DOI：10.11858/gywlxb.20251251

极端条件下铁的相互作用势*

魏良睿，孙阳

（厦门大学物理科学与技术学院，福建 厦门 361005）

摘要：铁在极端高温高压条件下的物理性质对于理解地球及类地行星内部结构和演化过程具有关重要意义。为了刻画铁在超级地球内部极端条件下的动力学行为，结合第一性原理分子动力学模拟与实验测定的高压熔化曲线，构建了一套适用于超高压力与高温范围的嵌入式原子势函数。该势函数拟合了体心立方相、密排六方相和液相在 400 ~ 1000 GPa、6000~10^4 K 下的多项物理性质，包括固态的弹性常数、液态的径向分布函数，以及实验获得的熔化曲线。在不同温压条件下对该势函数进行了系统检验，结果表明，其能够准确再现固态弹性常数的压力-温度依赖；在 3 组典型温压点上与液相径向分布函数一致；预测的熔化曲线处于实验误差范围内，并与第一性原理模拟结果基本吻合。基于该势函数的热力学计算进一步表明，在 400 ~ 1000 GPa 压力区间内，铁的密排六方相保持热力学稳定，而体心立方相呈亚稳态。该势函数为大尺度模拟超级地球核心的形核结晶与固液共存提供了可靠的原子级工具；同时，该势函数与数据集为后续扩展多组分铁合金在超高压条件下的物性研究奠定基础。

关键词：铁；高温高压；嵌入原子方法；熔化曲线；分子动力学
中图分类号：O521.2　　文献标识码：A

最新录用，非最终出版稿

铁是地球及类地行星核心的主要成分，其在高温高压条件下的物理性质对于理解行星内部结构、热演化过程以及磁场的长期维系具有至关重要的意义。地核的固液状态与铁的物性密切相关。现有地球物理与高压物理研究表明，核幔边界处的压强为 136 GPa[1]，温度约为 3000–4000 K[2]。自核幔边界向深部延伸，温度和压强随深度递增，在内核边界处压强达到 329 GPa[1]，温度估计约为 5000–7000 K[3]。在该温压范围内，内核边界外侧物质为液态，而内侧物质为固态，因此内核边界的固液状态受铁合金液相线的严格约束。随着系外行星观测数据的迅速积累[4]，特别是大量质量高于地球的“超级地球”相继被发现，对太帕（terapascal, TPa）级压力条件下铁的热力学和动力学行为的研究已成为行星科学中的前沿课题。深入认识铁在极端条件下的熔化和相变，不仅有助于解释地球及其他岩质行星核心的结构特征[5–8]，也为理解其磁场演化机制和宜居性提供关键线索[9,10]。

目前，对极端高压下铁的热力学行为主要依赖实验与计算模拟两类方法。一方面，在极高压条件下进行实验测量仍然具有挑战性[11–16]，直至近年，实验才首次在接近 1 TPa 的条件下获得铁的熔化曲线[17]。另一方面，基于密度泛函理论的第一性原理分子动力学模拟能够精确地描述铁在极端条件下的热力学性质[18–30]，但其计算代价高昂，难以覆盖行星内部演化所需的长时间尺度与大空间尺度。相比之下，基于原子相互作用势函数的经典分子动力学能够模拟更大的体系与更长的时间[31–35]，但准确性取决于势函数对原子相互作用的刻画能力。因此，构建能够在超高压高温环境下精确描述铁原子间相互作用的势函数，是连接原子尺度模拟与行星尺度动力学演化模型的关键环节。本研究结合第一性原理计算得到的高温高压热力学数据以及最新实验测得的铁熔化曲线，开发了适用于 400 GPa–1 TPa 压力范围的原子势函数。通过同时拟合固相弹性常数、液相径向分布函数以及实验熔点数据，我们构建的势函数在固、液两相中的分子动力学模拟结果均与第一性原理计算结果

*收稿日期: 2025-11-06；修回日期: 2025-12-22
基金项目：国家自然科学基金（T2422016，42374108）
作者简介：魏良睿（2002—），男，硕士研究生，主要从事地核下富铁固溶体相图研究. E-mail：19820241154118@stu.xmu.edu.cn
通信作者：孙 阳（1990—）男，博士，教授，主要从事极端条件下物性与相变研究. E-mail：yangsun@xmu.edu.cn

