Computational Materials Science 235 (2024) 112803

journal homepage: www.elsevier.com/locate/commatsci

[illegible]

[illegible]

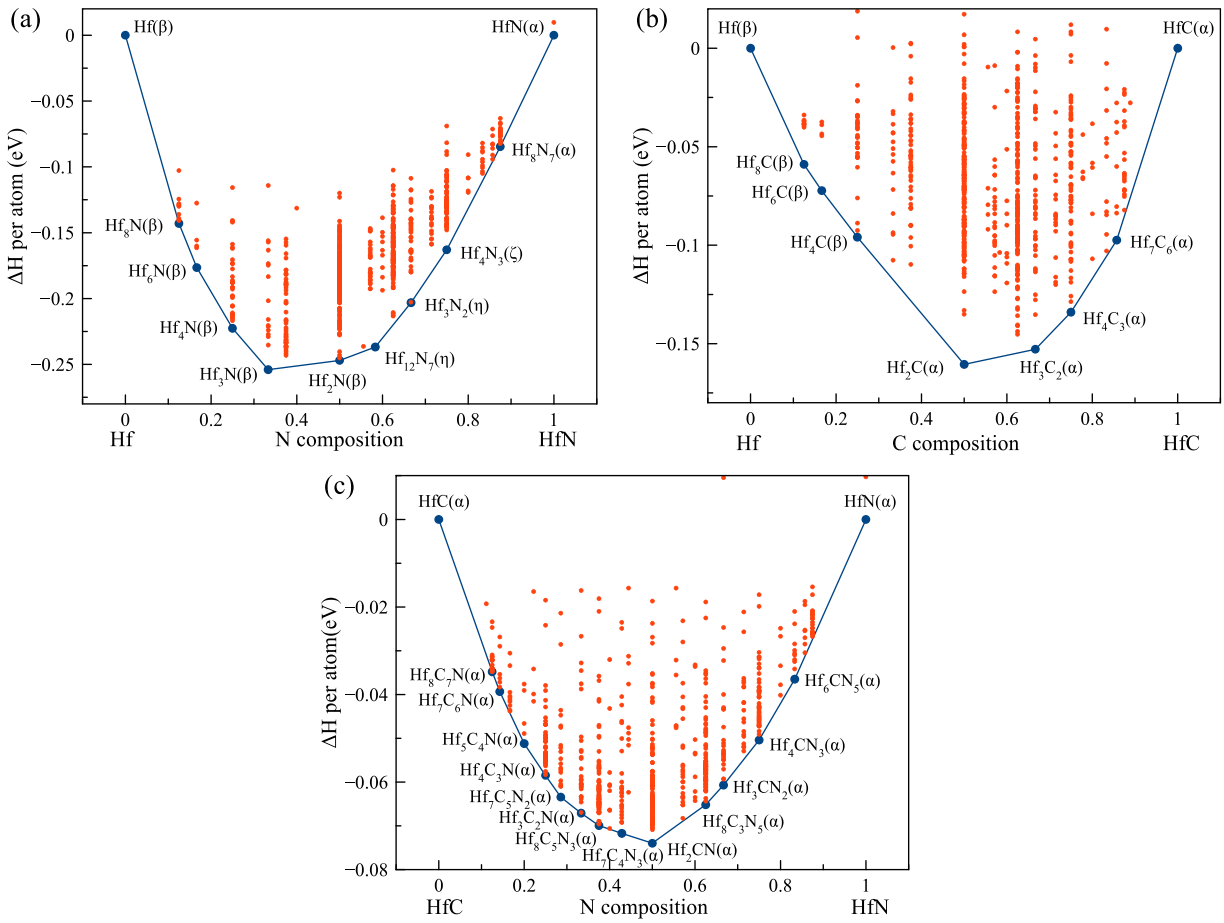
[illegible]

[illegible]

[illegible]

