Письма в ЖЭТФ, том 124, вып. 6, с. 450 – 456 © 2026 г. 25 сентября

Моделирование состава и структуры внутреннего ядра Земли с помощью глубокого машинного обучения

В. Э. Валиулин[+*1)], *А. В. Михеенков*[+*], *Н. М. Щелкачев*[×∘▽], *К. Д. Литасов*[+], *В. В. Бражкин*[+]

[+] *Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, 108840 Троицк, Москва, Россия*

[*] *Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), 141701 Долгопрудный, Россия*

[×] *Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия*

[∘] *Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия*

[▽] *Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", 123182 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 10 июля 2026 г.
После переработки 24 июля 2026 г.
Принята к публикации 31 июля 2026 г.

Проведено атомистическое исследование внутреннего ядра Земли. Использован нейросетевой потенциал взаимодействия, построенный с помощью машинного обучения. Нейронная сеть обучалась на данных первопринципных расчетов методом функционала плотности. В качестве модельной системы выбран многокомпонентный состав внутреннего ядра Земли, полученный на основе петрологических и экспериментальных оценок и содержащий несколько легких элементов (Si, S, O, C и H) в гексагональной плотноупакованной (ГПУ)-решетке Fe и Ni. Продемонстрировано согласие плотности, скоростей продольной и поперечной звуковых волн V_P и V_S с сейсмологической моделью PREM при PT-условиях внутреннего ядра. Радиальные функции распределения и коэффициенты диффузии демонстрируют суперионную природу внутреннего ядра. Полученные результаты при несоизмеримо меньших вычислительных затратах не уступают данным молекулярной динамики из первых принципов.

DOI: 10.7868/S3034576626090164

1. Введение. Внутреннее ядро Земли остается предметом большого числа исследований. Составляя всего 5 % от общего объема ядра, оно, однако, имеет большое значение из-за твердого состояния и заметно различных типов структурных неоднородностей. Средние значения плотности ядра Земли и профили сейсмических скоростей хорошо описываются моделью PREM [1]. Недавние усовершенствования сейсмологических методов позволили предложить более сложные, стратифицированные структуры на границах жидкого внешнего ядра [2, 3]. Оценки средних скоростей V_S во внутреннем ядре дают значения 3.39 ± 0.02 км/с вблизи верхней границы и 3.54 ± 0.02 км/с в центре, что на 3.4 ± 0.5 % ниже, чем в модели PREM [4].

Скачок плотности на границе внутреннего ядра составляет 0.6–0.9 г/см^3, что соответствует скачку V_P в 0.6–0.8 км/с [3]. Эти данные согласуются со значительным обеднением внутреннего ядра легкими элементами [5, 6].

Данные статических экспериментов с алмазными наковальнями при высоком давлении редко достигают давлений внутреннего ядра в 330–360 ГПа [7], что затрудняет прямое моделирование его состава и структуры. В этом случае теоретическое моделирование приобретает важнейшее значение. Одним из ключевых методов является *ab initio* молекулярная динамика [8–10]. Но, несмотря на очевидные достижения, даже фундаментальные вопросы о составе и структуре внутреннего ядра остаются дискуссионными. Это касается как стабильной структуры фазы железа – ГПУ или объемноцентрированная кубическая (ОЦК) [9, 11, 12], так и количества и состава примесей легких элементов, а также их влияния на структуру, уравнения состояния, скорости звука и упругие свойства [8, 13], линии плавления, фазовые диаграммы [14], вязкость, диффузионную подвижность [15–18] и теплопроводность [19]. Основными элементами, которые рассматриваются в качестве кандидатов на роль легких примесей в ядре Земли, являются кремний, сера, углерод, кислород и водород [6, 20, 21].

В последние годы широкое распространение получило моделирование материалов с использовани-

[1)] e-mail: valiulin@phystech.edu

ем глубокого машинного обучения (deep machine learning – DML) нейронных сетей. Методы DML имеют явные преимущества перед молекулярной динамикой из первых принципов. При почти той же точности результат достигается с вычислительными затратами на несколько порядков меньшими, что позволяет получать большее количество экспериментальных точек и включать в моделирование в тысячи раз большее количество атомов. С помощью этих методов можно получить практически любые термодинамические параметры и другие соответствующие физические свойства фаз при экстремальных давлениях и температурах.

Опубликовано большое количество работ по применению этого метода в науках о Земле и планетах (например, [22, 23]), в частности, при исследовании глубин Земли, включая мантию и ядро [24–26].