和实验结果保持良好一致性。本工作为进一步模拟超级地球内核的结晶过程、固–液相变以及内核对流演化等提供了可靠的原子尺度基础。

1 计算方法

1.1 嵌入原子方法

我们使用嵌入原子方法(Embedded atom method, EAM)来描述铁原子相互作用[36]。嵌入原子势中的总能量分为成对相互作用能和嵌入式原子能，即:

$$U = \sum_i^N \sum_{j=i+1}^N \varphi(r_{ij}) + \sum_i^N F(\rho_i)。 \tag{1}$$

其中 N 是总原子数，r_{ij}是原子间距离。ρ_i是i原子处的局域电荷密度。嵌入原子能F是局域电子密度的函数。这里我们采用如下的分段多项式函数[37]的形式来表达φ,ρ和F:

$$\varphi(r) = \sum_{k=1}^{n_a} a_k (r_k - r)^{p_k} H(r_k - r) H(r - r_c), \tag{2}$$

$$F(\rho) = -\sqrt{\rho} + \sum_{k=1}^{n_b} b_k (\rho - \rho_k)^{q_k} H(\rho - \rho_k), \tag{3}$$

$$\rho = c(r - r_c)^d \exp(-kr) H(r - r_c), \tag{4}$$

其中$H(x)$是亥维赛阶梯函数：当x非负时取 1，否则取 0。$(r_k - r)^{p_k} H(r_k - r) H(r_c - r)$和$(\rho - \rho_k)^{q_k} H(\rho - \rho_k)$分别作为成对项和嵌入项的基函数。$n_a$和$n_b$分别是成对相互作用能和嵌入原子能中的基函数的数量。在拟合的过程中,电荷密度里的参数c,r_c,d,k保持不变。因此，可以调节的参数只包含成对相互作用能和嵌入原子能中的权重参数。我们可以定义参数集合$\boldsymbol{X}$:

$$\boldsymbol{X} = (a_1, a_2 \cdots a_k, b_1 \cdots b_k). \tag{5}$$

同样地，我们定义了基函数集合$\boldsymbol{\Phi}$:

$$\boldsymbol{\Phi} = (\varphi_1, \varphi_2 \cdots \varphi_k, F_1 \cdots F_k)^T, \tag{6}$$

其中$\varphi_k = (r_k - r)^{p_k} H(r_k - r) H(r_c - r)$并且$F_k = (\rho - \rho_k)^{p_k} H(\rho - \rho_k)$。因此，总能量也可以写成基函数的关于权重的求和

$$U = \boldsymbol{X}\boldsymbol{\Phi} \tag{7}$$

1.2 计算模拟方法

经典分子动力学模拟使用 LAMMPS 软件[38]。在恒定原子数、体积和温度(NVT)模拟中使用了 Nosé-Hoover 恒温器[39]。在恒压 (NPT) 系综下同时使用 Nosé–Hoover 恒温器与恒压器。恒温器中的阻尼时间设置为 τ=0.01 ps，模拟时间步长为 1.0 fs。在计算弹性常数时，施加形变前后均进行了 10 ps 的分子动力学模拟。在熔点计算中，两相共存体系的模拟时长超过 100 ps。

在极端高温高压条件下，对铁的体心立方相 (bcc)、密排六方相 (hcp) 以及液态结构的第一性原理分子动力学模拟(*ab initio*molecular dynamics, AIMD)采用 VASP 软件进行[40]。电子–离子相互作用使用投影缀加波 (projector augmented wave, PAW) 方法处理，交换-相关能采用 Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) 形式的广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA)。高温下的电子熵通过 Mermin 形式的有限温度密度泛函理论进行描述[41,42]，电子温度与离子温度保持一致。我们使用包含 16 个价电子($3s^2 3p^6 3d^7 4s^1$)的 PAW16 势来模拟高温高压下铁原子的相互作用，平面波截断能为 750eV。我们分别使用 250 原子，240 原子，125 原子的超胞来模拟体心立方,密排六方相和液体。在第一性原理计算中，我们使用Γ点采样布里渊区。第一性原理分子动力学模拟的时间步长为 1.0fs，计算弹性常数时对形变前后的晶胞进行了 10 ps 模拟。

在经典分子动力学框架下，熔点通过固液共存模拟[43]得到。晶相的弹性常数采用应力应变法[44]计算。我们使用 Sturgeon 等[45]提出的方法进行了熔点拟合。

最新录用，非最终出版稿

2 研究结果

2.1 极高压下铁物理性质的第一性原理模拟

我们首先收集了铁在极高压条件下的一系列物理性质作为势函数的拟合目标。为确保势函数能够正确反映体心立方相与密排六方相的动力学稳定性，我们首先对高温高压条件下固体相的弹性常数进行拟合。由于目前在太帕级压力下铁的弹性常数尚缺乏直接实验数据，我们采用第一性原理分子动力学模拟来获取对应条件下的弹性常数。

