arXiv:2611.29539v1 [cond-mat.mtrl-sci] 22 Nov 2026

AmorphGen：使用机器学习和经典原子间势进行非晶结构生成的 Python软件包

Chaiyawat Kaewmeechai[a, *]、Louie Slocombe[a]、Alexis G. Manche[a]、David O. Scanlon[a, *]

[a]化学学院，伯明翰大学，埃奇巴斯顿，伯明翰 *B15 2TT*，英国

摘要

AmorphGen 是一个开源 Python 软件包，可根据组成或晶体生成并分析非晶态结构。基于化学信息的规则用于估计初始密度，并指定间距和配位约束。该软件提供三种路径：随机放置后进行弛豫、从晶体出发进行熔融淬火，以及对随机结构进行退火和淬火的混合路线。ASE 为经典势和机器学习势提供访问接口，并支持选定后端的图形处理器批处理。分析工具可计算配位数、键角、环，以及 X射线或中子结构因子，以便与测量结果进行比较。通过可选的 FEFF 代码接口，还可计算扩展X射线吸收精细结构（扩展 X 射线吸收精细结构谱）。对于非晶态 Ga_2O_3, TiO_2 和 $InGaZnO_4$, ，阳离子配位数接近参考模型和测量结果，且 X射线结构因子再现了测量到的主要峰。Ga_2O_3 和 $InGaZnO_4$ 的扩展 X 射线吸收精细结构谱也捕捉到了实验观察到的主导第一配位壳层特征。混合路线减少了 SiO_2 和砷中的成键缺陷，并形成了 SiO_2 的第一尖锐衍射峰。通过简化集合生成并规范化结构评估，AmorphGen 使跨组成、势函数和制备路线比较非晶模型，以及筛选新的非晶组成变得切实可行。

关键词： 非晶材料、结构生成、熔融淬火、机器学习原子间势、分子动力学、Python

*通讯作者电子邮箱：c.kaewmeechai@bham.ac.uk (Chaiyawat Kaewmeechai), d.o.scanlon@bham.ac.uk (David O. Scanlon)

元数据

Nr.	代码元数据描述	
C1	当前代码版本	v1.0.0
C2	代码仓库的永久链接， 该代码版本所使用的	https://github.com/SMTG-Bham/AmorphGen
C3	代码许可证	MIT许可证
C4	所使用的代码版本控制系统	git
C5	软件编程语言、工具， 以及所用的服务	Python 3.10 to 3.14; ASE, NumPy, SciPy, PyYAML, Matplotlib; 可选的 PyTorch 通过 MACE, CHGNet, SevenNet, 和 TorchSim；可选的 pyace 和 LAMMPS；可选外部 FEFF8.5L，用于扩展 X 射线吸收精细结构谱；GitHub Actions
C6	编译要求、操作 计算环境和依赖项，&依赖项-cies	Linux 或 macOS；CUDA GPU 可选 (CPU and Apple 支持 MPS）；pip 安装 amorphgen[mace], [CHGNet], 或[SevenNet]；TorchSim 引擎需要 [TorchSim] 额外依赖、Python 3.12 或更高版本，以及一块 CUDA GPU 或 CPU（不包括 Apple MPS)
C7	开发者文档 ／手册的链接（如有）	https://smtg-bham.github.io/AmorphGen
C8	问题咨询支持邮箱	c.kaewmeechai@bham.ac.uk

1. 动机与意义

非晶材料广泛应用于薄膜晶体管、固态电解质和相变存储器，其电子和离子性质的模拟始于原子模型。随机结构搜索（RSS）在距离约束下放置原子并优化结构 [1–3], ，而熔融-淬火分子动力学（MQ-MD）则将模拟液体冷却成玻璃态 [4]。对于 RSS，每种组成均需要设定初始密度、最小间距，以及离子材料的配位目标。设定值不当会导致成键缺陷，例如化学计量氧化物中的阴离子-阴离子二聚体或金属-金属键。

大多数现有工具都将起始参数以及制备工作流程中的很大一部分留给用户。物理信息种子坐标方法 [2],Packmol [5], 和 AIRSS [1] 将分离距离和密度作为输入。键切换能够构建高质量的连续随机网络，但对于每个体系都需要相应的成键网络和力场 [6–8]。逆蒙特卡罗代码 [9–12] 以及基于梯度的 TorchDisorder [13]将原子结构拟合到测量值结构因子，因此需要目标组成的实验数据。LAMMPS [14] 要求将每个模拟阶段编写为脚本，而 Atomsk [15] 和 pyiron [16] 提供构建模块和工作流管理功能，但不包含非晶专用默认设置。Vitriflow [17]利用用户定义的随机晶胞，通过 LAMMPS 对熔融淬火系综进行校准。amorphouspy [18] 根据组成构建随机氧化物玻璃，使用经验模型确定密度，并通过经典力场对其进行淬火。

更经济的原子间势使更大规模的 MQ-MD 模拟成为可能，但动力学的可靠性仍取决于势函数和方案。从头算 分子动力学计算开销很大，因此晶胞尺寸受限，且冷却速率远高于实验值。MPmorph [19] 等工作流程可将其自动化，但它们以使用 Packmol [5]打包的随机结构为起点。经典力场可处理数千个原子，但其拟合针对特定体系 [20–22]。包括 MACE [23, 24], 、CHGNet [25], 和 SevenNet [26], 在内的基础机器学习原子间势（ MLIPs ），无需针对特定体系进行拟合，便可为元素周期表中的大多数元素提供力计算，从而支持数千个原子和纳秒轨迹。静态准确性并不能保证有限温度下动力学的稳定性 [27]：在高温压强控制器作用下，基础机器学习原子间势可能使非晶氧化物膨胀至远低于其真实值的密度[28]。非晶结构仍是基础机器学习原子间势的薄弱环节 [29]。微调所需的参考数据少于训练新势函数 [29, 30]；通过 autoplex [33], 等工具自动化的从头训练 [31, 32], ，则需要为每个化学体系训练一个新势函数。无论使用哪种势函数，准备方案和对照参考数据进行检验都至关重要。

缺失的步骤是将根据组成推导的起始参数、适用于机器学习原子间势的系综制备，以及与参考数据的比较整合到一个工作流程中。现有工具要么用于分析结构 [34, 35] ，要么用于自动制备非晶系综 [17–19]。然而，据我们所知，目前还没有任何软件包能够让用户从化学式出发，生成最小间距和配位数目标均根据该组成的化学键自动推导的非晶结构。

在此，我们介绍 AmorphGen，这是一个开源 Python 库和命令行工具，可根据组成，为21种材料类别推导初始密度、最小间距和配位目标，然后

自动完成系综制备和结构分析（图 1）。它提供三种路径：随机 + 弛豫、从晶体进行熔融淬火，以及对随机结构进行退火和淬火的混合路线。它接受任何带有原子模拟环境（ASE）计算器的原子间势函数 [36]。我们将初始密度估算与包含100种化合物的校准集进行比较，并在五种材料上测试随机 + 弛豫和混合路线：Ga_2氧$_3$，TiO_2，$InGaZnO_4$，SiO_2，和砷。我们将这些系综与参考结构、测量的X射线结构因子进行比较；对于 Ga_2氧$_3$和 $InGaZnO_4$，，还与通过连接 FEFF 的接口计算得到的扩展X射线吸收精细结构（EXAFS）谱进行比较 [37, 38]。

2. 软件说明

2.1. 软件架构

AmorphGen 是一个基于 ASE [36]，NumPy [40],SciPy [41]，PyYAML [42]，和 Matplotlib [43]构建的纯 Python 软件包；PyTorch [44] 为可选项。附加组件可通过 ASE 的 LAMMPSlib [14]，和 TorchSim [48]添加 MACE、CHGNet、SevenNet、pacemaker ACEpotentials [45–47],以及 LAMMPS pair 样式。TorchSim 可为 MACE、SevenNet、Lennard-Jones 和 Buckingham–Coulomb势批量执行弛豫和定体积分子动力学。

四个模块构成了工作流程（见图1）：

- amorphgen.pipeline：随机生成和分子动力学方案；
- amorphgen.utils：组成规则，以及与计算器和引擎的接口；
- amorphgen.analysis：结构描述符、X射线和中子结构因子、[49, 50]，扩展X射线吸收精细结构、能量排序和参考比较；
- amorphgen.configs：默认方案和 YAML 模式。

amorphgen命令接受标志或经过模式验证的 YAML；amorphgen-slurm 编写 SLURM 作业脚本 [51]。分子动力学检查点和包含动量的扩展XYZ轨迹支持从最后一个完整帧恢复。发散保护机制会停止不稳定的分子动力学或弛豫（补充材料 S3节），而 NumPy 的 SeedSequence 会根据一个全局种子派生系综种子。

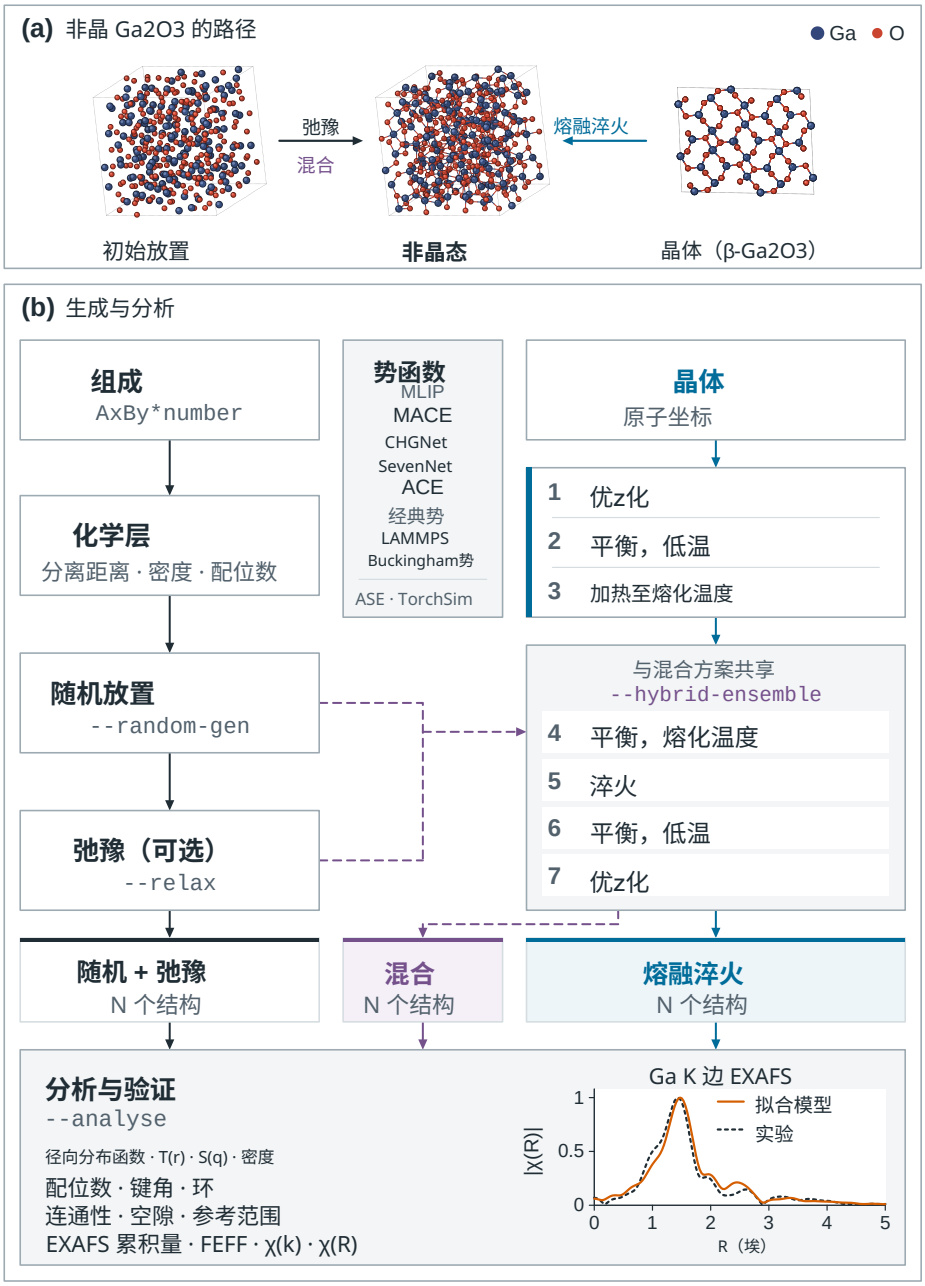

图1：AmorphGen 概览。(a) 非晶态镓$_2$氧$_3$ 结构（中心，由混合路线制备），可通过弛豫或混合路线从随机初始排布（左）得到，也可通过熔融淬火从 β-镓$_2$氧$_3$ 晶体（右）得到。(b) 生成与分析：随机 +弛豫、混合和熔融淬火路线，驱动这些路线的机器学习或经典势函数（中心），以及分析工具。图中展示了 100 晶胞 a-Ga_2O_3 随机 + 弛豫系综的 Ga K 边 EXAFS，并与 Reis 等人 [39], 按图 5a 中的方法拟合的薄膜进行比较。

2.2. 软件功能

化学式和倍数用于指定组成。例如，`Ga2O3*80` 生成一个含有 80 个化学式单元、共 400 个原子的晶胞，其中 Ga_2O_3 化学计量比为。电荷平衡用于确定氧化态，并从 21 种材料类别中选出一种。最小间距采用 Shannon 离子半径、[52], Cordero 共价半径 [53],或 Goldschmidt 金属半径 [54] ，并使用 0.70–0.85 的、依赖键类型的比例因子，以及单独的阳离子–阳离子规则（补充材料第 S1 节）。材料类别的堆积率 f_{pack} 用于确定晶胞:

$$V_{\mathrm{cell}} = \frac{1}{f_{\mathrm{pack}}} \sum_i N_i \, \frac{4}{3}\pi r_i^3, \qquad \rho = \frac{\sum_i N_i M_i}{N_{\mathrm{A}}\, V_{\mathrm{cell}}}, \qquad L = V_{\mathrm{cell}}^{1/3}, \tag{1}$$

其中， N_i 和 M_i 分别是元素 i的原子数和摩尔质量。未给定目标密度时，该估计值将作为初始密度。与 100 个目标密度相比，其中 41 个测量自非晶样品，另有 59 个假定为晶体密度的 0.80 倍，其平均绝对相对误差为 11.9 %（补充材料第 S2 节）。用户可以设置这些派生值。

随机生成器按照随机种子坐标方案 [2]，逐个放置原子。每个新原子与一个尚未达到配位数目标的已有原子之间的距离，会处于最小间距与成键截断距离之间。详细规则见补充材料 S1 节。

七阶段熔融-淬冷流程从晶体开始（图 1）。混合路线会在弛豫之前或之后，对随机结构应用第 4–7 阶段：液体退火、淬火、低温平衡和最终优化。熔融淬火系综和批量淬火则对液体快照或目录中的文件应用第 5–7 阶段。各阶段的系综、温度、持续时间和重启点均可配置；默认设置见补充材料 S3 节。TorchSim 分子动力学会固定输入晶胞。ASE 则遵循各阶段的设置，因此，使用基础势的混合示例需要`--eq-high-ensemble NVT`。基础机器学习原子间势可以在高温下通过压强控制器扩大晶胞 [28], 因此，我们的熔融淬火示例在加热和淬火期间也固定体积。

分析模块会计算几何第一壳层累积量和单高斯拟合偏差。其 FEFF 接口 [37, 38] 会构建以吸收原子为中心的团簇，并行运行外部可执行程序、检查输出，并先按位点、再按结构对 $\chi(k)$ 求平均，然后进行傅里叶变换。参考谱验证和路径截断检查详见补充材料第 S6.2 和 S6.4 节。

2.3. 示例代码片段与分析

这些命令会生成并弛豫 100 个含 400 个原子的 a-Ga_2O_3 晶胞，退火 20 个晶胞，并分析其结构和 Ga K 边 EXAFS。步骤 1–2 需要安装［mace］和［torchsim］附加组件、Python 3.12 或更高版本，以及 CUDA GPU；步骤 3 会从代码库的 examples/ 目录读取参考文件，该文件不会通过 pip 安装；步骤 4 需要外部 FEFF。放置时密度保持在 4.84g cm^{-3}，并使用 --retry-mode none；随后，MACE-MPA-0 每次弛豫十个晶胞中的原子和立方晶胞，使能量降至 0.05 eV $Å^{-1}$。混合分子动力学采用单精度和固定体积；其温度程序和参考文件检查详见补充材料第 S3 节。

```
# 1. 随机放置并弛豫 100 个 Ga160O240 晶胞 amorphgen --r
andom-gen --composition "Ga2O3*80" -n 100 \ --seed 2026 --
target-density 4.84--retry-mode none \ --relax -m mace-mpa-0 --
engine torchsim --batch-size 10 \ -f 0.05 -o random_ga2o3/ # 2. 对其中
20 个采用混合路线（在 3000 开尔文下退火 50 ps） mkdir -p seeds_
ga2o3 cp $(ls random_ga2o3/random_opt/*.xyz | head -n 20) seeds_
ga2o3/ amorphgen --hybrid-ensemble --input-dir seeds_ga2o3/ \ --
seed 2026 -m mace-mpa-0 --dtype float32 \ --engine torchsim --
batch-size 10--eq-high-ensemble NVT \ --eq-high-steps 100000 -f 0.05 -
o hybrid_ga2o3/ # 3. 结构分析，并与参考范围进行比较 amorphgen --
analyse --input-dir hybrid_ga2o3/final/ \ --reference
examples/reference_a_Ga2O3.yaml--sq \ --connectivity --rings --
ring-criterion primitive \ --save-plot plots/ # 4. 对所有 Ga 位点计算
Ga-O 累积量和 Ga K边 EXAFS amorphgen --analyse --input-dir
hybrid_ga2o3/final/ \ --exafs Ga-O --harmonic-fitGa-O --feff-write feff
\ --feff-absorber Ga --feff-radius 10 \ --feff-stoichiometry structure --
feff-card RPATH=8 \ --feff-card "CRITERIA=1.0 0.5" --feff-run --
feff-workers 8 \ --feff-kmax 12 --save-plot exafs/
```

对于晶体，此命令会在固定体积下加热并保持熔体状态，然后生成最多 20 个淬火过程，并在 300 开尔文下进行 NPT 平衡。

```
amorphgen Ga2O3_超晶胞.xyz --mq-ensemble -n 20 \\ -m mace-mpa-0 --
melt-ensemble NVT--eq-high-ensemble NVT \\ --eq-high-steps 100000 --
eq-low-ensemble NPT -o mq_ga2o3/
```

