

Supplemental Information

Ab initio modeling MAX phase solid solutions using the special quasirandom structure approach

C. Jiang^{1,a)} and A. Chroneos^{2,3,b)}

¹Idaho National Laboratory, Idaho Falls, Idaho 83415, USA

²Faculty of Engineering, Environment and Computing, Coventry University, Priory Street, Coventry CV1 5FB, United Kingdom

³Department of Materials, Imperial College London, London SW7 2BP, United Kingdom

Table 1. Structural description of the 128-atom SQS structure for modeling the $Zr_2(Al_{0.5}A_{0.5})C$ MAX phase. Lattice vectors of the SQS are $a_1=(2\sqrt{3}a, -2a, 0)$, $a_2=(0, 4a, 0)$, and $a_3=(0, 0, c)$, where a and c are the hcp lattice parameters of the perfect MAX phase. Atomic positions are given in fractional coordinates for the ideal, unrelaxed structure.

Zr atoms	Al atoms	A atoms	C atoms
0.333333 0.166667 0.086460	0.083333 0.166667 0.750000	0.333333 0.166667 0.750000	1.000000 1.000000 1.000000
0.583333 0.666667 0.086460	0.583333 0.166667 0.750000	0.833333 0.166667 0.750000	0.250000 1.000000 1.000000
0.583333 0.916667 0.086460	0.083333 0.416667 0.750000	0.333333 0.666667 0.750000	0.500000 1.000000 1.000000
0.833333 0.916667 0.086460	0.333333 0.416667 0.750000	0.583333 0.666667 0.750000	0.750000 1.000000 1.000000
0.416667 0.083333 0.913540	0.583333 0.416667 0.750000	0.083333 0.916667 0.750000	1.000000 0.250000 1.000000
0.166667 0.333333 0.913540	0.833333 0.416667 0.750000	0.583333 0.916667 0.750000	0.250000 0.250000 1.000000
0.666667 0.583333 0.913540	0.083333 0.666667 0.750000	0.916667 0.833333 0.250000	0.500000 0.250000 1.000000
0.833333 0.166667 0.413540	0.833333 0.666667 0.750000	0.416667 0.833333 0.250000	0.750000 0.250000 1.000000
0.083333 0.916667 0.413540	0.333333 0.916667 0.750000	0.666667 0.833333 0.250000	1.000000 0.500000 1.000000
0.833333 0.916667 0.413540	0.833333 0.916667 0.750000	0.916667 0.083333 0.250000	0.250000 0.500000 1.000000
0.416667 0.833333 0.586460	0.166667 0.833333 0.250000	0.666667 0.083333 0.250000	0.500000 0.500000 1.000000
0.666667 0.833333 0.586460	0.166667 0.083333 0.250000	0.166667 0.333333 0.250000	0.750000 0.500000 1.000000
