов ( $T = 0$  К). В ходе поиска стабильных составов и их структур в системе Ni–P были выявлены семь новых соединений: Ni<sub>14</sub>P, Ni<sub>12</sub>P, Ni<sub>10</sub>P, Ni<sub>8</sub>P, Ni<sub>7</sub>P, Ni<sub>5</sub>P, Ni<sub>3</sub>P и Ni<sub>2</sub>P. Все предсказанные соединения являются динамически стабильными, что подтверждается фононными спектрами. Также были проведены спин-поляризованные расчеты, показывающие наличие магнитного момента в структурах с относительно высоким содержанием никеля Ni<sub>14</sub>P, Ni<sub>12</sub>P и Ni<sub>10</sub>P. Выше 350 ГПа магнитный момент у всех предсказанных соединений отсутствует, в то время как у чистого Ni магнитный момент сохраняется вплоть до 400 ГПа.

**Ключевые слова:** первопринципные расчеты, квантово-химическое моделирование, энергетическая устойчивость, фосфид никеля, дисперсионные кривые, бинарные соединения, магнитный момент.

DOI: <https://doi.org/10.32523/2616-6836-2020-132-3-67-73>

Поступила: 11.09.2020/ Допущена к опубликованию: 21.09.2020

**Введение.** Знание химического состава и физических свойств недр Земли происходит в основном из сейсмических наблюдений, геофизического моделирования, непосредственного наблюдения поверхностных пород и изучения метеоритов, а также на экспериментах высокого давления и высоких температур, ограничивающих свойства и поведение составляющих минералов [1-2].

К сожалению, на сегодняшний день глубинные недра Земли не могут быть непосредственно отобраны из-за технических ограничений, так как самая глубокая скважина, которая была пробурена до сих пор, достигла лишь приблизительно 12 км [3]. Следовательно, экспериментальные исследования при высоких давлениях и высоких температурах сыграли существенную роль в изучении недр Земли. В настоящее время общепризнано, что ядро Земли состоит в основном из сплава железа и никеля (Fe–Ni) и плотность внутреннего ядра, оцененная на основе сейсмических наблюдений, примерно на 10 % ниже плотности чистого железа при соответствующих P–T параметрах. Этот дефицит плотности можно объяснить, предположив наличие примесей легких элементов во внутреннем ядре. На основе сравнения модели силикатного грунта и космохимического содержания элементов были определены несколько основных кандидатов на роль основного легкого элемента, включая Ni, S, O, C, N, H и P [4-6].

Среди легких элементов, предположительно присутствующих в ядре, фосфор (P) представляет особый интерес, так как фосфиды, особенно Fe–Ni, которые находятся в железных метеоритах, давно изучены для понимания формирования планетарного тела. Изучение железных метеоритов и хондритов указывает на то, что фосфиды Fe–Ni могут играть важную

роль при образовании астероидов, планетезималей и планет земного типа, сопровождающих металлические и сульфидные минералы Fe-Ni, а также дают информацию о составе планетных ядер [7,8]. Геохимические ограничения указывают на то, что около 90 % фосфора на нашей планете сосредоточено в ядре [9,10]. Фосфиды Fe-Ni в метеоритах представлены никельфосфидом прейберсита (Fe,Ni)<sub>3</sub>P-(Ni,Fe)<sub>3</sub>P, баррингеритом и его полиморфизмом высокого давления аллабогданитом (Fe,Ni)<sub>2</sub>P [11,12] и меллинитом (Ni, Fe)<sub>4</sub>P [13]. Содержание Ni в железных метеоритах может достигать 60 мас.% [14] в насыщенных породах и 65 мас.% в фосфидах Fe-Ni [15]. Поэтому важно изучать никель-концевые элементы ключевых космохимических систем, таких как Fe-Ni-P.

Помимо снижения плотности, наличие легких элементов в сплавах Fe-Ni также влияет на упругие свойства и скорости акустических волн оболочки. Например, легирование Fe кремнием увеличивает как сжимающую, так и сдвиговую скорости волн, тогда как добавление Ni уменьшает скорости сжимающей и сдвиговой волн [16].