Недавние применения методов DML для изучения ядра Земли включают следующие важные результаты. Исследования упругости и вязкости ГПУ-Fe [27] указали на важную роль структурных дефектов и возможное соответствие ГПУ-Fe значениям V_s во внутреннем ядре. Оценки относительной стабильности ОЦК и ГПУ железа при условиях внутреннего ядра [12] указали на возможную стабильность ОЦК-Fe при самых высоких температурах и давлениях внутреннего ядра. Обнаружение структур ближнего порядка в расплавах Fe-Si и Fe-Si-O при давлениях ядра, которые соответствуют кристаллоподобным мотивам и поведению, близкому к твердому состоянию [25, 28]. Распределение серы между жидким и твердым железом показывает, что учет лишь одной серы не может объяснить скачок плотности на границе внутреннего ядра [29]. Определены границы взаимной растворимости кислорода и кремния в жидком железе с выводом о дифференциации Земли на силикатную мантию и металлическое ядро [24]. Преимущественное распределение водорода в жидкую фазу внешнего ядра, моделирование температуры плавления FeH_x при условиях границы внутреннего ядра [13]. Влияние кремния и кислорода на распределение водорода между внешним и внутренним ядром [30, 31].

В данной работе с использованием обучения нейронной сети методами DML мы получили межатомные потенциалы многокомпонентных металлических систем с малым количеством примесей и применили эти данные для моделирования внутреннего ядра Земли. Основной целью работы была демонстрация эффективности и применимости предложенных методов для дальнейшего более детального изучения конкретных задач, связанных не только с твердым внутренним ядром, но и с жидким внешним ядром.

2. Методика расчета.

2.1. Краткое описание алгоритма.

После задания типа решетки и элементного состава создается численный образец, далее он доводится до целевой температуры. Затем в расчетах участвует нейронная сеть, обученная на данных первопринципного квантового расчета.

Пакет молекулярной динамики LAMMPS определяет основные термодинамические параметры системы. Параллельно можно рассчитать средний квадрат смещения (диффузию), коэффициент вязкости, скорости звуковых волн, радиальную функцию распределения (radial distribution function – RDF) или корреляционные функции.

Все результаты были получены в кристаллической фазе, что контролировалось по форме RDF, скачку температуры при постоянной плотности (или плотности при постоянной температуре).

2.2. Нейронная сеть и машинное обучение.

Межатомный потенциал был построен на основе методов машинного обучения (MLIP), используя данные подхода density function theory (DFT) (энергия, силы, вириалы, электронная температура) как обучающую выборку. В качестве основного пакета выбран DeePMD [32] с дескрипторами se_a (радиус обрезания 5 Å), тремя скрытыми слоями (25, 50, 100 нейронов) и 20 угловыми нейронами; внешняя сеть содержала три слоя по 255 нейронов. Электронная температура учитывалась через параметр fparam [32]. Точность MLIP составила 10 мэВ/атом по энергии и 0.3 эВ/Å по силам.

Активное обучение выполнялось по алгоритму DP-GEN [29]: четыре реплики MLIP обучались на исходных данных, проводилась классическая молекулярная динамика (МД), наименее точные конфигурации отбирались по разбросу сил и добавлялись в базу после DFT-пересчета, затем цикл повторялся до сходимости. МД-моделирование расплава велось для 100–150 атомов с шагом 0.2 фс и длиной траектории 25000–100000 шагов в периодических граничных условиях.

Сплав нагревался/охлаждался от 3000 до 7000 K с термостатом Нозе–Гувера при давлениях 200–400 ГПа (основные расчеты – 350 ГПа). Химический состав соответствовал моделям Земли [6, 20]; начальные конфигурации – ОЦК, гранецентрированная кубическая (ГЦК) или ГПУ с атомами Fe и Ni, легкие элементы (H, C – в междоузлиях; S, O, Si – в узлах и междоузлиях). Для устойчивости

обучения концентрации легких элементов иногда искусственно завышались.

DFT-расчеты проводились в VASP [33] с функционалом PBE-GGA, энергией обрезания 1000 эВ и плотностью k-сетки 2000 точек на атом [34]. Магнитные степени свободы не учитывались, что оправдано для транспортных свойств в парамагнитных Fe-сплавах [35]. Более сложный подход, учитывающий магнитные свойства в MLIP, сейчас находится в разработке (см. [36]). Это направление и наших будущих исследований.

