机器学习确定 Mg_2SiO_4 P–T 相图

Siyu Zhou[1]、[#]、Daohong Liu[2#]、Chuanyu Zhang[1]、[*]、Yu He[2]、[3**]、Xuben Wang[4,] ***、Xiaopan Zuo[ll]物理学院，成都理工大学，中国成都 610059[2]关键矿产研究与勘查国家重点实验室，中国科学院地球化学研究所，中国贵阳 550081。[3]高压科学与技术先进研究中心，中国上海 201203[4]地球物理学院，成都理工大学，中国成都 610059 * 通讯作者 ** 第二通讯作者 *** 第三通讯作者 # 这些作者贡献相同 电子邮箱：（C. Zhang）zhangchuanyu10@cdut.edu.cn；（Y. He）heyu@mail.gyig.ac.cn；（X. Wang）wxb@cdut.edu.cn

要点：

1. 基于第一性原理 GGA 泛函，构建了初始数据集，并采用主动学习和机器学习方法，开发了适用于 Mg2SiO4 固相和液相的深度势（DP）模型与神经进化势（NEP）模型。

2. 采用非平衡热力学积分和两相共存方法，确定了镁 Mg_2SiO_4 体系的相图。

摘要

Mg_2SiO_4 及其高压多形（瓦兹利石和林伍德石）之间的相变，是地幔动力学和深地幔物质循环的核心过程。然而，这些相界的位置及其对压力-温度（P-T）的依赖关系仍存在争议，主要原因是极端条件下实验的局限性，以及第一性原理自由能计算的高计算成本。本文采用一种机器学习势驱动工作流，结合非平衡热力学积分（NETI）和两相共存模拟，以实现大规模、长时间尺度的分子动力学采样。通过这一工作流，评估了镁橄榄石的熔化曲线，并构建了完整的 P–T 相图。与传统的从头算方法相比，该策略在保持相稳定性评估热力学一致性的同时，降低了计算开销。该工作流适用于高效评估深地球硅酸盐体系中的相稳定性和热力学性质。

关键词： 机器学习，Mg_2SiO_4， 相图，非平衡热力学积分，两相共存

通俗语言摘要

Mg_2SiO_4 是地幔中最丰富的矿物之一，其向高压多形瓦兹利石和林伍德石的相变，与地表以下约 400–700 km 深处的关键地震不连续面密切相关。对这些相变的热力学约束，对于理解地幔的温度结构、化学组成和深部动力过程至关重要。本文训练并构建了一种机器学习原子间势，可同时描述 Mg2SiO4 固体和熔体的行为，并据此开展大规模分子动力学模拟，以显著低于第一性原理自由能计算的成本，系统地重建其相图。结果表明，这种机器学习势在保持接近第一性原理精度的同时，显著提升了计算效率，为研究深部地球硅酸盐的相稳定性和熔融行为提供了一种高效且可扩展的计算途径。

1 引言

硅酸盐矿物是地幔的重要组成部分。在众多硅酸盐体系中，Mg_2SiO_4 及其高压多形（瓦兹利石和林伍德石）极具代表性，它们是从上地幔到地幔过渡带的主要矿物相，并与410千米和520千米处地震不连续面的矿物学成因密切相关（Akaogi等人，1989；Yu等人，2008；H. Zhang等人，2022）。因此，建立一个能够同时约束固-固和固-液相界的完整相图，对于将矿物物理学与地震观测联系起来，并评估地幔温度和组成如何调控这些不连续面至关重要。

然而，在与地幔相关的极端温度和压力条件下，实验方法在为这些关键相变提供严格热力学约束方面仍面临重大挑战。一方面，由于实验设备的局限性以及相变动力学中的不可逆效应，系统往往无法达到热力学平衡。另一方面，熵和吉布斯自由能等关键热力学量无法通过实验直接测量，通常只能依赖间接推断方法。现有的Mg_2SiO_4 相图模型很大程度上依赖有限的实验数据和特定的热力学模型（Akaogi等人，1989；Chopelas，1991；Stixrude与Lithgow-Bertelloni，2005），这不可避免地导致相界位置的确定存在较大不确定性。

相比之下，第一性原理计算已广泛用于估算高温高压条件下的自由能和相稳定性，并可初步预测相边界的位置。然而，在高温范围内，由于准谐近似（QHA）的适用性逐渐降低，且热振动的非谐效应增强，相边界压力仍存在不可忽视的不确定性（Tsuchiya等人，2004；Yu等人，2007）。与此同时，不同的交换-相关泛函和热力学路径（如准谐近似和准谐德拜模型）在预测 α–β 相边界位置及其克拉伯龙斜率方面存在显著差异（Liu等人，2008；Yu等人，2008）。此外，第一性原理方法的计算成本通常会将可行的模拟规模限制在相对较小的体系和较短的时间尺度，从而限制对复杂相空间和热涨落的充分采样。

近年来，机器学习势（MPLs）的进展为应对这些挑战开辟了新途径，使得能够在极端温度和压力条件下模拟相变与熔融行为（He等人，2026年；Smith等人，2021年；L. Zhang等人，2021年），并展示了以接近第一性原理精度开展大规模、长时间尺度动力学模拟的可行性（Behler，2016年）。特别是，深度势（DP）模型（L. Zhang等人，2018年）、神经进化势（NEP）模型（Fan等人，2021年）和高斯近似势（GAP）模型（Bartók等人，2010年）等机器学习势大幅拓展了相空间

时间尺度，使复杂矿物体系的量子尺度采样成为可能同时显著降低了计算成本。

基于这些方法学进展，本研究开发了适用于 Mg2SiO4 体系的高精度机器学习势，该势采用高精度第一性原理数据集进行训练。通过将该机器学习势与非平衡热力学积分（NETI）自由能计算相结合。因此，开展了深度势分子动力学（DPMD）模拟，以计算相变点和

α、 β和γ 相的熔点，并构建地幔过渡带条件下 Mg2SiO4 的压力–温度（P–T）相图。本研究为 Mg2SiO4 多形的相稳定性和克拉珀龙斜率 提供了新的定量约束。