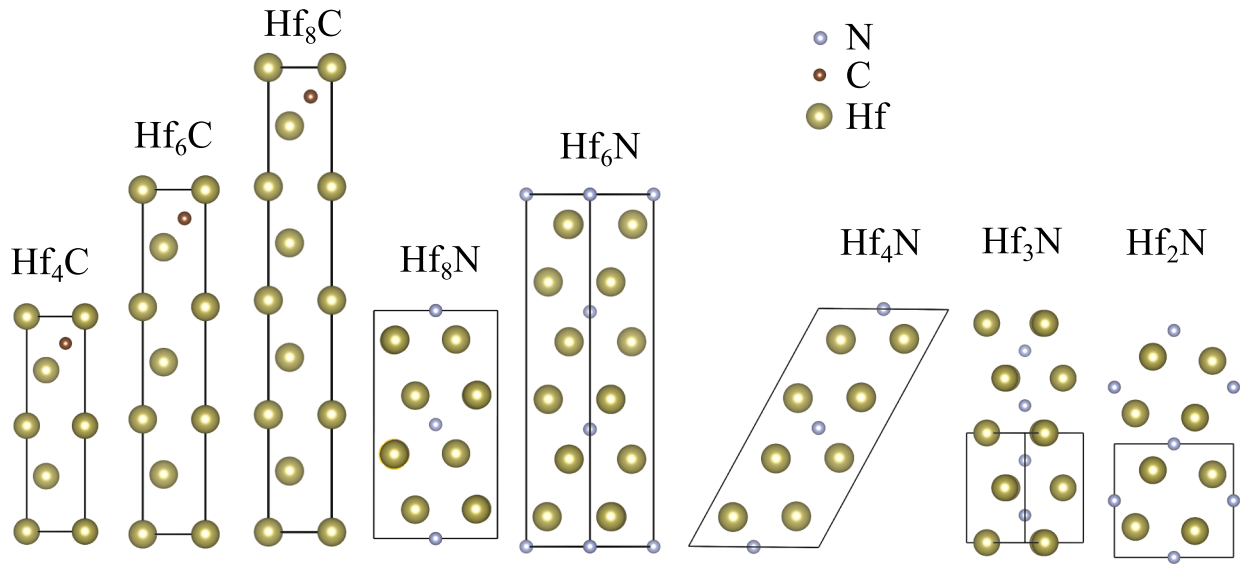
[illegible]

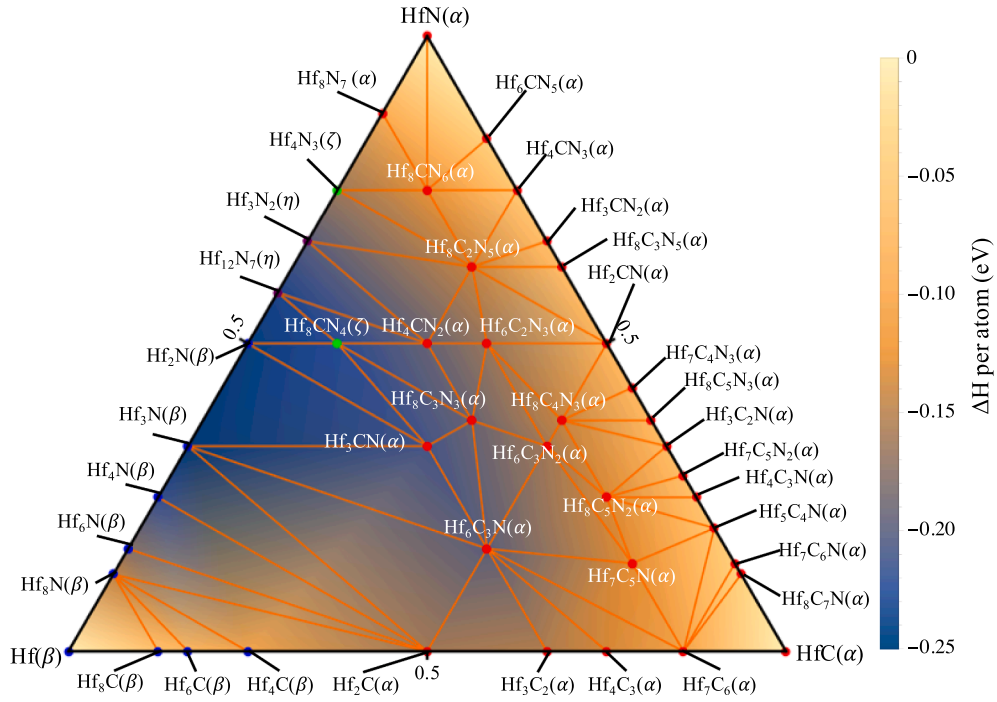
[illegible]



/ (0 <)' & !)2#-##! 3 0 5+:0*$%!1#)L.0 1-4Q/!!5 4 0 74Q/!!5 41/$63!+4Q/!6 5 4 / 7@ ! !