Python API 还支持在不进行弛豫的情况下执行放置和分析：

```
from amorphgen import 生成_随机
from amorphgen.analysis import StructureAnalyser

晶胞 = [generate_random({"Ga": 160,      "O": 240}, 随机种子=s,
                        目标_密度=4.84, retry_mode="none")
        for s in 范围(3)]
sa =StructureAnalyser(晶胞)
print(sa.coordination("Ga-O")["Ga-O"]["均值"]) # Ga-O 配位数均值
print(sa.dimer_report()["总计"])# 近邻接触
```

3. 示例

我们在五个体系上测试了 AmorphGen：三种金属氧化物（非晶态 Ga_2O_3，、非晶态 $InGaZnO_4$，和非晶态 TiO_2）、石英玻璃（非晶态 SiO_2），以及非晶砷。对于非晶砷，最近发表了一种基于 r^{2}SCAN 数据训练的 MACE 势和一个模型结构 [55]，，同时还以数字化形式发表了参考文献 [56] 中的测量值结构因子，从而可以进行直接比较。每个体系均使用基础机器学习原子间势 MACE-MPA-0 [24]，，该势函数基于 MPtrj [25] 和 sAlex [57–59] 数据集训练。对于非晶态 SiO_2，，我们还使用了 van Beest、Kramer 和 van Santen 的经典势（BKS） [20]；对于非晶砷，则使用了 Liu 等人的势函数，该势函数通过 `--model-path` 加载。

对于每种氧化物，按照第 2.3 节中的工作流程，使用该氧化物的组成和密度，通过随机放置和弛豫生成了 100 个结构，并通过混合路线生成了 20 个结构。引擎、精度以及每项任务使用的随机种子见补充材料第 S3 节和表 S4。立方晶胞中，a-Ga_2O_3，350 含有 400 个原子，a-$InGaZnO_4$，270 含有 400 个原子，a-TiO_2，含有 400 个原子，而 a-SiO_2含有 648 个原子。对于 a-As，使用 2000 原子晶胞按照每条路径生成了 5 个结构，晶胞大小与 Liu 等人 的模型相同。每个晶胞均按照给定的参考密度构建（对于 a-Ga_2O_3，，为 PBE0-TC-LRC 值 [60]），因此这些测试检验的是放置规则和方案，而非密度估算值。

下面，退火是50ps 混合路线的定体积阶段（非晶砷为 1500 开尔文，氧化物为3000 开尔文）。每次图形处理器计算均使用一块 NVIDIA A100-SXM4 GPU 和一台 Intel Xeon Ice Lake CPU 的四个核心运行，而 BKS 运行使用四个 CPU 核心。图2 展示了每个体系的一个结构。

对于这三种金属氧化物，随机 + 弛豫得到的阳离子配位数与参考值相差不超过0.5（表1，图3a–i）。两个a-Ga_2O_3 系综的Ga–O键比参考结构长0。03Å [60]，密度接近室温下溅射薄膜的密度，4。78–4。84$\,\mathrm{g\,cm^{-3}}$

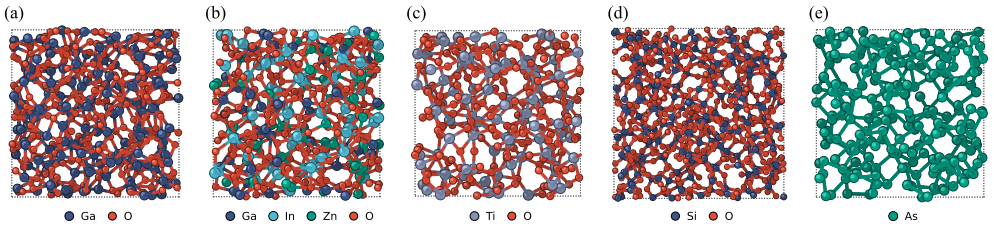

图 2：随机 + 弛豫系综中的一个弛豫结构：(a) 非晶 Ga_2氧$_3$ O（400 个原子）、(b) 非晶 $InGaZnO_4$（350 个原子）、(c) 非晶 TiO_2（270 个原子）、(d) 非晶 SiO_2（648 个原子）和 (e) 非晶砷，沿 x–y 平面投影，并显示阳离子–氧键和砷–砷键。为清晰起见，(e) 展示的是一个含 216 个原子的非晶态As晶胞，其生成设置与第 3 节分析的 2000 原子晶胞相同。

[61, 62]。对于a-TiO_2, ，Ti–O距离和配位数与衍射结果一致 [63], ；对于a-$InGaZnO_4$, ，金属–O距离与扩展X射线吸收精细结构测量值 [64]相差不超过0.08 Å。a-TiO_2 和 a-$InGaZnO_4$ 弛豫后的密度均落在实测薄膜密度范围内，该范围随沉积条件 [65–67], 变化 [65, 但低于其最高密度薄膜，分别为3.4–3.6和5.9–6.1 g cm^{-3}（图4c、f、i）。

X射线 $S(q)$ 总体上符合参考峰位置，但非晶 Ga_2O_3 和非晶 $InGaZnO_4$, 的第一个峰较弱，而非晶 TiO_2 的弱而宽的第一个峰位于略低的 q。弛豫后仍存在 O–O二聚体，即距离小于 1.9 埃的氧原子对（补充材料第S4节）；它们分别出现在 58%、17% 和 46% 的非晶 Ga_2O_3, 、非晶 TiO_2, 和非晶 $InGaZnO_4$ 结构中，而混合路线可将其全部消除。详细的峰值比较和参考不确定性见补充材料第S4.1节。

体系	描述符	随机	混合	参考
a-镓$_2$氧$_3$	Ga–O键（埃）	1.933	1.929	1.901 [60]
	CN(Ga)；四配位、五配位（%）	4.5；55，41	4.5；55，42	4.5； 55, 42 [60]
	氧–Ga–氧，Ga–氧–Ga (°)	107, 115	107, 116	107, 117 [60]
	密度 (g cm^{-3})	4.77 ± 0.05	4.85 ± 0.06	4.5–5.6 [68, 69]
a-TiO_2	钛–氧（埃）	1.957	1.953	1.94–1.96 [63]
	配位数(钛)	5.2	5.2	5.3 [63]
	氧–钛–氧、钛–氧–钛（°）	105、120	105, 121	–
	密度 (g cm^{-3})	3.29 ± 0.09	3.26 ± 0.06	3.0–3.6 [65]
a-$InGaZnO_4$	铟–氧、Ga–O键、锌–氧 (埃)	2.21, 1.93, 2.05	2.21, 1.92, 2.05	2.13、1.87、1.97 [64]
	In 的配位数, CN(Ga), Zn 的配位数	5.3, 4.4, 4.2	5.4, 4.3, 4.2	5.1、3.9、3.7 [64]
	密度（g cm^{-3}）	5.53 ± 0.07	5.59 ± 0.06	5.3–6.1 [64, 66, 67]

表1：采用 MACE-MPA-0 生成的 a-Ga_2O_3, 、a-TiO_2, 和 a-$InGaZnO_4$ 系综：随机 + 弛豫（100 个结构）和混合（20 个）。密度（均值 ± 标准差）为从 4.84、3.80 和 6.10 g cm^{-3} 进行立方晶胞弛豫后的结果。CN，平均配位数。

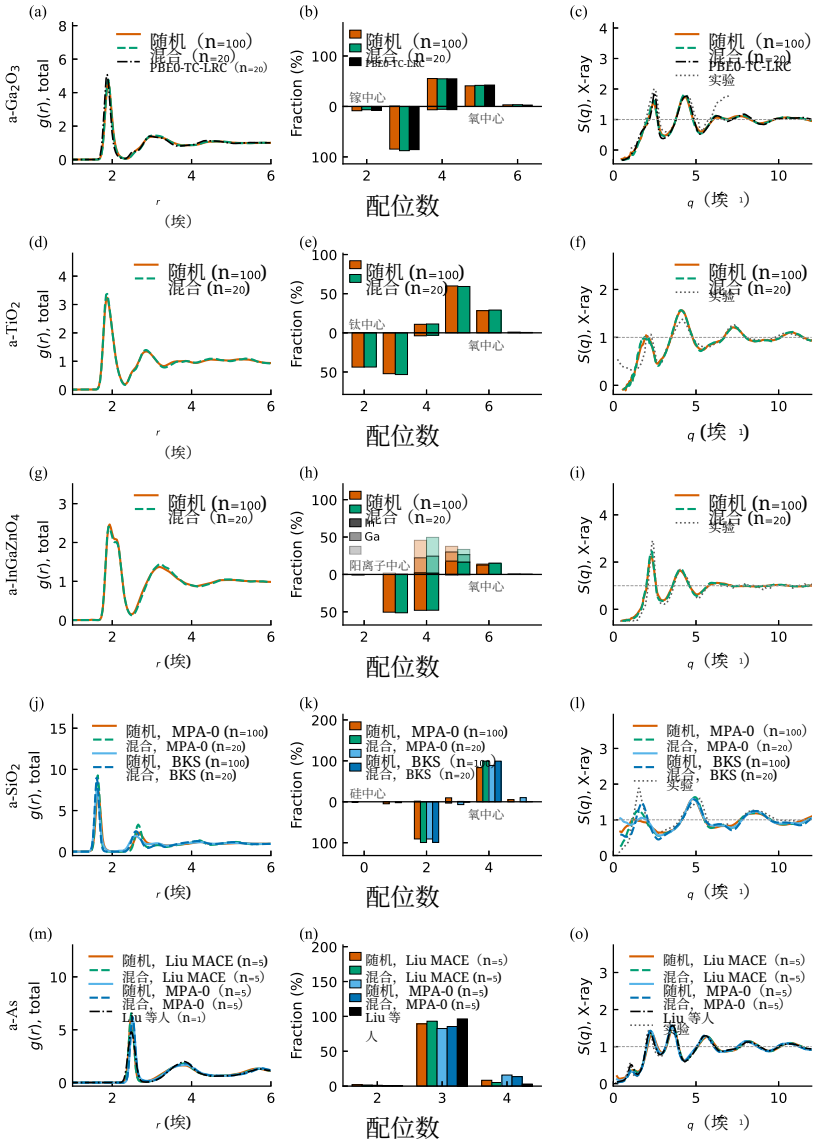

图3：随机 +弛豫（实线）和混合（虚线）系综的总 $g(r)$（左）、配位分布（中）和X射线 $S(q)$（右）：(a–c) a-Ga_2O_3 ，采用参考文献 [60]中的PBE0-TC-LRC结构；(d–f) a-TiO_2；(g–i) a-$InGaZnO_4$；(j–l) a-SiO_2 ，采用MACE-MPA-0和BKS；(m–o) a-As，采用MACE-MPA-0、Liu 等人的势函数[55], 及其结构。参考结构以点划线表示。阳离子中心和氧中心的配位分数分别向上和向下。 $S(q)$为20个结构的平均值（a-As为5个）。点线：测量值 $S(q)$；a-Ga_2O_3 [62]和a-$InGaZnO_4$ [64]薄膜以及a-TiO_2 [63] 和石英玻璃 [70] 的数据取自X射线数据，并按参考文献 [71, 72], 重新绘制；a-As [56]的数据取自X射线与中子联合数据，并按参考文献 [55]重新绘制；对于单质，两者给出的 $S(q)$相同。

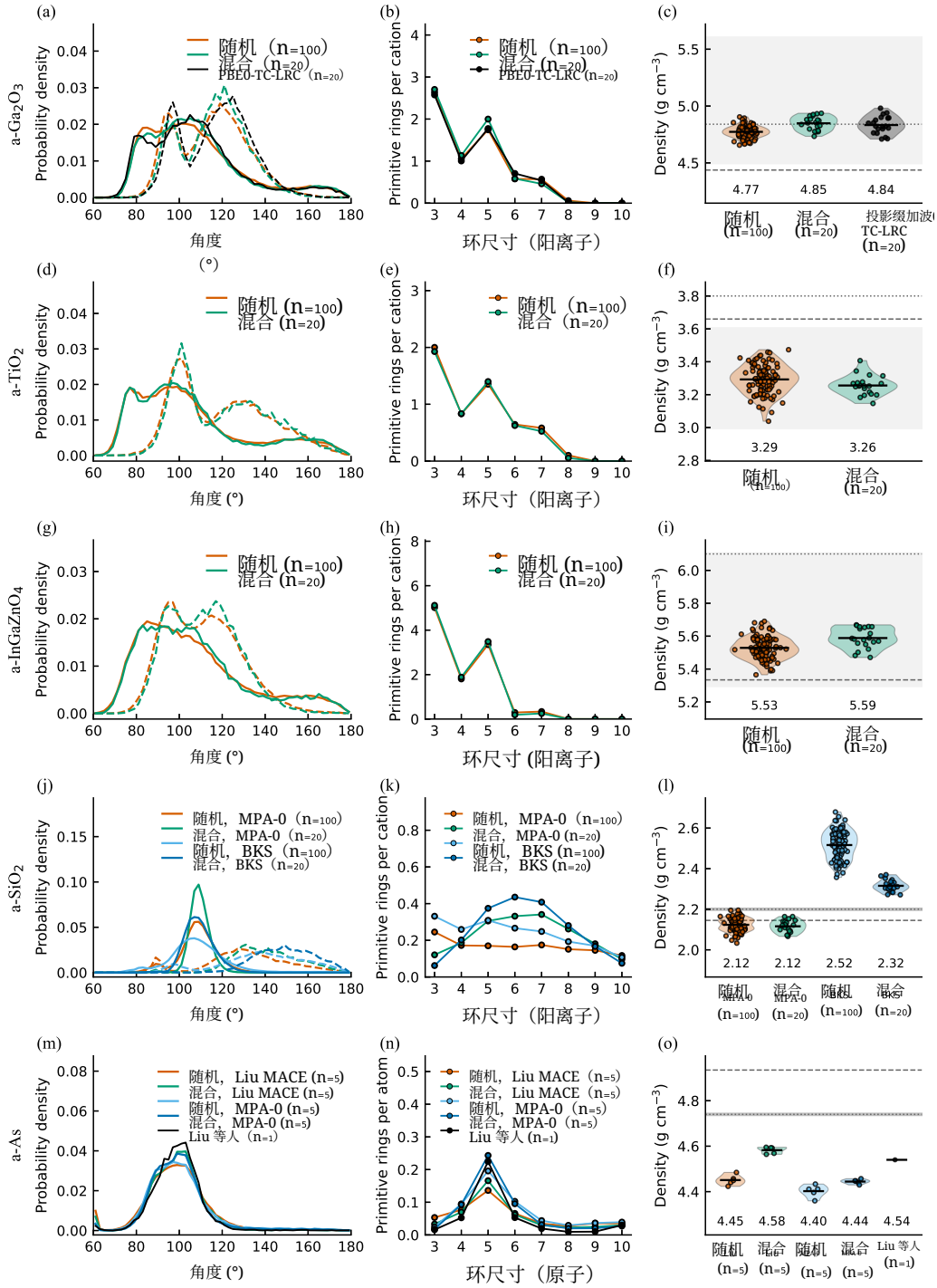

图4：图3中的各系综的键角（左）、本原环（中）和密度（右）。键角：O–M–O（实线）和 M–O–M（虚线；非晶砷对应 As–As–As）。每个阳离子的环数（非晶砷为每个原子的环数） [73, 74]。对于金属氧化物，它们主要反映氧配位数。立方晶胞弛豫后的密度，其中生成密度（点线）、ρ_{est} （虚线）以及测量值或范围（色带）。

非晶态 SiO_2	MACE-MPA-0		BKS		参考
	随机	混合	随机	混合	实验 [70, 75, 76]
硅–氧（埃）	1.657	1.636	1.635	1.615	1.608–1.62
硅的配位数；四配位（%）	3.9；83	4.0；99.3	4.1；89	4.0；99	4；∼100
硅氧硅 (°)	130	140	138	149	144–152
密度 (g cm^{-3})	2.12 ± 0.03	2.12 ± 0.03	2.52 ± 0.07	2.32 ± 0.03	2.20
FSDP位置 (埃$^{-1}$) / 高度	none	1.50 / 1.26	1.70 / 1.06	1.74 / 1.48	1.55 / 1.9
a-As	Liu等的 MACE		MACE-MPA-0		参考
	随机	混合	随机	混合	模型 [55]
砷–砷（埃）	2.496	2.493	2.538	2.533	2.498
砷的配位数；三重配位（%）	3.1；89.3	3.0；93.1	3.2；82.6	3.1；85.5	3.0；96.4
As–As–As (°)	98.1	98.3	99.5	99.4	98.6
密度 (g cm^{-3})	4.45 ± 0.02	4.58 ± 0.02	4.40 ± 0.03	4.44 ± 0.01	4.54
FSDP位置 (埃$^{-1}$) / 高度	1.18 / 0.37	1.18 / 0.40	1.10 / 0.33	1.10 / 0.37	1.10 / 0.51

表2：非晶态 SiO的键长、键角、配位数和FSDP值$_2$ 及非晶砷。密度（均值 ± 标准差）为单独进行立方晶胞弛豫后的结果。FSDP：第一尖锐衍射峰的位置和高度（图3l、o）。非晶砷的参考值根据已存档的模型结构计算得出。

补充材料S4节给出了邻居截断距离、环定义和结构因子处理。对于MACE-MPA-0，弛豫和退火后的非晶态 SiO_2 系综具有相似的径向分布函数，但仅弛豫会留下配位缺陷，且没有第一尖锐衍射峰（FSDP）（表 2，图 3j–l）。退火将四配位硅比例提高到99。3%，使 20个结构中的 16 个不含 O–O二聚体；而每个弛豫后的结构都含有这种二聚体，并消除了低q 的上升 $S(q)$。它还改变了环（图4k）：仅弛豫会产生平坦的分布，其中包含许多三元环；而退火后，分布峰值出现在六元环至七元环处，使用 BKS 时最为明显，这与石英玻璃模拟结果接近；在石英玻璃中，六元环出现得最频繁 [77]。使用 MACE-MPA-0 时，键长和键角仍处于衍射范围之外 [75, 76], ，且第一尖锐衍射峰弱于测量值 [70]。从相同的放置构型出发，BKS 在退火后给出的局部描述符处于这些范围内，但其第一尖锐衍射峰仍然较弱且发生偏移。该比较同时涉及势函数和密度：BKS 在 2。20g cm^{-3} 下进行退火，而 MACE-MPA-0 在2。12g cm^{-3} （补充材料S3节）。

对于非晶砷，Liu 的特定体系 MACE 势等人 [55] 仅经弛豫便能再现其模型的键长和角度（表2，图3m–o）。退火减少了过量的四配位位点，增加了五元环（图4n），并消除了低q 峰 S（q），而 MACE-MPA-0 保留了更多配位缺陷。所有四个系综的密度仍低于