2. 计算模拟详情

2.1 第一性原理数据集制备

初始训练数据集采用深度势生成器 DP-GEN软件包（Y. Zhang 等，2020年）的工作流程[redacted]S（3.9.0.2）集成；通过结构扰动和短时间分子动力学模拟对具有代表性的构型进行采样。所有第一性原理计算均采用原子轨道线性组合（LCAO）基组（M. Chen 等，2010年；P. Li 等，2016年）、S[redacted]G15 优化守恒范数范德堡（ONCV）赝势（Hamann，2013年）以及[redacted]Perdew–Burke–[redacted]BE）交换–关联泛函（Perdew 等，1996年）进行。平面波能量截断[redacted]场（SCF）电荷密度的收敛标准设为 1×10^{-6} Ry。k-点网格间距设为 0.2 $Å^{-1}$，所有分子动力学模拟均采用 1 fs 的时间步长。、 β和 γ 相分别包含 112、112 和 56 个原子。随后通过 12 次主动学习迭代扩展初始数据集。

此外，研究使用 ABACUS 在 10 吉帕和 5000 开尔文条件下进行补充的 NPT系综从头算分子动力学（AIMD）模拟，以加强液态采样，并从中提取具有代表性的液态构型。使用 NepTrainKit 软件包（C. Chen 等，2025）对主动学习和增强采样生成的数据集进行筛选，最终得到包含 2516 个构型的精选数据集。随后，通过另外四轮迭代训练周期进一步完善该数据集，将探索的热力学空间扩展至压力最高 35 吉帕、温度最高 5000 开尔文。最终数据集随后用于机器学习原子间势的长时间尺度训练。

2.2 机器学习

随后，收集到的数据集被用于使用 DeePMD- kit 软件包进行长时间训练（Wang 等，2018；[redacted]*2*描述符，并将*rcut_smth*设为 0.5 Å，且相互作用

截断半径扩展至 7.5 Å，以更好地捕捉较长程相互作用。嵌入网络的层大小设为 {25, 50, 100}，拟合神经网络则由三个隐藏层组成，每层包含 240 个神经元（{240, 240, 240}）。训练步数设为 5,000,000，以确保势稳健收敛。同时，对初始数据集进行了能量平移过程，并使用相同的配置训练神经进化势（NEP）模型。

2.3 深度势分子动力学模拟

采用深度势模型耦合大规模分子动力学模拟器 LAMMPS 软件包（Plimpton, 1995）进行计算。α 相包含7056个原子，β 相包含7840个原子，γ 相包含7000个原子。分别使用朗之万恒温器和Nosé–Hoover恒温器控制系统温度和压力（Hoover，1985；Nosé，2002；Schneider & Stoll，1978）。首先，在NVT系综下进行约20 ps的预平衡，以稳定系统温度，并防止初始晶格因压力耦合而迅速膨胀。随后，在NPT条件下进行约100 ps的模拟，以获得特定温度和压力下的平衡晶格参数。待系统体积和结构完全收敛后，对原子位置进行约100 ps的时间平均，得到时间平均的平衡构型，从而优化晶体结构。之后，再进行100 ps的采样阶段，计算镁、硅和氧原子的均方位移（MSD）。利用该均方位移表征原子振动特性，并推导相应的爱因斯坦晶体弹簧常数k；同时，为后续采用非平衡热力学积分（NETI）自由能方法的计算提供初始构型（Cajahuaringa & Antonelli，2022；Freitas等人，2016；Paula Leite & De Koning，2019）。k 定义为：

$$k = \frac{3k_{\mathrm{B}}T}{\langle(\Delta \mathbf{r})^2\rangle} \tag{1}$$

其中 k_{B} 为玻尔兹曼常数，T 表示系统温度，$(\Delta r)^2$表示原子相对于其时间平均平衡位置的均方位移（MSD）。角括号表示对时间以及系统中所有原子进行统计平均。

采用两相共存法（TPC）（Morris 等，1994年）测定熔点。所有分子动力学模拟均基于原子组成的系统，分别处于 α 和 β 相。对于每个目标压力，首先在NPT系综中，以接近预期熔点的初始温度对系统进行10 ps的平衡，使晶胞体积充分弛豫并消除残余应力。随后，沿z方向将超胞划分为固相区和液相区，并在NVT系综中对不同区域分别进行25 ps的温度控制，以构建初始固–液界面。在此阶段，将液相区的温度设为5000开尔文，以确保液相在过热条件下完全熔化

。随后，将整个系统的温度调至熔化温度的1.1倍，并继续模拟15 ps，以获得结构稳定且固–液界面清晰的两相构型。在建立稳定的两相构型后，将模拟切换至采用各向异性压力控制的NPH系综，使系统在目标压力下自由演化。该生产运行持续250 ps，以充分采样固–液界面的长时间动力学行为。达到收敛后，取最后50 ps内的系统温度平均值作为熔化温度。为减少统计涨落并提高熔点测定的可靠性，在每个压力下使用不同的随机种子独立重复整个TPC流程五次，并取平均值作为最终熔化温度。

3. 结果

3.1. 机器学习势模型的基准测试

DP模型的精度是根据DFT参考数据，从能量和力方面进行评估的（图1）。各相的能量误差被限制在–5.92 meV·atom⁻1（图S1）。随后在后续分析中用作辅助模型的神经进化势模型的性能见图S2。对于两种机器学习势模型，与DFT参考的偏差始终保持较低，表明在所采样的构型空间内，底层势能面以高保真度得到了再现。