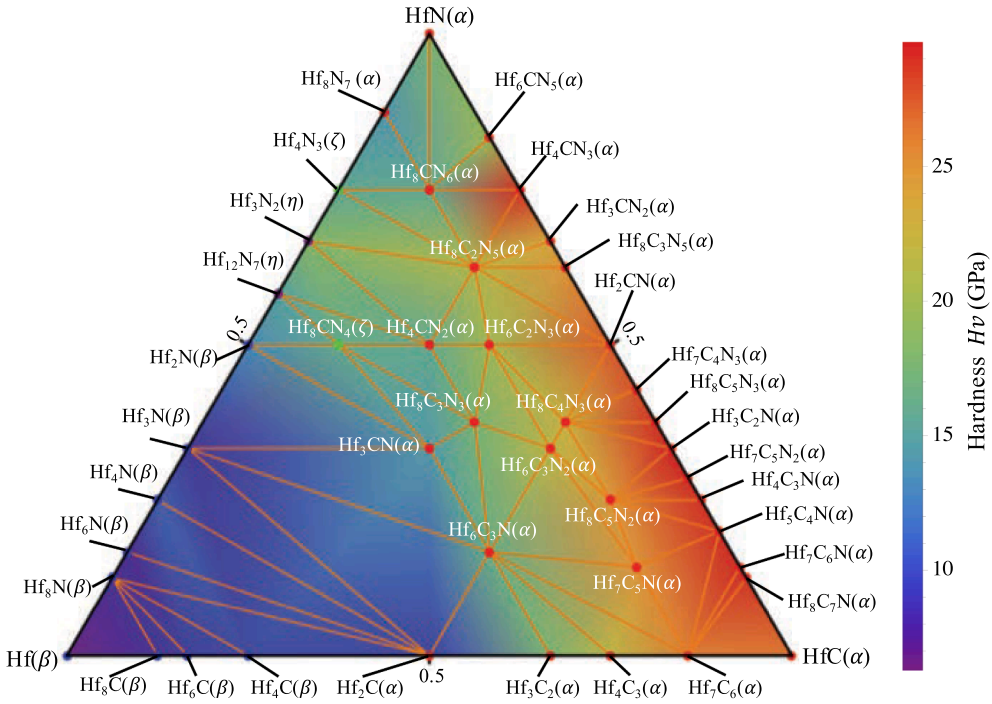
< ' # & 1 : 0 & !*K&#!&!$ #&&21'!1 H#0 - ! 9+ !' 1 #&$0%&* $3% !! + , " - $ % .)
: .3!*) # + &&1 D#-&*' -0!9+)0!D 2 0 - &&1 0&&$&!! *#$! & #0) /* !0) !
& '&##!) $21')13-!#1!%# $ #)'11 !1#.!! < ' & 0 &#1$ #!) %# #)+#0!D 2 & *#,13 !!<- 1 + +1 1&)*)0*$#&3!!
0 H 0 D 0 % # $ 1 $ %&$ 3 2 2 3 #) +! 0 D 2 0 & # D & 2 # 0) $ & N = # T V -! * 1 2 % ! 1 $ # 5:H 11-!**&!'W *! # $($:15!* $F **&0* 0 !9 & 1 * 0 $ 1 % # !
& ' 1 &) # 2 & 0 ! *#$D 1-&!#) * $ & !<#'- **-&@!!! B &! ' 1 & 0 D # !OW (F S N Q T @ < ' # L + ' 1 + $ 0 %)#)! # #1$&#*) 0 %$#!#) +#0!D 2 & # 3 !
- & 1 2 ' 1 D #1 -$!D & 0) D $ 3 # 1) ! 0) 1 & 9 3 * & * & 0 B ! $ # & * + !* & $ %%!# $ #) 1%) *1K3#132!2 & 0 L * 0 0 1 & (0 ! 5 0) D : 1 & # 3 !
: 1)) 1* # -) 0 - +H 1 & # B %% * / / ! $&*' 0#B-1#&! #) H '1 * + $!! 9 #) 3 # H = B 1 $ & !) $ K # S Z @ V '! # 1 # $ + # + &3) *0) $#-+!& .
&)1 $) !* /) # 0&D' !#'**)%D '#! & & #$D%2 #) 1P&$&!) ' 0 & @ '# 1) $ 1 3 = -! * D H 1 &) #%3-!1 2 !* $+ !1) : 0 $ -2 !* $$!* &) 0 1%$#B$!-Z 3 !* $!
+ & -) &0) $ * +&&# $) -#* !& . 5 /& '$#+0&),* .0!$ Q 1 ! # !H $*!3 # .' 1 / $ H ' D & # # 0) # 5 1 1 $ & $) 1 H + &) D 0 0 !3 # ! # 3 * & %# !
D 2 0 & 0 # & !2 3 '. 1 - & 1 : * & ! &) 1 $ - D * # & & * 1 0 1 $)! : 1 $ & 1 2) 0 c # 1 + & %0 D) # $ H & 1 # D # # ! & ' S O Z 3 ! = @ A ! # - V # # & & # D 3 # # & ! ' 0 3 - !
$ * &) S * `3 N # U - 1 / ! $ 3 1 - 2 # + * R + 1 1 $: !& & 0 ! B # $ & & '* - # # & .) ! + & :) # # + - 1 ! & ' - # ' 1 ! ! : # # ! # $ - ! # # 3 L ! & # $ - & * 0) ! # # 2) . # : - 0 # & & ' & 4 # / 5 6 !