Чтобы лучше понять потенциальное присутствие легких элементных сплавов Fe и Ni в недрах Земли, необходимо изучить кристаллическую структуру и поведение при сжатии бинарного соединения Ni-P. Таким образом, понимание поведения соединений Ni-P при высоких давлениях имеет важное значение для обсуждения и ограничения свойств планетарных ядер. Поэтому структуры и свойства соединений железа с фосфором Ni-P заслуживают большого внимания для дальнейшего изучения.

В настоящей работе мы провели детальный поиск новых структур фосфидов никеля при высоких давлениях на основе теории функционала плотности и алгоритмов предсказания структур. Необходимо отметить, что расчеты проводились без учета колебаний атомов ( $T = 0$  K). В результате поиска стабильных структур в системе Ni-P были предсказаны такие соединения как Ni<sub>14</sub>P, Ni<sub>12</sub>P, Ni<sub>10</sub>P, Ni<sub>8</sub>P, Ni<sub>7</sub>P, Ni<sub>5</sub>P, Ni<sub>3</sub>P и Ni<sub>2</sub>P.

**Методы.** Процедура предсказания кристаллических структур проводилась с помощью программ USPEX, основанного на эволюционных алгоритмах [17], и AIRSS, основанного на методе случайной выборки [18]. Расчеты электронной структуры проводились в рамках теории функционала плотности (DFT) методом псевдопотенциала, в программном пакете VASP [19]. Обменно-корреляционное взаимодействие учитывалось в приближении обобщенного градиента (GGA) в виде функционала Пердю-Берка-Эрнцгергофа (PBE) [20]. Важно отметить, что для всех исследованных структур были проведены расчеты с учетом спин-поляризации.

Расчеты по предсказанию кристаллических структур с помощью кода USPEX состоят из следующих этапов:

1. Генерирование и оптимизация кристаллических структур различных стехиометрий и определение стабильных составов;
2. Поиск при фиксированной стехиометрии наиболее энергетически выгодных структур;
3. Сортировка сгенерированных структур в соответствии с вероятностью их формирования.

В случае расчетов с помощью программы USPEX отбиралось 60 % структур с наименьшей энтальпией, которые использовались для генерации нового поколения в следующем процентном соотношении: путем наследственности – 35 %, путем атомных мутаций – 20 %, путем пермутации параметров решетки – 10 %, и 35 % от всех структур нового поколения генерировались случайным образом. В случае расчетов методом AIRSS случайным образом генерировалось и оптимизировалось 1000-1200 структур, из которых отбирались энергетически наиболее выгодные представители. Во всех расчетах оптимизация производилась в рамках теории функционала плотности (DFT), при помощи алгоритма сопряженного градиента. Параметры оптимизации были следующими: энергия обрезания базиса плоских волн – 450 эВ, сетка k-точек Монкхорста-Пака [21] с плотностью точек, равной  $0.5 \text{ \AA}^{-3}$ , электронное размытие – по схеме Метфесселя-Пакстона [22], параметр  $\sigma = 0.05$  эВ.

**Результаты.** Поскольку все новые предсказанные структуры, кроме Ni<sub>3</sub>P, изоморфны fcc Ni, локальный порядок и ближайшее окружение атомов в нем одинаковы. Элементарная ячейка Ni<sub>3</sub>P, состоящая из восьми формульных единиц, содержит три симметрично

неэквивалентных атома никеля, занимающих позиции 8d (Ni1), 8f (Ni2) и 8e (Ni3), и один атом Р в положении 8d.

Атом никеля Ni1 находится внутри четырехугольной призмы, вершины которой образованы атомами Ni2 и Ni3, в центре квадрата, образованного атомами фосфора, как показано на рис. 1 (а). Атом Ni2 находится в координационной среде квадратной призмы. В этом случае грани призмы, внутри которой находится Ni2, образованы атомами Ni1 и Р. В этом случае атомы Ni1 и Р в вершинах призмы образуют плоские прямоугольники. (Рис. 1 (б)) Локальное окружение атома Ni3 (рис. 1) такое же, как и у Ni2, за исключением того, что грани призмы, лежащие в плоскости YZ, повернуты на 90 градусов относительно друг друга, в результате чего атом Ni3 находится в тетраэдрическом окружении атомов Ni1 и Р. Ближнее окружение атома фосфора, как видно из сравнения рисунков 1(а) и 1(г), такое же, как и у атома Ni1, за исключением того, что все ближайшие соседи Р-атомы никеля.