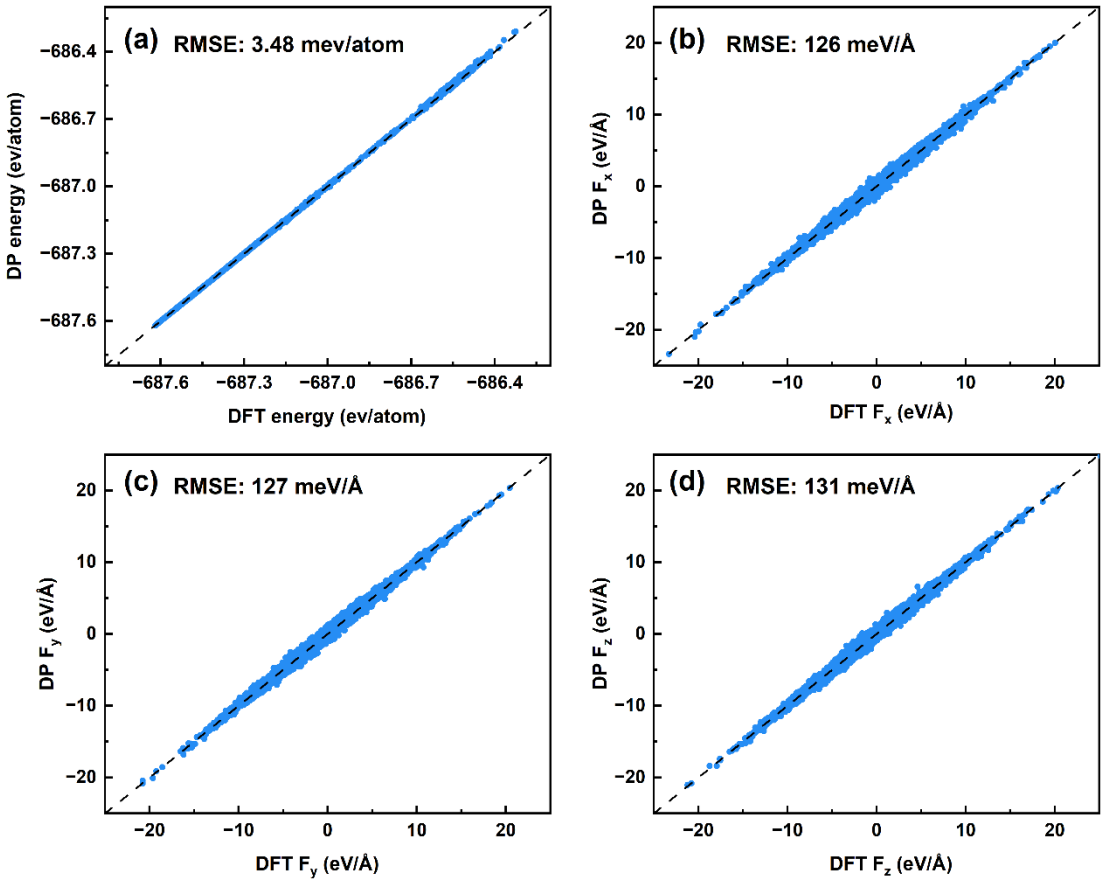


图1. DP势预测的能量和力与DFT参考数据的比较。(a) 每个原子的势能以及(b–d) x、y和z方向的力分量。黑色虚线表示理想一致关系y=x，表明在整个数据集上DP预测与DFT计算具有极好的一致性。

除匹配DFT能量和力外，还需验证物理相关的结构描述符是否被准确再现。为此，针对α、 β、 γ以及液相，使用深度势和神经进化势计算了径向分布函数（RDF），并与DFT结果直接比较（图2）。所有相均观察到高度一致，表明由镁–氧和硅–氧成键主导的短程有序被机器学习模型很好地捕捉。径向分布函数的定义为，

