

STUDY OF THE CORRELATION BETWEEN THE RADIAL DISTRIBUTION FUNCTION AND BOND ANGLE DISTRIBUTION IN Mg_2SiO_4 SOLID

Pham Huu Kien, Nguyen Hong Linh, Duong Thi Lich, Ngo Tuan Ngoc, Dang Thi Thu Huong, Giap Thi Thuy Trang*

TNU - University of Education

ARTICLE INFO	ABSTRACT
Received: 26/01/2021 Revised: 28/4/2021 Published: 04/5/2021	In this paper, the characteristics about topology of SiO_x and MgO_n units in Mg_2SiO_4 solid at different pressures are investigated by molecular dynamics simulation to clarify its microstructure under compression. The structure of Mg_2SiO_4 solid is considered through the pair radial distribution function and bond angle distribution. The result shows that the tight correlation between the pair radial distribution function Si-Si, Mg-Mg and bond angle distribution Si-O-Si, Mg-O-Mg, respectively. The characteristic change of pair radial distribution function Si-Si, Mg-Mg under compression is also discussed in detail.
KEYWORDS Simulation Mg_2SiO_4 Solid Topology Correlation	

NGHIÊN CỨU SỰ TƯƠNG QUAN GIỮA HÀM PHÂN BỐ XUYÊN TÂM VÀ PHÂN BỐ GÓC LIÊN KẾT TRONG HỆ Mg_2SiO_4 RẮN

Phạm Hữu Kiên, Nguyễn Hồng Linh, Dương Thị Lịch, Ngô Tuấn Ngọc, Đặng Thị Thu Hương, Giáp Thị Thùy Trang*

Trường Đại học Sư phạm – ĐH Thái Nguyên

THÔNG TIN BÀI BÁO	TÓM TẮT
Ngày nhận bài: 26/01/2021 Ngày hoàn thiện: 28/4/2021 Ngày đăng: 04/5/2021	Trong bài báo này, đặc trưng hình học của các đa diện SiO_x và MgO_n trong hệ Mg_2SiO_4 rắn theo áp suất khác nhau được mô phỏng bằng phương pháp động lực học phân tử. Cấu trúc của hệ Mg_2SiO_4 rắn được phân tích thông qua hàm phân bố xuyên tâm cặp và phân bố góc liên kết. Kết quả phân tích cho thấy có mối tương quan chặt chẽ giữa hàm phân bố xuyên tâm cặp Si-Si, Mg-Mg và phân bố góc liên kết Si-O-Si, Mg-O-Mg tương ứng. Sự thay đổi đặc trưng của hàm phân bố xuyên tâm cặp Si-Si, Mg-Mg theo áp suất cũng được thảo luận chi tiết.
TỪ KHÓA Mô phỏng Mg_2SiO_4 Rắn Đặc trưng hình học Tương quan	

DOI: <https://doi.org/10.34238/tnu-jst.3948>

* Corresponding author. Email: tranggtt@tnue.edu.vn

1. Giới thiệu

Mg_2SiO_4 là vật liệu quan trọng, có nhiều ứng dụng trong công nghệ và đời sống như gạch chịu lửa, màng gốm xốp cho các lò phản ứng, vật liệu nha khoa, xử lý rác thải hạt nhân... Ngoài ra, Mg_2SiO_4 là một trong những thành phần chủ yếu của lớp vỏ Trái đất. Vì vậy, hiểu rõ cấu trúc của vật liệu này là rất quan trọng đối với ngành khoa học vật liệu và vật lý địa cầu [1]-[6]. Với hệ Mg_2SiO_4 rắn, thực nghiệm tán xạ neutron và nhiễu xạ tia X [7]-[9] cho thấy: nguyên tử Si có số phối trí 4,0, tạo thành tứ diện SiO_4 với khoảng cách liên kết Si-O trung bình là 1,62 Å, nguyên tử Mg có số phối trí trung bình là 4,5, khoảng cách liên kết Mg-O là 2,00 Å. Thừa số cấu trúc tổng thể trên cơ sở tán xạ neutron cho thấy phân bố khoảng cách liên kết Mg-O không đối xứng. Do đó, đa diện phối trí của MgO bị bóp méo và khoảng cách Mg-O phân bố trong một khoảng rộng.