0 & ! ' K # # & 1 & B & 2 1 ' ! 1 - * # & - ! ' # 1 ! / $ $ * B) - *. 3 - # S N D 1 \ $! 0 5 - . - & 1 # $ D 4 ! / 5-7. ! - & 1 # -) D # # 2 0) * & 2 #) 3 # ! ! * & 3 1 * $ # & - ! ! 0 - !) !
3 #) # 0 + B - &) & + & $ & !) ' # # / 6 5 4 2 / - 7 # ! 3 0 : - * . $ - 1 &) S N D 0 ! V) # - 1) # # 1 3 + * 0 D . 2 ! 1) S 1 ` : X = # ` !] @ N T = N X V
< ' , - = < 1 &) ! # D # $ 2300 & # - $ & 0 # * 1 + ! * & 3 ' & # #) $ + 10) D . 2 5 0 - * G $ & # %) * 1) & # * + 0 * $ 2 ! -) 2 1 + H 1 1 + ! 0 $ 3 + & # 1 3 % ! $ B ' 0) - & 5
& * 0 $ 2 1 1 + # - ! 0 + H 1 & & 0 $ 5 - & 0 * + D ' ** L 0 1 0 $ & & ' & #) ! 1 $ - * & 9 * 10 + & B) ! H 3 & 1 T T K T T K T T * ! $ & # %) - 1 + & # / D D & &) ! ' # 0 ! $ I # $ & * 0 $ 1
D # & + 1 1) ! : 1 $ $ 1 + &) * 3 # - @ ! $ * + & H * & & ! ' $ # ! D : 0 # 2 0 * $ & * 1 $ % c ! / 0 #) 1 3 + ! ' * D 1 & * 0 $
< ' 2 #) # - H # 0 $) & B * ! D & - 3 ! # D 0 $ - & & ') * 1 1 & 2 # 1 ! : < 0 & ! * & $ & 0 # ! + # & 0 # ! $ - 1)) # 0 ! % + 0 $ - & 1 5 1 2 $ 0 & 3 $ & ! - * * $ & ! # + * 2) 2 0 1 + 1 # !
- # & ' + 4 & / ! ! 5 4 / 6 & 5 # 4) / $ 7 1 !) - . & ! # # D + ! 1 0 & ! # # ! L ! 2 # - 6 & # 3 # !) - S Z @ < V ' 2 # 1 $ # 5 # $ 1 # !) + # % ! & # 0 1 / - # 1 & & ! ! Y # Y W @ ' ! & 0 #) / 1 0 $) + ! # !
0 / - ! & 1 ÷ & # ! + & ' 1 + 0 ! - # B ! * - $ & ! 0 #) $ 2 1 ') 1 . 3 ! # 1 %) 1 0 D) @ ! # # + & +) 0 0 $ $! * # +) ! % 1 # - $ # & & 0 ! ! Y Z # W # ! ' * & ' # # ! 0 ! $ I #) 0 % $ & ! $ # # !
L 1 D 2 & ' # # = ! ! 5 - 7 . ! - & ' # 1 D / ! 0 &) . ! 2 0 # / D ! # & 1 & 0 - D & ! 1 + B # $ % - ! &) + + & 0 $) ! 1 #) % ! # - $ # & & 0 ! ! Y N # W 1 ! $ & ! ' # & !) +) & #) 1 1 L 1 ! & * 0 $