具体而言，我们在给定晶格常数的超胞上进行 NVT 系综下的模拟。表 1 和表 2 分别列出了体心立方相和密排六方相晶体所采用的晶格常数、模拟温度及相应超胞达到的平衡压强。对于密排六方相，在 P=350 GPa 时的晶格常数取自基于地核条件的第一性原理研究[34]，而 P=671 和 1000 GPa 时的晶格常数来源于最新实验测量结果[17]。如表 1 中所示，第一性原理分子动力学模拟的压强范围从接近地核内部压强（~400 GPa）延伸至 1TPa。

表 1 第一性原理模拟得到的体心立方和密排六方相晶格常数和平衡压强

Table 1 Lattice constants of bcc and hcp phasesfrom ab initio simulations

bcc	a (Å)		Pressure (GPa)
T=6000K	2.369		396
T=8500K	2.269		665
T=10000K	2.164		1078
hcp	a (Å)	c (Å)	Pressure (GPa)
T=6000K	2.15	3.42	350
T=8500K	2.03	3.25	671
T=10000K	1.95	3.14	1000

为确定体心立方与密排六方两相的弹性常数，我们将超胞沿 xx 方向施加拉伸形变，形变量可以写成$\Delta l_{xx} = \epsilon l_{xx,0}$，其中$\epsilon = 0.01$是 xx 方向的应变，$l_{xx,0}$是晶胞在 xx 方向的初始长度。随后在形变后的结构上进行第一性原理分子动力学模拟，并计算形变前后体系的应力张量。根据形变前后应力的变化，弹性常数可由下式得到

$$C_{11} = -\frac{(P_{xx} - P_{xx,0})}{\epsilon} \tag{8}$$

$$C_{12} = -\frac{(P_{yy} - P_{yy,0})}{\epsilon} \tag{9}$$

$$C_{13} = -\frac{(P_{zz} - P_{zz,0})}{\epsilon} \tag{10}$$

其中$P_{xx,0}$,$P_{yy,0}$,$P_{zz,0}$是 xx,yy 和 zz 方向的平衡压强，P_{xx},P_{yy},P_{zz}是施加形变后的压强。

对于体心立方相，由晶体对称性可得$C_{12} = C_{13}$。而对于密排六方相，C_{11},C_{12},C_{13}是相互独立的弹性常数。使用相同的方法，我们额外对 bcc 结构施加了 yz 方向的形变以计算C_{44}，对 hcp 结构施加了 yz 和 zz 方向的形变以计算C_{33}与C_{44}。在上述方法下得到的体心立方相和密排六方相弹性常数列于表 2。

表 2 第一性原理模拟得到的体心立方和密排六方相的弹性常数

Table 2Elastic constants for bcc and hcp phases from ab initio simulations

bcc	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)		C_{44} (GPa)	
T=6000 K, P=396 GPa	1462	1462		331	
T=8500 K, P=665 GPa	2146	2146		457	
T=10000 K, P=1078GPa	3243	3337		667	
hcp	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{13} (GPa)	C_{33} (GPa)	C_{44} (GPa)
T=6000 K, P=350GPa	1571	1173	1042	4134	211

最新录用，非最终出版稿

T=8500 K, P=671 GPa	2639	2158	1767	2886	318
T=10000 K, P=1000 GPa	3407	3151	2427	1882	488

我们不仅关注超级地球内部条件下铁的固态性质，还需要考察其构成外核的液态铁的结构与密度特征，因此在势函数构建中引入对液相状态的约束是必要的。为此，我们进行了液态铁的第一性原理分子动力学模拟，模拟涵盖三组不同的温度–密度条件，表 3 给出了相应的体系平衡压力。与此同时，我们计算了在这些密度条件下液态铁的径向分布函数 g(r)。g(r) 定义为以某一原子为中心，在距其 r 处找到其他原子的相对概率密度，从而反映原子间的成对关联特征。对于 g(r) 的拟合，我们采用了文献[37]的方法。该方法基于统计物理理论计算无序液体中的平均力$F(r)$，并利用$F(r) = k_B T \, \mathrm{d}\ln g(r)/\mathrm{d}r$的热力学关系将目标 g(r) 与由试探势函数产生的原子构型的平均力相关联，进而将势函数参数的拟合转化为线性最小二乘问题，从而利用迭代算法得到与目标 g(r) 自洽的势函数参数（即试探势函数 → 分子动力学计算 g(r) → 平均力方程更新势函数参数 → 下一代试探势函数，直至误差收敛）。

表 3 第一性原理模拟得到的液体密度和平衡压强

Table 3Liquid density and equilibrium pressure from ab initio simulations

T (K)	Density (10^3 kg/m^3)	Pressure (GPa)
6000	13.441	360
8500	15.202	596
10000	17.428	958