Khác với phương pháp thực nghiệm, mô phỏng là một phương pháp hiệu quả để nghiên cứu vi cấu trúc của các hệ ở cả trạng thái rắn và lỏng, đặc biệt ở nhiệt độ và áp suất cao. Mô phỏng trong công trình [10] chỉ ra khoảng cách Mg-O trung bình trong khối đa diện MgO_4 là khoảng 1,94 Å. Tuy nhiên, trong công trình [11] chỉ ra, có 4 nguyên tử O liên kết với Mg ở khoảng cách 2,00 Å và hai nguyên tử O khác có khoảng cách 2,20 Å. Kết quả này phù hợp với mô phỏng gần đây cho thấy nguyên tử Mg có số phối trí 6 [12]. Các nguyên tử Mg có phối trí bát diện tạo thành bát diện MgO_6 méo với khoảng cách Mg-O trung bình là 2,07 Å và số phối trí trung bình là 5,7. Kết quả mô phỏng Mg_2SiO_4 ở trạng thái lỏng cho thấy, khi áp suất tăng phối trí của nguyên tử Si tăng từ 4 lên 6. Do đó Mg_2SiO_4 ở trạng thái lỏng có sự chuyển pha cấu trúc khi tăng áp suất [13], [14]. Các nghiên cứu về hệ Mg_2SiO_4 lỏng bằng mô phỏng cũng đã được báo cáo trong các công trình [14]-[16]. Hầu hết nghiên cứu này tập trung vào khảo sát các đặc điểm cấu trúc và động lực học (hệ số khuếch tán, độ nhớt và chuyển đổi cấu trúc).

Trong bài báo này, mô phỏng động lực học phân tử (ĐLHPT) được thực hiện cho hệ Mg_2SiO_4 rắn chứa 3500 nguyên tử. Bài báo tập trung nghiên cứu cấu trúc hình học của các đa diện SiO_x , MgO_n , mối tương quan giữa các hàm phân bố xuyên tâm (HPBXT) và phân bố góc liên kết (PBGLK).

2. Phương pháp nghiên cứu

Mẫu Mg_2SiO_4 rắn gồm 3500 nguyên tử (500 nguyên tử Si, 2000 nguyên tử O và 1000 nguyên tử Mg) được dựng bằng phương pháp mô phỏng ĐLHPT ở nhiệt độ 500 K trong khoảng áp suất từ 0-100 GPa với điều kiện biên tuần hoàn và thế tương tác Oganov. Chi tiết về thế tương tác Oganov có thể tham khảo trong các công trình [11], [17].

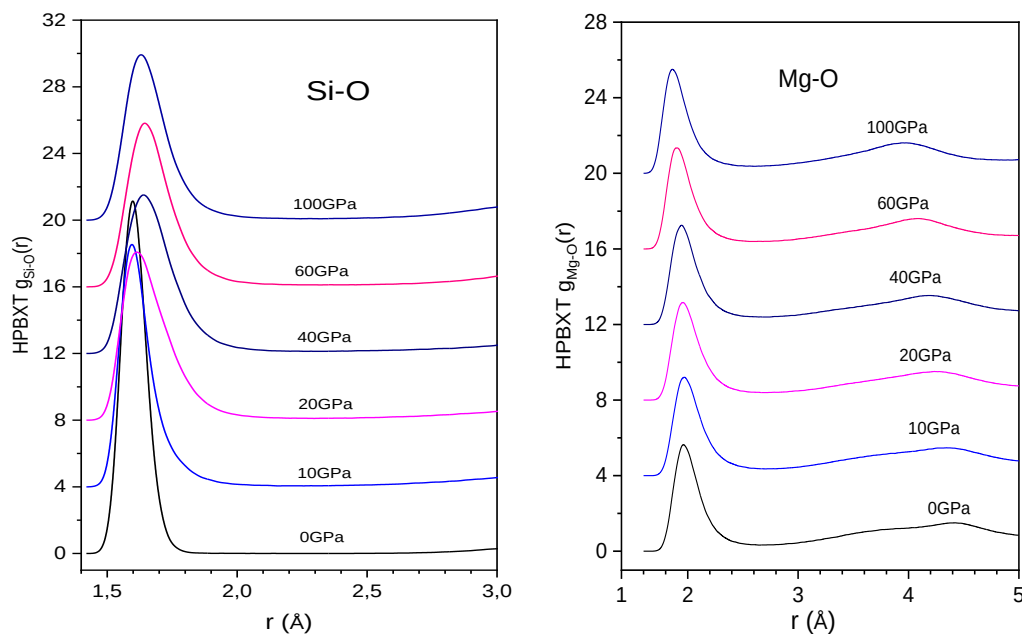
Ban đầu, cấu hình được tạo ra bằng cách gieo ngẫu nhiên tất cả các nguyên tử trong hộp mô phỏng với mật độ thực của Mg_2SiO_4 rắn là 3,20 g/cm³. Tiếp theo, mẫu được nung đến 6000 K để loại bỏ cấu hình nhớ ban đầu. Ở 6000 K, mẫu được hồi phục trong 2×10^5 bước mô phỏng. Sau đó, mẫu lần lượt được làm lạnh xuống 5000, 4000, 3000 và cuối cùng xuống 500 K. Ở mỗi nhiệt độ, mẫu được hồi phục trong 2×10^5 bước mô phỏng. Tiếp theo, mẫu 500 K và ở áp suất phòng (0 GPa) được hồi phục trong 10^6 bước mô phỏng (sử dụng mô hình NPT). Tiếp theo, các mẫu ở nhiệt độ 500 K và áp suất khác nhau 5, 10, 15, 20, 25, 30, 40, 60, 80 và 100 GPa được tạo ra bằng cách nén mẫu 0 GPa đến áp suất tương ứng. Ở 500 K và các áp suất từ 0 đến 100 GPa, mỗi mẫu được hồi phục trong 2×10^6 bước mô phỏng.