Для всех приведенных ниже результатов выполнялось не менее трех независимых прогонов с разными начальными распределениями скоростей и случайными перестановками атомов, сходимость контролировалась по стабилизации исследуемой величины (полной энергии, давления, плотности и упругих характеристик). Расчет считался завершенным, когда изменение этих величин за последние 20000 шагов не превышало 0.5 % от их среднего значения. Дополнительное удлинение траектории вдвое не выявило систематического дрейфа. Разброс же между независимыми прогонами не превышал 1 % для всех характеристик. Для верификации потенциала для нескольких опорных составов были проведены прямые DFT-МД расчеты (с теми же параметрами VASP) на траекториях длиной ~ 5 пс; отклонение предсказаний MLIP от DFT-данных по средней энергии не превысило 15 мэВ/атом, что подтверждает надежность построенного потенциала и воспроизводимость всех представленных результатов.

3. Результаты и обсуждение.

3.1. Концентрация легких элементов. Единого мнения об элементном составе внутреннего ядра пока нет. Бесспорными являются основной элемент – Fe, далее Ni и пять легких примесей Si, S, O (в очень малой концентрации), C и H, см. обзоры [6, 20, 21]. Этот элементный состав и был принят в работе.

Кристаллическая решетка твердого ядра из-за экстремального давления ($P \sim 350$ ГПа), очевидно, плотно упакована, либо ОЦК, либо ГПУ, в литературе обычно предпочтительнее ГПУ [7, 8, 20, 27, 37]. Мы рассматривали этот тип решетки.

В образце для численного исследования атомы Fe, Ni и двух более тяжелых примесей (Si и S) были помещены в узлы ГПУ-решетки, остальные (O, C и H) – в междоузлия. Исследовалось также влияние переноса кислорода в узлы решетки.

В расчетах были положены следующие концентрации элементов: Fe = 0.8211, Ni = 0.0426, Si = 0.0118, S = 0.0216, O = 0.0020, C = 0.0325 и H = 0.0683 (массовые пропорции: Fe = 0.9194, Ni = 0.0502, Si = 0.0067, S = 0.0139, O = 0.0007, C = 0.0078, H = 0.0014). Точные концентрации легких элементов неизвестны. Использованные значения попадают в диапазон составов из обзора [20]. Для некоторых элементов они выше медианного значения оценок из [20], для некоторых – ниже. Как показывают наши расчеты, изменение пропорций легких элементов в широком диапазоне при сохранении их общей массовой доли не меняет положения опорной точки, и почти не сдвигает основные результаты. Влияние же их общей массовой доли гораздо заметнее.

Для точки 1 термодинамические параметры: давление $P = 350.6$ ГПа, плотность $\rho = 13.0$ г/см^3, температура $T = 5500$ K, что с высокой точностью соответствует литературным данным [1, 20] в глубине ядра. Точка 2 получена переносом атомов кислорода в узлы решетки при неизменных концентрациях. $P = 350.0$ ГПа, другие параметры не изменились.

3.2. Суперионная природа внутреннего ядра. Интуитивно можно ожидать, что при экстремальных параметрах внутреннего ядра ($T \sim 5500$ K, $P \sim$ ~ 350 ГПа, $\rho \sim 13$ г/см^3) оно может представлять собой сложный суперионный кристалл. Это состояние вещества не является новым и изучается уже более полувека. Однако идея, что внутреннее ядро Земли – суперионный кристалл, появилась недавно [8, 10, 13, 37–40]. Таким образом, среди элементов ядра – Fe, Ni, Si, S, O, C и H – железо и никель занимают узлы решетки, и их самодиффузия незначительна; кремний и сера также находятся в узлах, но диффундируют сильнее; а три самых легких примеси, занимающие междоузлия, проявляют свойства жидкой фазы. Это наиболее явно проявляется в диффузии отдельных элементов [10, 37, 38, 41, 42], а также в парциальных радиальных функциях распределения [11, 42].

Форма кривой RDF позволяет надежно отличить жидкую фазу от кристаллической. В первом случае RDF(r) для больших r стремится к константе, во втором – это последовательность убывающих максимумов.

Все радиальные функции распределения усреднялись на достаточно длительном времени. Наглядную картину дает RDF для точки 1 (Fe, Ni, Si и S в узлах ГПУ-решетки, O, C, H в междоузлиях).