实验值，且即使是特定体系势函数，退火后的第一尖锐衍射峰也弱于已发表的模型和实验 [56]。我们的数值取自五个含 2000 个原子的晶胞的平均值；Liu等人给出了一个含 2000 个原子的模型，并根据十次同等规模的独立运行估计不确定性 [55]。计入淬火和低温平衡后，我们的混合方案仅持续72ps，比他们的方案短约 20 倍，却仍能再现局部结构。制备设置以及更多环和峰的比较见补充材料第 S3 节和第 S4.1 节。

使用 FEFF8.5L（Feff8L）计算的扩展 X 射线吸收精细结构谱 [78] 并对所有金属原子取平均后，可直接与 X 射线吸收测量结果进行比较（图5）。这些谱是根据随机 + 弛豫结构计算得到的，因此不包含热振动。傅里叶变换在2% 以内收敛至4 埃，而更长的散射路径仍会使原始$\chi(k)$略有变化（补充材料第 S6.4 节）。

对于非晶 Ga_2O_3, ，谱是对 100 个随机 + 弛豫晶胞取平均得到的，这些晶胞按表1 所述方法构建（补充材料第 S6.3 节）。拟合比例因子、偏移量、能量位移和额外阻尼项 $\Delta\sigma^2$后，其与测量谱吻合 [39] ，在$k = 2.5$–12埃范围内的归一化平方残差为 0.043^{-1} ，并再现了主要的 Ga–O 配位壳层。

对于非晶 $InGaZnO_4$, ，谱是对 504 个单元取平均得到的，这些单元按表1 所述方法构建，但在固定体积下弛豫，密度为实测值$6.10\,\mathrm{g\,cm^{-3}}$。Zn 和 Ga 谱以相同方式拟合到一种组成不同的薄膜[79], ，且没有可用的 In 测量谱。与 Kumara 等人的相位校正变换相比，*et al.* [64], 第一壳层峰值的差异在0.04埃以内（表1 中的较长均值距离符合不对称配位壳层的预期），但即使经过退火，3.3埃附近的 In 特征仍然过弱（补充材料第 S6.5–S6.7 节）。

这些测试说明了如何选择路径。Random + 弛豫是最快的（补充材料表 S5）。对于金属氧化物，它已能给出阳离子配位数。不过，这些结构中仍有 17–58% 存在 O–O二聚体。混合路线可以消除这些二聚体；需要高质量结构时，例如用于训练数据，混合路线是更好的选择。对于非晶态 SiO_2和非晶砷，必须进行退火，因为仅靠弛豫会导致 17% 的硅和 11–17% 的砷配位错误。即使经过退火，采用这一方案得到的中程有序度仍低于实验值。对于扩展X射线吸收精细结构，各体系达到均值收敛所需的晶胞数不同：a-Ga_2O_3 需要几十个，而 a-$InGaZnO_4$, 需要几百个；每个晶胞的 FEFF 计算约耗费 0.1 核心小时。因此，应对每个新体系进行补充材料第 S6.4 节所述的晶胞采样检查。

基础势无需训练，覆盖元素周期表中的大多数元素，因此可以立即对新的组成进行建模。然而，在我们的测试中，

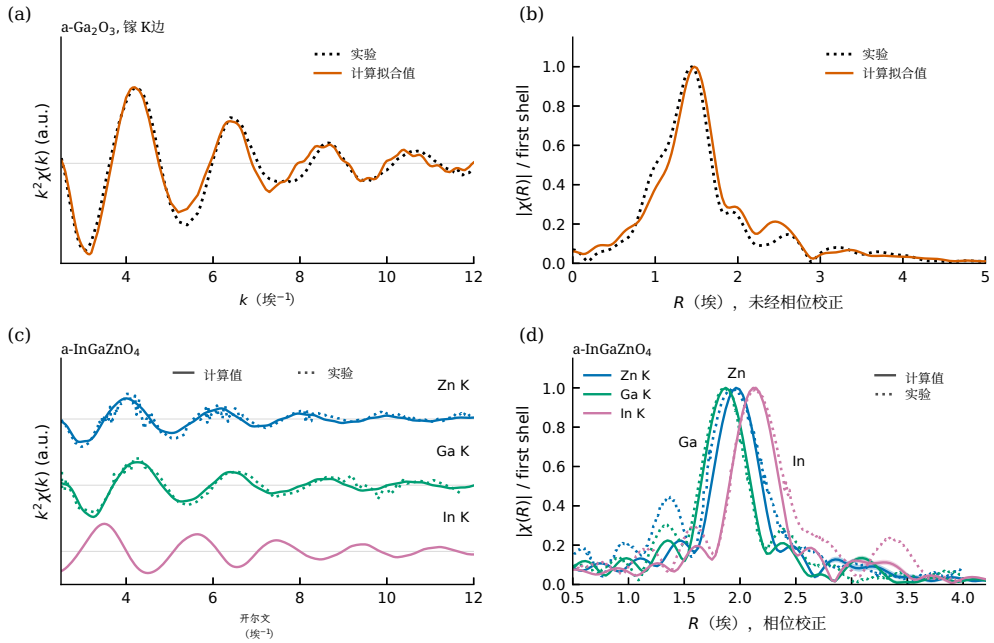

图 5：使用 FEFF8.5L，从静态 MACE-MPA-0 结构计算得到的 K 边扩展 X 射线吸收精细结构（实线）与实测光谱（虚线）的对比。(a) 100 个随机 a-Ga_2O_3 晶胞的 Ga K边 $k^2\chi(k)$，并对比例因子、偏移量、能量位移和额外阻尼 $\Delta\sigma^2$ 进行拟合，使其符合 Reis 等人 [39]的沉积态薄膜。(b) (a) 的傅里叶变换，未经相位校正。(c, d) 504 个在 6.10 g cm^{-3}下弛豫的 a-$InGaZnO_4$ 晶胞的 Zn、Ga 和 In K 边。(c) $k^2\chi(k)$，为清晰起见进行了偏移。Zn 和 Ga 按照 (a) 的方法，拟合至另一种组成（In:Ga:Zn= 3:0.4:2）的薄膜 [79], ，因此 (c) 仅测试第一壳层的相位和频率。In 未进行拟合，因为尚未发表其实测光谱。(d) 相位校正后的 $|\chi(R)|$，将 k^3加权谱与 Kumara 等人 [64], 的结果进行对比；其 k 范围未注明，并缩放至第一壳层极大值。窗函数见补充材料第 S6.1 节。

MACE-MPA-0 产生的金属–氧键略长于参考值，且氧化物密度低于密度最高的薄膜。弛豫后，与 BKS 相比，它在非晶态 SiO_2 中留下的四配位硅更少，在非晶砷中留下的三配位砷也少于 Liu等人的势函数。因此，我们建议使用密度泛函理论检查几个结构，或使用经过微调的势函数或特定体系势函数；AmorphGen 无需对工作流程进行任何更改即可接受这些势函数 [29, 30]。熔融淬火路线未单独进行基准测试。其第 4–7 阶段运行的代码与混合路线相同，而混合路线已在固定体积下完成上述测试；第 1–3 阶段用于优化、平衡和加热初始晶体，尚未进行测试。其示例设置见补充材料第 S3 节。使用基础势时，应在固定体积下运行，并且仅在低温下启用压强控制器 [28]。

4. 影响

AmorphGen 将结构生成、弛豫和分析整合到同一工作流程中，使非晶材料的系综研究切实可行。在第 3 节中，使用 MACE-MPA-0 生成并弛豫 100 个含 270 至 648 个原子的结构，每种氧化物耗时 48 分钟 至 3 小时 ，在单张 NVIDIA A100 GPU 上完成，其中包括原子放置（补充材料表 S5）。因此，在进行成本更高的退火或密度泛函理论计算之前，可以筛选多种组成。

针对特定材料训练的势函数也可用于同一工作流程。使用 Liu 等人 [55]，针对非晶砷训练的 MACE 势，对五个含 2000 个原子的结构进行了退火和淬火，在单张 GPU 上耗时约 10 小时 ，并与其模型直接比较（表 2）。

FEFF接口可按元素逐一将这些系综与X射线吸收测量结果直接比较。对于非晶态Ga_2O_3 和非晶态$InGaZnO_4$，计算光谱再现了每种金属测量得到的第一配位壳层，也显示了模型在第一配位壳层之外的差异（图 5）。

5. 结论

我们开发了 AmorphGen，这是一款可自动进行非晶结构生成的 Python 软件包。给定化学组成后，它会根据该组成推导出的约束随机放置原子，然后对生成的结构进行弛豫，或通过混合路线进一步退火。它还支持从晶体出发的完整熔融-淬冷流程。所有路径均使用机器学习势或经典原子间势运行。

AmorphGen 还包含一个分析模块，可计算径向分布函数、配位数、键角、环、多面体连接性、X射线或中子结构因子；借助外部 FEFF 可执行文件，还可计算系综平均的扩展 X 射线吸收精细结构谱。此外，它还会将每组结构与参考数据进行比较。

我们在三种金属氧化物、石英玻璃（SiO_2）和砷上验证了生成的结构。对于这三种氧化物，仅采用随机 +弛豫即可得到接近参考值的阳离子配位数。SiO_2 和砷则需要退火，这能减少它们的配位缺陷，但在此方案下，中程有序程度仍低于实验结果。a-Ga_2O_3 和 a-$InGaZnO_4$ 的扩展 X 射线吸收精细结构谱捕捉到了测量值中占主导的第一配位壳层特征。

致谢

C.K. 和 D.O.S. 感谢由英国研究与创新署（UKRI）通过英国政府的 Horizon

欧洲资助担保（EP/Y019504/1）。本研究中所述的计算使用 Baskerville 二级高性能计算服务（https://www.baskerville.ac.uk/）完成。Baskerville 由工程与物理科学研究委员会和英国研究与创新署通过世界一流实验室计划（EP/T022221/1）和数字研究基础设施计划（EP/W032244/1）资助，并由伯明翰大学的高级研究计算中心运营。本文所述的计算还使用了伯明翰大学的 BlueBEAR 高性能计算服务，该服务为该大学的研究群体提供高性能计算服务（详情请见 http://www.birmingham.ac.uk/bear），以及由华威大学科学计算研究技术平台托管的 Sulis 二级高性能计算平台（由 EPSRC 项目 EP/T022108/1 和 HPC Midlands+ 联盟资助）。通过加入由英国工程与物理科学研究委员会（EPSRC；EP/L000202、EP/R029431、EP/T022213、EP/X035859）资助的英国高端计算材料化学联盟，我们还使用了 ARCHER2 英国国家超级计算服务。我们还感谢英国材料与分子建模中心提供计算资源，该中心部分由 EPSRC（EP/T022213/1、EP/W032260/1 和 EP/P020194/1）资助。图1 中的结构使用 hofmann [80]进行渲染。

数据可用性

软件以 AmorphGen v1.0.0 的形式存档于 Zenodo（https://doi.org/10.5281/zenodo.24207927）。第 3 节的数据存档于 https://doi.org/10.5281/zenodo.24284240。

补充材料

补充材料详细介绍了组成规则和材料类别（S1节、表 S1）；密度校准及其参考数据（S2节、表 S2–S3 和图 S1）；结构系综、精度、随机种子和任务划分（S3节、表 S4）；结构分析设置（S4节）；结构生成的计算成本（S5节、表 S5）；以及 EXAFS 协议、验证、收敛测试和与实验的比较（S6节、表 S6–S8）。

CRediT 作者贡献声明

Chaiyawat Kaewmeechai: 概念化、数据整理、形式分析、研究、方法学、软件、验证、可视化，

撰写——初稿，撰写——审阅与编辑。**Louie Slocombe:**软件、验证、项目管理、撰写——审阅与编辑。**Alexis G. Manche:** 形式分析、研究、方法学、软件、验证、撰写——审阅与编辑。**David O. Scanlon:** 概念化、经费获取、项目管理、资源、监督、撰写——审阅与编辑。

利益冲突声明

作者声明，他们不存在任何已知的、可能影响本文所报告工作的竞争性财务利益或个人关系。

写作过程中生成式人工智能和人工智能辅助技术的使用声明

在准备本文的过程中，作者使用 Claude Code 和 Claude（Anthropic）起草和修改文本，并根据 AmorphGen 源代码核对软件描述；同时使用 Grammarly 检查拼写、语法和文风。在使用这些工具后，作者根据需要对内容进行了审阅和编辑，并对已发表文章的内容承担全部责任。

参考

[1] C. J. Pickard, R. J. Needs, 从头算随机结构搜索, 《物理学杂志：凝聚态》23 (2011) 053201. doi:10.1088/0953-8984/23/5/053201。[2] Y. Youn, Y. Kang, S. Han, 一种基于局部几何生成非晶结构的高效方法, 《计算材料科学》95 (2014) 256–262. doi:10.1016/j.commatsci.2014.07.053。[3] E. B. Jones, V. Stevanović, 玻璃态固体作为晶体微观态的统计系综, npj《计算材料》6 (2020) 56.doi:10.1038/s41524-020-0329-2。[4] I. Štich, R. Car, M. Parrinello, 通过从头算分子动力学研究非晶硅：制备、结构与性质, 《物理评论B》44 (1991) 11092–11104. doi:10.1103/PhysRevB.44.11092。

[5] L. Martínez, R. Andrade, E. G. Birgin, J. M. Martínez, PACK MOL：用于构建分子动力学模拟初始构型的软件包，《计算化学杂志》30 (2009) 2157–2164.doi:10.1002/jcc.21224。[6] F. Wooten, K. Winer, D. Weaire, 非晶硅和锗结构模型的计算机生成，《物理评论快报》54 (1985) 1392–1395. doi:10.1103/PhysRevLett.54.1392。[7]G. T. Barkema, N. Mousseau, 高质量连续随机网络，《物理评论B》62 (2000) 4985–4990. doi:10.1103/PhysRevB.62.4985。[8] Z. Zheng, F. Zheng, Y.-N. Wu, S. Chen, L.-W. Wang, 一种用于生成非晶结构的广义键切换蒙特卡罗方法，《今日计算材料》6 (2025) 100031. doi:10.1016/j.commt.2025.100031。[9] R. L. McGreevy, L. Pusztai, 逆蒙特卡罗模拟：一种确定无序结构的新技术, Molecular Sim- ulation 1 (1988) 359–367. doi:10.1080/08927028808080958。[10] M. G. Tucker, D. A. Keen, M. T. Dove, A. L. Goodwin, Q. Hui, RM-CProfile：用于多晶材料的逆蒙特卡罗，《物理学杂志：凝聚态》19 (2007) 335218. doi:10.1088/0953-8984/19/33/335218。[11] B. Aoun, Fullrmc，一款借助机器学习和人工智能的刚体逆蒙特卡罗建模软件包，《计算化学杂志》37 (2016) 1102–1111. doi:10.1002/jcc.24304。[12] G. Opletal, T. C. Petersen, B. O'Malley, I. K. Snook, D. G. McCulloch, I. Yarovsky, HRMC：采用硅和碳势函数的混合逆蒙特卡罗方法, Computer Physics Communications 178 (2008) 777–787. doi:10.1016/j.cpc.2007.12.007。[13] A. Gore, X. Gouws, C. G. Tetsassi Feugmo, TorchDisorder：一个可微框架，可根据实验衍射数据生成物理真实的无序结构，《化学理论与计算杂志》22 (2026) 6859–6873. doi:10.1021/acs.jctc.6c00490。[14] A. P. Thompson, H. M.Aktulga, R.Berger,D. S. Bolintineanu, W. M.Brown, P. S. Crozier, P.J. in 't Veld, A.Kohlmeyer, S. G. Moore,

T. D. Nguyen 等，LAMMPS——一种灵活的模拟工具，用于原子、介观和连续体尺度上的基于粒子的材料建模，Computer Physics Communications 271 (2022) 108171。doi:10.1016/j.cpc.2021.108171。[15] P. Hirel，Atomsk：用于操作和转换原子数据文件的工具，Computer Physics Communications 197 (2015) 212–219。 doi:10.1016/j.cpc.2015.07.012。[16]J. Janssen、S. Surendralal、Y. Lysogorskiy、M. Todorova、T. Hickel、R. Drautz、J. Neugebauer，pyiron：用于计算材料科学的集成开发环境，Computational Materials Science 163 (2019) 24–36。doi:10.1016/j.commatsci.2018.07.043。[17] J. Cottom、R. Delhomme、E. Olsson，Vitriflow：由熔融–淬火模拟得到的经校准非晶结构系综，Computational Ma- terials Science 275 (2026) 115098。doi:10.1016/j.commatsci.2026.115098。[18] L. Talirz、A. Atila、M. Sadowski、J. Janssen，amorphouspy：用于在原子尺度计算玻璃性质的工作流程，版本 0.8.1 (2026)。doi:10.5281/zenodo.21365089。网址 https://github.com/glasagent/amorphouspy[19] M. Aykol、S. S. Dwaraknath、W. Sun、K. A. Persson，亚稳态无机材料合成的热力学极限，Science Advances 4 (2018) eaaq0148。doi:10.1126/sciadv.aaq0148。[20] B. W. H. van Beest、G. J. Kra mer、R. A. van Santen，基于从头算计算的硅氧化物和磷酸铝力场，《物理评论快报》64 (1990) 1955–1958。doi:10.1103/PhysRevLett.64.1955。[21] A. Carré、J. Horbach、S. Ispas、W. Kob，从 Car-Parrinello 分子动力学模拟中获取有效势的新拟合方案：应用于二氧化硅，EPL（Europhysics Letters）82 (2008) 17001。 doi:10.1209/0295-5075/82/17001。[22] R. D. Oeffner、S. R. Elliott，针对从头算能量面进行经验拟合的二氧化锗原子间势，《物理评论B》58 (1998) 14791–14803。 doi:10.1103/PhysRevB.58.14791。[23] I. Batatia、D. P. Kovács、G. N. C. Simm、C. Ortner、G. Csányi，MACE：用于快速且