3. Kết quả và bàn luận

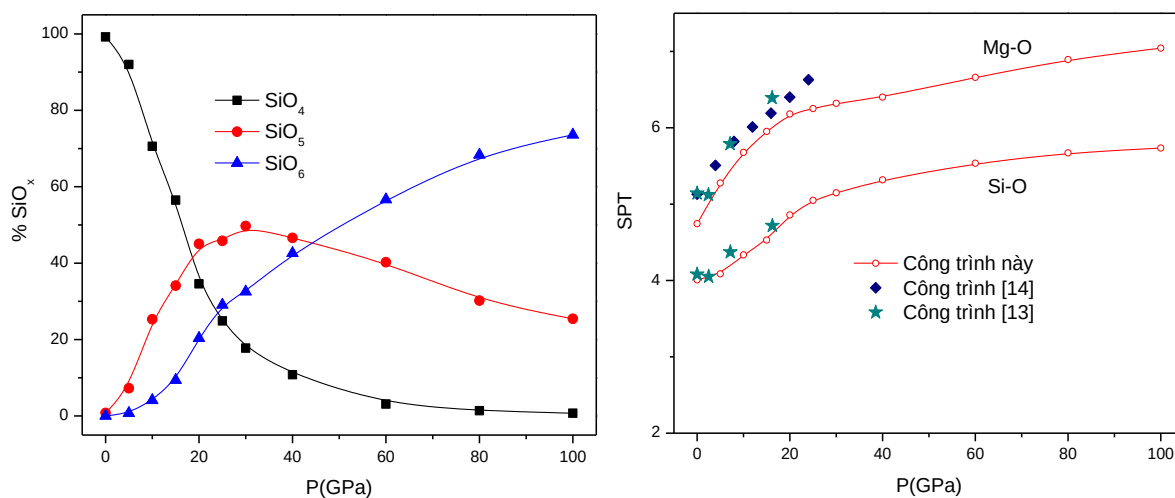
Hình 1 chỉ ra HPBXT của các cặp Si-O và Mg-O ở các áp suất khác nhau. Trong khoảng áp suất 0-15 GPa, vị trí đỉnh thứ nhất của HPBXT Si-O khoảng 1,60 Å và hầu như không phụ thuộc vào áp suất. Trên 15 GPa, vị trí đỉnh thứ nhất của HPBXT Si-O có xu hướng dịch chuyển sang phải khi áp suất tăng đến 40 GPa. Vị trí đỉnh thứ nhất ở 40 GPa là 1,64 Å. Trên 40 GPa, đỉnh thứ nhất của HPBXT Si-O có xu hướng dịch chuyển sang trái. Ở 100 GPa đỉnh thứ nhất là 1,64 Å.

Trái lại, trong khoảng 0-100 GPa, đỉnh thứ nhất của HPBXT Mg-O có xu hướng dịch chuyển sang trái khi áp suất tăng, cụ thể từ vị trí 1,98 Å xuống 1,85 Å.