Радиальные функции распределения. На рисунках 1, 2 и 3 показаны радиальные функции распределения для отдельных элементов внутреннего ядра. Из рисунков 1, 2 и 3 видно, что основные элементы ядра (Fe и Ni) и более тяжелые примеси (S, Si) локализованы в узлах решетки, а самые легкие

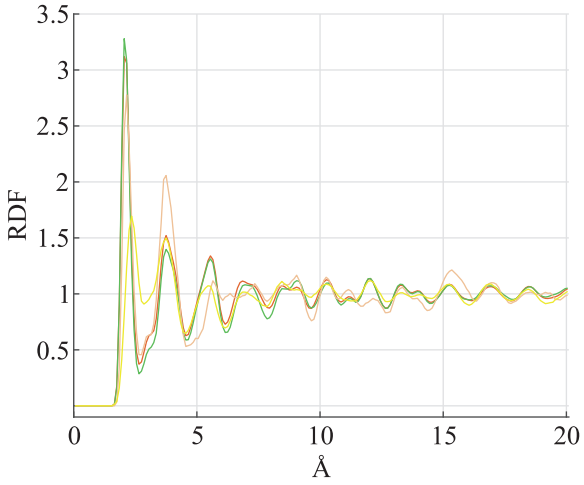

Рис. 1. (Цветной онлайн) Парциальные RDF для четырех тяжелых элементов – Fe (красный), Ni (зеленый), S (коричневый), Si (желтый). С небольшими флуктуациями картина в целом отражает радиальную функцию распределения ГПУ-решетки

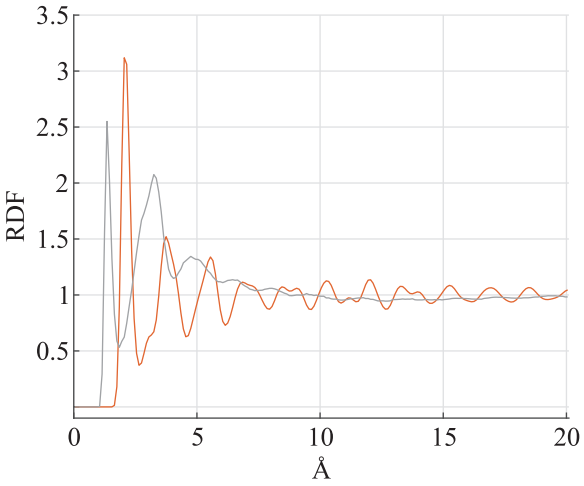

Рис. 2. (Цветной онлайн) Парциальная RDF для Fe (красный) и C (серый). Легкий элемент сосредоточен между координационными сферами ГПУ-решетки железа

примеси – углерод и водород – существуют в жидкой фазе. Результаты для кислорода не показаны, поскольку вследствие малой концентрации абсолютное число его атомов в расчетной выборке мало и недостаточно для надежного усреднения.

Для более детального рассмотрения – на рис. 1 оставлены RDF только четырех тяжелых элементов – Fe, Ni, S и Si. С небольшими флуктуациями картина в целом отражает радиальную функцию распределения ГПУ-решетки.

На рисунках 2 и 3 показано наложение RDF железа и двух "жидких" легких элементов: углерода на

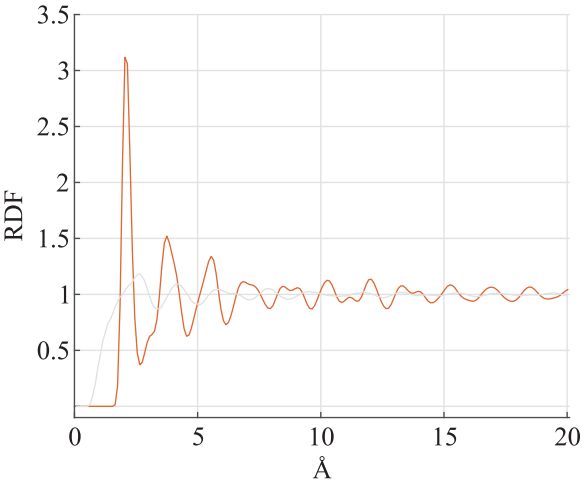

Рис. 3. (Цветной онлайн) Парциальная RDF для Fe (красный) и H (светло-серый). Легкий элемент сосредоточен между координационными сферами ГПУ-решетки железа

рис. и водорода на рис. 3. В обоих случаях видно, что легкие элементы концентрируются между координационными сферами ГПУ-решетки железа. Жидкостная асимптотика их кривых очевидна.

Общая картина представлена на рис. 4. Видно, что при переходе от водорода к железу "жидкостная" асимптотика RDF переходит в "кристаллическую".