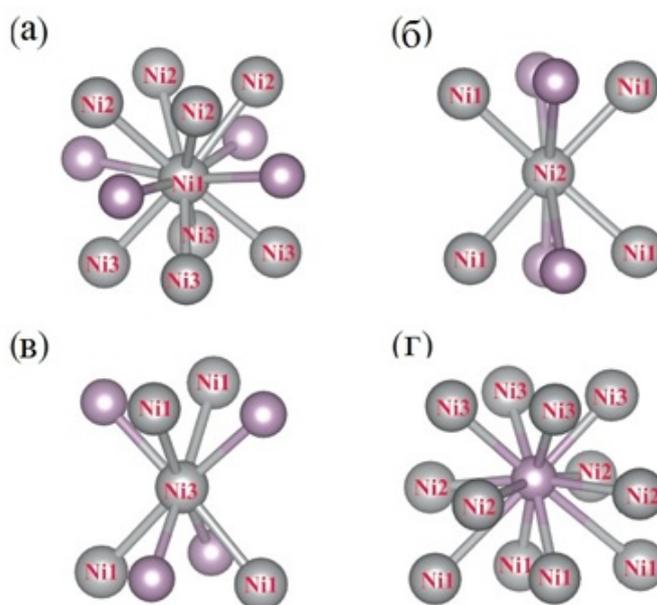


Рисунок 1 – Локальный порядок в структуре Ni<sub>3</sub>P Смс. Фиолетовые шарики соответствуют атомам фосфора

Все предсказанные структуры являются динамически стабильными, то есть устойчивы по отношению к колебаниям атомов и решетки. Свидетельство этому - рассчитанные нами дисперсионные кривые фононов (рис. 2). На рассчитанных спектрах мы не наблюдаем мнимых частот, что и указывает на динамическую стабильность структур.

Спин-поляризованные расчеты показывают наличие магнитного момента в структурах с относительно высоким содержанием никеля от Ni<sub>14</sub>P до Ni<sub>10</sub>P, как показано на рис. 3. Во всех остальных случаях магнитный порядок отсутствует. Магнитный момент на атом никеля уменьшается с увеличением удельного содержания фосфора в системе. При увеличении давления магнитный момент и магнитное упорядочение полностью исчезают при давлении 315, 360 и 350 для решеток Ni<sub>14</sub>P, Ni<sub>12</sub>P, и Ni<sub>10</sub>P соответственно. В отличие от рассмотренных фосфидов величина магнитного момента в чистом никеле слабо зависит от внешнего давления.

Относительная стабильность рассматриваемых соединений при давлениях 200-400 ГПа приведена на рис. 4. Предсказанные структуры Ni<sub>14</sub>P, Ni<sub>12</sub>P, Ni<sub>10</sub>P, Ni<sub>8</sub>P, Ni<sub>7</sub>P, и Ni<sub>5</sub>P являются стабильными во всем рассматриваемом интервале давлений. Предсказанные соединения Ni<sub>3</sub>P и Ni<sub>2</sub>P становятся стабильными относительно распада на изохимическую смесь при давлениях выше 200 ГПа. Также, кроме предсказанных структур, стабильными являются две экспериментально синтезированные структуры Ni<sub>8</sub>P<sub>3</sub> и NiP<sub>2</sub> со структурой пирита. Ni<sub>8</sub>P<sub>3</sub>, как оказалось, является стабильным во всем рассматриваемом интервале давлений. NiP<sub>2</sub> стабилен до 310 ГПа и выше этого давления распадается на Ni<sub>2</sub>P и P.