J # $ + # O ! = 6 0 6) Q ! ≃ 4 O ! 4 6 0 9) H Q ! = 2 O ! + Q 1 ! $ B ! 0 + ! + Q H ! ' #) # 1 H #) 1 # + ! + 0 D 2 * - - * & $ # # & ! 0 ! $ c % %) 1 1 & 3 # D ! # & & 0 3 @ !
& ' 4 # / ! 5 - 6 . ! - & 0 # $ D ' ! 1 & ' ! ' # ? 1 ! $ 3 4 D ! # & 1 1 & 0 - D & ! 1 + B # $ % # $ + # - < @ ' ! # # 1) 1 + % 0) H ' 1 & 2 ' # D) ! / 0) D # 1 3 % ! $ D #) D 1 & & 0 0 3 !
> 1 - # 3 $ & ! ' 3 * ! #) H - # * + & 1 . 3 =) ! # - & D # 1 1 & !) 1 $ - * # & & H 0 $ # $ Z U V * D * & 2 1)) H ! ! D 0 & ! 0 3 # 3 & ! ! 1 # ! & ' & 0 3) ! - - ! + & 1 K # #) & ! 1 !
- & 1 + B # $ % # 0 $ + + # H) ! & & * $ $! & #2) 0 *) 0 &) * K 0 ! $ # ! / ! 5 4 / 6 5 4 1 / $ 7 3 ! & 2 1 ' ! 1 - * # & - ! ' & #) ! 1 $ - D * # & & * 1 0 1 $) ! : 1 $ $ + &) S N 3 # ` @ !!
2 ' 1 3 - * # 1 %) 1 1 D @ 3 ! * &) 0 $ * 1 * 3 $ * - $ * % % & & 0 $ # ! 1 & &) # - # & 1 : 4 #) # # 2 # #) / 0) D # 1 3 & " # * $! + D 3 # & 3 1 & 0 - D & ! 1 + B # $ % !
2 ' 1 0 # & - ! ' # $! & #0) & * ! 0 & #) $ 2 1 ') 1 3 - ! # 1 %) 1 D # = 1 ! # 1 ! # J # $ & # 1 & ! # ? O ! 6 0 Q O ! 4 6 9 T Q ! = 2 K # & 1 $ Q ! = O ! # & 6 1 1 Q) @ ! : 0 $ = !
& Q !) # 3 : * 1 + - & *) + 0 ! 2 # 1) &) * & ! - # # $ 1 & &) #) # $ * 1 $) + . ! D 3 # * + $ % 1 ! $ $ * &) 0 1 % # 3 $ 1 + 1 $ 0 + $ & # ' $ 0 $ D # - & 1 : ! 1 H & &) * 1 + ! 0 & 0 0 3 !
* + & ' # !) D $ & ± # + & 2)) 0 0 $ 2 * # -) ! & * # - @ ! 0 + + & 2 ' 0 ! + & 1 ' # $ & 1) ! H & * * + 1 # - ! = 0 ! H 0 # & L ! 1 D * $ 0 & ! 0 $!
- &) + & ' 1) & #) - * ! # & ! H 2 # $ 4 # / 1 ! ! $ & / + 0 D 2 0 - * H & ' # 0) $ # - ! = !
3 # $ 0 # & & 6 0) 7 G ! $) 3 & # D 1 B & ' ! # # ! 1) D 0 ') # # / ! R + ! H # $ 1 & = !