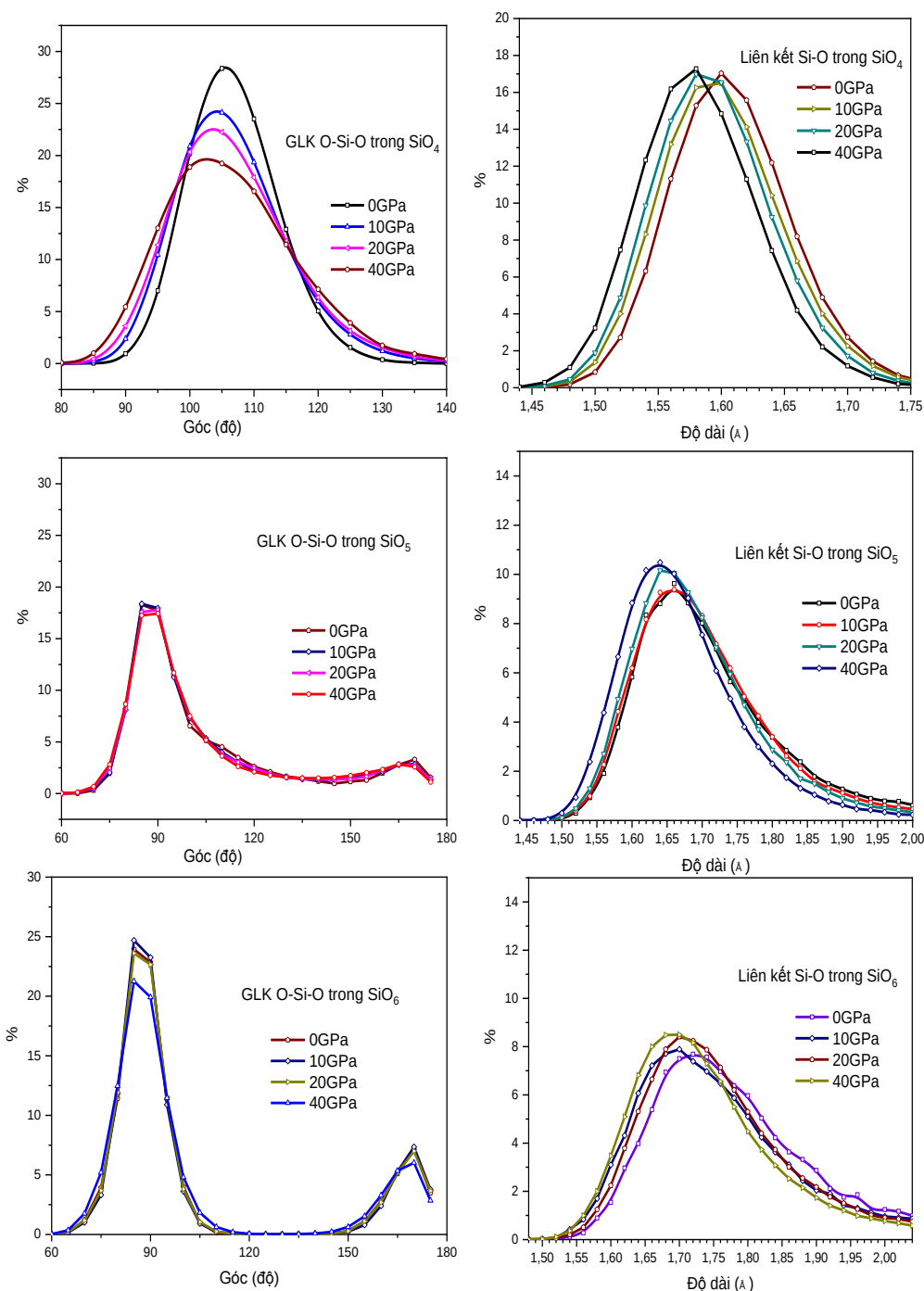
Hình 2 chỉ ra phân bố số phối trí của các cặp Si-O và Mg-O theo áp suất. Kết quả cho thấy ở áp suất phòng, tất cả các nguyên tử Si đều có phối trí 4 và hình thành đơn vị cấu trúc tứ diện SiO_4 .