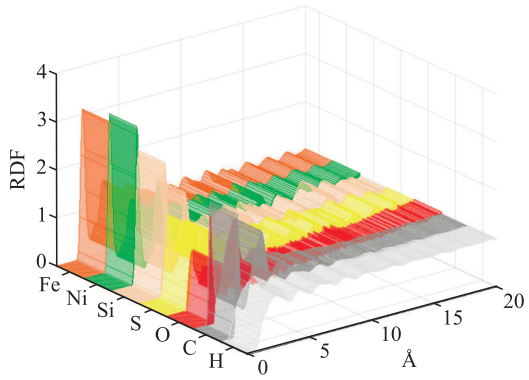

Рис. 4. (Цветной онлайн) Парциальные радиальные функции распределения. Различие в RDF видно для трех самых легких элементов (жидкий характер) и четырех более тяжелых (кристаллический). Результаты для кислорода не вполне корректны, поскольку число его атомов недостаточно для надежного усреднения. Термодинамические параметры $P \approx 350$ ГПа и $T \approx 5500$ K

Диффузия. Рассчитанные RDF позволяют говорить о суперионной фазе внутреннего ядра Земли. Более детальную картину дает анализ диффузии отдельных элементов. На рисунке 5 показаны временные зависимости среднего квадрата смещения (mean

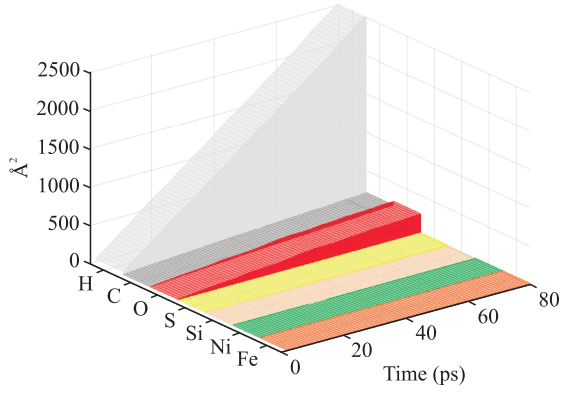

Рис. 5. (Цветной онлайн) Среднеквадратичное смещение $\langle r^2 \rangle(t)$ атомов железа, никеля и легких примесей

squared displacement – MSD) для всех элементов. Видно, что скорость диффузии трех легких элементов значительно превышает скорость диффузии Fe, Ni, Si и S, а движение атомов водорода радикально отличается от движения атомов других элементов. Это подтверждает и уточняет вывод о суперионной природе внутреннего ядра.

Для всех элементов наблюдается линейная зависимость среднего квадрата смещения от времени с высокой точностью (отклонения для кислорода объясняются недостаточным числом его атомов в образце). Полученные коэффициенты диффузии для всех элементов укладываются в диапазон литературных данных (см., например, [16, 20]). В логарифмическом масштабе $|\log D|$ (D в единицах $м^2/с$) для всех элементов почти равны: Fe = Ni = 9.56, Si = 9.68, S = 9.35, O = 8.26, C = 8.36 и H = 7.28. Использование в литературе по ядру нестандартных единиц – $|\log D|$ – обусловлено тем, что в исследуемой области коэффициенты диффузии малы D ($м^2/с$) $\ll 1$ и разбросаны в широком диапазоне значений.

Мы не приводим графики RDF и диффузии для точки 2 (атомы кислорода перенесены в узлы). За исключением кислорода, картина здесь практически такая же, как в точке 1. О различии точек 1 и 2 см. ниже при вычислении модулей и скоростей звука.

3.3. Модули упругости и скорости звуковых волн. Скорости звука, в отличие от других параметров ядра, измеряются непосредственно в сейсмических экспериментах. Поэтому их расчет является важным каналом проверки адекватности численного подхода. Отметим, что доступные оценки скорости поперечной волны V_S (S-share wave velocity) неточны, расхождения составляют от 2.5 до 4.5 км/с [6].

Скорости продольной V_P (P-compressional wave velocity) и поперечной V_S волн извлекаются из соответствующих мод деформации. Процедура их расчета следующая. Численный образец подвергается периодической деформации соответствующего типа, акцентирующей желаемые компоненты тензора напряжений. Для модуля объемного сжатия это "дышащая" периодическая мода вдоль трех координатных осей, для модуля сдвига – сдвиговая периодическая деформация.

Скорость продольной волны V_P. Регистрировалось изменение объема при однородной деформации. На каждом шаге деформации рассчитывается тензор напряжений. Он, конечно, недиагонален и, более того, диагональные элементы не совпадают друг с другом. Но, как и ожидается, в мегабарном диапазоне недиагональные компоненты значительно (на три порядка) меньше диагональных, а диагональные совпадают с высокой точностью (менее 0.1 %). Из полученных данных извлекается кривая давление–объем.

Опуская детали вычислений, представим результаты для модулей и скоростей звука. Для точки 1 изотермический модуль объемного сжатия $B =$ = 1270.1 ГПа, скорость звука $V_Ф = 10.1$ км/с. В адиабатическом режиме соответствующие значения $B =$ = 1299.2 ГПа и $V_Ф = 10.3$ км/с.