为了同时刻画固相与液相之间的竞争行为，我们在势函数拟合中加入了实验测得的密排六方相熔化曲线[17]作为约束。我们选取 360 GPa、584 GPa 和 990 GPa 处的熔点作为拟合目标，各压强下纯铁的熔点数据取自实验给出的熔化曲线，其数值列于表 4。

表 4 实验[17]得到的密排六方相在三个压强下的熔点

Table 4Melting temperature of hcp phase at three pressures from experiment

Pressure (GPa)	T_m^{hcp}(K)
360	6503
584	8342
990	11027

2.2 极高压下铁物理性质的拟合结果

我们首先基于第一性原理分子动力学得到的固相弹性常数和液态径向分布函数构建了初始版本的原子势函数。在此基础上，将实验熔点数据纳入拟合目标中进行迭代优化。通过势函数迭代优化流程[37]，在第 n 轮迭代中，设参数集为$\boldsymbol{X_n}$，用当前势函数$U(\boldsymbol{X_n})$进行分子动力学模拟计算需要拟合的各种性质（如弹性常数，液体径向分布函数和熔点），根据计算得到的热力学性质和迭代方程$\boldsymbol{X}_{n+1} = \boldsymbol{X}_n - \frac{P(\boldsymbol{X}_n) - P_{target}}{\nabla P(\boldsymbol{X}_n)}$更新参数$\boldsymbol{X_n} \rightarrow \boldsymbol{X_{n+1}}$，其中$P_{target}$是目标性质，$P(\boldsymbol{X}_n)$是当前势函数热力学性质，$\nabla P(\boldsymbol{X}_n)$是热力学性质关于势函数参数的导数，重复迭代以上过程直到势函数的性质和目标性质符合得较好。

在计算固相弹性常数时，我们分别使用包含 2000 个原子的超胞和 1920 个原子的超胞模拟体心立方相和密排六方相。液态径向分布函数的计算采用包含 6750 个原子的超胞。在固–液共存模拟中，我们分别使用包含 65,520 个原子的密排六方相–液相固液共存超胞和包含 64,000 个原子的

最新录用，非最终出版稿

体心立方相–液相固液共存超胞，并使用 NPT 系综模拟测定熔点。通过重复上述迭代步骤，直至各项性质均收敛并保持稳定，最终获得了性能良好的原子势函数。

图 1 给出了体心立方相和密排六方相的弹性常数。体心立方相有两个独立的弹性常数C_{11}和C_{12}。密排六方相有三个弹性常数C_{11},C_{12}和C_{13}。密排六方相和体心立方相的C_{11}和C_{12}的值和第一性原理分子动力学结果吻合良好。EAM 势在弹性常数上的优良表现表明其能够较好地刻画体心立方与密排六方两相的力学稳定性。

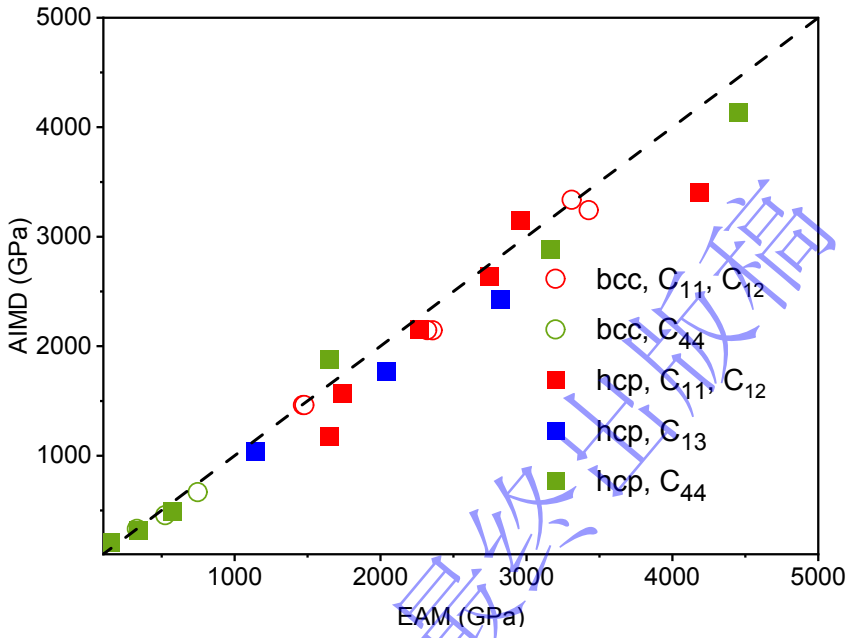

图 1 体心立方相和密排六方相弹性常数

Fig.1Elastic constants for bcc and hcp phases.