$$g(r) = \frac{dN}{4\pi r^2 dr} / (\rho dV) \tag{2}$$

其中dN 是距离r处厚度为dr 的球壳内目标原子的数目， ρ 是系统数密度，dV 是壳层体积。

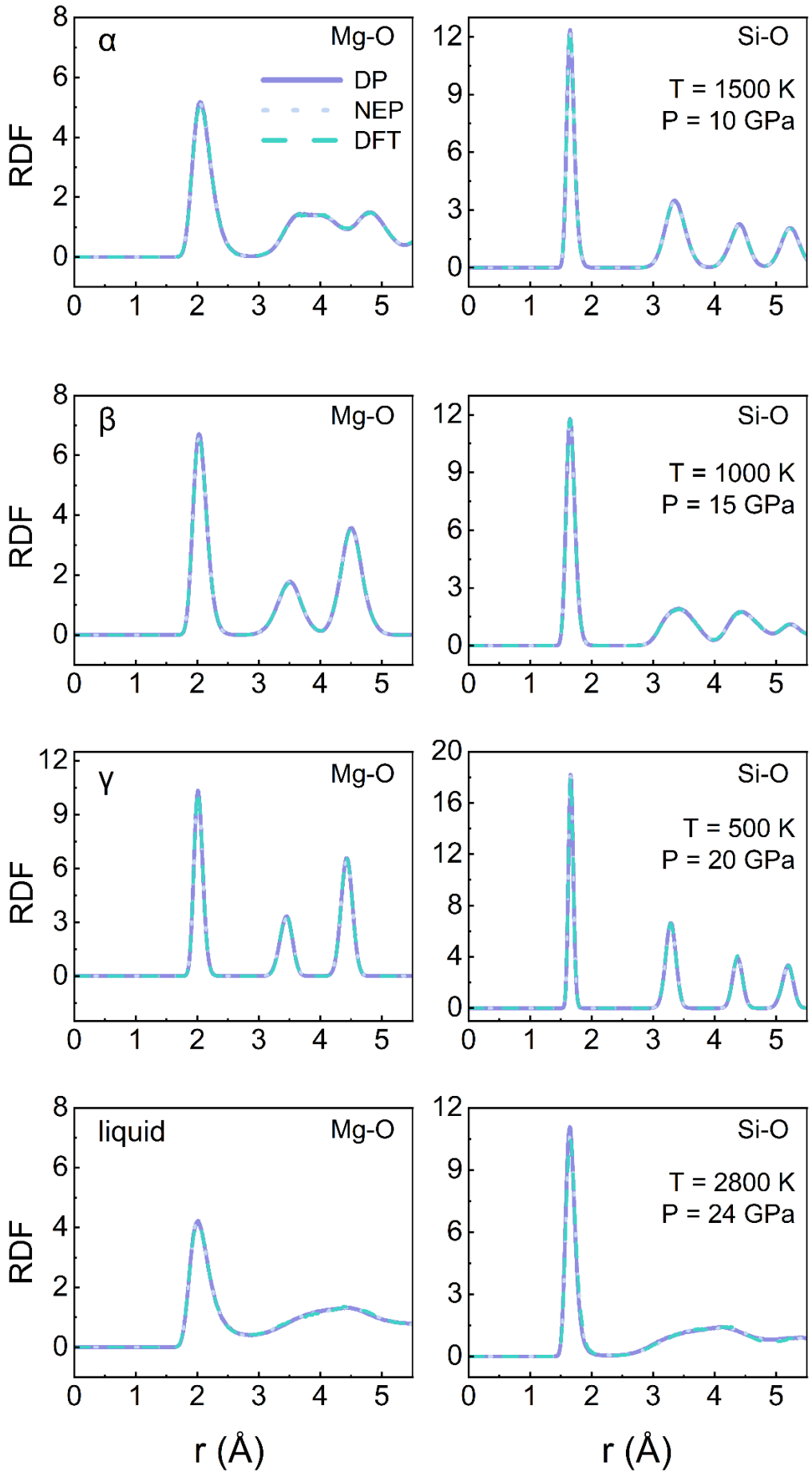

α
Mg-O
DP
NEP
DFT
Si-O
T = 1500 K
P = 10 GPa
β
Mg-O
Si-O
T = 1000 K
P = 15 GPa
γ
Mg-O
Si-O
T = 500 K
P = 20 GPa
liquid
Mg-O
Si-O
T = 2800 K
P = 24 GPa
RDF
r (Å)

图2. 使用不同势函数计算得到的 Mg_2SiO_4 的径向分布函数（RDF）比较。各面板展示了 Mg-O 和 Si-O 对分布，分别对应α 相（1500 K，10 GPa）、β 相（1000 K，15 GPa）、γ相（500 K，20 GPa）以及液相（2800 K，24 GPa）。实线（DP）、点线（NEP）和虚线（DFT）分别表示采用深度势能、神经进化势和密度泛函理论得到的结果。

通过密度预测进一步评估了热力学性质的一致性。首先，使用 DP 和 DFT 方法计算了三种固态同质多象体在 500 K、压力为 5、10 和 20 GPa 条件下的密度（图 S3），结果吻合良好。随后将评估范围扩展至 500–2500 K 和 0–40 GPa，并使用 DP 和 NEP 预测平衡密度。基于这些结果，采用三阶 Birch–Murnaghan 形式拟合了三个相的状态方程（EOS）。如图 3 所示，即使在较高温度和压力下，DP 与 NEP 的结果仍然高度一致，表明它们适用于本研究考察的高P–T稳定域。

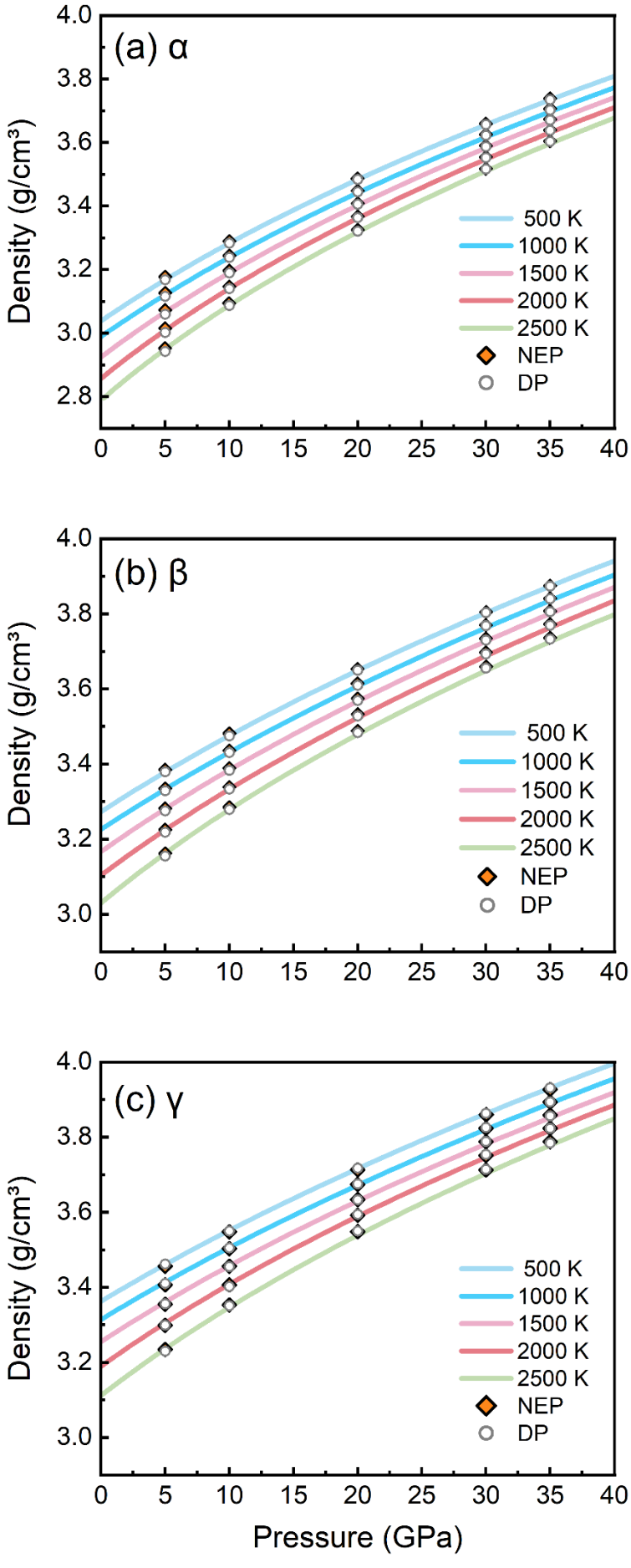

(a) α
(b) β
(c) γ
Density (g/cm³)
Pressure (GPa)
500 K
1000 K
1500 K
2000 K
2500 K
NEP
DP
4.0
3.8
3.6
3.4
3.2
3.0
2.8
0
5
10
15
20
25
30
35
40

图3. 不同温度下镁$_2$硅O$_4$ 三种固态同质多象体的密度对压力的依赖关系。（a）α 相，（b）β 相，以及（c）γ 相。实线表示通过拟合三阶 Birch–Murnaghan 状态方程获得的密度，不同颜色分别对应500开尔文（浅蓝色）、1000开尔文（蓝色）、1500开尔文（粉色）、2000年开尔文（红色）和2500开尔文（绿色）。符号表示使用机器学习原子间势计算的平衡密度，其中菱形表示神经进化势（NEP）的结果，空心圆表示深度势（DP）的结果。