Для точки 2 изотермический модуль объемного сжатия $B = 1264.7$ ГПа, скорость звука $V_Ф = 9.9$ км/с. В адиабатическом режиме $B =$ = 1297.5 ГПа и $V_Ф = 10.1$ км/с.

Скорость поперечной волны V_S. При сдвиговой периодической деформации объем остается постоянным. Его контроль позволяет заключить, что деформация является чисто сдвиговой. Дальнейший расчет модуля сдвига аналогичен расчету модуля объемного сжатия, хотя численно более сложен. Мы представляем модуль сдвига только для точки 1 в адиабатическом режиме – $G = 178.7$ ГПа, скорость звука $V_S = 3.7$ км/с. Таким образом, полученная V_S для точки 1 в адиабатическом режиме оказывается почти в 3 раза меньше, чем V_P, оставаясь, тем не менее, в диапазоне, предполагаемом для внутреннего ядра.

3.4. Вязкость. Подвижная фракция суперионного кристалла внутреннего ядра находится не только в условиях экстремальных термодинамических параметров, но и в жестком геометрическом ограничении. Это делает определение вязкости чрезвычайно сложным. В ГПУ-решетке тензор вязкости жидких компонентов сильно анизотропен, что еще более усложняет задачу. Неудивительно, что оценки вязкости в этой области различаются на много порядков [15–17, 20, 43].

Для вычисления вязкости используются различные подходы. Ниже представлены результаты, полученные методом Грина–Кубо, т.е. выражение коэф-

фициента вязкости через интеграл по времени от автокорреляционной функции. Наша оценка коэффициента вязкости, усредненного по направлениям, составляет $\eta \approx 1\,\text{Па}\cdot\text{с}$, вязкость сильно анизотропна: $\eta \approx 0.05\,\text{Па}\cdot\text{с}$ в плоскости и $\eta \approx 2\text{Па}\cdot\text{с}$ в перпендикулярном направлении.

4. Заключение. В работе потенциал межатомного взаимодействия атомов железа и никеля с легкими элементами построен с помощью глубокого машинного обучения. Нейронная сеть обучалась на данных первопринципных расчетов методом функционала плотности. Для моделирования выбран многокомпонентный состав внутреннего ядра Земли согласно [20], Fe, Ni, пять легких элементов (Si, S, O, C, H) в ГПУ-решетке.

Продемонстрировано хорошее согласие расчетных значений плотности, и скоростей звука V_P и V_S с сейсмологической моделью PREM при PT-условиях внутреннего ядра. Суперионная природа внутреннего ядра впервые установлена на основании расчета радиальных функций распределения и коэффициентов диффузии отдельных элементов.

Предложенный алгоритм может быть применен для расчета фазовых диаграмм, границ плавления, вязкости и диффузионной подвижности элементов в твердой фазе железа. Полученные с помощью машинного обучения результаты не уступают данным молекулярной динамики из первых принципов. Это позволяет решать широкий круг термодинамических задач, связанных с недрами Земли и планет, с большей детализацией как по времени, так и по вычислительным ресурсам.

Н. М. Щелкачев выражает благодарность Объединенному суперкомпьютерному центру Российской академии наук (суперкомпьютер MVS-10P) и вычислительным ресурсам Центра коллективного пользования "Моделирование и обработка данных для установок мегасайенс" Национального исследовательского центра "Курчатовский институт" (http://ckp.nrcki.ru/), а также суперкомпьютерному центру "Говорун" Объединенного института ядерных исследований за предоставленные вычислительные мощности. Н. М. Щелкачев также благодарит ОИВТ РАН и Российский научный фонд за поддержку (грант # 25-29-01649).

Финансирование работы. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант # 25-29-01649).