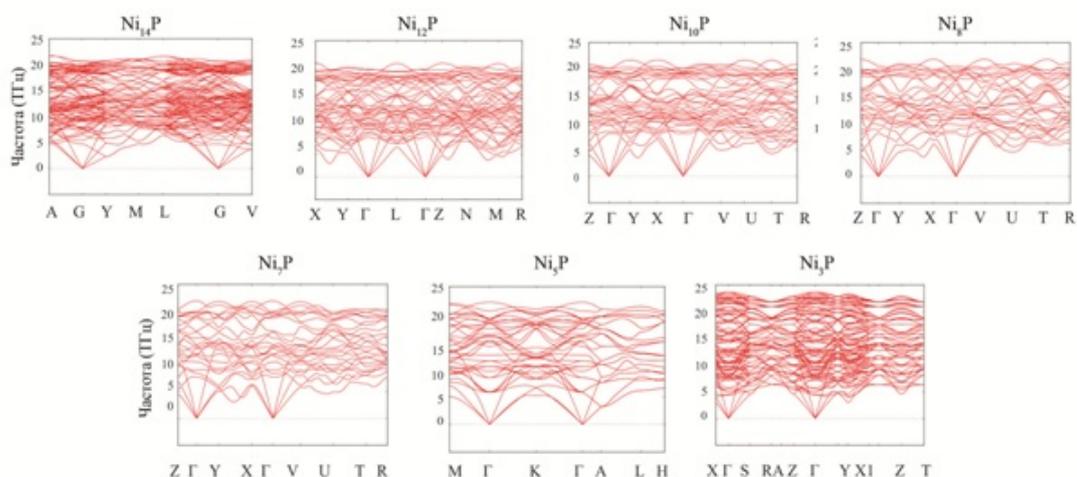


Рисунок 2 – Дисперсионные кривые для Ni-P

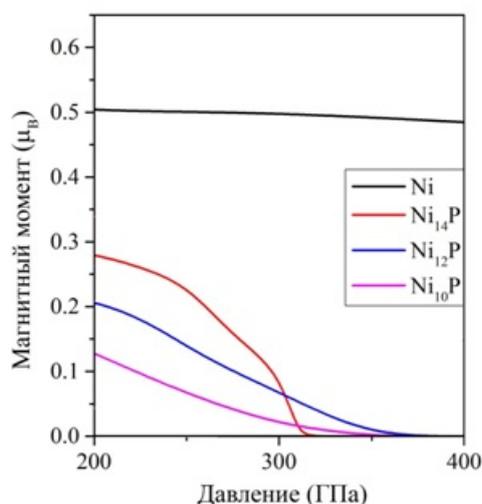


Рисунок 3 – Зависимость давления магнитного момента (в магетоне Бора) на атом Ni для предсказанных кристаллических структур Ni-P

Тенденция фазовой стабильности для соединений Ni-P при атмосферном давлении такова:  $Ni_5P_4 > Ni_2P > Ni_{12}P_5 > NiP > Ni_8P_3 > Ni_3P > NiP_2 > NiP_3$  [23]. С увеличением давления эта последовательность изменяется. При давлениях выше 300 ГПа структуры по увеличению относительной энтальпии образования упорядочиваются следующим образом:  $Ni_3P < Ni_5P < Ni_7P < Ni_8P < Ni_{10}P < Ni_{12}P < Ni_{14}P$ . При давлениях 300 и 400 ГПа наиболее стабильным является  $Ni_8P_3$ . Следует отметить, что результаты, представленные на рис.4 получены без учета температурного эффекта. Для их полного рассмотрения в рамках метода динамики решетки необходимо рассчитать колебательные спектры всех рассматриваемых структур. Нами были проведены расчеты колебаний решетки для всех рассмотренных Ni-P структур, кроме  $Ni_8P_3$  (рис. 2). Так в случае с этой структурой мы столкнулись с технической трудностью, связанной с тем, что элементарная ячейка этого кристалла содержит 132 атома. Кроме того, из-за своей низкой симметрии программное обеспечение PHONOPY генерирует 264 различных ячеек со смещенными атомами для расчета фононных мод. Наши компьютерные ресурсы не позволяют проводить такие масштабные расчеты, в связи с этим мы оставляем этот вопрос для дальнейших исследований.