随后，我们检验了所构建势函数对液体结构的刻画能力。图 2 给出了在三组温压条件下，由 EAM 势计算得到的液体径向分布函数与第一性原理分子动力学结果的对比。可以看出，在各个温压下，两者在峰位位置与峰高变化趋势上均具有良好一致性，并且均方根误差(RMSE)均小于 0.04，说明该势函数能够正确再现液态铁的局域结构特征。由于液体径向分布函数直接反映原子对之间的相互作用信息[37]，上述结果表明所构建的 EAM 势在 400–1000 GPa 压力范围内能够可靠地描述铁原子间的相互作用。

最新录用，非最终出版稿

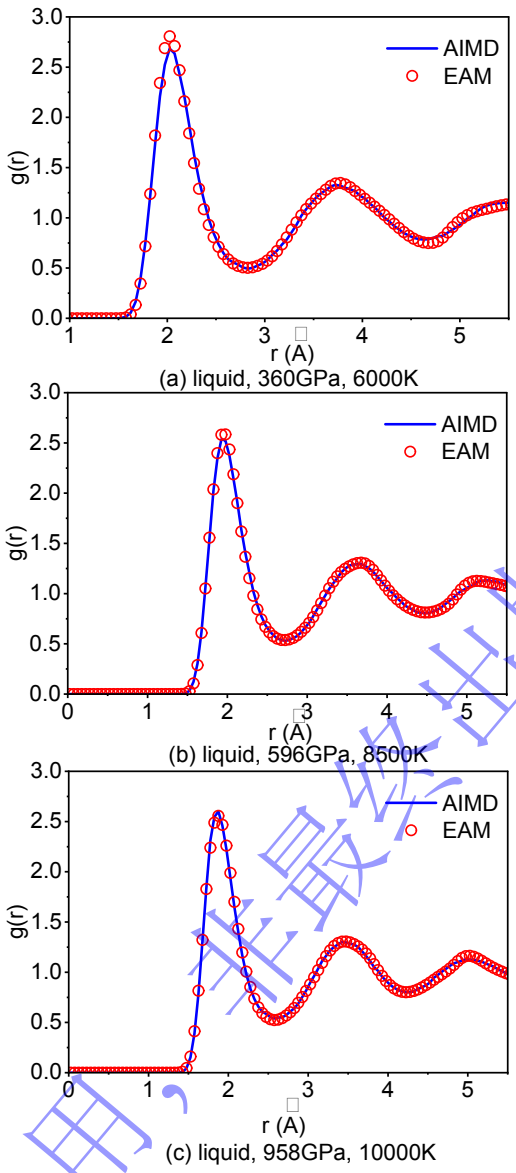

图 2 液体径向分布函数

Fig.2 Liquid radial distribution function

我们进一步检验 EAM 势函数对于熔点的描述。图 3 给出了密排六方相的熔化曲线，并与实验测量的熔化温度[17]以及基于密度泛函理论(DFT)的计算结果[21,30]。我们的熔化曲线在实验误差范围内和实验吻合得很好。为表征熔点随压强的变化关系，我们采用 Simon 方程$T_m = T_0\left(1+\frac{(P-P_0)}{a}\right)^b$，其中$a,b$是拟合参数。拟合得到的密排六方相熔点方程为

$$T_m = 6546\left(1+\frac{(P-360.0)}{227.133}\right)^{0.378} \tag{11}$$

基于构建的原子势函数，我们还预测了体心立方相在极高压条件下的熔化曲线。如图 3 所示，在 400 GPa 至 1 TPa 的压强范围内，密排六方相始终具有最高的熔点，表明密排六方相在该范围内仍为最稳定晶相。这一结果与 Stixrude 等[30]和 Bouchet 等[46]的第一性原理计算结论在定性上保持一致。此外，尽管体心立方相在该压力范围内处于亚稳态，但其力学稳定性仍然较好。

最新录用，非最终出版稿

本研究构建的势函数可进一步用于探索超级地球核心条件下可能发生的形核过程[35]，为理解极端条件下的结晶机制提供原子尺度手段。此外，本工作中所产生的第一性原理数据可作为高质量训练集，用于构建深度学习势函数[47–50]，以对铁的相互作用进行更高精度的描述。本势函数及其建模流程可推广至包含 Ni、O、S、Si、H、Mg 等轻元素的多组分铁合金体系[51–53]，为研究多相、多组分行星核物质在太帕级压力下的结构、相变与动力学提供方法学基础。