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. A. Dziewonski and D. Anderson, "Preliminary reference Earth model", Phys. Earth Planet. Inter. **25**, 297 (1981).
2. П. Н. Гаврюшкин, Н. Н. Мартиросян, С. В. Ращенко, Д. Н. Сагатова, Н. Е. Сагатов, А. И. Семерикова, Т. М. Федотенко, К. Д. Литасов, "Первый экспериментальный синтез ортокарбоната Mg по реакции $MgCO_3 + MgO = Mg_2CO_4$ при давлениях нижней мантии Земли", Письма в ЖЭТФ **116**, 472 (2022) [P. Gavryushkin, N. Martirosyan, S. Rashchenko, D. Sagatova, N. Sagatov, A. Semerikova, T. Fedotenko, and K. Litasov, "First Experimental Synthesis of Mg Orthocarbonate by the $MgCO_3 + MgO = Mg_2CO_4$ Reaction at Pressures of the Earth's Lower Mantle", JETP Lett. **116**, 477 (2022)].
3. X. Ma and H. Tkalčić, "CCMOC: A new view of the Earth's outer core through the global coda correlation wavefield", Phys. Earth Planet. Inter. **334**, 106957 (2023).
4. T. Costa de Lima, T.-S. Pham, X. Ma, and H. Tkalčić, "An estimate of absolute shear-wave speed in the Earth's inner core", Nat. Commun. **14**, 4577 (2023).
5. K. Hirose, S. Labrosse, and J. Hernlund, "Composition and State of the Core", Annu. Rev. Earth Pl. Sc. **41**, 657 (2013).
6. K. D. Litasov and A. F. Shatskiy, "Composition of the Earth's core: A review", Russ. Geol. Geophys. **57**, 22 (2016).
7. D. Ikuta, E. Ohtani, H. Fukui, T. Sakai, D. Ishikawa, and A. Q. R. Baron, "Sound velocity of hexagonal closepacked iron to the Earth's inner core pressure", Nat. Commun. **13**, 7211 (2022).
8. W. Wang, Y. Li, J. P. Brodholt, L. Vočadlo, M. J. Walter, and Z. Wu, "Strong shear softening induced by superionic hydrogen in Earth's inner core", Earth Planet. Sc. Lett. **568**, 117014 (2021).
9. A. B. Belonoshko, J. Fu, and G. Smirnov, "Free energies of iron phases at high pressure and temperature: Molecular dynamics study", Phys. Rev. B **104**, 104103 (2021).
10. Y. He, S. Sun, D. Y. Kim, B. G. Jang, H. Li, and H.-k. Mao, "Superionic iron alloys and their seismic velocities in Earth's inner core", Nature **602**, 258 (2022).
11. A. B. Belonoshko and G. S. Smirnov, "A comparison of experimental and ab initio structural data on Fe under extreme conditions", Metals **13** (2023).
12. Z. Li and S. Scandolo, "Competing phases of iron at Earth's core conditions from deep-learning-aided ab-initio simulations", Geophys. Res. Lett. **51**, e2024GL110357 (2024).
13. L. Yuan and G. Steinle-Neumann, "Hydrogen distribution between the Earth's inner and outer core", Earth Planet. Sc. Lett. **609**, 118084 (2023).
14. I. Mashino, F. Miozzi, K. Hirose, G. Morard, and R. Sinmyo, "Melting experiments on the Fe–C binary system up to 255 GPa: Constraints on the carbon content in the Earth's core", Earth Planet. Sc. Lett. **515**, 135 (2019).