准确力场的高阶等变消息传递神经网络，载于：神经信息处理系统进展，第 35 卷，2022 年，第 11423–11436 页。
doi:10.52202/068431-0830.[24] I. Batatia、P. Benner、Y. Chiang、A. M. Elena、D. P. Kovács、J. Riebesell、X. R. Advincula、M. Asta、M. Avaylon、W. J. Baldwin 等，原子尺度材料化学的基础模型，《化学物理学杂志》163 (2025) 184110。doi:10.1063/5.0297006.[25] B. Deng、P. Zhong、K. Jun、J. Riebesell、K. Han、C. J. Bartel、G. Ceder，CHGNet：用于电荷感知原子尺度建模的预训练通用神经网络势，《自然·机器智能》5 (2023) 1031–1041。doi:10.1038/s42256-023-00716-3.[26] Y. Park、J. Kim、S. Hwang、S. Han，分子动力学模拟中图神经网络原子间势的可扩展并行算法，《化学理论与计算杂志》20 (2024) 4857–4868。doi:10.1021/acs.jctc.4c00190.[27] D. Li、J. Yang、X. Chen、L. Yu、S. Liu，基础原子尺度模型对于有限温度分子动力学是否可靠？，The Journal of Physical Chemistry C 129 (2025) 21538–21544。doi:10.1021/acs. jpcc.5c07541.[28] S. Li、Y. An、X. Guo、W. Yang、Z. Wang，非晶结构生成中通用机器学习原子间势的熔融淬火失效及实用解决方案，预印本 (2026)。arXiv:2606.16385，doi:10.48550/arXiv.2606.16385.[29] N. L. Fragapane、V. L. Deringer，非晶材料：通用原子间势面临的前沿挑战，预印本 (2026)。arXiv:2607.11384，doi:10.48550/arXiv.2607.11384.[30] T. L. Tompa、E. Varga-Umbrich、I. Batatia、A. M. Elena、N. Bernstein、G. Csányi，机器学习原子间势基础模型的微调：准确性与可迁移性的策略，预印本 (2026)。arXiv:2606.12704，doi:10.48550 /arXiv.2606.12704.[31] V. L. Deringer、G. Csányi，非晶碳的机器学习原子间势，《物理评论B》95 (2017) 094203。doi:10.1 103/PhysRevB.95.094203.[32] V. L. Deringer、M. A. Caro、G. Csányi，机器学习原子间势：材料科学中的新兴工具，《先进材料》31 (2019) 1902765。
doi:10.1002/adma.201902765。

[33] Y. Liu, J. D. Morrow, C. Ertural, N. L. Fragapane, J. L. A. Gardner, A. A. Naik, Y. Zhou, J. George, V. L. Deringer，探索和学习势能面的自动化框架，《自然通讯》16 (2025) 7666。doi:10.1038/s41467-025-62510-6。[34] S. Le Roux, P. Jund，拓扑网络的环统计分析：一种新方法及其在非晶态 GeS_2 和 SiO_2 体系中的应用，《计算材料科学》49 (2010) 70–83。doi:10.1016/j.commatsci.2010.04.023。[35] A. Stukowski，使用 OVITO（开放可视化工具）对原子模拟数据进行可视化和分析，Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 18 (2010) 015012。doi:10.1088/09 65-0393/18/1/015012。[36] A. Hjorth Larsen, J. J. Mortensen, J. Blomqvist, I. E. Castelli, R. Chris- tensen, M. Dułak, J. Friis, M. N. Groves, B. Hammer, C. Hargus 等，原子模拟环境——用于处理原子的 Python 库，《物理学杂志：凝聚态》29 (2017) 273002。doi:10.1088/1361-648X/aa680e。[37] A. L. Ankudinov, B. Ravel, J. J. Rehr, S. D. Conradson，X射线吸收近边结构的实空间多重散射计算与解析，《物理评论B》58 (1998) 7565–7576。doi:10.1103/PhysRevB.58.7565。[38] J. J. Rehr, R. C. Albers，X射线吸收精细结构的理论方法，Reviews of Modern Physics 72 (2000) 621–654。doi: 10.1103/RevModPhys.72.621。[39] A. Reis, M. Hanke, O. Bierwagen, A. Trampert, P. Mazzolini, E. Welter，Ga_2O_3 及其与 In_2O_3形成的固溶体在热退火过程中的无序–有序转变，physica status solidi (b) 260 (2023) 2200535。doi:10.1002/pssb.202200535。[40] C. R. Harris, K. J. Millman, S. J. van der Walt, R. Gommers, P. Virtanen, D. Cournapeau, E. Wieser, J. Taylor, S. Berg, N. J. Smith 等，使用 NumPy 进行数组编程，Nature 585 (2020) 357–362。doi:10.1038/s41586-020-2649-2。[41] P. Virtanen, R. Gommers, T. E. Oliphant, M. Haberland, T. Reddy, D. Cournapeau, E. Burovski, P. Peterson, W. Weckesser, J. Bright 等，SciPy 1.0：科学计算的基础算法，

Python，Nature Methods 17 (2020) 261–272。doi:10.1038/s41592-0 19-0686-2。[42] PyYAML 开发者，PyYAML：适用于 Python 的 YAML 解析器和生成器，访问日期：2026年11月13日 (2026)。网址 https://github.com/yaml/pyyaml[43] J. D. Hunter, Matplotlib：二维图形环境，Computing in Science & Engineering 9 (2007) 90–95。doi:10.1109/MCSE.2007.55。[44]A. Paszke, S. Gross, F. Massa, A. Lerer, J. Bradbury, G. Chanan, T. Killeen, Z. Lin, N. Gimelshein, L. Antiga 等，PyTorch：命令式风格、高性能深度学习库，载于：神经信息处理系统进展，第32卷，2019年，第8024–8035页。网址 https://proceedings.neurips.cc/paper/2019/hash/bdbca288fee7f92f2bfa9f7012727740-Abstract.html[45] R. Drautz，面向准确且可迁移原子间势函数的原子簇展开，《物理评论B》99 (2019) 014104。d o i: 10.1103/PhysRevB.99.014104。[46] Y. Lysogorskiy, C. van der Oord, A. Bochkarev, S. Menon, M. Rinaldi, T. Hammerschmidt, M. Mrovec, A. Thompson, G. Csányi, C. Ort- ner 等，原子簇展开（PACE）的高性能实现及其在铜和硅中的应用，npj Computational Ma- terials 7 (2021) 97。doi:10.1038/s41524-021-00559-9。[47]A. Bochkarev, Y. Lysogorskiy, S. Menon, M. Qamar, M. Mrovec, R. Drautz，原子簇展开的高效参数化，Physical Review Materials 6 (2022) 013804。doi:10.1103/PhysRevMat erials.6.013804。[48] O. Cohen, J. Riebesell, R. Goodall, A. Kolluru, S. Falletta, J. Krause, J. Colindres, G. Ceder, A. S. Gangan，TorchSim：基于 PyTorch 的高效原子模拟引擎，《人工智能促进科学》1 (2025) 025003。doi:10.1088/3050-287X/ae1799。[49] D. Waasmaier, A. Kirfel，自由原子和离子的解析散射因子函数，《晶体学报》A辑 51 (1995) 416–431。doi:10.1107/S0108767394013292。[50] V. F. Sears，中子散射长度和截面，《中子新闻》3 (1992) 26–37。doi:10.1080/10448639208218770。

[51] A. B. Yoo, M. A. Jette, M. Grondona, 《SLURM：用于资源管理的简单 Linux 实用工具》，载于：并行处理作业调度策略，计算机科学讲义第 2862 卷，Springer，2003 年，第 44–60 页。 doi:10.1007/10968987_3。[52] R. D. Shannon，修订后的有效离子半径及卤化物和硫属化物中原子间距离的系统研究，《晶体学报》A辑 32 (1976) 751–767。doi:10.1107/S0567739476001551。[53] B. Cordero, V. Gómez, A. E. Platero-Prats, M. Revés, J. Echeverría, E. Cremades, F. Barragán, S. Alvarez，《共价半径再探》，《道尔顿汇刊》(2008) 2832–2838doi:10.1039/b801115j。[54] N. N. Greenwood, A. Earnshaw，《元素化学》，第 2 版，Butterworth-Heinemann，1997 年。[55] Y. Liu, Y. Zhou, R. Ademuwagun, L. Walterbos, J. George, S. R. Elliott, V. L. Deringer，非晶态砷的中程结构有序，《美国化学会志》148 (2026) 9400–9412。 doi:10.1021/jacs.5c18688。[56]P. M. Smith, A. J. Leadbetter, A. J. Apling，斜方晶态砷和玻璃态砷的结构，《哲学杂志》31 (1975) 57–64。 doi:10.1080/14786437508229285。[57] J. Schmidt, N. Hoffmann, H.-C. Wang, P. Borlido, P. J. M. A. Carriço, T. F. T. Cerqueira, S. Botti, M. A. L. Marques，借助机器学习确定材料的全局零温相图，《先进材料》35 (22) (2023) 2210788。doi:10.1002/adma.202210788。[58] J. Schmidt, T. F. T. Cerqueira, A. H. Romero, A. Loew, F. Jäger, H.-C. Wang, S. Botti, M. A. L. Marques，通过大型数据集改进材料科学中的机器学习模型，《今日材料：物理学》48 (2024) 101560。 doi:10.1016/j.mtphys.2024.101560。[59] L. Barroso-Luque, M. Shuaibi, X. Fu, B. M. Wood, M. Dzamba, M. Gao, A. Rizvi, M. Uyttendaele, C. L. Zitnick, Z. W. Ulissi，Open Materials 2024 (OMat24) 无机材料数据集及模型，《自然·计算科学》6 (2026) 642–652。 doi:10.1038/s43588-026-00996-w。

[60] C. Kaewmeechai, J. Strand, A. L. Shluger，晶态和非晶态 Ga_2O_3，中俘获空穴的电子结构与性质，Physical Review B 111 (2025) 035203。doi:10.1103/PhysRevB.111.035203。[61]Z. Han, H. Liang, W. Huo, X. Zhu, X. Du, Z. Mei，化学刻蚀非晶态 Ga_2O_3 薄膜晶体管的紫外光探测性能提升，Advanced Optical Materials 8 (2020) 1901833。doi:10.1002/adom.201901833。[62]Y. Liu, H. Liang, L. Yang, G. Yang, H. Yang, S. Song, Z. Mei, G. Csányi, B. Cao，结合机器学习与实验，揭示非晶氧化镓中与原子结构相关的热输运，《先进材料》35 (2023) 2210873。doi: 10.1002/adma.202210873。[63] V. Petkov, G. Holzhüter, U. Tröge, T. Gerber, B. Himmel，通过电子衍射、X射线衍射和逆蒙特卡罗模拟研究非晶态 TiO_2 的原子尺度结构，Journal of Non-Crystalline Solids 231 (1998) 17–30。doi:10.1016/S0022-3093(98)00418-9。[64] L. S. R. Kumara, K. Ishikawa, K. Ide, H. Hosono, T. Kamiya, O. Sakata，利用 XAFS 和高能 XRD 研究氢化与未氢化非晶 In-Ga-Zn-O 薄膜的局部结构性质，The Journal of Physical Chemistry C 125 (2021) 13619–13628。doi:10.102 1/acs.jpcc.1c02437。[65] D. Mergel, D. Buschendorf, S. Eggert, R. Grammes, B. Samset，反应蒸发制备的 TiO_2 薄膜的密度和折射率，Thin Solid Films 371 (2000) 218–224。doi:10.1016/S0040-6090(00)0 1015-4。[66] K. Ide, M. Kikuchi, M. Ota, M. Sasase, H. Hiramatsu, H. Kumomi, H. Hosono, T. Kamiya，工作压力和退火对非晶 In-Ga-Zn-O 薄膜晶体管体密度及纳米孔结构的影响，Japanese Journal of Applied Physics 56 (2017) 03BB03。doi:10.7567/JJAP.56.03BB03。[67] S. Hu, K. Lu, H. Ning, R. Yao, Y. Gong, Z. Pan, C. Guo, J. Wang, C. Pang, Z. Gong 等，非晶铟镓锌氧化物薄膜质量与薄膜晶体管性能之间相关性的研究，Nanomaterials 11 (2021) 522。doi:10.3390/nano11020522。[68]M. Passlack, E. F. Schubert, W. S. Hobson, M. Hong, N. Moriya, S. N. G. Chu, K. Konstadinidis, J. P. Mannaerts, M. L. Schnoes, G. J.

Zydzik，用于电子和光电子应用的 Ga_2O_3 薄膜，《应用物理学杂志》77 (1995) 686–693. doi:10.1063/1.359055.[69] M. Nieminen, L. Niinistö, E. Rauhala, 通过原子层外延利用乙酰丙酮镓生长氧化镓薄膜，材料化学杂志 6 (1996) 27–31. doi:10.1039/JM9960600027.[70] S. Kohara, M. Itou, K. Suzuya, Y. Inamura, Y. Sakurai, Y. Ohishi, M. Takata，从常压到极端条件下利用高能X射线衍射研究无序材料的结构，《物理学杂志：凝聚态》19 (2007) 506101. doi:10.1088/0953-8984/19/50/506101.[71]K. Yang, A. Kachmar, B. Wang, N. M. A. Krishnan, M. Balonis, G. Sant, M. Bauchy，利用紧束缚分子动力学深入认识非晶态 TiO_2 的原子结构，《化学物理学杂志》149 (2018) 094501. doi:10.1063/1.5042783.[72] A. Zeidler, K. Wezka, R. F. Rowlands, D. A. J. Whittaker, P. S. Salmon, A. Polidori, J. W. E. Drewitt, S. Klotz, H. E. Fischer, M. C. Wilding 等，从四面体网络到八面体网络的 SiO_2 玻璃高压转变：结合中子衍射和分子动力学的联合研究，《物理评论快报》113 (2014) 135501. doi:10.1103/PhysRevLett.113.135501.[73] K. Goetzke, H.-J. Klein，有限和无限多面体网络中不同类别环的性质及其高效算法判定，《Journal of Non-Crystalline Solids》127 (1991) 215–220. doi: 10.1016/0022-3093(91)90145-V.[74] X. Yuan, A. N. Cormack, 拓扑网络中本原环统计的高效算法，《计算材料科学》24 (2002) 343–360. doi:10.1016/S0927-0256(01)00256-7.[75] R. L. Mozzi, B. E. Warren，玻璃态二氧化硅的结构，《应用晶体学杂志》2 (1969) 164–172. doi:10.1107/S002188986 9006868.[76] A. C. Wright，玻璃态二氧化硅的中子散射。V. 玻璃态二氧化硅的结构：60 年衍射研究让我们了解了什么？，《Journal of Non-Crystalline Solids》179 (1994) 84–115. doi: 10.1016/0022-3093(94)90687-4.

[77] K. Vollmayr, W. Kob, K. Binder，非晶态二氧化硅中的冷却速率效应：一项计算机模拟研究，《物理评论B》54 (1996) 15808– 15827. doi:10.1103/PhysRevB.54.15808。[78]FEFF 项目和 xraypy 开发者，Feff8L (feff85exafs)：开放源代码理论 EXAFS 计算，基于 FEFF8.5L；修订版本 ec8dcb07ca8ee034d0fa7431782074f0f65357a5 (2026)。网址 https://github.com/xraypy/feff85exafs[79] C. Revenant, M. Benwadih, O. Proux，溶液法制备的铟镓锌氧化物中 Zn 和 Ga 周围的局部结构及其对电子性质的影响，《固体物理学现状（RRL）——快速研究快报》9 (2015) 652–655. doi:10.1002/pssr.201510322。[80] B. J. Morgan，hofmann，版本 0.21.1，修订版 87627da；访问日期：2026年11月13日 (2026)。网址https://github.com/bjmorgan/hofmann

补充材料：AmorphGen：一个用于利用机器学习和经典原子间势进行非晶结构生成的 Python软件包

Chaiyawat Kaewmeechai [a,*]、Louie Slocombe [a]、Alexis G. Manche [a]、David O. Scanlon [a,*]

[a]化学学院，伯明翰大学，埃奇巴斯顿，伯明翰 *B15 2TT*，英国

本补充材料记录了支持主论文的方法和检查。第 S1–S2节介绍了组成规则和密度校准，包括参考数据和拟合堆积因子。第 S3–S5节记录了结构系综、模拟设置、分析方法、其他结构比较以及计算成本。第 S6节介绍了 EXAFS 协议、与 FEFF 参考计算的验证、收敛性测试以及与实验结果的比较。

目录

S1 组成规则 **3**

S2 密度估算与校准 4S2.1 参考密度 .6 S2.2 按类别划分的拟合堆积因子 .8

S3 结构系综与模拟设置 9 S4 结构分析及其他比较 11S4.1 其他结构比较 . 12**S5 结构生成的计算成本 13**

*通讯作者电子邮箱地址： c.kaewmeechai@bham.ac.uk (ChaiyawatKaewmeechai)， d.o.scanlon@bham.ac.uk (DavidO.Scanlon)

S6 扩展X射线吸收精细结构计算 14S6.1 FEFF 与傅里叶变换设置（协议 P）. . . . . 14 S6.2 与 FEFF 参考计算的验证. . . . . 15S6.3 a-Ga_2氧 $_3$：系综、光谱拟合与能量参考. . . . . 15 S6.4 收敛性与拟合灵敏度.16 S6.5 a-$InGaZnO_4$：系综与密度控制.18S6.6 a-$InGaZnO_4$：与实验比较. 18S6.7 a-$InGaZnO_4$：退火晶胞.20 S6.8 EXAFS 的计算成本.21

S1. 组成规则

AmorphGen 根据元素类型规则将每种元素对 A–B 分类为离子型、共价型或金属型；对于规则判为离子型、但鲍林电负性差小于 1.0 的元素对，则按共价型处理 [1–3]。该元素对的最小间距为 $d_{\min}(A,B) = (r_A + r_B)\, s_{\text{bond}}$，其中 r_A 和 r_B 分别是 Shannon 离子半径、Cordero 共价型 [4], 半径或 Goldschmidt 金属型 [5], 半径；对于包含类金属的共价型元素对，若表中列有其金属半径，则使用该半径。键类型比例因子 s_{bond} 对离子型、共价型和阴离子–阴离子对取 0.80，对 Cl 和 S 等较大的阴离子取 0.70，对金属–金属对取 0.85； $d_{\min}$ 的上限为 2.8–3.0 埃。在含有阴离子 X的化合物中，金属阳离子对和相同类金属的元素对改用共边距离，即 $\sqrt{2}\,(r_A + r_X)\; s$，也就是两个多面体共边的阳离子之间的间距。此处 r_X 为最大阴离子半径；异种离子对的阳离子–阴离子接触距离取两个阳离子对应数值的平均值；金属阳离子取 $s = 0.85$ ，类金属取 0.80。包含类金属的异种阳离子对（例如 Zn_2SiO_4, 中的 Si–Zn）按共价型处理。间距绝不会小于该元素对的金属型或共价型接触距离。每个阴离子对应较多阳离子的化合物采用更短的接触距离：每个阴离子有七或八个阳离子近邻时，因子 $\sqrt{2}$变为 1.155（阳离子 70.5° 围绕阴离子）；有九至十二个近邻时则取 1（Li_2O、Li_3N）；超过十二个时采用金属接触距离（Fe_3C）。该类别还设定配位目标。在氧化物中，四面体形成元素（Si、Ge、Zn、B、Be 及其他类金属）的配位数为四，其他阳离子的配位数为五；金红石型二氧化物和高价氧化物中的其他阳离子配位数为六，萤石型二氧化物中的则为八。存在金属或高价阳离子时，氧化物配位目标的容差为一，否则为零（SiO_2, GeO_2, ZnO）。卤化物中的阳离子配位数为六，四面体形成元素则为四（BeF_2, $ZnCl_2$）；氮化物中的阳离子配位数为四，以上均无容差。大多数其他类别也采用精确目标；合金和纯金属的配位数为八，容差为二。随后，随机生成器采用种子坐标方案 [7]。每个新原子都会尝试放置在距仍可接受成键的种子原子 $d_{\min} \le d \le d_{\max}$ 处，其中 $d_{\max}$ 为成键截断距离。如果任意原子对的间距小于其 $d_{\min}$ ，或某个近邻因此变为过配位，则拒绝该位置。修复步骤会将配位数低于最低配位数（阴离子为二、阳离子为三）的原子移至仍可接受成键的原子旁边。若放置过程停滞，则在同一晶胞中重新打包原子；只有重新打包失败时才扩大晶胞。