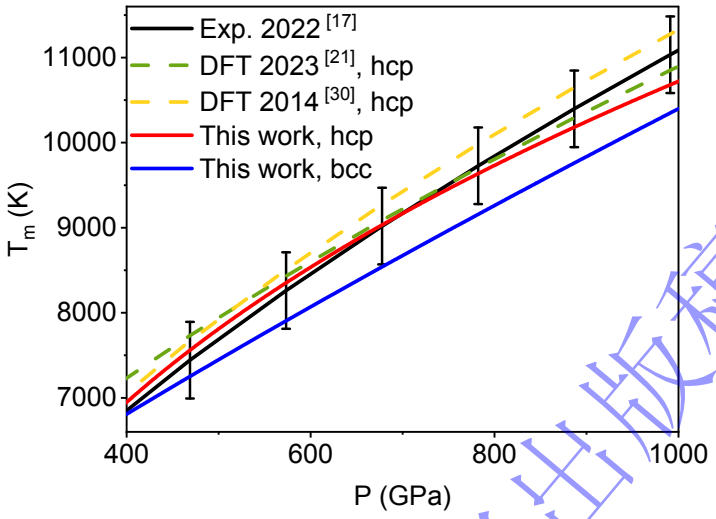

图 3 熔化曲线

Fig.3Melting temperature lines.

3 结 论

本研究基于第一性原理分子动力学计算与高压熔化实验数据，构建了一个适用于极高压强范围的大尺度铁原子作用势函数。通过将体心立方相与密排六方相的弹性常数、液态径向分布函数以及密排六方相熔化曲线共同纳入拟合，本工作所开发的势函数在结构、力学和热力学性质上均与第一性原理计算及实验结果保持良好一致性：该势函数能够准确再现极高压下固态铁的弹性常数，可靠描述 400GPa–1 TPa，6000–10000 K 高温高压下的液态结构，并在固–液共存模拟中给出与实验相符的熔化曲线。基于势函数我们预测了 400 GPa–1 TPa 区间内保持密排六方相的热力学稳定性和体心立方相的亚稳性。本研究建立的势函数为研究超级地球核心中铁的形核与结晶提供了有效的原子尺度模拟工具，并为进一步扩展至多组分行星核体系深部物质在超高压条件下的结构与演化机制奠定了基础。

最新录用，非最终出版稿

参考文献

[1] DZIEWONSKI A M, ANDERSON D L. Preliminary reference Earth model[J]. Physics of the Earth and Planetary Interiors, 1981, 25(4): 297-356.

[2] FIQUET G, AUZENDE A L, SIEBERT J, et al. Melting of Peridotite to 140 Gigapascals[J]. Science, 2010, 329(5998): 1516-1518.

[3] ALFÈ D, GILLAN M J, PRICE G D. Temperature and composition of the Earth’s core[J]. Contemporary Physics, 2007, 48(2): 63-80.

[4] KANE S R, HILL M L, KASTING J F, et al. A CATALOG OF KEPLER HABITABLE ZONE EXOPLANET CANDIDATES[J]. The Astrophysical Journal, 2016, 830(1): 1.

[5] HIROSE K, LABROSSE S, HERNLUND J. Composition and State of the Core[J]. Annual Review of Earth and Planetary Sciences, 2013, 41(1): 657-691.

[6] MORARD G, ANDRAULT D, ANTONANGELI D, et al. Properties of iron alloys under the earth's core conditions[J]. Comptes Rendus - Geoscience, 2014, 346(5-6): 130-139.

[7] HIROSE K, WOOD B, VOČADLO L. Light elements in the Earth's core[J]. Nature Reviews Earth and Environment, 2021, 2(9): 645-658.

[8] GAO C, HO K M, SUN Y. Progress in the study of the composition, structure and nucleation of the Earth′s core[J]. Bulletin of Mineralogy, Petrology and Geochemistry, 2025, 44(1): 94-115.

[9] ELKINS‐TANTON L. What Makes a Habitable Planet?[J]. Eos, Transactions American Geophysical Union, 2013, 94(16): 149-150.

[10] DEHANT V, LAMMER H, KULIKOV Y N, et al. Planetary Magnetic Dynamo Effect on Atmospheric Protection of Early Earth and Mars[J]. Space Science Reviews, 2007, 129(1-3): 279-300.

[11] ANZELLINI S, DEWAELE A, MEZOUAR M, et al. Melting of iron at earth's inner core boundary based on fast X-ray diffraction[J]. Science, 2013, 340(6131): 464-466.

[12] ZHANG Y, WANG Y, HUANG Y, et al. Collective motion in hcp-Fe at Earth's inner core conditions[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2023, 120(41): e2309952120.

[13] LI J, WU Q, LI J, et al. Shock Melting Curve of Iron: A Consensus on the Temperature at the Earth's Inner Core Boundary[J]. Geophysical Research Letters, 2020, 47(15): e2020GL087758.

[14] TURNEAURE S J, SHARMA S M, GUPTA Y M. Crystal Structure and Melting of Fe Shock Compressed to 273 GPa: In Situ X-Ray Diffraction[J]. Physical Review Letters, 2020, 125(21): 215702.

