

Background:

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

(可能是 C 原子活性高 容易重新排列. 吸附. 堆積成 2D 的結構)

△ 但是在 HfC 中 (Nb, Hf, Ti, Ta, Zr) 沒有觀察到類似的現象

↓ 16 16 16 16 16

80.

⇒ 總共 160 atoms

? why ZrC 容易!

why HfC 沒有? 抑制住了?

· HfC 的内部排序 (每層) 是否會影響 C 的吸附與遷移行為?

· 局部環境如何影響單個 C 原子的吸附穩定性?

Steps:

建立高熵碳化物 slab	Nb, Hf, Ti, Ta, Zr 隨機混合
在表面吸附一個 C 原子	模擬碳原子從 bulk 或氣相到表面的過程
Relax + Static	精確獲得吸附結構與能量
吸附能計算	分析穩定性
周圍元素統計	理解哪些元素組合有利於 / 抑制石墨化傾向

- 材料深處的原子是固定不動的. (bulk-like)
- 只有表面附近的原子因吸附而微稍重構 (relax)

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

保證晶格大小內部原子位置合適
避免 slab 出現內應力或假變形

2 layers

表面 10 Å

允許表面重構

真實的 bulk 性質

表面每層程度較高, 因此手動鬆弛一些結構. (bridge, on-top, hollow)