表 S1：密度估算值的材料类别、半径表和堆积因子。

类别	半径	f_{pack}	示例
网络形成体氧化物	Shannon	0.50	硅O_2, 锗O_2, B_2O_3
金属氧化物	Shannon	0.52	Ga_2O_3, In_2O_3, InGaZnO $_4$, Al_2O_3
金红石型二氧化物	Shannon	0.66	钛氧$_2$, 锡氧$_2$, 铱氧$_2$
萤石型二氧化物	Shannon	0.63	铪氧$_2$, 锆氧$_2$
高价氧化物	Shannon	0.60	Sb_2氧$_5$, Ta_2氧$_5$, W氧$_3$
小阳离子氧化物	Cordero	0.35	BeO
卤氧化物	Shannon	插值[a]	BiOCl、$NaTaOCl_4$
卤化物	Shannon	0.58	Li_2ZrCl $_6$, CaF_2, AlF_3
大阳离子氮化物	Shannon	0.52	氮化铟、氮化锆、氮化铪、氮化铕
小阳离子氮化物	Shannon	0.62	氮化铝、GaN、TiN、氮化硼、硅$_3$N $_4$
氢化物	Shannon	0.55	氢化锂、MgH_2
硫属化物	Cordero	0.30	硫化锌、碲化镉、碲化锗、Sb_2Te_3
硫属化物玻璃	Cordero	0.23	锗硫$_2$, 锗硒$_2$, 砷$_2$硫$_3$, 砷$_2$硒$_3$
氮族化物	Cordero	0.32	GaAs, InP, GaSb
四面体元素	Cordero	0.30	Si, Ge
低配位元素	Cordero	0.28	C, P, As, Se
氢化网络	Cordero	0.28–0.32[b]	a-Si:H, a-C:H
共价碳化物	Cordero	0.32	碳化硅, B_4C
过渡金属碳化物	Goldschmidt; Cordero C	0.60	碳化钛、碳化钨
硼化物	Goldschmidt; Cordero B	0.60	钛B_2, 镁B_2
合金	Goldschmidt	0.60	NiTi、CuZr
默认	Shannon	0.52	超出该范围的组成上述类别

[a] 根据阴离子中的卤素分数，在无卤组成的系数与 0.58 之间进行插值。[b] 无氢主体的系数（0.30 a-Si:H、0.28 a-C:H、0.32 a-SiC:H），含氢量为 0.90埃。

S2. 密度估算与校准

密度估算值采用正文中的公式 (1)，使用材料类别对应的半径和堆积因子 f_{pack} （表 S1）。我们将随附的因子与表 S2中的 100 个目标密度进行了比较：其中 41 个是在非晶样品上测量的，另 59 个假定为晶体密度的 0.80 倍。因此，误差反映的是与这组混合数据的一致程度，而非与

100 个非晶态测量值。每种化合物都会反求得到一个因子$f_i = f_{\mathrm{code}}\,\rho_{\mathrm{target},\,i}/\rho_{\mathrm{est},\,i}$，拟合得到的类别因子则是该类别中 f_i 的中位数（表S3）。采用提供的因子时，平均绝对相对误差（即 $|\rho_{\mathrm{est}}/\rho_{\mathrm{target}} - 1|$的均值）为$11.9\%$ （图S1）。采用拟合因子进行留一交叉验证，即根据同一类别中其他成员的中位数预测每种化合物，在 99 种化合物上的误差为9.8% 。BeO 作为唯一的小阳离子氧化物，不纳入其中。

软件仓库中的脚本 examples/calibration/fit_packing_factors.py 及其输入文件 examples/calibration/packing_reference_densities.csv 可使用 AmorphGen v1.0.0 重现这些结果。拟合因子仅用于比较，不会替代随软件提供的因子。在两者差异最大的情况下，估计值存在系统性偏差：金属玻璃的起始值约比其实测密度低 18%（0.60 对比拟合值 0.73），而萤石型二氧化物则约高 24%（0.63 对比 0.51）。对于此类体系，应提供实测密度，或使用拟合因子。

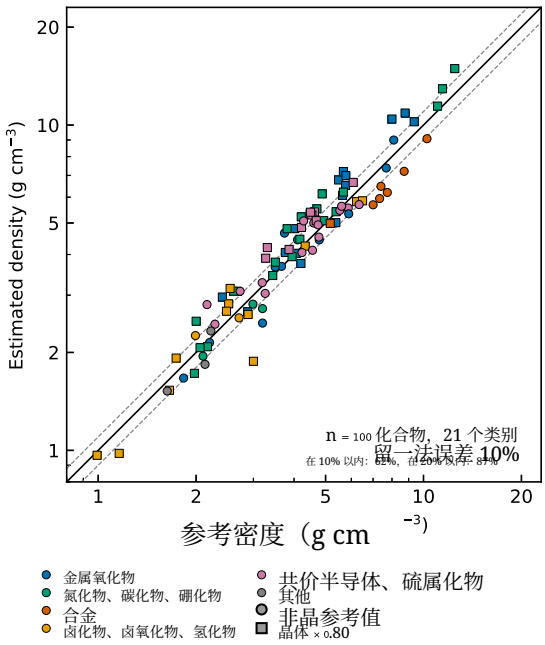

图 S1：100 种校准化合物的球堆积密度估算值与目标密度对比（圆形：非晶参照物；方形：晶体密度 × 0.80），按类别组着色；虚线表示 ±10%。数据和各类别的拟合结果见表S2 和S3。

S2.1. 参考密度

各行遵循表 S1 的材料类别顺序。所有密度列均使用 $\mathrm{g cm^{-3}}$。

表 S2：校准集的 100 个有来源的参考密度。类型：非晶态 (A) 或晶态 (C) 参考值；A 的目标 =参考值，C 的参考值为 $\times$ 0.80；估计值 =AmorphGen 对该组成的类别估计值（g $\mathrm{cm^{-3}}$）。手册值取自《CRC 手册》第 97 版 [8]。

化合物	类别	Kind	参考	目标	估计值	来源
As_2O_3	网络形成氧化物	A	3.74	3.74	4.65	[9]
B_2O_3	网络形成氧化物	A	1.83	1.83	1.67	[10]
GeO_2	网络形成氧化物	A	3.66	3.66	3.68	[11]
SiO_2	网络形成氧化物	A	2.20	2.20	2.15	[12]
TeO_2	网络形成氧化物	A	5.65	5.65	5.59	[13]
Al_2O_3	金属氧化物	A	3.20	3.20	2.46	[14]
Fe_2O_3	金属氧化物	C	5.25	4.20	3.75	[8]
In_2O_3	金属氧化物	A	4.78	4.78	4.44	[15]
$InGaZnO_4$	金属氧化物	A	5.89	5.89	5.33	[16]
MgO	金属氧化物	C	3.60	2.88	2.67	[8]
NiO	金属氧化物	C	6.72	5.38	5.01	[8]
Sm_2O_3	金属氧化物	C	7.09	5.67	7.20	[17]
Y_2O_3	金属氧化物	C	5.03	4.02	4.80	[8]
ZnO	金属氧化物	C	5.60	4.48	5.33	[8]
IrO_2	金红石型二氧化物	C	11.70	9.36	10.23	[8]
MnO_2	金红石型二氧化物	C	5.08	4.06	4.04	[8]
RuO_2	金红石型二氧化物	C	7.05	5.64	6.08	[8]
SnO_2	金红石型二氧化物	C	6.85	5.48	6.78	[8]
TiO_2	金红石型二氧化物	A	3.50	3.50	3.66	[18]
CeO_2	萤石型二氧化物	C	7.22	5.77	6.99	[8]
HfO_2	萤石型二氧化物	A	8.10	8.10	8.99	[19]
ThO_2	萤石型二氧化物	C	10.00	8.00	10.44	[8]
UO_2	萤石型二氧化物	C	10.97	8.78	10.89	[8]
MoO_3	高价氧化物	C	4.70	3.76	4.06	[8]
Nb_2O_5	高价氧化物	A	4.10	4.10	4.44	[20]
Ta_2O_5	高价氧化物	A	7.68	7.68	7.38	[21]
V_2O_5	高价氧化物	C	3.35	2.68	3.08	[8]
WO_3	高价氧化物	C	7.20	5.76	6.53	[8]
BeO	小阳离子氧化物	C	3.01	2.41	2.96	[8]
BiOBr	卤氧化物	C	8.12	6.50	5.85	[22]
BiOCl	卤氧化物	C	7.78	6.22	5.81	[23]
FeOCl	卤氧化物	C	3.61	2.89	2.62	[24]
LaOCl	卤氧化物	C	5.41	4.33	4.25	[25]
AlF_3	卤化物	C	3.10	2.48	2.68	[8]
BeF_2	卤化物	A	1.99	1.99	2.25	[26]
CaF_2	卤化物	C	3.18	2.54	3.15	[8]

化合物	类别	Kind	参考	目标	估计值	来源
LiCl	卤化物	C	2.07	1.66	1.53	[8]
MgF_2	卤化物	C	3.15	2.52	2.82	[8]
NaCl	卤化物	C	2.17	1.74	1.92	[8]
$ZnCl_2$	卤化物	A	2.71	2.71	2.55	[27]
HfN	大阳离子氮化物	C	13.81	11.05	11.44	[28]
ScN	大阳离子氮化物	C	4.30	3.44	3.45	[29]
YN	大阳离子氮化物	C	5.88	4.70	5.52	[30]
ZrN	大阳离子氮化物	C	7.09	5.67	6.22	[8]
AlN	小阳离子氮化物	C	3.25	2.60	3.09	[8]
BN	小阳离子氮化物	A	2.10	2.10	1.95	[31]
Be_3N_2	小阳离子氮化物	C	2.71	2.17	2.08	[8]
GaN	小阳离子氮化物	C	6.10	4.88	6.14	[8]
锗$_3$N$_4$	小阳离子氮化物	C	5.26	4.21	5.22	[32]
硅$_3$N$_4$	小阳离子氮化物	A	3.20	3.20	2.73	[33]
TiN	小阳离子氮化物	C	5.21	4.17	4.46	[8]
LiH	氢化物	C	0.78	0.62	0.54	[8]
MgH_2	氢化物	C	1.45	1.16	0.98	[8]
$NaAlH_4$	氢化物	C	1.24	0.99	0.97	[8]
TiH_2	氢化物	C	3.75	3.00	1.88	[8]
砷$_{40}$Te$_{60}$	硫属化物	A	5.60	5.60	5.63	[34]
CdS	硫属化物	C	4.83	3.86	4.15	[8]
CdTe	硫属化物	C	5.85	4.68	5.08	[35]
锗$_2$Sb$_2$Te$_5$	硫属化物	A	5.87	5.87	5.56	[36]
GeTe	硫属化物	A	5.53	5.53	5.47	[37]
PbS	硫属化物	C	7.60	6.08	6.66	[8]
ZnS	硫属化物	C	4.09	3.27	3.90	[8]
ZnSe	硫属化物	C	5.27	4.22	4.84	[38]
砷$_2$S$_3$	硫属化物玻璃	A	3.19	3.19	3.28	[39]
砷$_2$硒$_3$	硫属化物玻璃	A	4.56	4.56	4.12	[39]
GeS_2	硫属化物玻璃	A	2.73	2.73	3.08	[40]
锗硒$_2$	硫属化物玻璃	A	4.23	4.23	4.06	[40]
镓$_9$Sb$_{91}$	氮族化物	A	6.34	6.34	5.70	[41]
GaP	氮族化物	C	4.14	3.31	4.20	[8]
GaSb	氮族化物	C	5.61	4.49	5.40	[8]
InAs	氮族化物	C	5.67	4.54	5.29	[8]
InP	氮族化物	A	4.77	4.77	4.52	[42]
InSb	氮族化物	C	5.77	4.62	5.41	[8]
Ge	四面体元素	A	4.60	4.60	5.00	[43]
Si	四面体元素	A	2.29	2.29	2.44	[44]
As	低配位元素	A	4.74	4.74	4.93	[45]
C	低配位元素	A	3.26	3.26	3.04	[46]
P	低配位元素	A	2.16	2.16	2.81	[8]
Se	低配位元素	A	4.28	4.28	5.07	[8]
碳$_{60}$氢$_{40}$	氢化网络	A	1.63	1.63	1.52	[46]
碳$_{70}$氢$_{30}$	氢化网络	A	2.13	2.13	1.84	[46]
硅$_{91}$氢$_9$	氢化网络	A	2.22	2.22	2.33	[47]
B_4C	共价碳化物	C	2.50	2.00	2.49	[8]

化合物	类别	Kind	参考	目标	估计值	来源
Be_2C	共价碳化物	C	2.47	1.98	1.73	[48]
SiC	共价碳化物	A	2.99	2.99	2.82	[49]
TaC	过渡金属碳化物	C	14.30	11.44	12.92	[8]
TiC	过渡金属碳化物	C	4.93	3.94	3.94	[8]
WC	过渡金属碳化物	C	15.60	12.48	14.91	[8]
ZrC	过渡金属碳化物	C	6.73	5.38	5.41	[8]
LaB_6	硼化物	C	4.76	3.81	4.80	[8]
MgB_2	硼化物	C	2.57	2.06	2.07	[8]
TiB_2	硼化物	C	4.38	3.50	3.79	[8]
ZrB_2	硼化物	C	6.17	4.94	5.08	[8]
$铜_{64}Zr_{36}$	合金	A	7.74	7.74	6.21	[50]
CuZr	合金	A	7.33	7.33	5.94	[50]
$CuZr_2$	合金	A	7.00	7.00	5.69	[50]
$Fe_{80}B_{20}$	合金	A	7.40	7.40	6.48	[51]
$Ni_{60}Nb_{40}$	合金	A	8.72	8.72	7.21	[52]
NiTi	合金	C	6.46	5.17	4.99	[53]
Pd_4Si	合金	A	10.25	10.25	9.08	[54]

S2.2. 按类别划分的拟合堆积因子

拟合因子和误差按照与表 S1 相同的类别顺序分组。MAE 表示上文定义的平均绝对相对误差，以百分比表示。仅包含 BeO 的类别不报告留一法误差。

表 S3：各类别拟合结果：化合物数量（n，包括 n_{A} 非晶参照物）、代码中的堆积因子、反演因子中位数、该类别内的取值范围，以及留一交叉验证中该类别中位数的平均绝对误差（MAE）。对于卤氧化物，f_{code} 根据阴离子的卤素分数进行插值（表S1），四种化合物的值均为 0.55；对于氢化网络，该值为无氢主体的因子（a-C:H 为 0.28，a-Si:H 为 0.30）。

类别	n	n_{A}	f_{code}	f_{fit} (中位数)	范围	MAE
网络形成氧化物	5	5	0.50	0.51	0.40–0.55	8.0 %
金属氧化物	9	3	0.52	0.56	0.41–0.68	13.2 %
金红石型二氧化物	5	1	0.66	0.61	0.53–0.66	6.5 %
萤石型二氧化物	4	1	0.63	0.51	0.48–0.57	5.8 %
高价氧化物	5	2	0.60	0.55	0.52–0.62	5.8 %
小阳离子氧化物	1	0	0.35	0.28	0.28–0.28	–
卤氧化物	4	0	0.55	0.60	0.56–0.61	4.5 %
卤化物	7	2	0.58	0.52	0.47–0.63	7.9 %
大阳离子氮化物	4	0	0.52	0.49	0.44–0.52	8。4 %
小阳离子氮化物	7	2	0.62	0.58	0.49–0.73	17。3 %

类别	n	n_{A}	f_{code}	f_{fit} （中位数）	范围	MAE
氢化物	4	0	0.55	0.64	0.56–0.88	12.6 %
硫属化物	8	3	0.30	0.28	0.25–0.32	6。4%
硫属化物玻璃	4	4	0.23	0.23	0.20–0.25	10.9 %
氮族化物	6	2	0.32	0.27	0.25–0.36	9.1 %
四面体元素	2	2	0.30	0.28	0.28–0.28	1.7 %
低配位元素	4	4	0.28	0.25	0.22–0.30	18.0 %
氢化网络	3	3	0.28, 0.30	0.30	0.29–0.32	6.9 %
共价碳化物	3	1	0.32	0.34	0.26–0.37	21.5 %
过渡金属碳化物	4	0	0.60	0.56	0.50–0.60	13.4 %
硼化物	4	0	0.60	0.57	0.48–0.60	9。8 %
合金	7	6	0.60	0.73	0.62–0.75	7.1 %

S3. 结构系综与模拟设置

本节记录了正文第 3 节结构比较所用系综的设置。表 S4 列出了引擎和任务划分；重新生成的 a-Ga_2O_3 以及单独的 a-$InGaZnO_4$ EXAFS 所用系综详见第 S6.3 节和 S6.5节。

默认方案和示例覆盖设置。熔融淬火流程分为七个阶段：优化、低温平衡、加热、液体平衡、淬火、低温平衡和最终优化。默认低温和熔化温度分别为 300 和 3000 K，加热和冷却速率为 100 K ps^{-1}，时间步长为 0.5 fs，液体保持时间为 10 ps。默认情况下，加热和液体平衡均使用压强控制器。

正文第2.3节中的混合示例采用定体积、单精度分子动力学：在 3000 K 下运行 50 ps，以 100 K ps^{-1} 的速率冷却至 300 K，再在 300 K 下运行 10 ps，随后进行最终弛豫。熔融淬火示例将体系加热至 3000 K，并在定体积条件下保持液体 50 ps；随后对最多 20 个去相关快照进行淬火，并在 300 K 的 NPT 系综下平衡，然后进行弛豫。分析命令会检查参考文件中具有范围的每个描述符：a-Ga_2O_3, 密度、Ga–O键长、配位数和键角。

发散保护机制。 任何分子动力学阶段或弛豫在位置、能量或力变为非有限值、两个原子间距小于 0.5埃、两次检查之间每个原子的能量变化超过 10 eV、温度超过 10^5开尔文，或体积低于初始值的五分之一或高于初始值的五倍时，都会停止并显示提示信息。