[15] ZHANG D, JACKSON J M, ZHAO J, et al. Temperature of Earth's core constrained from melting of Fe and Fe0.9Ni0.1 at high pressures[J]. Earth and Planetary Science Letters, 2016, 447: 72-83.

[16] LIU J, SUN Y, LV C, et al. Iron-rich Fe–O compounds at Earth's core pressures[J]. The Innovation, 2023, 4(1): 100354.

[17] KRAUS R G, HEMLEY R J, ALI S J, et al. Measuring the melting curve of iron at super-Earth core conditions[J]. Science, 2022, 375(6577): 202-205.

[18] SUN T, BRODHOLT J P, LI Y, et al. Melting properties from *ab initio* free energy calculations: Iron at the Earth's inner-core boundary[J]. Physical Review B, 2018, 98(22): 224301.

[19] SUN Y, MENDELEV M I, ZHANG F, et al. *Ab Initio* Melting Temperatures of Bcc and Hcp Iron Under the Earth's Inner Core Condition[J]. Geophysical Research Letters, 2023, 50(5): e2022GL102447.

[20] BOUCHET J, MAZEVET S, MORARD G, et al. Ab initio equation of state of iron up to 1500 GPa[J]. Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics, 2013, 87(9): 1-8.

[21] GONZÁLEZ-CATALDO F, MILITZER B. *Ab initio* determination of iron melting at terapascal pressures and Super-Earths core crystallization[J]. Physical Review Research, 2023, 5(3): 033194.

[22] SUN Y, MENDELEV M I, ZHANG F, et al. Unveiling the effect of Ni on the formation and structure of Earth's inner core[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2024, 121(4): e2316477121.

[23] ZHANG Z, SUN Y, WENTZCOVITCH R M. PBE-GGA predicts the B8↔B2 phase boundary of FeO at Earth's core conditions[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2023, 120(28): e2304726120.

[24] ALFÈ D. Temperature of the inner-core boundary of the Earth: Melting of iron at high pressure from first-principles coexistence simulations[J]. Physical Review B, 2009, 79(6): 060101.

最新录用，非最终出版稿

[25] POZZO M, DAVIES C, GUBBINS D, et al. Thermal and electrical conductivity of iron at Earth's core conditions[J]. Nature, 2012, 485(7398): 355-358.

[26] LI Y, VOČADLO L, SUN T, et al. The Earth's core as a reservoir of water[J]. Nature Geoscience, 2020, 13(6): 453-458.

[27] WU Z, WANG W. Shear softening of earth's inner core as indicated by its high poisson ratio and elastic anisotropy[J]. Fundamental Research, 2025, 5(1): 264-268.

[28] HE Y, SUN S, KIM D Y, et al. Superionic iron alloys and their seismic velocities in Earth's inner core[J]. Nature, 2022, 602(7896): 258-262.

[29] WEI L, WU Z, HO K M, et al. The Fe-Ni phase diagram and the Earth's inner core structure[J]. Science Advances, 2025, 11(23): eadu1998.

[30] STIXRUDE L. Structure of Iron to 1 Gbar and 40 000 K[J]. Physical Review Letters, 2012, 108(5): 055505.

[31] DAVIES C J, POZZO M, ALFÈ D. Assessing the inner core nucleation paradox with atomic-scale simulations[J]. Earth and Planetary Science Letters, 2019, 507: 1-9.

[32] ZHANG W J, LIU Z Y, LIU Z L, et al. Melting curves and entropy of melting of iron under Earth's core conditions[J]. Physics of the Earth and Planetary Interiors, 2015, 244: 69-77.

[33] BELONOSHKO A B, FU J, SMIRNOV G. Free energies of iron phases at high pressure and temperature: Molecular dynamics study[J]. Physical Review B, 2021, 104(10): 104103.

[34] SUN Y, ZHANG F, MENDELEV M I, et al. Two-step nucleation of the Earth's inner core[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2022, 119(2): e2113059119.

[35] GAO C, HO K M, WENTZCOVITCH R M, et al. Understanding the two-step nucleation of iron at Earth's inner core conditions: A comparative molecular dynamics study[J]. Physical Review B, 2025, 111(13): 134104.

[36] FINNIS M W, SINCLAIR J E. A simple empirical *N* -body potential for transition metals[J]. Philosophical Magazine A, 1984, 50(1): 45-55.

[37] MENDELEV M I, SROLOVITZ D J. Determination of alloy interatomic potentials from liquid-state diffraction data[J]. Physical Review B, 2002, 66(1): 014205.

[38] THOMPSON A P, AKTULGA H M, BERGER R, et al. LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales[J]. Computer Physics Communications, 2022, 271: 108171.