Hf8C
Hf6C
Hf4C
Hf8N
Hf6N
Hf4N
Hf3N
Hf2N
N
C
Hf


HfN(α)
Hf8N7 (α)
Hf6CN5(α)
Hf4N3(ζ)
Hf4CN3(α)
Hf8CN6(α)
Hf3N2(η)
Hf3CN2(α)
Hf8C3N5(α)
Hf12N7(η)
Hf8C2N5(α)
Hf2CN(α)
Hf8CN4(ζ)
Hf4CN2(α)
Hf6C2N3(α)
0.5
0.5
Hf2N(β)
Hf7C4N3(α)
Hf8C5N3(α)
Hf8C3N3(α)
Hf6C4N3(α)
Hf3N(β)
Hf3C2N(α)
Hf3CN(α)
Hf6C3N2(α)
Hf7C5N2(α)
Hf4N(β)
Hf4C3N(α)
Hf8C5N2(α)
Hf5C4N(α)
Hf6N(β)
Hf6C3N(α)
Hf7C6N(α)
Hf7C5N(α)
Hf8N(β)
Hf8C7N(α)
Hf(β)
HfC(α)
Hf8C(β)
Hf6C(β)
Hf4C(β)
Hf2C(α)
0.5
Hf3C2(α)
Hf4C3(α)
Hf7C6(α)
0
−0.05
−0.10
−0.15
−0.20
−0.25
ΔH per atom (eV)

J HB&! % /#&& K & & &

J HB&! % /#&& K & & &



/ (0 <)' # 0 D 2 && '#8 0) # &) 3 $ # !* & % 4 # - ! 5 + 0 D 2 * & # 3 + 0 $ + & 1 1 $ & & ! # # D 2 *)/*0+)1D 0 !6 1 # # $ & 1 ! S @ J @ V !