Hình 1. HPBXT cặp Si-O và Mg-O ở các áp suất khác nhau



Hình 2. Tỷ lệ SiO_x và số phối trí (SPT) Si-O và Mg-O theo áp suất trong công trình này và số liệu trong [13], [14]



Hình 3. PBGLK và ĐDLK trong SiO_x theo áp suất

Điều này cũng có nghĩa là số phối trí Si-O trung bình là 4,0 ở áp suất 0 GPa. Khi tăng áp suất, số lượng nguyên tử Si có phối trí 4 giảm, trong khi số lượng nguyên tử Si có phối trí 5 và 6 tăng, hình thành các đa diện SiO_5 và SiO_6 . Số lượng SiO_5 tăng theo áp suất và đạt giá trị lớn nhất khoảng 50% ở 30 GPa. Trên 30 GPa, số lượng SiO_5 giảm theo áp suất. Ở 100 GPa, SiO_5 là 25,3%. Số nguyên tử Si có phối trí 6 tăng dần theo áp suất và đạt giá trị 73,5% ở 100 GPa. Số

phối trí Si-O trung bình tăng mạnh theo áp suất đến 30 GPa. Số phối trí Si-O trung bình ở 30 GPa là khoảng 5,20. Trên 30 GPa, số phối trí Si-O trung bình tăng nhẹ theo áp suất và đạt giá trị 5,73 ở 100 GPa. Số phối trí Mg-O trung bình tăng mạnh từ 4,75 ở 0 GPa lên 6,18 ở 20 GPa. Trên 20 GPa, số phối trí Mg-O trung bình tăng nhẹ theo áp suất và đạt giá trị 7,04 ở 100 GPa. Sự thay đổi của số phối trí trung bình Mg-O và Si-O khi nén phù hợp tốt với số liệu mô phỏng trong các công trình [13], [14].

Hình 3 chỉ ra phân bố góc liên kết O-Si-O và độ dài liên kết Si-O (PBGLK và ĐDLK) trong SiO_x ở các áp suất khác nhau. Có thể thấy rằng, góc liên kết O-Si-O trong SiO_4 có dạng hàm phân bố Gauss và thay đổi nhẹ theo áp suất. Khi áp suất tăng, PBGLK O-Si-O trong các đơn vị SiO_4 có xu hướng hơi dịch chuyển sang trái và rộng hơn một chút. Điều này làm cho chiều cao của đỉnh giảm đáng kể khi tăng áp suất. Trái lại, PBGLK O-Si-O trong các đa diện SiO_5 có đỉnh chính ở khoảng 90° và một đỉnh phụ nhỏ ở khoảng 170° và nó hầu như không thay đổi theo áp suất. PBGLK O-Si-O trong các đơn vị SiO_6 có đỉnh chính ở khoảng 85° và đỉnh nhỏ ở 170° . Khi tăng áp suất, góc liên kết phân bố trong một khoảng rộng hơn một chút và chiều cao của đỉnh thay đổi đáng kể.