3.2. 克拉珀龙斜率和熔化曲线参数

在确定固相相变点之前，通过采用不同的切换时间（图S4–S5）评估了非平衡热力学积分（NETI）的收敛情况。随后，采用[illegible]AS）方法（Freitas等人，2016）通过评估吉布斯自由能[illegible]在一定温度范围内确定相变压力（图S6 – S8）。

由此得到的克劳修斯–克拉珀龙斜率表明，α–β DP和神经进化势方法预测的相变斜率均大于采用GGA – Perdew–Burke–Ernzerhof结合准谐近似的第一性原理计算方法得到的估计值（Yu等人，2008年），而β–γ 斜率则较小。具体而言，α–β斜率经测定，[illegible]分别为2.81（2.82）MPa/K；而[illegible]斜率预测值为2.84（2.00）MPa/K，分别对应DP和神经进化势。尽管这些结果与GGA–Perdew–Burke–Ernzerhof结合准谐近似的结果有所不同，预测的α–β 斜率仍处于现有实验约束的范围内，而β–γ 斜率则略低于已报道的数值（Akaogi等人，1989年；Inoue等人，2006年；Katsura & Ito，[illegible]）。总体而言，在高压高温条件下，深度势和神经进化势预测的相界呈现出一致的相变趋势。

对于熔化曲线，采用了 Kechin 提出的一种方程（Kechin，2001）。其一种形[illegible]下：

$$T_m(p) = T_0\left(1 + \frac{p - p_0}{A}\right)^B \exp\left(-\frac{p - p_0}{C}\right) \quad (3)$$

其中，T_0 和 P_0 分别表示参考熔化温度和压力，a、b和c为拟合参数。基于 DP（神经进化势）模型拟合得到的参数为 a =18.31(21.17) 吉帕、b = 0.42(0.76) 和 c = 78.07(44.61) 吉帕。

4. 讨论

4.1. 镁橄榄石熔化曲线

镁橄榄石（α 相）的熔化曲线见图4，该曲线由两相共存模拟（图S9）确定的熔点拟合得到。预测的大气压下熔点略低于Bowen等人（1914年[illegible]测量值。相比之下，3–5吉帕范围内的预测结果与Davis等人（1964年）的测量值吻合良好。

总体而言，神经进化势模型得到的熔化温度始终低于深度势模型的预测值。不过需要指出的是，这两种机器学习模型均未能捕捉De Koker等人（2008年）报告的特征：结合LDA泛函进行的克劳修斯–克拉珀[illegible]熔化温度在13吉帕和2550开尔文时达到最大值，随后在更高压力下呈负斜率。

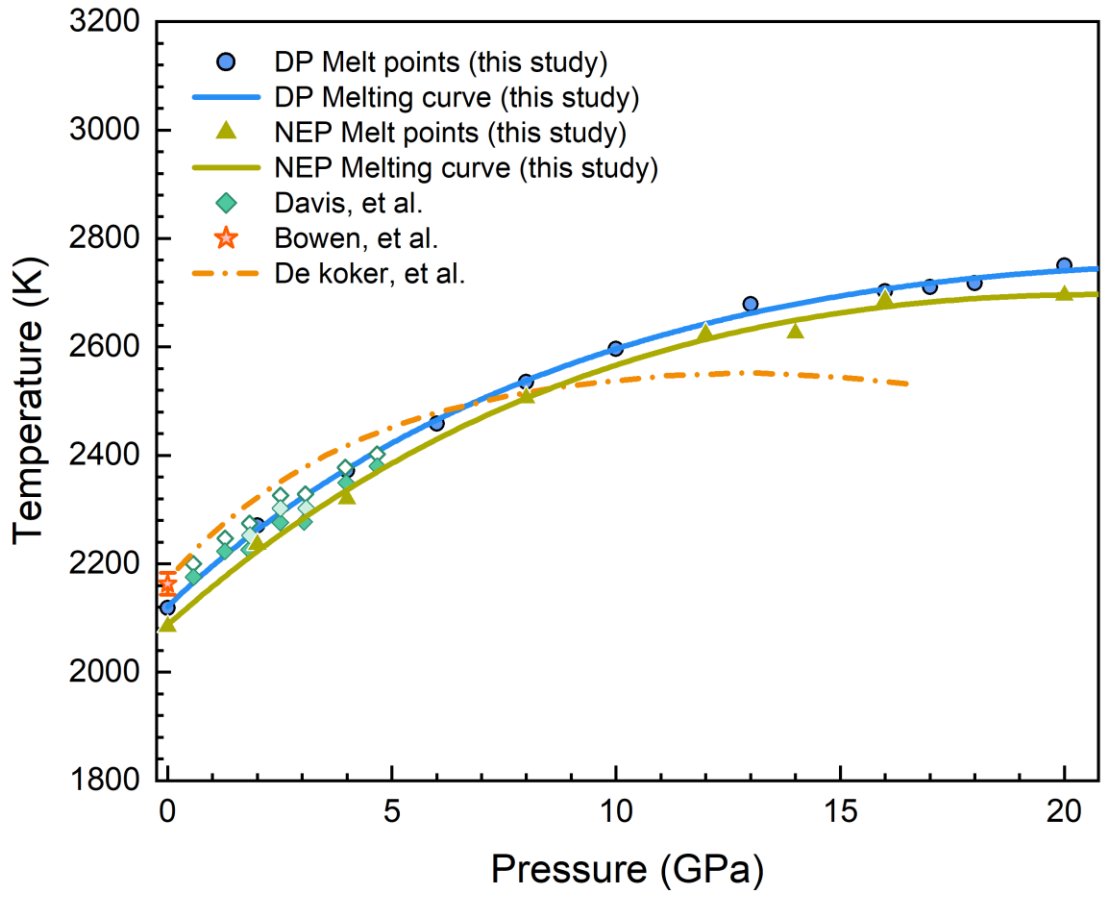


图4. 熔化曲线 T_m（P）镁橄榄石（α 相）蓝色圆圈表示本研究使用DP模型获得的熔点，蓝色实线表示相应的拟合熔化曲线。橄榄色三角形表示使用神经进化势模型获得的熔点，橄榄色实线表示相应的拟合熔化曲线。先前的实验数据以绿色菱形（Davis等人，1964年）、橙色短虚线（De Koker等人，2008年）和橙色星号（Bowen等人，1914年）表示。

