Mater. Rep. B, 2019, Vol. 33, No. 3
DOI: 10.11896/cldb.201906010
http://www.mater-rep.com http://www.mr-int.net

[补充信息]

$CaCO_3$在 Fe（100）表面成垢机制的第一性原理研究

张旭昀 1,2,3，王文泉 1,3，郭斌 2，郑冰洁 1,3，吴戆 1,3，王勇 1, 3

1 东北石油大学 机械科学与工程学院，黑龙江 大庆 163318；
2 哈尔滨工业大学 材料科学与工程学院，黑龙江 哈尔滨 150001；
3 黑龙江省石油石化多相介质处理及污染防治重点实验室，黑龙江 大庆 163318；

[Supplementary Information]

First-principles Calculations Study for Scaling Mechanism of $CaCO_3$ on Fe(100) Surface

ZHANG Xuyun[1,2,3], WANG Wenquan[1,3], GUO Bin[2], ZHENG Bingjie[1,3], WU Zhuang[1,3], WANG Yong[1,3]

1 School of Mechanical Science and Engineering, Northeast Petroleum University, Heilongjiang Daqing 163318, China
2 School of Materials Science and Engineering, Harbin Institute of Technology, Heilongjiang Harbin 150001, China
3 Heilongjiang Key Laboratory of Petroleum and Petrochemical Multiphase Treatment and Pollution Prevention, Daqing 163318, Heilongjiang, China

模型建立

在建立 Fe(100)表面模型时首先建立α-Fe 原胞，并对该结构进行优化，优化后的晶格常数为 2.866Å，随后使用该结构建立表面模型。为了使所建立的模型尽可能的接近真实的晶体，铁原子的层数需要足够厚，因此采用 5 层铁原子平板模型，建立 p(2×2)的周期超级晶胞。为避免层晶之间的干扰对计算结果的影响，添加了一个足够大的真空层，其厚度为 15Å，以减小不同层原子间的影响，并消除垂直方向上周期性边界条件的影响[7]。最后，固定底两层原子允许上三层原子自由弛豫以模拟铁表面。

计算参数选择

CaCO3 在 Fe(100)表面有多种吸附位置，包括顶位(Top)、桥位(Bridge)和洞位(Hollow)三种高度对称位置，如图 2 所示。因此建立覆盖度为 1/9ML 时 CaCO3 在上述铁表面顶位、桥位、洞位的吸附初始模型，并进行结构优化。将文石、方解石两种结构分别放置在 Fe（100）表面的桥位、顶位和洞位时，初始放置距离设置为 1.2Å，同时束缚 Fe（100）的底二层原子，使吸附质以及表面三层原子能够自由弛豫至能量最低的稳定吸附位置。

✉ wangyongsll@163.com.

总能量收敛的精度为 1×10-6eV/atom，结构优化过程中采用 BFGS 算法，能量精度为 2×10-5eV/atom，每个原子受力小于 0.05eV/Å，内应力小于 0.1GPa，原子移动位移小于 0.002Å。在进行收敛性测试后综合考虑计算精度和计算时长，截断能选择使用 380eV，k-point 取样为 4×4×2。

✉ wangyongsll@163.com.