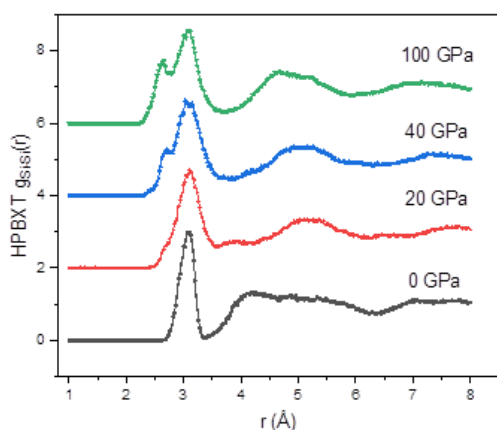
Thêm nữa, hình 3 cũng cho thấy rằng, phân bố ĐDLK Si-O trong SiO_4 có dạng hàm phân bố Gauss và chúng có xu hướng dịch chuyển nhẹ sang trái khi áp suất tăng. Ở áp suất khí quyển, phân bố ĐDLK Si-O trong SiO_4 có đỉnh cực đại ở vị trí khoảng 1,60 Å. Ở 40 GPa, đỉnh cực đại dịch chuyển đến vị trí 1,56 Å. Ở 5 GPa, phân bố ĐDLK Si-O trong SiO_5 có đỉnh cực đại tại vị trí 1,68 Å. Trong khoảng 0-30 GPa, đỉnh cực đại có xu hướng dịch chuyển nhẹ sang trái khi áp suất tăng. Trên 30 GPa, đỉnh này dịch chuyển mạnh sang trái khi áp suất tăng. Ở 100 GPa, vị trí đỉnh là 1,60 Å. Tương tự như phân bố ĐDLK Si-O cũng nhận được trong các đơn vị SiO_5 và SiO_6 . Kết quả cho thấy Si-O trong các đơn vị SiO_6 lớn hơn độ dài liên kết trong SiO_5 và độ dài liên kết trong SiO_5 lớn hơn độ dài liên kết trong SiO_4 . Sự khác biệt về ĐDLK Si-O trong SiO_4 , SiO_5 và SiO_6 có thể được giải thích như sau: Góc liên kết O-Si-O trung bình trong SiO_4 lớn hơn góc liên kết trong SiO_5 và SiO_6 . Do đó, khoảng cách O-O trung bình trong đa diện SiO_5 và SiO_6 nhỏ hơn trong SiO_4 . Nói cách khác, sự tăng số phối trí Si-O dẫn đến sự tăng chiều dài liên kết Si-O, tương tự như sự gia tăng chiều dài liên kết Si-O trong thủy tinh SiO_2 tinh khiết khi nén. Đối với độ dài liên kết Mg-O, HPBXT Mg-O trong hình 1 cho thấy độ dài liên kết Mg-O trung bình có xu hướng giảm theo áp suất. Ở áp suất khí quyển, độ dài liên kết Mg-O trung bình là 1,98 Å. Giá trị này giảm xuống còn 1,85 Å ở 100 GPa. Có nghĩa là sự tăng số phối trí Mg-O không làm tăng chiều dài liên kết Mg-O trung bình. Điều này được giải thích như sau: Đơn vị phối trí MgO_n (với $n = 4-10$) không bền; độ dài liên kết Mg-O phân bố trong một phạm vi rộng; độ dài liên kết Mg-O dài hơn Si-O. Do đó, sự gia tăng độ dài liên kết Mg-O do sự tăng số phối trí Mg-O là khá nhỏ so với sự giảm của nó do áp suất nén. Đó là lý do tại sao độ dài liên kết Mg-O trung bình giảm khi áp suất tăng. Sự tăng nồng độ SiO_5 và SiO_6 khi nén dẫn đến sự tăng chiều dài liên kết Si-O trung bình. Trong khoảng 0-40 GPa, nồng độ SiO_5 và SiO_6 tăng mạnh theo áp suất dẫn đến tăng chiều dài liên kết Si-O trung bình. Đó là lý do tại sao đỉnh đầu tiên của HPBXT Si-O dịch chuyển sang phải.

Như chúng ta biết, trật tự tầm trung liên quan đến liên kết giữa các đơn vị cấu trúc SiO_x và MgO_n . Đặc trưng của trật tự tầm trung thể hiện trong các HPBXT Si-Si, Mg-Mg. Hình 4 và Hình 5 lần lượt cho thấy HPBXT Si-Si và PBGLK Si-O-Si ở các áp suất khác nhau. Dưới 20 GPa, HPBXT Si-Si có cực đại thứ nhất ở vị trí xấp xỉ 3,10 Å. Tại 40 GPa, HPBXT Si-Si xuất hiện một đỉnh phụ bên trái. Độ cao của đỉnh phụ tăng theo áp suất và có xu hướng dịch sang trái khi áp suất tăng. Tại 100 GPa, đỉnh cực đại thứ nhất của HPBXT Si-Si tách thành hai đỉnh, đỉnh chính ở vị trí xấp xỉ 3,10 Å và đỉnh phụ ở vị trí khoảng 2,60 Å. Sự tách đỉnh thứ nhất HPBXT Si-Si được cho là: khoảng cách Si-Si ($d_{\text{Si-Si}}$) có thể được xác định từ góc liên kết Si-O-Si và độ dài liên kết Si-O theo công thức (1):

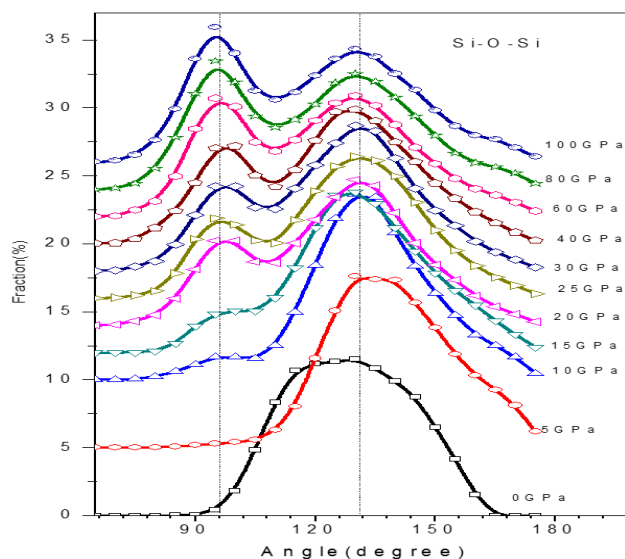
$$d_{\text{Si-Si}} = \sqrt{d_{\text{Si-O}}^2 + d_{\text{Si-O}}^2 - 2 \cdot d_{\text{Si-O}} \cdot d_{\text{Si-O}} \cdot \cos(\text{Si} - \text{O} - \text{Si})} \quad (1)$$