15. A. B. Belonoshko, J. Fu, T. Bryk, S. I. Simak, and M. Mattesini, "Low viscosity of the Earth's inner core", Nat. Commun. **10**, 2483 (2019).
16. W.-J. Li, Z. Li, Z. Ma, P. Zhang, Y. Lu, C. Wang, Q. Jia, X.-B. Cheng, and H.-D. Hu, "Ab initio determination on diffusion coefficient and viscosity of FeNi fluid under Earth's core condition", Sci. Rep. **12**, 21255 (2022).
17. S. Ritterbex and T. Tsuchiya, "Viscosity of HCP iron at Earth's inner core conditions from density functional theory", Sci. Rep. **10**, 6311 (2020).
18. Y. Xu, Y. He, S. Sun, W. Zhang, W. Dai, D. Y. Kim, and H. Li, "Viscosities of HCP iron alloys under Earth's inner core conditions", Geosci. Front. **16**, 101935 (2025).
19. M. Pozzo, C. Davies, D. Gubbins, and D. Alfè, "Thermal and electrical conductivity of solid iron and iron–silicon mixtures at Earth's core conditions", Earth Planet. Sci. Lett. **393**, 159 (2014).
20. K. Hirose, B. Wood, and L. Vočadlo, "Light elements in the Earth's core", Nat. Rev. Earth Environ. **2**, 645 (2021).
21. R. A. Fischer and W. F. McDonough, in *Earth's core composition and core formation*, A. Anbar and D. Weis (editors), *Treatise on Geochemistry*, Third edition (Elsevier, Oxford, 2025), p. 17.
22. M. Petrelli, "Machine Learning in Petrology: State-of-the-Art and Future Perspectives", J. Petrol. **65**, egae036 (2024).
23. H. Wang, Z. Lv, S. Kumar, and Q. Wang, "Applications of machine learning to high temperature and high pressure environments: A literature review", APL Mach. Learn. **2**, 046111 (2024).
24. C. Zhang, L. Tang, Y. Sun, K.-M. Ho, R. M. Wentzcovitch, and C.-Z. Wang, "Deep machine learning potential for atomistic simulation of Fe–Si–O systems under Earth's outer core conditions", Phys. Rev. Mater. **6**, 063802 (2022).
25. H. Sun, C. Zhang, L. Tang, R. Wang, W. Xia, and C.-Z. Wang, "Molecular dynamics simulation of Fe–Si alloys using a neural network machine learning potential", Phys. Rev. B **107**, 224301 (2023).
26. Z. Li and S. Scandolo, "Deep-learning interatomic potential for iron at extreme conditions", Phys. Rev. B **109**, 184108 (2024).
27. Z. Li and S. Scandolo, "Elasticity and viscosity of HCP iron at Earth's inner core conditions from machine learning-based large-scale atomistic simulations", Geophys. Res. Lett. **49**, e2022GL101161 (2022).
28. L. Tang, C. Zhang, Y. Sun, K.-M. Ho, R. M. Wentzcovitch, and C.-Z. Wang, "Structure and dynamics of $Fe_{90}Si_3O_7$ liquids close to Earth's liquid core conditions", Phys. Rev. B **108**, 064104 (2023).
29. Y. Zhang, H. Wang, W. Chen, J. Zeng, L. Zhang, H. Wang, and W. E, "DP-GEN: A concurrent learning platform for the generation of reliable deep learning based potential energy models", Comput. Phys. Commun. **253**, 107206 (2020).
30. T. Liu and Z. Jing, "Hydrogen and silicon are the preferred light elements in Earth's core", Commun. Earth Environ. **5**, 282 (2024).
31. Z. Zhang, W. Wang, J. Liu, Y. Zhang, R. N. Mitchell, and Z. Zhang, "Oxygen Driving Hydrogen Into the Inner Core: Implications for the Earth's Core Composition", Geophys. Res. Lett. **52**, e2024GL110315 (2025).
32. H. Wang, L. Zhang, J. Han, and E. W. Weinan, "DeePMD-kit: A deep learning package for many-body potential energy representation and molecular dynamics", Comput. Phys. Commun. **228**, 178 (2018).
33. G. Kresse and J. Furthmüller, "Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set", Comput. Mater. Sci. **6**, 15 (1996).
34. Y. Wang, P. Wisesa, A. Balasubramanian, S. Dwaraknath, and T. Mueller, "Rapid generation of optimal generalized Monkhorst-Pack grids", Comput. Mater. Sci. **187**, 110100 (2021).
35. E. O. Khazieva, N. M. Chtchelkatchev, and R. E. Ryltsev, "Accuracy and limitations of machine-learned interatomic potentials for magnetic systems: A case study on Fe–Cr–C", ARXIV.2507.18935 (2025).
36. T. Yang, Z. Cai, Z. Huang, W. Tang, R. Shi, A. Godfrey, H. Liu, Y. Lin, C.-W. Nan, M. Ye, L. Zhang, K. Wang, H. Wang, and B. Xu, "Deep learning illuminates spin and lattice interaction in magnetic materials", Phys. Rev. B **110**, 064427 (2024).
37. S. Sun, Y. He, J. Yang, Y. Lin, J. Li, D. Y. Kim, H. Li, and H.-k. Mao, "Superionic effect and anisotropic texture in Earth's inner core driven by geomagnetic field", Nat. Commun. **14**, 1656 (2023).
38. H. Yang, J. M. R. Muir, and F. Zhang, "Iron hydride in the Earth's inner core and its geophysical implications", Geochem. Geophys. Geosyst. **23**, e2022GC010620 (2022).
39. K. de Villa, F. González-Cataldo, and B. Militzer, "Double superionicity in icy compounds at planetary interior conditions", Nat. Commun. **14**, 7580 (2023).
40. I. Park, Y. He, J. Shim, and D. Y. Kim, "Electride formation of HCP-iron at high pressure: Unraveling the origin of the superionic state of iron-rich compounds in rocky planets", Adv. Sci. **11** (2024).
41. A. B. Belonoshko, S. I. Simak, W. Olovsson, and O. Y. Vekilova, "Elastic properties of body-centered cubic iron in Earth's inner core", Phys. Rev. B **105**, L180102 (2022).
42. M. Ghosh, S. Zhang, L. Hu, and S. X. Hu, "Cooperative diffusion in body-centered cubic iron in Earth and super-Earth's inner core conditions", J. Phys.: Condens. Matter **35**, 154002 (2023).
43. H. Tkalčić, S. Wang, and T.-S. Pham, "Shear Properties of Earth's Inner Core", Annu. Rev. Earth Pl. Sc. **50**, 153 (2022).