积分与数值精度。 分子动力学采用朗之万恒温器，摩擦系数为 $0.01\,\mathrm{fs}^{-1}$，时间步长为 $0.5\,\mathrm{fs}\,(1\mathrm{fs}$（非晶砷采用 1 fs）。MACE 计算中，随机系综弛豫采用双精度；混合分子动力学、最终混合弛豫以及后续立方晶胞弛豫采用单精度。BKS 计算采用双精度：放置、固定晶胞弛豫和分子动力学通过 ASE [55] 在 CPU 上运行，后续立方晶胞弛豫则使用 TorchSim [56] 在 CPU 上运行。BKS对势参数、Ewald设置和短程排斥核见软件仓库中的 `examples/softwarex_bks_sio2.yaml`；晶胞弛豫命令位于 `examples/softwarex_run_sio2_bks_cubic.slurm`。

二氧化硅与砷的制备。 二氧化硅对比中，BKS 和 MACE-MPA-0 使用了相同的初始放置。BKS 使用 Ewald求和 [57]，截断距离为 10 埃；其固定晶胞弛豫和退火均在 2.20 g cm^{-3} 的生成密度下进行。MACE-MPA-0 的退火采用 2.12g cm^{-3} 的弛豫后密度。正文表2中的密度是在分别进行立方晶胞弛豫后得到的。因此，这项对比中的势函数和退火密度均不相同。

五个 2000原子非晶砷晶胞以 4.74 g cm^{-3} [45] 的实测密度放置，配位数目标为 3（--target-cn As=3，这也是 v1.0.0 中的自动目标）。混合路线在 1500 开尔文下退火 50 ps，时间步长为 1 fs，并以 100 K ps^{-1} 的速率淬火，随后在 300 开尔文下运行 10 ps。整个 72 ps 方案比 Liu等人 [58], 的方案短约 20 倍；他们的 2000 原子晶胞通过 buildcell 以 4.74 g cm^{-3} 的密度放置，随后使用其经 r^{2}SCAN 训练的 MACE 势进行约 1.4 ns 的熔融淬火动力学模拟。他们分析了一个随论文存档的此类模型，并根据十次独立运行估计不确定性。我们的参考值根据已存档结构计算得出。

随机种子与任务分配。 随机系综由全局种子 2026 生成。氧化物混合结构采用前 20 个弛豫后的结构（索引 0–19）。每个任务 T 使用随机种子 $2026 + T$：对于 a-Ga_2O_3，a-TiO_2，和 a-$InGaZnO_4$，任务 1 和 2 各处理 10 个结构；对于使用 MACE-MPA-0 的 a-SiO_2 ，任务 1–4 各处理 5 个结构；对于 BKS，任务 4–23 各处理 1 个结构。这些分配在 examples/softwarex_run_oxide.slurm 和 examples/softwarex_run_sio2_bks.slurm 中实现。非晶砷混合结构使用随机种子 2026。非晶砷 MACE-MPA-0 混合结构采用与特定体系的 MACE计算相同的放置，并使用 MACE-MPA-0 再次弛豫。

对于 BKS 随机系综，任务 0–3 分别生成了索引 0–24、25–

49、50–74 和 75–99，并使用相同的全局种子。上述依赖任务的随机种子适用于后续的混合运行。

表 S4：结构系综的引擎和任务划分。每个条目给出任务数 ×每个任务的结构数；$4+1$ 表示两个作业，其中一个包含四个结构，另一个包含一个结构。表S5 中的 BKS GPU 计时比较与此处列出的结构系综相互独立。

体系	势函数	系综	引擎；任务数 ×结构
非晶 Ga_2O_3	MACE-MPA-0	随机 + 弛豫	TorchSim GPU； 1×100
		混合	TorchSim GPU； 2×10
a-钛氧$_2$	MACE-MPA-0	随机 + 弛豫	TorchSim GPU； 1×100
		混合	TorchSim GPU； 2×10
非晶 $InGaZnO_4$	MACE-MPA-0	随机 + 弛豫	TorchSim GPU； 1×100
		混合	TorchSim GPU； 2×10
非晶态 SiO_2	MACE-MPA-0	随机 + 弛豫	TorchSim GPU； 1×100
		混合	TorchSim GPU； 4×5
非晶态 SiO_2	BKS	随机 + 弛豫	ASE CPU； 4×25
		混合	ASE CPU； 20×1
a-As	MACE（Liu 等）	随机 + 弛豫，混合	TorchSim GPU； 1×5
a-As	MACE-MPA-0	随机 + 弛豫	TorchSim GPU； 1×5
		混合	TorchSim GPU； $4+1$
非晶砷（全部四个）两者		立方晶胞弛豫	TorchSim GPU； 4×5
非晶态 $_2$ SiO	BKS	立方晶胞弛豫	TorchSim CPU

S4. 结构分析和其他比较

邻居截断距离和二聚体.. 邻居截断距离设定为系综中每个部分 $g(r)$ 的第一个极小值：非晶 Ga_2O 中的 Ga–O 为 2.47 埃，Ti–O 为 2.61 埃；a-InGaZnO 中的 In–O、Ga–O 和 Zn–O 分别为 2.73、2.49 和 2.55 埃；硅–氧为 2.24 埃。这些氧化物数值适用于 MACE-MPA-0 混合系综。不同系综之间的截断距离有所差异：In–O 为 2.73–2.81 埃，硅–氧为 2.13–2.24 埃，其中包括 BKS。对于非晶砷，使用 Liu *et al.* [58]的 2.9 埃截断距离。配位数、键角和环均使用这些截断距离。如果 O–O 对之间的距离小于其最小放置间距的 0.85 倍，则计为二聚体。对于此处的氧化物，O–O 最小间距为 2.24 埃，因此阈值为 1.9 埃。

环统计.. 每个本原环（网络中不存在捷径的环）只计数一次，其中阳离子作为节点，由氧原子桥接（非晶砷中则是 As 原子彼此成键）。对于非晶 Ga_2O_3, 、非晶 TiO_2, 和非晶 $InGaZnO_4$, 12 ，环尺寸最多为 8 个原子；对于非晶态 SiO_2, 和非晶砷，最多为 10 个原子。计数按节点报告。这些是绘图脚本采用的设置；默认情况下，--rings 会为每条网络边指定其最短环，最多为 12 个原子。在除非晶态 SiO 以外的氧化物中，

一个与三个阳离子成键的氧原子会闭合成一个三元环，因此它们的环计数主要反映氧配位数。

结构因子。 $S(q)$直接根据每个晶胞的倒易晶格矢量计算，并采用 Faber–Ziman [59] X射线加权以及依赖于 q的 Waasmaier–Kirfel 形状因子 [60], ，以 0.04 埃$^{-1}$ 为分箱宽度，并使用 0.08 埃$^{-1}$ 的高斯函数进行平滑；随后对每个系综中的 20 个结构取平均（非晶砷仅取全部 5 个结构）。低于 $1.3 \times 2\pi/L$ 的分箱将被舍弃；对于 648 个原子的非晶态 SiO_2晶胞（$L = 21.4$埃），这会留下 $q \geq 0.38$ 埃$^{-1}$。这些是绘图脚本使用的设置；amorphgen --analyse 的默认设置（0.05 埃$^{-1}$ 分箱和平滑，不进行低-q 截断）会得到略有不同的曲线。采用团簇分析中的 0.10 埃$^{-1}$ 平滑后，非晶态 SiO_2 第一尖锐衍射峰的高度变化最多为 0.02，位置变化最多为 0.08 埃$^{-1}$。

统计不确定性.. 每个独立结构为一个描述符贡献一个均值，这些结构均值的权重相同。标准误为 SE $= s/\sqrt{n}$，其中 s 是结构均值的样本标准差，而 n 是参与计算的结构数量。该

95 t $\bar{x} \pm t_{0.975\,n-1}$ $W_{95} = \%$

$2t_{0.975\,n-1}$ 0.004

Student- 置信区间为 . SE，其总宽度为 . SE。报告的区间总宽度中，平均键长低于 Å，平均键角为 1° ，平均配位数为 0.05；这些数值适用于五晶胞非晶砷系综和氧化物系综。这些区间量化的是系综均值的不确定性；单个键长、键角或位点配位数的离散程度则是另一个量。EXAFS 所用的自助法区间详见第 S6节。

退火过程中的位移.. 在 50 ps 的退火过程中，a-Ga_2O_3, a-TiO_2, 和 a-$InGaZnO_4$, 10中的原子平均未包裹位移为 12–13 埃；在 1500 K 下，非晶砷中的位移为 11 埃，而在 a-SiO_2 中，使用任一势函数时位移仅为 2.4–3.5 埃。

S4.1. 额外结构比较

数值描述符汇总于正文的表1和表2中。以下比较提供了参考来源以及图3和图4的更多细节。

金属氧化物.....参考文献 [61] 中的 20 个非晶 Ga_2O_3 参考结构通过使用 Blanco等人 [62] 的经典势进行熔融淬火制备，并使用 PBE0-TC-LRC 进行优化。两个 AmorphGen 系综都再现了其 Ga 配位情况以及四配位和五配位位点的比例，但 Ga–O键长度约长 0.03埃。两个系综的 X射线 $S(q)$ 均与参考数据集和实测薄膜 [15] 从 2.5 埃$^{-1}$ 起的峰位相符，

但第一峰低于15–20 % 。对于非晶 TiO_2, ，第一峰位于 1.95，而2.28埃$^{-1}$ 测量值为 [63]。

a-$InGaZnO_4$ 扩展X射线吸收精细结构参考配位数为 5.1 ± 0.7(铟)、3.9 ± 0.6(镓)和 3.7 ± 0.5 (锌) [16]。计算得到的金属–O距离比测量值长 0.06–0.08 埃，这与 MACE-MPA-0 所依据的投影缀加波数据所预期的方向一致 [64]; 退火并未消除这一差异。球体堆积估算得出的 a-Ga_2O_3 和 a-$InGaZnO_4$ 密度分别为 4.44 和 5.33 g cm^{-3}，比测量值低 7–13%；a-TiO_2 则略高于其薄膜密度范围（表 S2）。

二氧化硅..... 使用 MACE-MPA-0 时，每个随机 $+$弛豫结构都含有 O– O 二聚体；退火后，20 个晶胞中有 16 个不再含有二聚体。退火前低-q 处的上升表明存在密度涨落。文献中的 BKS二氧化硅模拟以纳秒为尺度进行冷却 [65]；我们未检验此处采用的较短方案是否会限制第一尖锐衍射峰，其成因仍有争议 [66]。

砷.....采用 Liu 等人 [58], 的势函数进行弛豫，单独这一操作便能再现其模型中 2 Å^{-1}以上的 $S(q)$。MACE-MPA-0 的砷–砷键长出 0.04 Å，四配位位点数量则是其两倍（16%，而非 8%）。采用特定体系势函数时，退火使超出参考值的四配位位点减少一半，并将五元环数量从每个原子的 0.14 个提高到 0.17 个，而参考值为 0.22。采用 MACE-MPA-0 时，退火后仍有 14% 的砷为四配位。经过立方晶胞弛豫后，四个系综的密度均比实验值低 3–7%，且与参考模型相差不超过 0.14 g cm^{-3}。采用特定体系势函数退火的五个晶胞，其第一尖锐衍射峰高度介于 0.38 至 0.44 之间，低于沉积参考模型（本文计算值为 0.51；参考文献 [58]中的十次运行结果为 0.56 ± 0.01），也低于参考文献 [45], 根据 X射线与中子联合数据测得的 0.55（数据由参考文献 [58]数字化）。

S5. 结构生成的计算成本

表 S5 列出了正文第3节中计算的运行时间，数据取自作业日志。系综定义和任务划分见第S3节。GPU作业在一块 NVIDIA A100-SXM4 GPU 和四个 Intel Xeon Ice Lake核心上运行。CPU 上的 BKS作业在四个 Intel Xeon Platinum核心上运行；正文中分析的 BKS 结构来自这些运行。标记为 GPU 的 BKS 行使用批处理引擎（Ewald求和）重复相同的方案，以便比较，正文中未使用这些结果。

表 S5：按体系、势函数和路径统计的运行时间。结构列中括号内的数字表示每个作业包含的 × 个结构；两个运行时间或一个范围表示各个独立作业的运行时间。每结构时间是各作业运行时间之和除以结构数量，而非并行运行的作业所耗费的时间。对于随机 +弛豫，运行时间包括在 CPU 上的放置时间，括号中的时间则是在图形处理器上的弛豫时间。

体系	原子	势函数	路径	结构	硬件	运行时间	每个结构
a-镓$_2$氧$_3$	400	MACE-MPA-0	随机 + 弛豫	100	GPU	0.8 小时（0.6 小时）	28 s
			混合	20 (2 × 10)	GPU	20.1、21.4 小时	2.1 小时
a-钛氧$_2$	270	MACE-MPA-0	随机 + 弛豫	100	GPU	1.9 小时（0.5 小时）	69 s
			混合	20（2 × 10）	GPU	17.5，17.7 小时	1.8 小时
a-InGaZnO$_4$	350	MACE-MPA-0	随机 + 弛豫	100	GPU	1.4 小时 (0.5 小时)	50 s
			混合	20 (2 × 10)	GPU	17.4, 22.7 小时	2.0 小时
非晶态 SiO$_2$	648	MACE-MPA-0	随机 + 弛豫	100	GPU	3.1 小时（2.0 小时）	1.9 分钟
			混合	20 (4 × 5)	GPU	17.6–18.7 小时	3.7 小时
非晶态 SiO$_2$	648	BKS	随机 + 弛豫	100 (4 × 25)	CPU	2.1–2.9 小时	6 分钟
			混合	20（20 × 1）	CPU	30–41 小时	30–41 小时
非晶态 SiO$_2$	648	BKS	随机 + 弛豫	100	GPU	1.2 小时（13 分钟）	42 s
			混合	20 (1 × 20)	GPU	16.6 小时	50 分钟
a-As	2000	MACE（Liu 等人）	随机 +弛豫	5	GPU	20 分钟（5 分钟）	4 分钟
			混合	5	GPU	10.3 小时	2.1 小时
a-As	2000	MACE-MPA-0	随机 +弛豫	5	GPU	23 分钟（8 分钟）	5 分钟
			混合	5（4 + 1）	GPU	18.2 小时	3.6 小时
a-As	2000	both	立方晶胞弛豫	每组 5 个	GPU	2.5–9 分钟	<2 分钟

S6. EXAFS 计算

本节介绍正文图 5 背后的计算。a-镓$_2$氧$_3$ 系综按照结构基准设置重新生成；a-InGaZnO$_4$ 谱使用在固定体积下单独生成的更大系综。这些区别详见第 S6.3 节和 S6.5节。

S6.1. FEFF 和傅里叶变换设置（协议 *P*）

正文图 5 中的所有谱均使用 FEFF8.5L 计算，该程序来自其开源 Feff8L 发行版 [67], ，通过 AmorphGen FEFF 接口调用。计算使用的是 v1.0.0 发布前冻结的接口；已发布的模块会生成字节完全相同的 FEFF 输入文件，并得到相同的平均谱（数据存档）。每个吸收原子都位于从周期性晶胞（含周期镜像）中截取的 10 Å 原子簇中心。势函数为非自洽势（Hedin–Lundqvist 交换，EXCHANGE 0），每种元素使用一个势函数，晶胞原子数取自晶胞（--feff-stoichiometry structure）；路径的有效半路径长度限制为 8 Å（RPATH 8），最多四条腿（NLEG 4），并设定 CRITERIA 1.0 0.5； $S_0^2 = 1$ 不添加德拜–沃勒因子，因此谱仅包含结构的静态无序。$\chi(k)$ 先对每个晶胞中抽样的位点取平均，再对各晶胞等权平均；随后在间距为 0.05 Å^{-1} 的网格上进行变换，并使用 3 至 12 Å^{-1}（$dk = 1$ Å^{-1}，2048 个点）的汉宁窗，权重设置为实验对比中所用的 a-Ga$_2$O$_3$ 的 k^2 和 a-InGaZnO$_4$，的 k^3。

S6.2. 与 FEFF 参考计算的验证

FEFF8.5L [67] 随附的三种晶体参考结构由 AmorphGen 根据其晶格重建并重新计算：NiO（镍K边，岩盐结构，$a = 4.1684$ Å）、UO_2（U L_3, 萤石结构，$a = 5.4682$Å）和铜（铜K边，面心立方结构，$a = 3.61$ Å, 自洽势）。在 $k = 2$–18 Å^{-1}范围内，$\chi(k)$ 与相应参考值之间的相对均方根差分别为 0.0012%、0.0014% 和 0.0012%。如果不提供晶胞原子数，FEFF 会根据有限团簇推断原子数，此时 NiO 和 UO_2 的谱与参考值分别相差 2.8% 和 4.6%；因此，非晶计算使用 --feff-stoichiometry structure。使用 pytest --run-feff 和 FEFF 可执行文件运行时，AmorphGen测试套件中的 EXAFS测试包含这些参考结构。

S6.3. a-Ga_2O_3：系综、光谱拟合和能量参考

正文表1中的100个随机 + 弛豫晶胞，使用 AmorphGen v1.0.0、随机种子 2026 以及正文第2.3节的设置（--retry-mode none，TorchSim，每批10个，双精度，立方晶胞，0.05 eV 埃$^{-1}$）重新生成。重新生成的系综密度为 4.773 ± 0.051 g cm^{-3}，Ga–O距离为1.9331 埃（截断距离为 2.47 埃），CN(Ga)为4.47，与表中数据一致。这些晶胞与原始晶胞相似，但并非完全相同：AmorphGen教程中提供的十个原始晶胞里，有九个重现后的中位原子位移低于0.05 埃，第十个则弛豫到了附近的一个极小值。

均值 $k^2\chi(k)$拟合了 Reis等人 [68] 在$k = 2.5$–12埃$^{-1}$范围内的沉积态薄膜数据，拟合参数包括比例因子、偏移量和能量位移 ΔE_0，以及额外的无序项 $\Delta\sigma^2$。归一化平方残差为 0.043，而仅拟合比例因子和偏移量时为 0.68（正文图 5a）。第S6.4 节测试了该拟合对 FEFF 设置的敏感性。

计算值和测量值的谱对应于不同的能量参考。计算得到的 $\chi(k)$ 以非自洽 FEFF势的阈值为能量参考，而测量谱以背景扣除过程中选定的吸收边能量为参考；Reis 等人没有说明该值。ΔE_0 吸收了这一偏移量，并且由于二者相关，任何相位差也可能来自键长。为将二者分离，将采用协议 P 计算的 β-Ga_2O_3 晶体 [69]，（常规晶胞中的全部八个 Ga 位点，因此四面体位点和八面体位点的权重相等）以相同方式拟合到同一图中的退火薄膜，该薄膜包含 β-Ga_2O_3 晶粒，拟合范围为$k = 2.5$–10.5 Å^{-1}。该范围在 10.9 和 11.45Å^{-1}附近的两个窄尖峰之前结束；Reis 等人报告称，这两个尖峰与该谱中的布拉格衍射伪影相吻合。晶体需要 $\Delta E_0 = 8.0$eV 和 $\Delta\sigma^2 = 0.0043$Å^2，归一化平方残差为 0.15（若包含尖峰则为 0.43，拟合范围截至