0.916667 0.083333 0.586460	0.416667 0.083333 0.250000	0.416667 0.333333 0.250000	1.000000 0.750000 1.000000
0.416667 0.083333 0.586460	0.916667 0.333333 0.250000	0.916667 0.583333 0.250000	0.250000 0.750000 1.000000
0.666667 0.083333 0.586460	0.666667 0.333333 0.250000	0.416667 0.583333 0.250000	0.500000 0.750000 1.000000
0.416667 0.583333 0.586460	0.166667 0.583333 0.250000	0.666667 0.583333 0.250000	0.750000 0.750000 1.000000
0.083333 0.166667 0.086460			1.000000 1.000000 0.500000
0.583333 0.416667 0.086460			0.250000 1.000000 0.500000
0.083333 0.916667 0.086460			0.500000 1.000000 0.500000
0.916667 0.833333 0.913540			0.750000 1.000000 0.500000
0.333333 0.166667 0.413540			1.000000 0.250000 0.500000
0.333333 0.416667 0.413540			0.250000 0.250000 0.500000
0.583333 0.666667 0.413540			0.500000 0.250000 0.500000
0.333333 0.416667 0.086460			0.750000 0.250000 0.500000
0.833333 0.416667 0.086460			1.000000 0.500000 0.500000
0.083333 0.666667 0.086460			0.250000 0.500000 0.500000
0.166667 0.833333 0.913540			0.500000 0.500000 0.500000
0.666667 0.333333 0.913540			0.750000 0.500000 0.500000
0.083333 0.416667 0.413540			1.000000 0.750000 0.500000
0.583333 0.916667 0.413540			0.250000 0.750000 0.500000
0.833333 0.416667 0.413540			0.500000 0.750000 0.500000
0.333333 0.666667 0.413540			0.750000 0.750000 0.500000
0.833333 0.166667 0.086460			
0.083333 0.416667 0.086460			
0.333333 0.666667 0.086460			
0.916667 0.083333 0.913540			
0.166667 0.083333 0.913540			
0.666667 0.083333 0.913540			
0.416667 0.333333 0.913540			
0.916667 0.583333 0.913540			
0.166667 0.583333 0.913540			
0.583333 0.166667 0.413540			
0.583333 0.416667 0.413540			
0.833333 0.666667 0.413540			
0.916667 0.833333 0.586460			
0.166667 0.833333 0.586460			
0.166667 0.083333 0.586460			
0.416667 0.333333 0.586460			
0.166667 0.583333 0.586460			
0.666667 0.583333 0.586460			
0.666667 0.833333 0.913540			
0.083333 0.166667 0.413540			
0.083333 0.666667 0.413540			
0.916667 0.333333 0.586460			
0.166667 0.333333 0.586460			
0.916667 0.583333 0.586460			
0.583333 0.166667 0.086460			
0.833333 0.666667 0.086460			
0.416667 0.833333 0.913540			
0.416667 0.583333 0.913540			
0.333333 0.916667 0.413540			