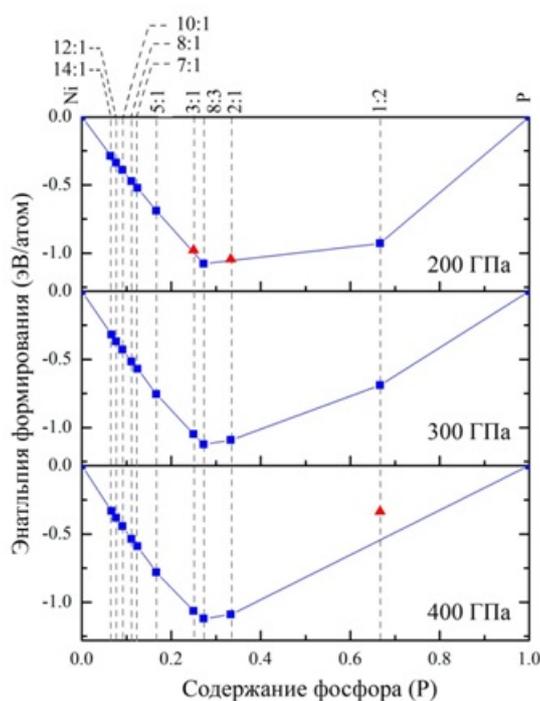


Рисунок 4 – Выпуклые оболочки системы Ni-P при различных давлениях и 0 К. Синие квадраты обозначают устойчивые структуры, красные треугольники - метастабильные структуры

**Заключение.** Изучение материалов под высоким давлением имеет большое значение для понимания механизма фазового перехода, механической устойчивости и внутренней структуры ядра Земли и других планет. В результате компьютерного моделирования было предсказано существование семи новых кристаллических структур фосфидов никеля различной стехиометрии в диапазоне давлений 200-400 ГПа. Шесть из этих соединений описываются fcc-решеткой никеля, в которой часть атомов заменена атомами фосфора. Для фосфида  $\text{Ni}_3\text{P}$  предсказана новая фаза высокого давления, характеризующаяся пространственной группой  $\text{Cmca}$ . Также в ходе исследования был предсказан  $\text{Ni}_2\text{P}$ . Структура данного соединения имеет структурный тип антикотунита, а сам фосфид изоструктурен минералу аллабогданиту.

### Список литературы

- 1 McDonough W.F. Compositional model for the Earth's core // *Treatise on Geochemistry*. - 2014. - V. 3. - P. 559 - 577.
- 2 Scott H.P., Williams Q., Knittle E. Stability and equation of state of  $\text{Fe}_3\text{C}$  to 73 GPa: Implications for carbon in the Earth's core // *Geophysical Research Letters*. - 2001. - V. 28. - P. 1875 - 1878.
- 3 Li J., Fei Y. Experimental constraints on core composition // *The Mantle and Core*. - 2003. - V. 2. - P. 521 - 546.
- 4 Terasaki H., Fischer R. Deep Earth: Physics and Chemistry of the Lower Mantle and Core // *Geophysical Monograph*. - 2016. - V. 317. - P. 1 - 10.
- 5 Allegre C.J., Poirier J.P., Humles E. and Hofmann A.W. The chemical composition of the Earth // *Earth and Planetary Science Letters*. - 1995. - V. 134. - P. 515 - 526.
- 6 Rivoldini A., Van Hoolst T., Verhoeven O., Mocquet A., Dehant V. Geodesy constraints on the interior structure and composition of Mars // *ICARUS International Journal of Solar System Studies*. - 2011. - V. 213. - P. 451 - 472.
- 7 Britvin S., Rudashevsky N., Krivovichev S., Burns P., Polekhovsky Y. Allabogdanite  $(\text{Fe,Ni})_2\text{P}$ , a new mineral from the Onello meteorite: The occurrence and crystal structure // *American Mineralogist*. - 2002. - V. 87. - P. 1245 - 1249.
- 8 Miettinen J., Vassilev G. Thermodynamic Description of Ternary Fe-X-P Systems. Part 6: Fe-Ni-P // *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*. - 2014. - V. 36. - P. 78 - 87.
- 9 Brock S., Senevirathne K. Recent developments in synthetic approaches to transition metal phosphide nanoparticles for magnetic and catalytic applications // *Journal of Solid State Chemistry*. - 2008. - V. 181. - P. 1552 - 1559.