4.2. 相图

本研究采用的方法框架下，基于深度势和神经进化势模型构建的相图如图5(a)所示。与先前的计算结果相比，固-固边界[illegible]主要与 α–β 边界有关。具体而言，与密度泛函理论结合准谐近似的结果相比，DP模型预测的相变点向更高压力偏移。这种偏移可能部分归因于模拟晶胞尺寸不同所导致的系统性有限尺寸效应。更重要的是，这可能表明

准谐近似难以充分描述具有显著非谐性的矿物，例如镁橄榄石（Gillet 等，1991）。

值得注意的是，在准谐近似失效区间（Wentzcovitch 等，2004）内，深度势计算预测的α–β 相变压力高于准谐近似的预测值（图 S10[illegible]的β–γ 相界压力则低于准谐近似的结果（图 S10(b)）。采用神经进化势模[illegible]得到的计算结果呈现出相同的定性趋势，进一步支持了这一观察。综合来看，这些结果表明，Mg_2SiO_4 体系在高温下的准谐近似偏差无法通过对不同相界统一施加压力平移修正来捕捉。相反，不同相的自由能非谐贡献可能存在显著差异。在 MgO、MgSiO3 和SiO2 等多晶型体系中也有类似现象的报道（G. Li 等，2023；Soubiran 和 Militzer，2020；Z. Zhang 和 Wentzcovitch，2022），因此[illegible]

总体而言，采用机器学习模型得到的镁橄榄石相图在相变趋势和整体拓扑结构方面，均与实验外推相图（图5(b)）大体一致，这支持了机器学[illegible]硅酸盐体系中的预测可靠性。相较于实验约束，预测相界系统性地向较高压力偏移，这归因于用于生成训练参考数据的底层密度泛函近似存在固有局限，而非势函数拟合过程中引入的失真。深度势研究水相图时，也发现了与参考泛函精度局限相关的相界类似系统性偏移（L. Zhang等人，2021）。

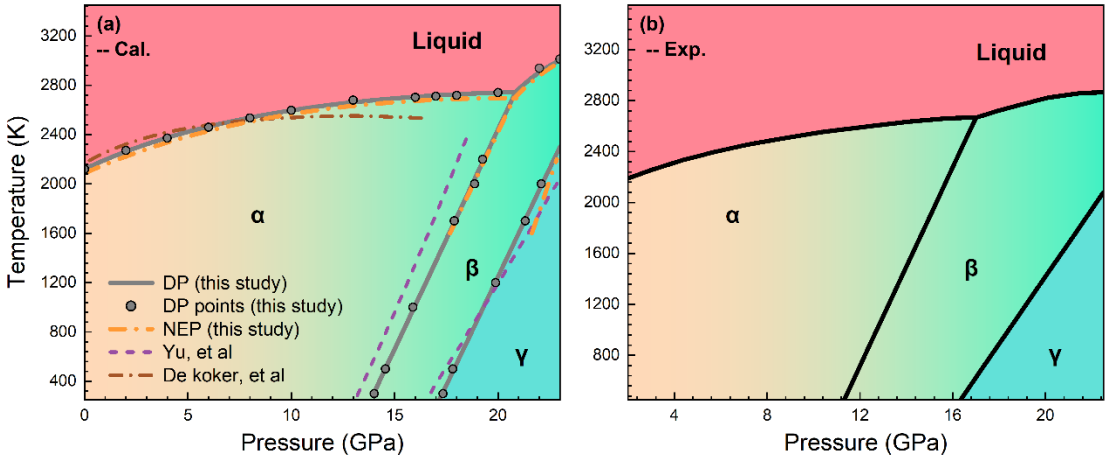


图5. 镁的压力-温度相图$_2SiO_4$，对比计算与实验相界。（a）计算所得的压力-温度相图。灰色实线表示使用DP势预测的相界，灰色实心圆表示通过吉布斯自由能交叉确定的相变点。神经进化势的预测结果以黄色点划线表示。密度泛函理论（广义梯度近似）结合准谐近似的结果以紫色虚线表示（Yu等人，2008年）。使用LDA泛[illegible]-克拉珀龙积分方法得到的熔化曲线以棕红色短虚线表示（De Koker等人，2008年）。**（b）**汇编的实验外推相图

此前研究中（Andrault & Bonhifd，1995年；Bouibes & Zaoui，2020年；

Horiuchi 等，1981）。

5.结论

本研究将机器学习与非平衡自由能和双相方法相结合，采用更大的体系和更长的模拟时间，推导出镁橄榄石熔化曲线，并构建了完整的镁橄榄石相图。DP 和 NEP 模型在整体相变趋势方面均表现出一致的预测结果。这进一步支持了该方法在高温高压条件下快速、全面确定复杂矿物完整相图方面的可靠性。未来，将利用该方法获得的机器学习模型扩展至含铁橄榄石和更多下地幔矿物相，并结合非平衡分子动力学（NEMD）方法，以更好地研究热输运性质。该方法还将扩展至相关行星科学领域的研究。