0.666667 0.333333 0.586460			
0.916667 0.333333 0.913540			

Table 2. Structural description of the 128-atom SQS structure for modeling the $Zr_2(Al_{0.75}A_{0.25})C$ MAX phase. Lattice vectors of the SQS are $a_1=(2\sqrt{3}a, -2a, 0)$, $a_2=(0, 4a, 0)$, and $a_3=(0, 0, c)$, where a and c are the hcp lattice parameters of the perfect MAX phase. Atomic positions are given in fractional coordinates for the ideal, unrelaxed structure.

Zr atoms	Al atoms	A atoms	C atoms
0.333333 0.166667 0.086460	0.083333 0.166667 0.750000	0.583333 0.666667 0.750000	1.000000 1.000000 1.000000
0.583333 0.666667 0.086460	0.333333 0.166667 0.750000	0.333333 0.916667 0.750000	0.250000 1.000000 1.000000
0.583333 0.916667 0.086460	0.583333 0.166667 0.750000	0.916667 0.833333 0.250000	0.500000 1.000000 1.000000
0.833333 0.916667 0.086460	0.833333 0.166667 0.750000	0.416667 0.833333 0.250000	0.750000 1.000000 1.000000
0.416667 0.083333 0.913540	0.083333 0.416667 0.750000	0.666667 0.833333 0.250000	1.000000 0.250000 1.000000
0.166667 0.333333 0.913540	0.333333 0.416667 0.750000	0.416667 0.333333 0.250000	0.250000 0.250000 1.000000
0.666667 0.583333 0.913540	0.583333 0.416667 0.750000	0.916667 0.583333 0.250000	0.500000 0.250000 1.000000
0.833333 0.166667 0.413540	0.833333 0.416667 0.750000	0.416667 0.583333 0.250000	0.750000 0.250000 1.000000
0.083333 0.916667 0.413540	0.083333 0.666667 0.750000		1.000000 0.500000 1.000000
0.833333 0.916667 0.413540	0.333333 0.666667 0.750000		0.250000 0.500000 1.000000
0.416667 0.833333 0.586460	0.833333 0.666667 0.750000		0.500000 0.500000 1.000000
0.666667 0.833333 0.586460	0.083333 0.916667 0.750000		0.750000 0.500000 1.000000
0.916667 0.083333 0.586460	0.583333 0.916667 0.750000		1.000000 0.750000 1.000000
0.416667 0.083333 0.586460	0.833333 0.916667 0.750000		0.250000 0.750000 1.000000
0.666667 0.083333 0.586460	0.166667 0.833333 0.250000		0.500000 0.750000 1.000000
0.416667 0.583333 0.586460	0.916667 0.083333 0.250000		0.750000 0.750000 1.000000
0.083333 0.166667 0.086460	0.166667 0.083333 0.250000		1.000000 1.000000 0.500000
0.583333 0.416667 0.086460	0.166667 0.083333 0.250000		0.250000 1.000000 0.500000
0.083333 0.916667 0.086460	0.416667 0.083333 0.250000		0.500000 1.000000 0.500000
0.916667 0.833333 0.913540	0.666667 0.083333 0.250000		0.750000 1.000000 0.500000
0.333333 0.166667 0.413540	0.916667 0.333333 0.250000		1.000000 1.000000 0.500000
0.333333 0.416667 0.413540	0.166667 0.333333 0.250000		0.250000 0.250000 0.500000
0.583333 0.666667 0.413540	0.666667 0.333333 0.250000		0.500000 0.250000 0.500000