- 10 Fujiwara H., Kadomatsu H., Tohma K., Fujii H., Okamoto T. Pressure-induced magnetic transition in Fe<sub>2</sub>P // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. - 1980. - V. 21. - P. 262 - 268.
- 11 Dera P., Lavina B., Borkowski L.A., Prakash V.B., Sutton S.R., Rivers M.L., Prewitt C.T. High-pressure polymorphism of Fe<sub>2</sub>P and its implications for meteorites and Earth's core // Geophysical Research Letters. - 2008. - V. 35. - P. 10301 - 10306.
- 12 Sideridis A., Zaccarini F., Grammatikopoulos T. and et al. First occurrences of Ni-phosphides in chromitites from the ophiolite complexes of Alapaevsk, Russia and Gerakini-Ormylia, Greece // Ophiolite. - 2018. - V. 43. - P. 75 - 84.
- 13 Pratesi G., Bindi L., Moggi-Cecchi V. Icosahedral coordination of phosphorus in the crystal structure of melliniite, a new phosphide mineral from the Northwest Africa 1054 acapulcoite // American Mineralogist. - 2006. - V. 91. - P. 451 - 454.
- 14 Donohue P.C., Bither T.A. and Young H.S. High-pressure synthesis of pyrite-type nickel diphosphide and nickel diarsenide // Inorganic Chemistry. - 1968. - V. 7. - P. 998 - 1001.
- 15 Goldstein J., Scott E., Chabot N. Iron meteorites: crystallization, thermal history, parent bodies, and origin // Geochemistry. - 2009. - V. 69. - P. 293 - 325.
- 16 Nisar J. and Ahuja R. Structure behavior and equation of state (EOS) of Ni<sub>2</sub>P and (Fe<sub>1-x</sub>Ni<sub>x</sub>)<sub>2</sub>P (allabogdanite) from First-principles calculations // Earth and Planetary Science Letters. - 2010. - V. 295. - P. 578 - 582.
- 17 Oganov A.R. and Glass C.W. Crystal structure prediction using ab initio evolutionary techniques: Principles and applications // The Journal of Chemical Physics. - 2006. - V. 124. - P. 244704.
- 18 Pickard C.J. and Needs R.J. Ab initio random structure searching // Journal of Physics: Condensed Matter. - 2011. - V. 23. - P. 053201.
- 19 Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // Physical Review. - 1996. - V. 54. - P. 11169 - 11186.
- 20 Perdew J., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple // Physical Review Letters. - 1996. - V. 77. - P. 3865- 3868.
- 21 Monkhorst H.J. and Pack J.D. Special Points for Brillouin-Zone Integrations // Physical Review B. - 1976. - V. 13. - P. 5188 - 5192.
- 22 Methfessel M. and Paxton A.T. High-precision sampling for Brillouin-zone integration in metals // Physical Review B. - 1989. - V. 40. - P. 3616.
- 23 Chen J.S., H. Lu C. Yu and Chen J.M. Theoretical study on the phase stability, elasticity, hardness and electronic structures of Ni-P compounds // Phase Transitions. - 2016. - V. 89. - P. 1078- 1089.

А.Б. Базарбек<sup>1</sup>, Н.Е. Сагатов<sup>2</sup>, Т.М. Инербаев<sup>1,2</sup>, А.Т. Акилбеков<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Нұр-Сұлтан, Қазақстан

<sup>2</sup> В.С. Соболев атындағы геология және минералогия институты, Новосибир, Ресей

#### Жоғары қысымда никель фосфидтерінің тұрақтылығын алғашқы принципті есептеу

**Аннотация.** Бұл мақалада тығыздық функционалы теориясы (DFT) негізінде компьютерлік модельдеу әдістері 200-400 ГПа қысым аралығында Ni-P екілік жүйесіндегі қосылыстардың кристалдық құрылымдары мен салыстырмалы энергетикалық тұрақтылығын болжау үшін алғашқы есептеулер жүргізілді. Есептеулер атомдардың тербелістерін ескерусіз жүргізілгенін атап өткен жөн (T = 0 K). Ni-P жүйесіндегі тұрақты қосылыстар мен олардың құрылымдарын іздеу барысында жеті жаңа қосылыс анықталды: Ni<sub>14</sub>P, Ni<sub>12</sub>P, Ni<sub>10</sub>P, Ni<sub>8</sub>P, Ni<sub>7</sub>P, Ni<sub>5</sub>P, Ni<sub>3</sub>P және Ni<sub>2</sub>P. Барлық болжамды қосылыстар динамикалық тұрақты, бұл фондық спектрлермен расталады. Сондай-ақ, Ni<sub>14</sub>P, Ni<sub>12</sub>P және Ni<sub>10</sub>P никель құрамы салыстырмалы түрде жоғары құрылымдарда магниттік моменттің болуын көрсететін спин-поляризацияланған есептеулер жүргізілді. 350 ГПа-дан жоғары барлық болжамды қосылыстарда магниттік момент жоқ, ал таза Ni-де магниттік момент 400 ГПа-ға дейін сақталады.