数据可用性

本论文所依据的数据可根据合理请求向通讯作者获取。

利益声明

本稿件的提交不存在利益冲突，且经所有作者同意发表。我谨代表我的合作者声明，所述工作为原创研究，此前未曾发表，也未全部或部分提交至其他期刊审议发表。

补充信息

请参阅附件。

致谢

本研究得到国家自然科学基金委员会（42230311）和四川省大学生创新创业训

202510616025）资助。所有从头算模拟均在成都超级计算中心完成。

参考

Akaogi, M., Ito, E., & Navrotsky, A. (1989). Mg_2SiO_4 -Fe_2SiO_4 体系中橄榄石—改性尖晶石—尖晶石相变：量热测量、热化学计算及地球物理应用。《地球物理研究杂志：固体地球》，*94*(B11), 15671–15685. https://doi.org/10.1029/JB094iB11p15671 Andrault, D., & Bonhifd, M. A. (n.d.). (Mg,Fe)2SiO40livines的压缩与非晶化：最高达70吉帕的X射线衍射研究。Bartók, A. P., Payne, M. C., Kondor, R., & Csányi, G. (2010). 高斯近似势：无需电子的量子力学精度。《物理评论快报》，*104*(13), 136403. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.136403 Behler, J. (2016). 观点：用于原子模拟的机器学习势。《化学物理学杂志》，*145*(17), 170901. https://doi.org/10.1063/1.4966192 Bouibes, A., & Zaoui, A. (2020). 第一性原理研究镁橄榄石的高压相变。《固体物理与化学杂志》，*136*，109161. https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2019.109161 BOWEN N L, ANDERSEN O. MgO-SiO2 [J]二元体系。《美国科学杂志》，1914, s4-37(222): 487–500. Cajahuaringa, S., & Antonelli, A. (2022). 使用LAMMPS进行相界的非平衡自由能计算。《计算材料科学》，*207*，111275. https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2022.111275 Chen, C., Li, Y., Zhao, R., Liu, Z., Fan, Z., Tang, G., & Wang, Z. (2025, June 2). NepTrain和NepTrainKit：神经进化势自动化主动学习与可视化工具包。arXiv. https://doi.org/10.48550/arXiv.2506.01868 Chen, M., Guo, G.-C., & He, L. (2010). 用于从头算的可系统改进优化原子基组。《*Journal of Physics. Condensed Matter: An Institute of Physics Journal*》，*22*(44), 445501. https://doi.org/10.1088/0953- 8984/22/44/445501 Chopelas, A. (1991). 振动光谱学推导的地幔压力下β-Mg_2SiO_4 热学性质：对400千米深度地幔的启示。《地球物理研究杂志：固体地球》，*96*(B7), 11817–11829. https://doi.org/10.1029/91JB00898 Davis, B. T. C., & England, J. L. (1964). 镁橄榄石在最高50千巴压力下的熔融。《*Journal of Geophysical Research*》，*69*(6), 1113–1116. https://doi.org/10.1029/JZ069i006p01113 De Koker, N. P., Stixrude, L., & Karki, B. B. (2008). 高压下Mg2SiO4熔体的热力学、结构、动力学与凝固。《地球化学与宇宙化学学报》，*72*(5), 1427–1441. https://doi.org/10.1016/j.gca.2007.12.019 Fan, Z., Zeng, Z., Zhang, C., Wang, Y., Song, K., Dong, H., et al. (2021). 神经进化机器学习势：兼具高精度与低

原子模拟中的成本及其在热输运中的应用。《Physical Review B》，104(10)，104309。https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.104309 Freitas, R., Asta, M., & Koning, M. de. (2016). 使用 LAMMPS 对固体进行非平衡自由能计算。《计算材料科学》，112，333–341。https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2015.10.050 Gillet, P., Richet, P., Guyot, F., & Fiquet, G. (1991). 镁橄榄石的高温热力学性质。《地球物理研究杂志：固体地球》，96(B7)，11805–11816。https://doi.org/10.1029/91JB00680 Guyot, F., & Reynard, B. (1992). 橄榄石化合物中压力诱导的结构改性与非晶化。《Chemical Geology》，96(3–4)，411–420。https://doi.org/10.1016/0009-2541(92)90069-H Hamann, D. R. (2013). 优化的范德堡范数守恒赝势。《Physical Review B》，88(8)。https://doi.org/10.1103/PhysRevB.88.085117 He, Y., Zhang, W., Hu, Q., Sun, S., Hu, J., Liu, D., et al. (2026). 地核—地幔边界处超离子转变不会导致脱水。Science AdvAnceS。Hoover, W. G. (1985). 正则动力学：平衡相空间分布。《Physical Review A》，31(3)，1695–1697。https://doi.org/10.1103/PhysRevA.31.1695 Horiuchi, H., Sawamoto, H., β-Mg2SiO4：单晶X射线衍射研究。《American mineralogist》66 .：568-575。(1981) Inoue, T., Irifune, T., Higo, Y., Sanehira, T., Sueda, Y., Yamada, A., et al. (2006). 通过原位X射线衍射测定Mg2SiO4中瓦兹利石与林伍德石之间的相边界。《Physics and Chemistry of Minerals》，33(2)，106–114。https://doi.org/10.1007/s00269-005-0053-y Katsura, T., & Ito, E. (1989a). 高压高温下的Mg_2SiO_4-Fe_2SiO_4体系：精确测定橄榄石、改性尖晶石和尖晶石的稳定性。《地球物理研究杂志：固体地球》，94(B11)，15663–15670。https://doi.org/10.1029/JB094iB11p15663 Katsura, T., & Ito, E. (1989b). 高压高温下的Mg_2SiO_4-Fe_2SiO_4体系：精确测定橄榄石、改性尖晶石和尖晶石的稳定性。《地球物理研究杂志：固体地球》，94(B11)，15663–15670。https://doi.org/10.1029/JB094iB11p15663 Kechin, V. V. (2001). 高压下的熔化曲线方程。《Physical Review B》，65(5)，052102。https://doi.org/10.1103/PhysRevB.65.052102 Li, G., Zhang, Z., Niu, X., Liu, J., Li, J., Wang, W., & Zhang, Z. (2023). 下地幔条件下SiO2多晶型物的状态方程与相界。《地球物理研究杂志：固体地球》，128(10)，e2023JB026774。https://doi.org/10.1029/2023JB026774 Li, P., Liu, X., Chen, M., Lin, P., Ren, X., Lin, L., et al. (2016). 基于可系统改进原子基组的大规模从头算模拟。《计算材料科学》，112，503–517。https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2015.07.004 Liu, L., Du, J., Zhao, J., Liu, H., Wu, D., & Zhao, F. (2008). 高压研究