& ' 2 1 2 4 0 @ # I H # #) ! $ & * + & ' 2 & 1 & & D # 2 ! #) H 1 * & + 1) ! # & ! ' # $ # 0 ! $ 5 2 # 1 * B $! & * / H $ # + ± & ! ' # 0 ! D 2 0 -)* 1 & $ * % 0 # $! 7 ≤ Y . N ! & ! # !
D # & 1 & 0 D 0 3 ! * - 0) & # 0) D 2 # 0 ! * $ & =) # & ' - # 0 $ % R %) 1 & 4 0 6 7 & ! . - & * # $ 1 %) # # D # $ & 2 &) ! # I R 0 $ 3 - * $ % Y ± @ < Y Y # !
$ &) 0 0 & 2 ! . - # ! . ! - & 1 # * D 3 = * ! $ % H # & * 0 $ % ! / :) - # ! $ #) < % ' . # @ * ! ! 9 0 * ÷ --) ! 0 1 $ & * 0 @ ! Q ÷ 0 H - + ' # ! 1) * 1 * & $ * 1 0 $! ! # - & ÷ H ! # # $!
+ 1 / 0 #) L ! 1 D 2 1 0 # & ! ! 1 # ! 2 2 ' 1 1 & # 0 - 0 !) 1 D ! * $ % * # 0) 3 #) # 0 Y @ 2 1 $ 3 @ ^ 1 M $ = 3 ! 1 - D ! * $ * D 1 & 0 ! ! 4 # / ! 6 0 D 2 0 - ! & ÷ 0 $ a
2 ' 1 R # ! < 3 @ # ! # & # 1 & = 1 1 $! K # & 2 1 ' 1 1 - H # 0 - ! / 3 ! - 0 H / K 0 =) D * $ % % # $ #) ' 1 * % ' / . # 0 1)) & !) + H & * & D ' 0 !) ' # 1 ! / $ ÷ 0 D 2 1 &) 0 $ D 5 !
- * $ % # % ! H 0 * $ & H ' ! ! 3 # &) 0 * + ' * < 0 D # & !) . @ & # ' $ # ') 1 ! & + # ! D # & 1 & 0 D $ & # $ & 3 0 - # ! ' * % ' / # 0 +)) 0 ! D 2 0 - H & ± D 0 0 $) $ # ! ! &) 0
- & 1 : 0 & ! ' 1 & ! 2 1 2 ' 1 1 1 - $ ' 3 # & 2 1 ' 1) - # ! 1 & & 0 ! ! 0 # & $! ' 1 0 $! ! 3) & 0 ! % # & $ ' 1 + $ 1) : 0 $ @ !
' * % ÷ 0 $) R %) 1 & &) 0 1 0 $ 2 3 . L ! ! 2 # + & 0 # # & $) & ! ' 1 0 0 2) 3 #) * $ % @ & ! 2 #) ! # I ÷ 0 + & H ' 3 ! $ = ! + & - ' & # # ! 3) D 0 3 . - & 1 1 D 0 ÷ ! ' & .
& ' # 0 ! D 2 0 : $ 3 & & 1 ! ! ÷ D 2 0) & & 0 1 $ & &) ' # & !) +- & & 1) : 1 * ! ' & &
0 & ! ' # 0 ! D 2 0 < $ ' 3 # - & @ 1 ! & & *) + ! + - & & 1) : 1 0 & ! ' & 0 ! D 2 0 + $ 1 3 $ - ! !
: # ! #) * R . # ! 3 D 2 & * # $ % % # $ I 0 1 & ! ' # # # ! 1 + & * ÷ D 1 $ &) * - + ! # - !
& 0 $ - &) ' # # ! % # $ I 1 1) 2 # 0 ! # ÷ & * $ 1 0 & & 1 ! ÷ 1 $ # & $!) # 3 !
< ' &) 1 $ - D * # & & * 1 0 1 $) ! ! 1 $ $ # ÷ & 1) 1 *) 3 # # ! & - # # # $! # + 0 &) # ! 3 # ! *): ! . + ! 0 D 2 & * # % # J # 1 $ - + - * 0 # + H ! 1 & & # # # ! - - D 1 1 & $) ! * 1 L ! # !
' * % - ' & ! * / 1 $ # 3 - 1 -) ! 3 $ 1 # $ 3 $ 0 $ 5 - & 0 * + + ' 1 * $ 0 D & & & ') # ! . - ! # $! 0 $! # % 1 &) # 3 ! # A $ # ' ! * 1 # I + # 0 D 2 & 0 # 1 ' $! 3 0 $ R) D 0 # 3 ' !
2) 0 2 #) & ! $ # – H 1 . < @ ! * & ! D 2 0) & 0 1 $ 3 #) - ' & 0 1 H $! 3 - ! & 1 1 & $ * 3 + ! ! $ 1 D &) ! + - & & 1) : 1 < ' ! * & 0 @ # ! L 2 # + & $ D 3 0 # - ! & !
& ' # ! - 1 # ! ! # 1 -) 1 ! . - 1 ! ! $ + & 0 * & 0 ' $ # ! 1) : 1 0 $ $ $! * &) 0 - % 0 $ & ! # $ & & ! ' $ # ! H ! 0 D 2 0 3 $ * 3 - - + ! 0 ! ' #)) 1 #) 3 ! # 1 & & 0 ! $ 0 H - $ & ! 1 : # !
1 + + 0) 3 H $ # % ! 1. = ! & 1 & # # ! 3 1 ! – & * * + ! 0 $ # 1 - + + ' 0 ! D 2 0) $ 3 ! - &) + &) # - @ !
2 0) & 0 # & & 2 ! ' # 0 $! ' # L < ' @ # ! $ % # $ 5 +) 1 + & 0 & $ 1 + & 0 1 & $! ' & # - - ! # ! < ' & ! # 0) W & * B ' 1 1)) ! 3 ! $ # 1 $ # + ! 0 D 2 & # * 3 & $ % # ! 1 - & * + !
2 ' 1 - 1 #) # 0 ! $ & ! ! F # ! 2 2 # D G # $ $ / & 0 1) D 0 ! & & 1 $ # B ! * / R + + & & $ - & H 1 * $ & & ' - # H D 2 *)/*0+)1D 3 # 1 1 # 0 2 6 # 3 # # $ & 1 ! S @ J ! 3 V
& 0 ! *) # + + & D 2 1) # $ 1 B 0 $ % * & %) # # & 1 + 1 0 $ + & H 1 # $ & - = !
+ 0 D 2 & & ' # # 3 ! 1 1 ! #) - 1 % # D 1 0) 3! O N Q ! = 0 ' $ D 6 0 3 O . Q 1 ! $! 3 ! $ $ $! ! !

J H&% /#&& K &&&&

J HB&! % /#&& K & & &

J H8&! % /#&& K & & &

J HB&! % /#&& K & & &

J H&& % /#&& K & & &