**Түйін сөздер:** бастапқы принципті есептеулер, кванттық химиялық модельдеу, энергетикалық тұрақтылық, никель фосфиді, дисперсиялық қисықтар, екілік қосылыстар, магниттік момент.

A.B. Bazarbek<sup>1</sup>, N.E. Sagatov<sup>2</sup>, T.M. Inerbaev<sup>1,2</sup>, A.T. Akilbekov<sup>1</sup>

<sup>1</sup> L.N.Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan, Kazakhstan

<sup>2</sup> V.S. Sobolev institute of Geology and Mineralogy, Novosibirsk, Russia

#### First principle calculations of the stability of nickel phosphides at high pressures

**Abstract.** In this article, the first principle calculations for predicting crystal structures and the relative energy stability of compounds in the Ni-P binary system in the pressure range of 200-400 GPa were performed using computer modeling based on the density functional theory (DFT). It should be noted that the calculations were performed without taking into account the vibrations of atoms (T = 0 K). The search for stable compounds and their structures in the Ni-P system revealed seven new compounds: Ni<sub>14</sub>P, Ni<sub>12</sub>P, Ni<sub>10</sub>P, Ni<sub>8</sub>P, Ni<sub>7</sub>P, Ni<sub>5</sub>P, Ni<sub>3</sub>P and Ni<sub>2</sub>P. All predicted compounds are dynamically stable, which is confirmed by phonon spectra. Spin-polarized calculations were also performed showing the presence of a magnetic moment in structures with a relatively high Nickel content of Ni<sub>14</sub>P, Ni<sub>12</sub>P, and Ni<sub>10</sub>P. Above 350 GPa, the magnetic moment is absent for all predicted compounds, while for pure Ni, the magnetic moment is preserved up to 400 GPa.

**Keywords:** the first principle calculations, quantum chemical modeling, energy stability, nickel phosphide, dispersion curves, binary compounds, magnetic moment.

