计算高压物理 • 前言

压力是调控物质结构、成键方式和电子状态的基本物理参量。通过改变原子间距离和体系能量平衡，高压能够诱导常压下难以实现的结构转变、化学反应和新型物态，为探索物质基本规律、发现新材料以及认识地球与行星内部过程提供独特手段。随着金刚石对顶砧、动态压缩和高压原位表征技术的发展，高压物理已拓展至更高压力、更高温度和更短时间尺度，成为凝聚态物理、材料科学、化学和地球科学等领域的重要交叉方向。

计算高压物理为认识极端条件下物质的形成规律、演化机制和功能特性提供了重要理论支撑。依托第一性原理计算、晶体结构预测、分子动力学和自由能分析等方法，研究者能够在原子和电子尺度揭示高压物质的结构稳定性、相变机制、化学反应路径及物性演化规律，并据此预测常压下难以形成的新型化合物、亚稳结构和极端物态，为高压实验设计和新材料发现提供理论依据。特别是，机器学习势、数据驱动结构搜索、自动化计算工作流和人工智能辅助材料设计等新技术，正在推动计算高压物理从对实验现象的解释，发展为对新结构、新物态和新物性的系统预测与主动发现，为建立理论计算、实验合成和物性表征协同推进的新型研究范式提供重要支撑。

本专刊围绕计算高压物理的若干前沿问题组织稿件，内容涉及高压新型化合物的结构预测与稳定性分析、高压下相变和分解机制、氢化物及含氧体系的电子和力学性质、超离子态与极端物态、地球深部和行星内部物质模拟，以及晶体结构预测方法和数据驱动计算的发展。这些研究从不同层面展示了计算方法在发现新物质、揭示新机制和预测新物性方面的作用，也体现了计算高压物理与高压实验、材料设计及地球科学之间日益紧密的联系。

我们组织本专刊，旨在集中展示计算高压物理领域的最新研究进展，促进高压物理、凝聚态物理、化学和地球科学等相关领域之间的学术交流，推动理论方法、计算软件与实验技术的协同发展。未来，随着高精度理论、多尺度模拟、人工智能和高压实验技术进一步融合，计算高压物理有望在新型功能材料发现、极端条件化学、能源材料和地球深部过程研究中发挥更加重要的作用。希望本专题能够为读者了解计算高压物理的发展现状和未来方向提供参考，并为极端条件物质科学的发展贡献新的认识和思路。

王彦超　　孙建
吉林大学　　南京大学
2026 年 10 月 14 日

最新录用，非最终出版稿