[39] HOOVER W G. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions[J]. Physical Review A, 1985, 31(3): 1695.

[40] KRESSE G, FURTHMÜLLER J. Efficient iterative schemes for *ab initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set[J]. Physical Review B, 1996, 54(16): 11169-11186.

[41] MERMIN N D. Thermal properties of the inhomogeneous electron gas[J]. Physical Review, 1965, 137(5A): A1441.

[42] WENTZCOVITCH R M, MARTINS J L, ALLEN P B. Energy versus free-energy conservation in first-principles molecular dynamics[J]. Physical Review B, 1992, 45(19): 11372-11374.

[43] MORRIS J R, WANG C Z, HO K M, et al. Melting line of aluminum from simulations of coexisting phases[J]. Physical Review B, 1994, 49(5): 3109-3115.

[44] CLAVIER G, DESBIENS N, BOURASSEAU E, et al. Computation of elastic constants of solids using molecular simulation: comparison of constant volume and constant pressure ensemble methods[J]. Molecular Simulation, 2017, 43(17): 1413-1422.

[45] STURGEON J B, LAIRD B B. Adjusting the melting point of a model system via Gibbs-Duhem integration: Application to a model of aluminum[J]. Physical Review B, 2000, 62(22): 14720-14727.

最新录用，非最终出版稿

[46] BOUCHET J, MAZEVET S, MORARD G, et al. *Ab initio* equation of state of iron up to 1500 GPa[J]. Physical Review B, 2013, 87(9): 094102.

[47] WU F, WU S, WANG C Z, et al. Melting temperature of iron under the Earth's inner core condition from deep machine learning[J]. Geoscience Frontiers, 2024, 15(6): 101925.

[48] LI Z, SCANDOLO S. Competing Phases of Iron at Earth's Core Conditions From Deep‐Learning‐Aided ab‐initio Simulations[J]. Geophysical Research Letters, 2024, 51(19): e2024GL110357.

[49] YUAN L, STEINLE-NEUMANN G. Hydrogen distribution between the Earth's inner and outer core[J]. Earth and Planetary Science Letters, 2023, 609: 118084.

[50] ZHANG Z, CSÁNYI G, ALFÈ D. Partitioning of sulfur between solid and liquid iron under Earth's core conditions: Constraints from atomistic simulations with machine learning potentials[J]. Geochimica et Cosmochimica Acta, 2020, 291: 5-18.

[51] FANG Y, SUN Y, WANG R, et al. Structural prediction of Fe-Mg-O compounds at super-Earth's pressures[J]. Physical Review Materials, 2023, 7(11): 113602.

[52] FANG Y, SUN Y, WANG R, et al. Unconventional iron-magnesium compounds at terapascal pressures[J]. Physical Review B, 2021, 104(14): 144109.

[53] ZHENG F, SUN Y, WANG R, et al. Structure and motifs of iron oxides from 1 to 3 TPa[J]. Physical Review Materials, 2022, 6(4): 043602.

最新录用，非最终出版稿

Interatomic Potentials for Iron under Extreme Conditions

WEI Liangrui, SUN Yang
(*Department of Physics, Xiamen University, Xiamen 361005, Fujian, China*)

Abstract: The physical properties of iron under extreme high-pressure and high-temperature conditions are crucial for understanding the internal structure and evolutionary processes of Earth and terrestrial planets. To characterize the dynamic behavior of iron under the extreme conditions inside super-Earths, we combine first-principles molecular dynamics simulations with experimentally measured high-pressure melting curves to construct an embedded-atom potential applicable across ultra-high pressures and temperatures. This potential is fitted to multiple properties of the body-centered cubic (bcc), hexagonal close-packed (hcp), and liquid phases over 400 GPa to 1 TPa and 6000 to 10,000 K, including the elastic constants of the solid phases, the radial distribution functions of the liquid, and experimentally determined melting data. We systematically validate the potential across different pressure-temperature conditions and find that it accurately reproduces the pressure–-temperature dependence of solid elastic constants, matches liquid radial distribution functions at three representative pressure-temperature conditions, and predicts melting curves that lie within experimental uncertainties and agree well with previous first-principles simulations. Thermodynamic calculations based on this potential further show that the hcp phase remains thermodynamically stable between 400 GPa and 1 TPa, while the bcc phase is metastable. This potential provides a reliable atomistic tool for large-scale simulations of nucleation, crystallization, and solid–liquid coexistence in the cores of super-Earths. Moreover, the potential and associated dataset lay the groundwork for future extensions to multicomponent Fe alloys and their properties under ultra-high-pressure conditions.

Keywords: iron; high temperature and high pressure; embedded atom method; melting curve; molecular dynamics

最新录用，非最终出版稿