0.333333 0.416667 0.413540	0.166667 0.583333 0.250000		0.750000 0.250000 0.500000
0.833333 0.666667 0.413540	0.666667 0.583333 0.250000		1.000000 0.750000 0.500000
0.833333 0.416667 0.086460	0.833333 0.666667 0.750000		0.250000 0.500000 0.500000
0.083333 0.666667 0.086460	0.166667 0.833333 0.250000		0.500000 0.500000 0.500000
0.166667 0.833333 0.913540	0.916667 0.083333 0.250000		0.750000 0.500000 0.500000
0.666667 0.333333 0.913540	0.666667 0.083333 0.250000		1.000000 0.750000 0.500000
0.083333 0.416667 0.413540	0.833333 0.916667 0.750000		0.250000 0.750000 0.500000
0.583333 0.916667 0.413540	0.166667 0.833333 0.250000		0.500000 0.750000 0.500000
0.833333 0.416667 0.413540	0.916667 0.416667 0.750000		0.750000 0.750000 0.500000
0.333333 0.666667 0.413540	0.416667 0.416667 0.750000		
0.833333 0.166667 0.086460	0.666667 0.416667 0.750000		
0.083333 0.416667 0.086460	0.166667 0.416667 0.750000		
0.333333 0.666667 0.086460	0.916667 0.166667 0.750000		
0.333333 0.916667 0.086460	0.416667 0.166667 0.750000		
0.916667 0.583333 0.913540	0.666667 0.166667 0.750000		
0.166667 0.083333 0.913540	0.833333 0.916667 0.750000		
0.416667 0.333333 0.913540	0.166667 0.833333 0.250000		
0.916667 0.583333 0.913540	0.916667 0.833333 0.250000		
0.166667 0.583333 0.913540	0.416667 0.833333 0.250000		
0.583333 0.166667 0.413540	0.666667 0.833333 0.250000		
0.583333 0.416667 0.413540	0.166667 0.833333 0.250000		
0.833333 0.666667 0.413540	0.916667 0.166667 0.750000		
0.916667 0.833333 0.586460	0.416667 0.166667 0.750000		
0.166667 0.833333 0.586460	0.666667 0.166667 0.750000		
0.166667 0.083333 0.586460	0.833333 0.916667 0.750000		
0.416667 0.333333 0.586460	0.166667 0.833333 0.250000		
0.166667 0.583333 0.586460	0.916667 0.833333 0.250000		
0.666667 0.583333 0.586460	0.416667 0.833333 0.250000		
0.666667 0.833333 0.913540	0.666667 0.833333 0.250000		
0.083333 0.166667 0.413540	0.166667 0.833333 0.250000		
0.083333 0.666667 0.413540	0.916667 0.166667 0.750000		
0.916667 0.333333 0.586460	0.166667 0.833333 0.250000		
0.166667 0.333333 0.586460	0.916667 0.166667 0.750000		
0.916667 0.583333 0.586460	0.416667 0.166667 0.750000		
0.583333 0.166667 0.086460	0.666667 0.166667 0.750000		
0.833333 0.666667 0.086460	0.833333 0.916667 0.750000		
0.416667 0.833333 0.913540	0.166667 0.833333 0.250000		
0.416667 0.583333 0.913540	0.916667 0.166667 0.750000		
0.333333 0.916667 0.413540	0.416667 0.166667 0.750000		
0.666667 0.333333 0.586460	0.666667 0.166667 0.750000		
0.916667 0.333333 0.913540	0.833333 0.916667 0.750000		