Ở đây d_{Si-Si} là khoảng cách giữa Si-Si, d_{Si-O} là độ dài liên kết Si-O và $\alpha = Si-O-Si$ là góc liên kết Si-O-Si. Dưới 15 GPa, PBGLK Si-O-Si có một đỉnh cực đại ở 134° , độ dài liên kết Si-O là khoảng 1,60 Å.

Với $d_{Si-O} \sim 1,60$ Å và $\alpha \sim 136^\circ$, thì d_{Si-Si} là 3,08 Å. Theo biểu thức (1) giá trị của khoảng cách Si-Si là 3,6 Å, tương ứng với vị trí của đỉnh chính của HPBXT Si-Si. Ở áp suất trên 15 GPa, PBGLK Si-O-Si có hai cực đại ở vị trí khoảng $95 - 98^\circ$ và $132 - 135^\circ$. Khoảng cách liên kết Si-Si được tính theo công thức (1) với $d_{Si-O} \sim 1,60 - 1,66$ Å và $\alpha \sim 95 - 98^\circ$ là khoảng 2,40 - 2,60 Å, với $\alpha \sim 132 - 135^\circ$ là khoảng 2,90 - 3,07 Å. Hai giá trị độ dài liên kết Si-Si này tương ứng với hai đỉnh đầu tiên của HPBXT Si-Si. Phân tích cho thấy khoảng cách Si-Si có thể được xác định bằng công thức (1). Kết quả chứng tỏ rằng có một mối tương quan chặt chẽ giữa HPBXT Si-Si và PBGLK Si-O-Si. Sự phân tách đỉnh đầu tiên của HPBXT Si-Si khi tăng áp suất nên liên quan đến sự thay đổi trật tự tầm trung. Ở áp suất thấp, hầu hết các đa diện SiO_x liên kết với nhau thông qua một nguyên tử O chung liên kết góc chung. Ở áp suất cao, trong mạng -Si-O-Si- hình thành liên kết chung cạnh và liên kết chung mặt.



Hình 4. HPBXT Si-Si theo áp suất



Hình 5. PBGLK Si-O-Si theo áp suất

Tương tự như cặp Si-Si, khoảng cách liên kết Mg-Mg (d_{Mg-Mg}) cũng có thể được xác định thông qua công thức (2).

$$d_{Mg-Mg} = \sqrt{d_{Mg-O}^2 + d_{Mg-O}^2 - 2 \cdot d_{Mg-O} \cdot d_{Mg-O} \cdot \cos(Mg-O-Mg)} \quad (2)$$

Theo công thức (2), khoảng cách Mg-Mg tính được là 2,85 Å tại áp suất phòng và khoảng 2,62 Å ở áp suất cao. Khoảng cách Mg-Mg được tính toán qua công thức (2) cũng phù hợp tốt với kết quả mô phỏng (Bảng 1). Trên 15 GPa, PBGLK Mg-O-Mg xuất hiện một bờ nhỏ ở vị trí khoảng 145° . Ứng với góc liên kết Mg-O-Mg 145° , khoảng cách Mg-Mg được tính qua công thức (2) là khoảng 3,80 Å [13], [14].