## References

- 1 McDonough W.F. Compositional model for the Earth's core. *Treatise on Geochemistry*, 3, 559 - 577 (2014).
- 2 Scott H.P., Williams Q., Knittle E. Stability and equation of state of  $Fe_3C$  to 73 GPa: Implications for carbon in the Earth's core. *Geophysical Research Letters*, 28, 1875 - 1878 (2001).
- 3 Li J., Fei Y. Experimental constraints on core composition. *The Mantle and Core*, 2, 521 - 546 (2003).
- 4 Terasaki H., Fischer R. Deep Earth: Physics and Chemistry of the Lower Mantle and Core. *Geophysical Monograph*, 317, 1 - 10 (2016).
- 5 Allegre C. J., Poirier J. P., Humles E. and Hofmann A. W. The chemical composition of the Earth. *Earth and Planetary Science Letters*, 134, 515 - 526 (1995).
- 6 Rivoldini A., Van Hoolst T., Verhoeven O., Mocquet A., Dehant V. Geodesy constraints on the interior structure and composition of Mars. *ICARUS International Journal of Solar System Studies*, 213, 451 - 472 (2011).
- 7 Britvin S., Rudashevsky N., Krivovichev S., Burns P., Polekhovsky Y. Allabogdanite  $(Fe,Ni)_2P$ , a new mineral from the Onello meteorite: The occurrence and crystal structure. *American Mineralogist*, 87, 1245 - 1249 (2002).
- 8 Miettinen J., Vassilev G. Thermodynamic Description of Ternary Fe-X-P Systems. Part 6: Fe-Ni-P. *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*, 36, 78 - 87 (2014).
- 9 Brock S., Senevirathne K. Recent developments in synthetic approaches to transition metal phosphide nanoparticles for magnetic and catalytic applications. *Journal of Solid State Chemistry*, 181, 1552 - 1559 (2008).
- 10 Fujiwara H., Kadomatsu H., Tohma K., Fujii H., Okamoto T. Pressure-induced magnetic transition in  $Fe_2P$ . *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 21, 262 - 268 (1980).
- 11 Dera P., Lavina B., Borkowski L.A., Prakapenka V.B., Sutton S. R., Rivers M. L., Prewitt C. T. High-pressure polymorphism of  $Fe_2P$  and its implications for meteorites and Earth's core. *Geophysical Research Letters*, 35, 10301 - 10306 (2008).
- 12 Sideridis A., Zaccarini F., Grammatikopoulos T. and et al. First occurrences of Ni-phosphides in chromitites from the ophiolite complexes of Alapaevsk, Russia and Gerakini-Ormylia, Greece. *Ofoliti*, 43, 75 - 84 (2018).
- 13 Pratesi G., Bindi L., Moggi-Cecchi V. Icosahedral coordination of phosphorus in the crystal structure of melliniite, a new phosphide mineral from the Northwest Africa 1054 acapulcoite. *American Mineralogist*, 91, 451 - 454 (2006).
- 14 Donohue P.C., Bither T.A. and Young H.S. High-pressure synthesis of pyrite-type nickel diphosphide and nickel diarsenide. *Inorganic Chemistry*, 7, 998 - 1001 (1968).
- 15 Goldstein J., Scott E., Chabot N. Iron meteorites: crystallization, thermal history, parent bodies, and origin. *Geochemistry*, 69, 293 - 325 (2009).
- 16 Nisar J. and Ahuja R. Structure behavior and equation of state (EOS) of  $Ni_2P$  and  $(Fe_{1-x}Ni_x)_2P$  (allabogdanite) from First-principles calculations. *Earth and Planetary Science Letters*, 295, 578 - 582 (2010).
- 17 Oganov A.R. and Glass C.W. Crystal structure prediction using ab initio evolutionary techniques: Principles and applications. *The Journal of Chemical Physics*, 124, 244704 (2006).
- 18 Pickard C.J. and Needs R.J. Ab initio random structure searching. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 23, 053201 (2011).
- 19 Kresse G., Furthmuller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Physical Review*, 54, 11169 - 11186 (1996).
- 20 Perdew J., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letters*, 77, 3865 - 3868 (1996).
- 21 Monkhorst H.J. and Pack J.D. Special Points for Brillouin-Zone Integrations. *Physical Review B*, 13, 5188-5192 (1976).
- 22 Methfessel M. and Paxton A.T. High-precision sampling for Brillouin-zone integration in metals. *Physical Review B*, 40, 3616 (1989).
- 23 Chen J.S., H. Lu C. Yu and Chen J.M. Theoretical study on the phase stability, elasticity, hardness and electronic structures of Ni-P compounds. *Phase Transitions*, 89, 1078 - 1089 (2016).

### Сведения об авторах:

*Базарбек А.Б.* - **основной автор**, докторант 3 курса специальности «6D072300-Техническая физика», Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, ул. Мунайтпасова, 13, Нур-Султан, Казахстан.

*Сагатов Н.Е.* - аспирант Института геологии и минералогии им. В.С.Соболева, Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева, проспект Коптюга, 3, Новосибирск, Россия.

*Инербаев Т.М.* - кандидат физико-математических наук, доцент кафедры «Техническая физика», Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, ул. Мунайтпасова, 13, Нур-Султан, Казахстан.

*Акилбеков А.Т.* - доктор физико-математических наук, профессор кафедры «Техническая физика», Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, ул. Мунайтпасова, 13, Нур-Султан, Казахстан.

*Vazarbek A.B.* - **main author**, PhD student of the specialty 6D072300 - Technical physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Munaitpasov str., 13, Nur-Sultan, Kazakhstan.

*Sagatov N.E.* - PhD student, V.S. Sobolev institute of Geology and Mineralogy, Koptiug str., 3, Novosibirsk, Russia.

*Inerbaev T.M.* - Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Professor of the Department of technical physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Munaitpasov str., 13, Nur-Sultan, Kazakhstan.

*Akilbekov A.T.* - Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor of Technical physics Department, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Munaitpasov str., 13, Nur-Sultan, Kazakhstan.