Table 3. Structural description of the 128-atom SQS structure for modeling the $(\text{Zr}_{0.5}\text{M}_{0.5})_2\text{AlC}$ MAX phase. Lattice vectors of the SQS are $a_1=(2\sqrt{3}a, -2a, 0)$, $a_2=(0, 4a, 0)$, and $a_3=(0, 0, c)$, where a and c are the hcp lattice parameters of the perfect MAX phase. Atomic positions are given in fractional coordinates for the ideal, unrelaxed structure.

Zr atoms			M atoms			Al atoms			C atoms		
0.333333	0.166667	0.086460	0.833333	0.166667	0.086460	0.083333	0.166667	0.750000	1.000000	1.000000	1.000000
0.583333	0.666667	0.086460	0.083333	0.416667	0.086460	0.333333	0.166667	0.750000	0.250000	1.000000	1.000000
0.583333	0.916667	0.086460	0.333333	0.666667	0.086460	0.583333	0.166667	0.750000	0.500000	1.000000	1.000000
0.833333	0.916667	0.086460	0.333333	0.916667	0.086460	0.833333	0.166667	0.750000	0.750000	1.000000	1.000000
0.416667	0.083333	0.913540	0.916667	0.083333	0.913540	0.083333	0.416667	0.750000	1.000000	0.250000	1.000000
0.166667	0.333333	0.913540	0.166667	0.083333	0.913540	0.333333	0.416667	0.750000	0.250000	0.250000	1.000000
0.666667	0.583333	0.913540	0.666667	0.083333	0.913540	0.583333	0.416667	0.750000	0.500000	0.250000	1.000000
0.833333	0.166667	0.413540	0.416667	0.333333	0.913540	0.833333	0.416667	0.750000	0.750000	0.250000	1.000000
0.083333	0.916667	0.413540	0.916667	0.583333	0.913540	0.083333	0.666667	0.750000	1.000000	0.500000	1.000000
0.833333	0.916667	0.413540	0.166667	0.583333	0.913540	0.333333	0.666667	0.750000	0.250000	0.500000	1.000000
0.416667	0.833333	0.586460	0.583333	0.166667	0.413540	0.583333	0.666667	0.750000	0.500000	0.500000	1.000000
0.666667	0.833333	0.586460	0.583333	0.416667	0.413540	0.833333	0.666667	0.750000	0.750000	0.500000	1.000000
0.916667	0.083333	0.586460	0.833333	0.666667	0.413540	0.083333	0.916667	0.750000	1.000000	0.750000	1.000000
0.416667	0.083333	0.586460	0.916667	0.833333	0.586460	0.333333	0.916667	0.750000	0.250000	0.750000	1.000000
0.666667	0.083333	0.586460	0.166667	0.833333	0.586460	0.583333	0.916667	0.750000	0.500000	0.750000	1.000000
0.416667	0.583333	0.586460	0.166667	0.083333	0.586460	0.833333	0.916667	0.750000	0.750000	0.750000	1.000000
0.083333	0.166667	0.086460	0.416667	0.333333	0.586460	0.916667	0.833333	0.250000	1.000000	1.000000	0.500000
0.583333	0.416667	0.086460	0.166667	0.583333	0.586460	0.166667	0.833333	0.250000	0.250000	1.000000	0.500000
0.583333	0.916667	0.086460	0.666667	0.583333	0.586460	0.416667	0.833333	0.250000	0.500000	1.000000	0.500000
0.833333	0.666667	0.086460	0.666667	0.833333	0.913540	0.666667	0.833333	0.250000	0.750000	1.000000	0.500000
0.666667	0.333333	0.913540	0.416667	0.833333	0.913540	0.916667	0.083333	0.250000	1.000000	0.250000	0.500000
0.083333	0.416667	0.413540	0.083333	0.666667	0.413540	0.166667	0.083333	0.250000	0.250000	0.250000	0.500000
0.583333	0.666667	0.413540	0.916667	0.333333	0.586460	0.416667	0.083333	0.250000	0.500000	0.250000	0.500000
0.333333	0.416667	0.086460	0.166667	0.333333	0.586460	0.666667	0.083333	0.250000	0.750000	0.250000	0.500000
0.833333	0.416667	0.086460	0.916667	0.583333	0.086460	0.916667	0.333333	0.250000	1.000000	0.500000	0.500000
0.083333	0.666667	0.086460	0.583333	0.166667	0.086460	0.166667	0.333333	0.250000	0.250000	0.500000	0.500000
0.166667	0.833333	0.913540	0.833333	0.666667	0.086460	0.416667	0.333333	0.250000	0.500000	0.500000	0.500000
0.666667	0.333333	0.913540	0.416667	0.833333	0.913540	0.666667	0.333333	0.250000	0.750000	0.500000	0.500000
0.083333	0.416667	0.413540	0.416667	0.583333	0.913540	0.916667	0.583333	0.250000	1.000000	0.750000	0.500000
0.583333	0.916667	0.413540	0.333333	0.916667	0.413540	0.166667	0.583333	0.250000	0.250000	0.750000	0.500000
0.833333	0.416667	0.413540	0.666667	0.333333	0.586460	0.416667	0.583333	0.250000	0.500000	0.750000	0.500000
0.333333	0.666667	0.413540	0.916667	0.333333	0.913540	0.666667	0.583333	0.250000	0.750000	0.750000	0.500000
0.333333	0.666667	0.413540	0.916667	0.333333	0.913540	0.666667	0.583333	0.250000	0.750000	0.750000	0.500000

