

# Background:

在 ZrC 表面容易形成 graphite-like carbon layer.

(可能是 C 原子流动性高容易重新排列, 吸附堆叠成类似的结构)

但是在 HfC 中 (Nb, Hf, Ti, Ta, Zr) 没有观察到类似的现象

↓ 16 16 16 16 16  
80. ⇒ 总共 160 atoms

? why ZrC 容易!

why HfC 没有? 抑制住了?

• HfC 的内部排序(无序)是否会影响 C 的吸附与吸附形态?

• 局部环境如何影响单个 C 原子的吸附稳定性?

- 材料深处的原子是固定不动的. (bulk-like)
- 只有表面附近的原子因吸附而做稍重调整 (relax)

## Steps:

建立高熵碳化物 slab	Nb, Hf, Ti, Ta, Zr 随机混合
在表面吸附一个 C 原子	模拟碳原子从 bulk 或气相到表面的过程
Relax + Static	精确获得吸附结构与能量
吸附能计算	分析稳定性
周围元素统计	理解哪些元素组合有利于/抑制石墨化倾向

relax → lattice constant ⇒ fix bottom and add vacuum then relax

真实的 bulk 性质

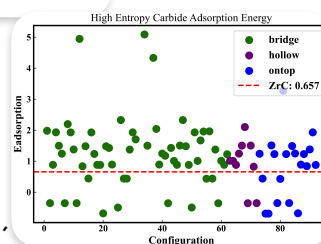
表面无序程度较高, 因此手动选取一些结构. (bridge, atop, hollow)

## Post-processing:

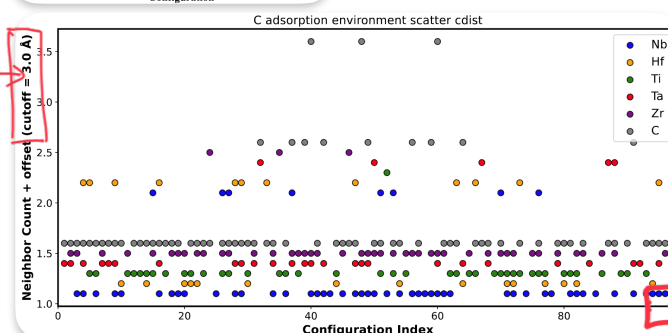
▲ Adsorption Energy vs different configuration.

change to find each atom various with  $E_{adsorb}$  where to decided the cutoff.

▲ Adsorption Carbon atom local environment.



just have a look to see the distribution.



change to adsorption energy