12 Å^{-1}）。晶体的结构已知，因此非晶拟合中的大部分偏移来自能量参考。在相同范围内，100 个晶胞与退火薄膜拟合需要 8.7 eV（残差为 0.36）；在完整范围内，与沉积态薄膜拟合需要 11.6 eV。因此，剩余的 3 eV 位于两条测量谱之间，即位于 E_0 或其第一壳层距离之间，而这项检查无法将二者区分开来。

晶体的额外 σ^2 为 0.0043 埃^2, ，这大致相当于室温下预期的热 Ga–O 无序，因为晶体计算中除两个 Ga 位点外不存在其他无序。静态非晶模型相对于沉积态薄膜仅需 0.0012 埃^2 。如果两种薄膜中的热无序相近，那么模型的静态第一壳层无序就比薄膜宽约 0.003 埃^2, ，这与其四配位和五配位 Ga（55% 和 41%）的混合情况相符。这一结论依赖于上述假设、并不完美的晶体拟合，以及 $\Delta\sigma^2$ 与 ΔE_0 相关并吸收其他任何形状差异这一点。

S6.4. 收敛性与拟合灵敏度

通过 $D_R(A,B)$ 比较两种变换 A 和 B ，$= \|\mathrm{FT}_A - \mathrm{FT}_B\|/\|\mathrm{FT}_B\|$, 复变换的范数取自$0 \le R \le 4$埃（未经相位校正）。目标是在表 S6 的数值细化和采样检查下，变化低于 2%。判据和阈值在这些运行开始前已确定，但此前对 60 个 Ga 位点的初步筛查显示，随着路径长度增加，第一个目标——原始 $k^2\chi(k)$ 在 3–12 埃$^{-1}$范围内变化 2%——无法达到，因为在 R中，变化在 4 埃以外。基于这一原因选择了该窗函数。超过此阈值的缩减位点测试促使我们在报告的谱中使用每个吸收原子位点。相对于协议 P，精修采用了更严格的路径滤波器（CRITERIA 0.25 0.125，F）、RPATH 10 埃（R）、NLEG 6（L）以及 12 埃团簇（C）。位点采样将位点的嵌套子集与每个晶胞的全部位点进行比较（S1），并给出 1000 个随机子集的第 95 百分位数（S2）。晶胞采样（N1）是对晶胞进行 1000 次随机对半划分后，两半晶胞之间 D_R 中位数的一半；对于独立晶胞，它估计所有晶胞均值的采样误差。

表 S6：EXAFS变换在 $R \leq 4$埃范围内的收敛性， D_R (%)。a-Ga_2O_3：正文表1中 100 个晶胞的所有行（16000 个 Ga吸收原子；每个晶胞 160 个位点中的 120 个位点采用 S1 和 S2），C 除外。a-$InGaZnO_4$：F、R、L 和 C 分别在 20 个晶胞中使用每种元素的 $\times$ 10 个位点；S1 和 S2 在 56 个晶胞中每个晶胞 50 个位点中的 40 个位点上进行；N1 在 504 个晶胞上进行。

		a-Ga_2O_3	a-InGaZnO$_4$		
Row	Test	Ga	Zn	Ga	In
F	路径滤波器	0.50	0.40	0.48	0.80
R	路径长度	0.11	0.10	0.07	0.01
L	散射阶数	0.51	0.11	0.24	0.04
C	簇半径	0.00[c]	0.00	0.00	0.00
S1	嵌套位点	0.42	1.94	1.60	1.87
S2	位点子集，第95百分位	0.72	3.81[a]	2.68[a]	3.08[a]
N1	晶胞	0.99[b]	1.81	1.25	1.45

[a] 高于 2 %，因此每个晶胞中每种元素的全部 50 个位点均用于每次拟合，从而消除了在晶胞内对子采样吸收原子位点造成的误差。 [b] 100个晶胞，每个晶胞均包含全部 160 个 Ga 位点（两半各 50 个）。较早的一个 20元胞系综给出的结果为 2.11 %。 [c] 对于该 20元胞系综，12 埃团簇给出的谱与 P 相同，因为 RPATH 已经限制了路径。

该判据涵盖变换中截至 4 埃的部分。完整的 k 空间谱尚未收敛：对于 a-Ga_2O_3, ，更严格的滤波器和更长的路径会使 3–12 埃$^{-1}$ 范围内的 $k^2\chi(k)$ 变化 4.9% 和 7.5%（相对均方根），这是由 R中 4 埃以外的特征所致。由于与实验的比较采用 k 空间拟合，因此对 100 个晶胞（全部 16 000 个位点，表 S7）分别使用每种精修重新进行了拟合。残差变化小于 0.002， ΔE_0 变化小于 0.07 eV，但$\Delta\sigma^2$ 最多降低 0.000 19 埃^2（R），约为其晶胞采样区间的三倍。因此，仅由 FEFF设置导致的拟合 $\Delta\sigma^2$ 不确定度约为 ± 0.0002埃^2 。

表S7：采用各 FEFF 设置对参考文献 $_2$的 a-Ga_3 O [68] 谱进行拟合（正文表1中的 100 个晶胞，每个晶胞均包含全部 160 个 Ga 位点）。括号中给出对晶胞进行 300 次配对自助法重采样所得的、相对于 P 的差值95% 区间。C 不再重复列出（见表S6）。

设置	残差	ΔE_0 （电子伏特）	$\Delta\sigma^2$ （10^{-4}埃^2）
P	0.0431	11.56	12.2
F	0.0433	11.55 [−0.013, −0.005]	11.6 [−0.59, −0.46]
R	0.0416	11.51 [−0.052, −0.041]	10.2 [−2.00, −1.84]
L	0.0421	11.61 [+0.051, +0.064]	12.0 [−0.23, −0.16]

FEFF8.5L 在最终求和中最多保留 15 000 条路径，超出的部分会在不发出警告的情况下被丢弃；AmorphGen 会拒绝此类运行结果，而本文中的运行结果均未接近该上限（最多为 10 319 条路径）。a-Ga_2O_3 的 F、R 和 L 行首先在较早的 20元胞系综上进行了评估（0.49、0.11 和 0.54%），

其密度较低（4.63g cm^{-3}）。100 元胞的结果得出了相同的收敛性结论。

S6.5. a-InGaZnO$_4$：系综与密度控制

这504个 a-InGaZnO$_4$ 晶胞（含有 In$_{50}$Ga$_{50}$Zn$_{50}$O$_{200}$，350 个原子）由 AmorphGen v1.0.0 以 6.10 g cm^{-3} 的密度放置，所用随机种子为2027–2035。随后使用 MACE-MPA-0 以双精度进行弛豫，收敛阈值为 0.05 eV Å^{-1}，并固定晶胞。凡是放置时需要更大晶胞或弛豫未收敛的结构均予以剔除（清单见数据存档）。该系综独立于正文表1中的100个晶胞；后者采用可变立方晶胞进行弛豫。在 6.10 g cm^{-3}的密度下，使用 MACE-MPA-0 计算时，这些晶胞承受约5 GPa的压力。将其中56个晶胞在零压力下弛豫（密度变为 5.32 g cm^{-3}），会使复数变换改变13–23%，且变化主要体现在相位上；但第一壳层峰值的移动最多只有 0.003 埃，而 3.36 埃处铟特征的高度为0.093，与相同56个晶胞在固定体积下的0.092相近。

正文表1中弛豫后密度下的晶胞也进行了测试。经过立方晶胞弛豫后，另一个包含100个晶胞的随机 +弛豫系综（5.39 ± 0.15g cm^{-3}）中，有36个晶胞的密度落在该表所列范围 5.53 ±0.07 g cm^{-3} 内（均值为 5.530 ± 0.037g cm^{-3}）。它们的铟、镓和锌配位数分别为5.31、4.42和4.16，M–O距离分别为2.209、1.930和2.047 埃。这两组数值均与该表中的数值吻合。对其中所有锌、镓和铟位点应用协议 P 后，得到的相位校正第一壳层峰值分别为1.977（锌）、1.874（镓）和2.128 埃（铟），与504 个单元的对应值相差不超过0.008 埃。铟特征，即3.20–3.50 埃区间内的均值，为0.099 [0.077–，而504 个单元为0.132]；镓旁瓣保持不变（在1.35和2.39 埃处分别为0.220和0.210）。与零压对照一样，整体变换的差异更大：两组均值之间的 D_R 分别为6.1%、15.1%和9.0%（铟、镓、锌），而36个晶胞的采样 N1 分别为4.8%、3.9%和6.7%。由于 N1 高于2%，504 个单元仍作为报告系综。

S6.6. a-InGaZnO$_4$：与实验对比

相位校正变换。 主要比较对象是超高真空溅射薄膜的变换，该薄膜含有 1 % 氧$_2$，见 Kumara 的图4 等人 [16]，，采用 k^3加权和汉宁窗； k 范围未予说明。变换经过相位校正：图4以 R为横坐标，其正文将第一壳层峰置于1.97、1.87和 2.12埃处，并将其归属于拟合得到的锌–氧、Ga–O键和铟–氧距离。从该图读得的极大值为1.934（锌）、1.867（镓）和 2.142埃（铟）。为匹配这些结果，窗函数化的 $k^3\chi(k)$在变换前乘以 $\exp(-i\varphi(k))$，其中 φ 相位取自 FEFF8.5L 中最短金属–氧单散射路径，并对每种元素的

20个位点取平均。这样第一壳层分别移动了 $+0.43$（锌）、 $+0.43$（镓）和 $+0.50$埃（铟）。不对称配位壳层的相位校正极大值低于其均值距离：对于表1（S6.5节）密度下的36个晶胞，1.977（锌）、1.874（镓）和2.128埃（铟）处的极大值，比2.047、1.930和2.209埃的平均 M–O 距离低0.06–0.08埃。因此，极大值可以与实验结果一致，而该表中的均值距离却长于拟合值。由于实测 k 范围未知，弱特征和旁瓣（其取决于窗函数）仅作近似比较（表 S8）；而接近1.4埃的锌特征取决于实验的背景扣除，因此虽列出但不作解释。这些区间仅涵盖晶胞采样。镓在1.35和2.39埃处的旁瓣位于第一壳层两侧，其高度强烈依赖窗函数，因此正文中未予讨论。实测谱包含热无序，而计算中未包含热无序。接近3.3埃的金属–金属路径通常具有比第一金属–O壳层更大的热 σ^2 ，因此热无序最有可能使计算得到的铟特征相对于第一壳层降低，并扩大其与实验结果之间的差距；这一点未作计算。

表 S8：相位校正后的 a-InGaZnO$_4$ 特征（504 个晶胞），与从参考文献 [16] 的图 4 中读取的结果进行比较。高度以第一壳层极大值为基准；括号内为对晶胞进行 1000 次自助法重采样得到的 95%区间。

Edge	特征	计算值	测量值
Zn	第一壳层极大值（埃）	1.969	1.934
Ga	第一壳层极大值（埃）	1.871	1.867
In	第一壳层极大值（埃）	2.128	2.142
Ga	位于 1.35 埃的旁瓣	0.224 [0.223–0.225]	0.303
Ga	位于 2.39 埃的旁瓣	0.210 [0.207–0.213]	0.282
Zn	1.35 埃附近的特征	0.223 [0.221–0.224]，在 1.47 埃	0.446
Zn	接近 3.0 埃的特征	0.127 [0.114–0.141]	0.12
Ga	位于 3.10 埃处的特征	0.134 [0.124–0.146]	0.024（无）
In	约 2.6 埃处的肩峰	0.186 [0.182–0.191]	0.269
In	约 3.3 埃处的局部最大值	0.112 [0.099–0.126]	0.236
In	3.20–3.50 埃范围内的均值	0.093 [0.085–0.103]	0.208

未校正的变换。Jia等人 [70],的第二部薄膜的变换为相位校正提供了独立验证，并检验了铟特征。图中展示了由 1:1:1 靶材溅射制备的薄膜的铟、镓和锌 K 边变换；薄膜在生长后呈非晶态，并在空气中 300 和 600 °C 下处理 1 小时。变换未进行相位校正（k^3，汉宁窗，铟和锌的范围为 $k = 2$–10 埃$^{-1}$，镓的范围为 3–11 埃$^{-1}$），且未进行 $\chi(k)$。我们从他们的图 1 中读取数值，精度约为第一壳层高度的 0.03，并将每条曲线的最低点设为零；随后以相同权重对 504 个晶胞的均值 $\chi(k)$ 进行变换

并采用相同的窗函数（假定为 $dk = 1$埃$^{-1}$ ），同样未进行相位校正。其第一壳层峰值分别为 1.64（铟）、1.40–1.42（镓）和 1.42–1.53 埃（锌），与计算值 1.56、1.41 和 1.47 埃相当。它们比参考文献 [16], 中的数值低 0.40–0.51 埃，与上述 FEFF 位移相近；而参考文献 [16]中的峰值与 Jia 等人拟合的距离（2.13–2.16、1.87 和 1.97 埃）相差不超过 0.04 埃，符合相位校正变换的预期。这些薄膜中的铟特征峰位于 2.95–3.06 埃。在 2.7–3.0 埃范围内（即 3.20–3.50 埃窗口未经校正时对应的范围），其均值分别为 0.17、0.10 和 0.17（生长后、300 和 $600\,^{\circ}$C），而计算值为 0.08。能量位移 ± 12eV 最多使计算值改变 0.01，并使计算得到的铟第一配位壳层移动至多 0.1 埃。因此，未进行相位校正时，计算得到的特征强度过弱，尽管测量高度因薄膜而异。计算得到的镓 K 边在约 2.0 和 2.4 埃处的波瓣与生长后薄膜的波瓣相符（分别为 0.16 和 0.12，对比 0.17 和 0.13）；但参考文献 [70]图 1(d) 中仅第一配位壳层拟合也出现了相同波瓣，因此它们是变换窗口造成的波纹，并非额外的配位壳层。在锌 K 边，2 埃以外的噪声约为第一壳层的 0.15，无法进行比较；而约 1 埃处的特征（即约 1.4 埃处特征未经校正时对应的特征）在不同薄膜间介于 0.27 至 0.55，符合其受背景扣除影响的预期。这里只使用从图中读取的数值。

倒易空间中的拟合。在此处比较的实验数据集中，Revenant等人 [71] 提供了另一种薄膜的测量值：溶胶-凝胶法制备的多孔 a-InGaZnO$_4$ $\chi(k)$，其 In:Ga:Zn $= 3$比例为 0.4:2，退火后形成富镓和富锌纳米团簇。我们使用了他们图1b和2b中在 $450\,^{\circ}$C 下退火的薄膜数据，并像处理 a-Ga$_2$O$_3$, 那样，对 504 个单元的均值 $k^2\chi(k)$进行拟合，拟合参数包括比例因子、偏移量、能量位移，以及在 $k = 2.5$–12 埃$^{-1}$ 范围内附加的 σ^2 （正文图 5c）。拟合得到的能量位移分别为 9.9 eV（Zn）和 13.0 eV（Ga），与 a-Ga$_2$O$_3$,的 11.6 eV 相近；附加 σ^2 分别为 0.0013 和 0.0008 埃^2, ，比例因子分别为 0.67 和 0.78，归一化平方残差分别为 0.19 和 0.15；相比之下，仅使用比例因子和偏移量时，归一化平方残差分别为 0.73 和 0.91。由于该薄膜的组成和结构与模型不同，此比较仅检验第一配位壳层振荡的相位和频率。目前没有测量得到的 In K边 $\chi(k)$数据，因此图 5c 展示的是未作任何位移的计算 In谱。

S6.7. a-InGaZnO$_4$：退火晶胞

我们通过对零压对照所用的 56 个晶胞应用正文中的混合路线，检验退火是否会增强铟特征；计算从这些晶胞的固定体积结构开始。计算采用 AmorphGen v1.0.0、MACE-MPA-0 和单精度分子动力学，时间步长为 0.5 fs。该

方案包括在 3000 K 下运行 50 ps、以 100 K ps^{-1}的速率淬火，以及在 300 K 下运行 10 ps，随后弛豫至 0.05 eV Å^{-1}。晶胞保持固定，因此密度维持在 6.10 g cm^{-3}。全部 56 个弛豫均收敛；每个晶胞在 3000 K 时都是液态，且没有 O–O 接触距离小于 2.0 Å。统计量和判定标准均在退火前预先确定。统计量 H 是 3.20–3.50 Å 范围内归一化并经相位校正的 $|\chi(R)|$ 的均值； ΔH 则是每个退火后晶胞与同一晶胞退火前的这一数值之差，其 95 % 区间由对晶胞进行 1000 次配对自助法重采样得到。若 ΔH 的区间下限大于零，则认为退火增强了该特征；若整个区间都落在± 0.06（即与实验值差距的一半）之内，则认为没有值得关注的变化。对全部 2800 个铟位点采用协议 P 后， H从 0.086 上升至 0.108 [0.084–0.140], ，且 $\Delta H = +0.023$ $[-0.018, +0.057]$。按预先声明的界限，这不构成值得关注的变化，但区间并未排除最高 0.06 的增幅； H 仍远低于测量值 0.208。退火确实改变了整体谱：退火后晶胞与原始晶胞之间，锌、镓和铟的 D_R 分别为 16%、7% 和 18%，变化主要来自 2.0–3.2 Å 范围，处于 H的窗函数之外。对于退火后晶胞的铟变换，精修 F、R、L 和 C 的 D_R 变化至多为 0.79%（20 个晶胞$\times$ 10 位点），与随机晶胞的情况相同。使用范围为 2–10 和 3–14 Å^{-1}的 k 窗函数，或不进行相位校正（窗函数范围为 2.70–3.00 Å ）时， H 也会上升，幅度为 0.02–0.03。这些检验并不能得出决定性结论。在 3.0 至 3.6 Å 范围内，每个铟在退火后的镓和锌邻居略多（镓为 2.53，对比 2.35；锌为 2.44，对比 2.31）。

S6.8. 扩展*X*射线吸收精细结构的计算成本

在 BlueBEAR 集群的单个核心上，每次 FEFF8.5L 运行（10 埃团簇，约 300–350 个原子）的中位耗时为：a-Ga_2O_3 中每个镓位点 2.5 s，a-$InGaZnO_4$中每个锌、镓和铟位点分别为 3.5、3.4 和 1.9 s。16 000 次 a-Ga_2O_3 运行共耗时 11.4 核心小时。对于 a-$InGaZnO_4$ 的 504 个晶胞中选取的 448 个晶胞子集，67 200 次运行共耗时 55 核心小时，即三个边合计每个晶胞约耗时 0.12 核心小时。独立的吸收原子计算可分配到多个 CPU 核心上。不同体系所需的晶胞数各异（表 S6）：此前使用的 20 个 a-Ga_2O_3 晶胞达到 N1 $= 2.1$%，而 56 个 a-$InGaZnO_4$ 晶胞得到 3.9–5.4 %，要达到 2 % 则需要数百个晶胞。因此，应针对每个体系检查 N1。