Table 4. Structural description of the 128-atom SQS structure for modeling the $(\text{Zr}_{0.75}\text{M}_{0.25})_2\text{AlC}$ MAX phase. Lattice vectors of the SQS are $a_1=(2\sqrt{3}a, -2a, 0)$, $a_2=(0, 4a, 0)$, and $a_3=(0, 0, c)$, where a and c are the hcp lattice parameters of the perfect MAX phase. Atomic positions are given in fractional coordinates for the ideal, unrelaxed structure.

Zr atoms	M atoms	Al atoms	C atoms
0.333333 0.166667 0.086460	0.583333 0.166667 0.086460	0.083333 0.166667 0.750000	1.000000 1.000000 1.000000
0.833333 0.166667 0.086460	0.333333 0.416667 0.086460	0.333333 0.166667 0.750000	0.250000 1.000000 1.000000
0.083333 0.416667 0.086460	0.833333 0.416667 0.086460	0.583333 0.166667 0.750000	0.500000 1.000000 1.000000
0.333333 0.666667 0.086460	0.083333 0.666667 0.086460	0.833333 0.166667 0.750000	0.750000 1.000000 1.000000
0.583333 0.666667 0.086460	0.833333 0.666667 0.086460	0.083333 0.416667 0.750000	1.000000 0.250000 1.000000
0.333333 0.916667 0.086460	0.166667 0.833333 0.913540	0.333333 0.416667 0.750000	0.250000 0.250000 1.000000
0.583333 0.916667 0.086460	0.416667 0.833333 0.913540	0.583333 0.416667 0.750000	0.500000 0.250000 1.000000
0.833333 0.916667 0.086460	0.666667 0.333333 0.913540	0.833333 0.416667 0.750000	0.750000 0.250000 1.000000
0.916667 0.083333 0.913540	0.416667 0.583333 0.913540	0.083333 0.666667 0.750000	1.000000 0.500000 1.000000
0.166667 0.083333 0.913540	0.083333 0.416667 0.413540	0.333333 0.666667 0.750000	0.250000 0.500000 1.000000
0.416667 0.083333 0.913540	0.333333 0.916667 0.413540	0.583333 0.666667 0.750000	0.500000 0.500000 1.000000
0.666667 0.083333 0.913540	0.583333 0.916667 0.413540	0.833333 0.666667 0.750000	0.750000 0.500000 1.000000
0.166667 0.333333 0.913540	0.666667 0.333333 0.586460	0.083333 0.916667 0.750000	1.000000 0.750000 1.000000
0.416667 0.333333 0.913540	0.916667 0.333333 0.913540	0.333333 0.916667 0.750000	0.250000 0.750000 1.000000
0.916667 0.583333 0.913540	0.833333 0.416667 0.413540	0.583333 0.916667 0.750000	0.500000 0.750000 1.000000
0.166667 0.583333 0.913540	0.333333 0.666667 0.413540	0.833333 0.916667 0.750000	0.750000 0.750000 1.000000
0.666667 0.583333 0.913540		0.916667 0.833333 0.250000	1.000000 1.000000 0.500000
0.583333 0.166667 0.413540		0.166667 0.833333 0.250000	0.250000 1.000000 0.500000
0.833333 0.166667 0.413540		0.416667 0.833333 0.250000	0.500000 1.000000 0.500000
0.583333 0.416667 0.413540		0.666667 0.833333 0.250000	0.750000 1.000000 0.500000
0.833333 0.416667 0.413540		0.916667 0.083333 0.250000	1.000000 0.250000 0.500000
0.083333 0.916667 0.413540		0.166667 0.083333 0.250000	0.250000 0.250000 0.500000
0.833333 0.916667 0.413540		0.416667 0.083333 0.250000	0.500000 0.250000 0.500000
0.916667 0.833333 0.586460		0.666667 0.083333 0.250000	0.750000 0.250000 0.500000
0.166667 0.833333 0.586460		0.916667 0.333333 0.250000	1.000000 0.500000 0.500000
0.416667 0.833333 0.586460		0.166667 0.333333 0.250000	0.250000 0.500000 0.500000
0.666667 0.833333 0.586460		0.416667 0.333333 0.250000	0.500000 0.500000 0.500000
0.916667 0.083333 0.586460		0.666667 0.333333 0.250000	0.750000 0.500000 0.500000
0.166667 0.083333 0.586460		0.916667 0.583333 0.250000	1.000000 0.750000 0.500000
0.416667 0.083333 0.586460		0.166667 0.583333 0.250000	0.250000 0.750000 0.500000
0.666667 0.083333 0.586460		0.416667 0.583333 0.250000	0.500000 0.750000 0.500000
0.916667 0.333333 0.586460		0.666667 0.583333 0.250000	0.750000 0.750000 0.500000
0.166667 0.333333 0.586460			
0.416667 0.583333 0.586460			
0.666667 0.583333 0.586460			
0.083333 0.166667 0.086460			
0.583333 0.416667 0.086460			
0.083333 0.916667 0.086460			
0.916667 0.833333 0.913540			
0.666667 0.833333 0.913540			
0.083333 0.166667 0.413540			
0.333333 0.166667 0.413540			
0.333333 0.416667 0.413540			
0.083333 0.666667 0.413540			
0.583333 0.666667 0.413540			
0.916667 0.333333 0.586460			
0.166667 0.333333 0.586460			
0.916667 0.583333 0.586460			