以及高温下的行为和通过第一性原理及准谐德拜模型研究镁橄榄石的α-至-β 相变。《计算物理通讯》，179(6)，417–423。https://doi.org/10.1016/j.cpc.2008.04.003 Morris, J. R., Wang, C. Z., Ho, K. M., & Chan, C. T. (1994). 通过共存相模拟得到的铝熔化线。《Physical Review B》，49(5)，3109–3115。https://doi.org/10.1103/PhysRevB.49.3109 Nosé, S. (2002). 用于正则系综模拟的分子动力学方法。《分子物理学》，100(1)，191–198。https://doi.org/10.1080/00268970110089108 Paula Leite, R., & De Koning, M. (2019). 使用LAMMPS对流体进行非平衡自由能计算。《计算材料科学》，159，316–326。https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.12.029 Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). 简明广义梯度近似。《物理评论快报》，77(18)，3865–3868。https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865 Plimpton, S. (1995). 短程分子动力学的快速并行算法。《计算物理学杂志》，117(1)，1–19。https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039 Rouquette, J., Kantor, I., McCammon, C. A., Dmitriev, V., & Dubrovinsky, L. S. (2008). 使用拉曼光谱、X射线衍射和穆斯堡尔谱学研究$(Mg_{0.9}\ Fe_{0.1})_2\ SiO_4$ 橄榄石的高压特性。《无机化学》，47(7)，2668–2673。https://doi.org/10.1021/ic701983w Schneider, T., & Stoll, E. (1978). 畸变型相变三维单组分模型的分子动力学研究。《Physical Review B》，17(3)，1302–1322。https://doi.org/10.1103/PhysRevB.17.1302 Smith, J. S., Nebgen, B., Mathew, N., Chen, J., Lubbers, N., Burakovsky, L., et al. (2021). 自动发现适用于铝的稳健原子间势。《自然·通讯》，12(1)，1257。https://doi.org/10.1038/s41467-021-21376-0 Soubiran, F., & Militzer, B. (2020). 兆巴压力范围内氧化镁的非谐性与相图。《物理评论快报》，125(17)，175701。https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.125.175701 Stixrude, L., & Lithgow-Bertelloni, C. (2005). 大洋上地幔的矿物学与弹性：低速带的起源。《地球物理研究杂志：固体地球》，110(B3)，2004JB002965。https://doi.org/10.1029/2004JB002965 Suzuki, A., Ohtani, E., Morishima, H., Kubo, T., Kanbe, Y., Kondo, T., et al. (2000). 原位测定$Mg_2\ SiO_4$中瓦兹利石与林伍德石之间的相边界。《地球物理研究快报》，27(6)，803–806。https://doi.org/10.1029/1999GL008425 Tokár, K., Jochym, P. T., Piekarz, P., Łażewski, J., Sternik, M., & Parlinski, K. (2013). 瓦兹利石II的热力学性质与相稳定性。《Physics and Chemistry of Minerals》，40(3)，251–257。https://doi.org/10.1007/s00269-013-0565-9

Tsuchiya, T., Tsuchiya, J., Umemoto, K., & Wentzcovitch, R. M.（2004）。地球下地幔中 MgSiO3 钙钛矿的相变。《地球与行星科学快报》，224(3–4), 241–248。https://doi.org/10.1016/j.epsl.2004.05.017 Wang, H., Zhang, L., Han, J., & E, W.（2018）。DeePMD-kit：用于多体势能表征和分子动力学的深度学习软件包。《计算物理通讯》，228，178–184。https://doi.org/10.1016/j.cpc.2018.03.016 Wentzcovitch, R. M., Karki, B. B., Cococcioni, M., & De Gironcoli, S.（2004）。MgSiO3 钙钛矿的热弹性性质：对地球下地幔性质的认识。《物理评论快报》，92(1)，018501。https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.018501 Yu, Y. G., Wentzcovitch, R. M., Tsuchiya, T., Umemoto, K., & Weidner, D. J.（2007）。Mg_2 SiO_4 中后尖晶石相变的第一性原理研究。《地球物理研究快报》，34(10), 2007GL029462。https://doi.org/10.1029/2007GL029462 Yu, Y. G., Wu, Z., & Wentzcovitch, R. M.（2008）。地球过渡带中 Mg2SiO4 的 α-β–γ 相变。《地球与行星科学快报》，273(1–2)，115–122。https://doi.org/10.1016/j.epsl.2008.06.023 Zeng, J., Zhang, D., Lu, D., Mo, P., Li, Z., Chen, Y., 等。（2023）。DeePMD-kit v2：用于深度势模型的软件包。《化学物理学杂志》，159(5)，054801。https://doi.org/10.1063/5.0155600 Zeng, J., Zhang, D., Peng, A., Zhang, X., He, S., Wang, Y., 等。（2025）。DeePMD-kit v3：用于机器学习势的多后端框架。《化学理论与计算杂志》，21(9)，4375–4385。https://doi.org/10.1021/acs.jctc.5c00340 Zhang, D., Bi, H., Dai, F.-Z., Jiang, W., Liu, X., Zhang, L., & Wang, H.（2024）。用于分子模拟的基于注意力机制的深度学习势模型的预训练。《npj计算材料》，10(1)，94。https://doi.org/10.1038/s41524-024-01278-7 Zhang, H., Schmandt, B., Zhou, W., Zhang, J. S., & Maguire, R.（2022）。美国本土下方单一的 520千米不连续面及其热解岩地震性质。《地球物理研究快报》，49(24), e2022GL101300。https://doi.org/10.1029/2022GL101300 Zhang, L., Han, J., Wang, H., Car, R., & E, W.（2018）。深度势分子动力学：一种具有量子力学精度的可扩展模型。《物理评论快报》，120(14)，143001。https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.143001 Zhang, L., Wang, H., Car, R., & E, W.（2021）。深度势水模型的相图。《物理评论快报》，126(23)，236001。https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.126.236001 Zhang, Y., Wang, H., Chen, W., Zeng, J., Zhang, L., Wang, H., & E, W.（2020）。DP-GEN：用于生成可靠的基于深度学习的势能模型的并发学习平台。《计算物理通讯》，253，107206。https://doi.org/10.1016/j.cpc.2020.107206

Zhang, Z., & Wentzcovitch, R. M.（2022）。非谐热力学性质及镁硅氧 3 后钙钛矿相变过程中的相边界。*PhysicalReview B*，*106*（5），054103。
https://doi.org/10.1103/PhysRevB.106.054103