参考

[1] 莱纳斯·鲍林，化学键的本质。IV. 单键的能量与原子的相对电负性，《美国化学会志》54 (1932)3570–3582。 doi:10.1021/ja01348a011。

[2] L . Pauling, The N结构 f the Chemical Bond and the S结构 f 《分子与晶体：现代结构化学导论》，第3版，康奈尔大学出版社，伊萨卡，纽约州，1960年。[3] A. L. Allred，基于热化学数据的电负性值，《无机与核化学杂志》17（1961）215–221。doi:10.1016/0022-1902(61)80142-5。[4] R. D. Shannon，卤化物和硫属化物中修订后的有效离子半径及原子间距离的系统研究，《晶体学报》A辑32（1976）751–767。doi:10.1107/S0567739476001551。[5] B. Cordero, V. Gómez，A. E. Platero-Prats，M. Revés，J. Echeverría，E. Cremades，F. Barragán，S. Alvarez，共价半径再探，《道尔顿汇刊》（2008）2832–2838doi:10.1039/b801115j。[6] N. N. Greenwood，A. Earnshaw，《元素化学》，第2版，Butterworth-Heinemann，1997年。[7] Y. Youn，Y. Kang，S. Han，一种基于局部几何生成非晶结构的高效方法，《计算材料科学》95（2014）256–262。doi:10.1016/j.commatsci.2014.07.053。[8] W. M. Haynes，D. R. Lide，T. J. Bruno（编），《CRC化学与物理手册》，第 97 版，CRC出版社，博卡拉顿，佛罗里达州，2016年。doi:10.1201/9781315380476。[9] 美国国家生物技术信息中心，PubChem 化合物摘要：CID 14888，三氧化二砷，访问于2025年10月（2025年）。URL https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/14888[10] A. Napolitano，P. B. Macedo，E. G. Hawkins，三氧化二硼的黏度和密度，《美国陶瓷学会志》48（1965）613–616。doi:10.1111/j.1151-2916.1965.tb14690.x。[11] M. Micoulaut，L. Cormier，G. S. Henderson，非晶态、晶态和液态 GeO_2, 的结构，《Journal of Physics: Condensed Matter》18（2006）R753–R784。doi:10.1088/0953-8984/18/45/R01。[12] R. Brückner，玻璃态二氧化硅的性质和结构。I，《Journal of Non-Crystalline Solids》5（1970）123–175。doi:10.1016/0022-3093(70)90190-0。

[13] O. L. G. Alderman，C. J. Benmore，S. Feller，E. I. Kamitsos，E. D. Simandiras，D. G. Liakos，M. Jesuit，M. Boyd，M. Packard，R. Weber，TeO中的短程无序$_2$ 熔体和玻璃，《The Journal of Physical Chemistry Letters》11（2020）427–431。doi:10.1021/acs.jpclett.9b03231。[14] A. Pugliese，B. Shyam，G. M. Repa，A. H. Nguyen，A. Mehta，E. B. Webb，III，L. A. Fredin，N. C. Strandwitz，采用X射线散射探测原子层沉积的氧化铝薄膜，并与分子动力学和密度泛函理论模型进行比较，《ACS Omega》7（2022）41033–41043。doi:10.1021/acsomega.2c04402。[15]Y. Liu，H. Liang，L. Yang，G. Yang，H. Yang，S. Song，Z. Mei，G. Csányi，B. Cao，通过机器学习结合实验，揭示非晶氧化镓中与原子结构相关的热输运，《先进材料》35（2023）2210873。doi:10.1002/adma.202210873。[16] L. S.R. Kumara，K. Ishikawa，K. Ide，H. Hosono，T.Kamiya，O.Sakata，利用XAFS和高能 XRD研究氢化和非氢化非晶 In-Ga-Zn-O 薄膜的局部结构性质，《The Journal of Physical Chemistry C》125（2021）13619–13628。doi:10.1021/acs.jpcc.1c02437。[17]A. A. Zav'yalova，R. M. Imamov，N. A. Ragimli，S. A. Semiletov，立方 C-Sm 结构的电子衍射研究$_2$O$_3$，《Kristallografiya》21（1976）727–729。[18] D. Mergel，D. Buschendorf，S. Eggert，R. Grammes，B. Samset，反应蒸发制备的 TiO$_2$ 薄膜的密度和折射率，《Thin Solid Films》371（2000）218–224。doi:10.1016/S0040-6090(00)01015-4。[19] K.-M. Kim，J. S. Jang，S.-G. Yoon，J.-Y. Yun，N.-K. Chung，低温下采用等离子体增强原子层沉积制备的 HfO$_2$ 薄膜的结构、光学和电学性质，《Materials》13（2020）2008。doi:10.3390/ma13092008。[20] J. C. Shank，M. B. Tellekamp，M. J. Wahila，S. Howard，A. S. Weidenbach，B. Zivasatienraj，L. F. J. Piper，W. A. Doolittle，表现出整流和滞回特性的可扩展忆阻器，用于神经形态计算，《Scientific Reports》8（2018）12935。doi:10.1038/s41598-018-30727-9。

[21] O. L. G. Alderman、C. J. Benmore、J. Neuefeind、E. Coillet、A. Mer- met、V. Martinez、A. Tamalonis、R. Weber，非晶态五氧化二钽及其与熔融态的关系，《物理评论材料》2（2018）043602。doi:10.1103/PhysRevMaterials.2.043602。[22] J. Ketterer、V. Krämer，溴氧化铋 BiOBr 的结构精修，Acta Crystallographica Section C 42（1986）1098–1099。doi:10.1107/S0108270186093307。[23] J. W. Anthony、R. A. Bideaux、K. W. Bladh、M. C. Nichols, Handbook of Mineralogy：氯氧化铋矿 BiOCl，访问日期：2026年11月13日（2005）。URL https://www.handbookofmineralogy.org/pdfs/bismoclite.pdf[24] M. D. Lind，氯氧化铁晶体结构的精修，《晶体学报》B辑 26（1970）1058–1062。doi:10.1107/S0567740870003618。[25] E. N. Maslen、V. A. Streltsov、N. R. Streltsova、N. Ishizawa，层状LaOCl结构中的同步辐射X射线电子密度，Acta Crystallo- graphica Section B 52（1996）576–579。doi:10.1107/S0108768196003084。[26] A. C. Wright、A. G. Clare、G. Etherington、R. N. Sinclair、S. A. Brawer、M. J. Weber，玻璃态氟化铍结构的中子衍射与分子动力学研究，Journal of Non-Crystalline Solids 111（1989）139–152。doi:10.1016/0022-3093(89)90275-5。[27] J. A. Erwin Desa、A. C. Wright、J. Wong、R. N. Sinclair，玻璃态氯化锌结构的中子衍射研究，Jour- nal of Non-Crystalline Solids 51（1982）57–86。doi:10.1016/0022-3093(82)90189-2。[28] H.-S. Seo、T.-Y. Lee、J. G. Wen、I. Petrov、J. E. Greene、D. Gall，MgO(001)上外延HfN层的生长与物理性质，Journal of Applied Physics 96（2004）878–884。doi:10.1063/1.1759783。[29]D. Gall、M. Städele、K. Järrendahl、I. Petrov、P. Desjardins、R. T. Haasch、T.-Y. Lee、J. E. Greene，利用光学光谱学、光电子发射和从头计算确定的氮化钪电子结构，《物理评论 B》63（2001）125119。doi:10.1103/PhysRevB.63.125119。

[30]L. Du、J. H. Edgar、R. A. Peascoe-Meisner、Y. Gong、S. Bakalova、M. Kuball，氮化钇的升华晶体生长，Journal of Crystal Growth 312（2010）2896–2903。doi:10.1016/j.jcrysgro.201 0.06.011。[31]S. M. Sattari-Esfahlan、S. Mirzaei、M. J. Josline、J.-Y. Moon、S.- H. Hyun、H. Jang、J.-H. Lee，非晶氮化硼：合成、性质与器件应用，Nano Convergence 12（2025）22。 doi:10.1186/s40580-025-00486-1。[32] S. N. Ruddlesden、P. Popper，硅和锗氮化物的晶体结构，《晶体学报》11（1958）465–468。 doi:10.1107/S0365110X58001304。[33] B. K. Yen、R. L. White、R. J. Waltman、Q. Dai、D. C. Miller、A. J. Kellock、B. Marchon、P. H. Kasai、M. F. Toney、B. R. York、等，超薄非晶氮化硅保护涂层的微结构与性质，《真空科学与技术 A》21（2003）1895–1904。 doi:10.1116/1.1615974。[34] J. Cornet、D. Rossier，砷-碲玻璃的性质与结构：（I）玻璃形成能力及相关性质，Journal of Non-Crystalline Solids 12（1973）61–84。doi:10.1016/0022-3093(73)90055-0。[35] N. A. Shah、W. Mahmood、M. Abbas、N. Nazar、A. H. Khosa、A. Zeb、A. Malik，叠层太阳能电池用碲锌镉半导体薄膜的合成，RSC Advances 11（2021）39940–39949。doi:10.1039/D1RA 07755D。[36] W. K. Njoroge、H.-W. Wöltgens、M. Wuttig，$Ge_2Sb_{2.04}Te_{4.74}$ 薄膜晶化过程中的密度变化，《真空科学与技术 A》20（2002）230–233。 doi:10.1116/1.1430249。[37] G. E. Ghezzi、J. Y. Raty、S. Maitrejean、A. Roule、E. Elkaim、F. Hippert，碳掺杂对非晶 GeTe 相变材料结构的影响，《应用物理快报》99（2011）151906。doi: 10.1063/1.3651321。 [38] O. Madelung，《半导体：数据手册》，第3版，Springer，柏林，2004。doi:10.1007/978-3-642-18865-7。[39] P. Knotek、P. Kutálek、E. Černošková、M. Vlček、L. Tichý，砷-硫和砷-硒硫属化物块体玻璃及薄膜的密度、纳米硬度和部分光学性质，RSC Advances 10（2020） 42744–42753。doi:10.1039/D0RA08939G。

[40] A. Tverjanovich, M. Khomenko, C. J. Benmore, M. Bokova, A. Sokolov, D. Fontanari, M. Kassem, T. Usuki, E. Bychkov，块体玻璃态碲化锗$_2$：四面体 GeX_2 家族中缺失的一员，也是下一代相变材料的前驱体，《材料化学》33 (2021) 1031–1045. doi:10.1021/acs.chemmater.0c04409.[41] M. Putero, M.-V. Coulet, C. Muller, G. Cohen, M. Hopstaken, C. Bae- htz, S. Raoux，Ga–Sb 薄膜结晶时的密度变化，《应用物理快报》105 (2014) 181910. doi:10.1063/1.4901321.[42] L. Cliche, S. Roorda, R. A. Masut，兆电子伏离子束使 InP 非晶化并致密化后持续发生的室温弛豫，《应用物理快报》65 (1994) 1754–1756. doi:10.1063/1.112907.[43] T. M. Donovan, W. E. Spicer, J. M. Bennett, E. J. Ashley，非晶锗薄膜的光学性质，《物理评论B》2 (1970) 397–413. doi:10.1103/PhysRevB.2.397.[44] J. S. Custer, M. O. Thompson, D. C. Jacobson, J. M. Poate, S. Roorda, W. C. Sinke, F. Spaepen，非晶硅的密度，《应用物理快报》64 (1994) 437–439. doi:10.1063/1.111121.[45]P. M. Smith, A. J. Leadbetter, A. J. Apling，正交晶态砷和玻璃态砷的结构，《哲学杂志》31 (1975) 57– 64. doi:10.1080/14786437508229285.[46] A. LiBassi, A. C. Ferrari, V. Stolojan, B. K. Tanner, J. Robertson, L. M. Brown，通过 X 射线反射率和电子能量损失谱测定类金刚石碳薄膜的密度、sp^3 含量和内部层状结构，《金刚石及相关材料》9 (2000) 771–776. doi:10.1016/S0925-9635(99)00233-2.[47] Z. Remeš, M. Vaněček, P. Torres, U. Kroll, A. H. Mahan, R. S. Cran- dall，光学测定不同氢含量的非晶硅和微晶硅层的质量密度，《非晶固体杂志》227–230 (1998) 876–879. doi:10.1016/S0022-3 093(98)00207-5.[48] A. Campbell, E. Cakmak, B. Henry, K. Johnson, D. Muzquiz, Y. Os- etskiy, E. Paxton, S. Raiman, D. Sulejmanovic, E. Zarkadoula 等，Be_2C 合成、性质及离子束辐照损伤表征，技术报告 ORNL/TM-2023/3011，橡树岭国家实验室 (2023). doi:10.2172/1997705.

[49] V. Heera, F. Prokert, N. Schell, H. Seifarth, W. Fukarek, M. Voelskow, W. Skorupa，碳化硅非晶化和退火后的密度与结构变化，《应用物理快报》70 (1997) 3531–3533. doi:10.1063/1.119223.[50] K. Wong, R. P. Krishnan, E. M. Dufresne, K. Ohara, A. R. Sandy, S. M. Chathoth，宏观和微观性质迥异的金属玻璃的普适老化特征，《材料学报》155 (2018) 35–42. doi:10.1016/j.actamat.2018.05.059.[51] R. Hasegawa, R. Ray，铁硼金属玻璃，Journal of Applied Physics 49 (1978) 4174–4179. doi:10.1063/1.325328.[52] S. Basak, R. Clarke, S. R. Nagel，对分布函数及其与非晶合金玻璃化转变的关系，《物理评论B》20 (1979) 3388–3390. doi:10.1103/PhysRevB.20.3388.[53] K. Otsuka, X. Ren，钛镍基形状记忆合金的物理冶金学，《材料科学进展》50 (2005) 511–678. doi:10.1016/j.pmatsci.2004.10.001.[54] D. E. Polk, 玻璃态金属合金的结构，《冶金学报》20 (1972) 485–491. doi:10.1016/0001-6160(72)90003-X.[55] A. Hjorth Larsen, J. J. Mortensen, J. Blomqvist, I. E. Castelli, R. Chris- tensen, M. Dułak, J. Friis, M. N. Groves, B. Hammer, C. Hargus 等，原子模拟环境——用于处理原子的 Python 库，《物理学杂志：凝聚态》29 (2017) 273002。doi:10.1088/1361-648X/aa680e.[56] O. Cohen, J. Riebesell, R. Goodall, A. Kolluru, S. Falletta, J. Krause, J. Colindres, G. Ceder, A. S. Gangan，TorchSim：基于 PyTorch 的高效原子模拟引擎，《人工智能促进科学》1 (2025) 025003. doi:10.1088/3050-287X/ae1799.[57] P. P. Ewald，光学和静电晶格势的计算，《物理学年鉴》369 (1921) 253–287. doi:10.1002/andp.19213690304.[58] Y. Liu, Y. Zhou, R. Ademuwagun, L. Walterbos, J. George, S. R. Elliott, V. L. Deringer, 非晶态砷的中程结构有序，《美国化学会志》148 (2026) 9400–9412. doi:10.1021/jacs.5c18688.

[59] T. E. Faber、J. M. Ziman, 《液态金属电学性质理论。III. 二元合金的电阻率》, 《哲学杂志》11 (1965) 153–173。doi:10.1080/14786436508211931。[60] D. Waasmaier、A. Kirfel, 《自由原子和离子的新解析散射因子函数》, 《晶体学报》A辑 51 (1995) 416– 431。doi:10.1107/S0108767394013292。[61] C. Kaewmeechai、J. Strand、A. L. Shluger, 《晶态和非晶态 Ga_2O_3, 中俘获空穴的电子结构与性质》, 《物理评论B》111 (2025) 035203。doi:10.1103/PhysRevB.111.035203。[62] M. A. Blanco、M. B. Sahariah、H. Jiang、A. Costales、R. Pandey, 《Ga_2O_3, 中点缺陷的能量学与迁移》, 《物理评论B》72 (2005) 184103。doi:10.1103/PhysRevB.72.184103。[63] V. Petkov、G. Holzhüter、U. Tröge、T. Gerber、B. Himmel, 《通过电子衍射、X射线衍射和逆蒙特卡罗模拟研究非晶态 TiO_2 的原子尺度结构》, Journal of Non-Crystalline Solids 231 (1998) 17–30。doi:10.1016/S0022-3093(98)00418-9。[64] P. Haas、F. Tran、P. Blaha, 《采用半局域泛函计算固体的晶格常数》, 《物理评论B》79 (2009) 085104。doi: 10.1103/PhysRevB.79.085104。[65] K. Voll mayr、W. Kob、K. Binder, 《非晶二氧化硅中的冷却速率效应：一项计算机模拟研究》, 《物理评论B》54 (1996) 15808– 15827。doi:10.1103/PhysRevB.54.15808。[66]S. R. Elliott, 《共价非晶态固体中的中程结构有序》, Nature 354 (1991) 445–452。doi:10.1038/354445a0。[67]FEFF 项目和 xraypy 开发者, 《Feff8L (feff85exafs)：基于 FEFF8.5L 的开源理论 EXAFS 计算》；修订版 ec8dcb07ca8ee034d0fa7431782074f0f65357a5 (2026)。URL https://github.com/xraypy/feff85exafs[68] A. Reis、M. Hanke、O. Bierwagen、A. Trampert、P. Mazzolini、E. Welter, 《Ga_2O_3 中的无序–有序转变及其与 In_2O_3形成的固溶体在热退火过程中的变化》, physica status solidi (b) 260 (2023) 2200535。doi:10.1002/pssb.202200535。[69] J. Åhman、G. Svensson、J. Albertsson, 《对 β-氧化镓的再研究》, Acta Crystallographica Section C 52 (1996) 1336–1338。doi: 10.1107/S0108270195016404。

[70] J. Jia、A. Suko、Y. Shigesato、T. Okajima、K. Inoue、H. Hosomi，《非晶态铟镓锌氧化物用于薄膜晶体管时，退火过程中缺陷结构和深亚带隙态的演变》，Physical Review Applied 9(2018)014018。
doi:10.1103/PhysRevApplied.9.014018。

[71] C. Revenant、M.Benwadih、O. Proux，溶液法制备的铟镓锌氧化物中锌和镓周围的局部结构及其对电子性质的影响，physica status solidi (RRL) – Rapid Research Letters 9 (2015) 652–655. doi:10.1002/pssr.201510322。