Bảng 1. Kết quả mô phỏng các đặc trưng của HPBXT Mg-Mg ở các áp suất

Áp suất GPa)	0	10	20	40	60	100
Vị trí đỉnh	2,85	2,80	2,78	2,63	2,63	2,62
Độ cao đỉnh	2,20	2,20	2,20	2,10	2,10	2,00

4. Kết luận

Hình dạng của các khối đa diện SiO_5 và SiO_6 thay đổi không đáng kể theo áp suất. Tuy nhiên, hình dạng của các tứ diện SiO_4 bị biến dạng mạnh khi tăng áp suất. Có mối tương quan chặt chẽ

giữa các HPBXT cặp với PBGLK và ĐDLK tương ứng. Khoảng cách liên kết Si-Si, Mg-Mg có thể được xác định thông qua PBGLK và ĐDLK Si-Si, Mg-Mg tương ứng. Sự hình thành các liên kết chung cạnh và chung mặt giữa các đa diện SiO_4 ở áp suất cao là nguyên nhân gây ra sự tách đỉnh cực đại thứ nhất của HPBXT Si-Si. Mối tương quan giữa các đặc trưng cấu trúc và các đỉnh cực đại của HPBXT có thể đưa ra một phương pháp để xác định sự thay đổi cấu trúc vi mô của hệ Mg_2SiO_4 rắn theo áp suất.

Lời cảm ơn

Nghiên cứu này được tài trợ bởi chương trình Nghiên cứu Khoa học và Công nghệ Trường Đại học Sư phạm - Đại học Thái Nguyên cho Đề tài Cấp Cơ sở năm 2021, mã số: CS-2021.

TÀI LIỆU THAM KHẢO/ REFERENCES

- [1] B. B. Karki and L. P. Stixrude, "Viscosity of MgSiO_3 liquid at Earth's mantle conditions: implications for an early magma ocean," *Science*, vol. 328, no. 5979, pp. 740-742, 2010.
- [2] T. Sakai et al., Experimental and theoretical thermal equations of state of MgSiO_3 post-perovskite at multi-megabar pressures," *Sci Rep*, vol. 6, no. 22652, pp. 1-8, 2016.
- [3] N. Tomioka and T. Okuchi, A new high-pressure form of Mg_2SiO_4 highlighting diffusion less phase transitions of olivine," *Sci Rep*, vol. 7, no. 1, pp. 1-9, 2017.
- [4] G. Mountjoy, B. M. Al-Hasni, and C. Storey, "Structural organisation in oxide glasses from molecular dynamics modelling," *J. Non-Cryst. Solids*, vol. 357, pp. 2522-2529, 2011.
- [5] A. Pedone, G. Malavasi, M. C. Menziani, U. Segre, and A. N. Cormack, "Role of Magnesium in Soda-Lime Glasses: Insight into Structural, Transport, and Mechanical Properties through Computer Simulation," *J. Phys. Chem. C*, vol. 112, no. 29, pp. 11034-11041, 2008.
- [6] C. -C. Lina, S. -F. Chenb, L. -G. Liua, and C. -C. Lia, "An ion structure and elasticity of $\text{Na}_2\text{O-MgO-SiO}_2$ glasses," *J. Non-Crystalline Solids*, vol. 353, no. 4, pp. 413-425, 2007.
- [7] L. Cormier and G. J. Cuello, "Mg coordination in a MgSiO_3 glass using neutron diffraction coupled with isotopic substitution," *Phys. Rev. B*, vol. 83, no. 22, 224204, 2011.
- [8] M. C. Wilding, C. J. Benmore, J. A. Tangeman, and S. Sampath, "Coordination changes in magnesium silicate glasses," *Europhys. Lett.*, vol. 67, pp. 212-218, 2004.
- [9] T. Taniguchi, M. Okuno, and T. Matsumoto, "X-ray diffraction and EXAFS studies of silicate glasses containing Mg, Ca and Ba atoms," *J. Non-Cryst. Solids*, vol. 211, 56, 1997.
- [10] Y. Matsui and K. Kawamura, "Instantaneous structure of an MgSiO_3 melt simulated by molecular dynamics," *Nature*, vol. 285, pp. 648-649, 1980.
- [11] J. D. Kubicki and A. C. Lasaga, "Molecular dynamics simulation of pressure and temperature effects on MgSiO_3 and Mg_2SiO_4 melts and glasses," *Phys. Chem. Miner.*, vol. 17, pp. 661-673, 1991.
- [12] L. T. San, N. V. Hong, T. Iitaka, and P. K. Hung, "Structural organization, micro-phase separation and polyamorphism of liquid MgSiO_3 under compression," *Eur. Phys. J. B*, vol. 89, no. 3, pp. 1-10, 2016.
- [13] F. J. Spera, M. S. Ghiorso, and D. Nevins, "Structure, thermodynamic and transport properties of liquid MgSiO_3 : Comparison of molecular models and laboratory results," *Geochimica et Cosmochimica Acta*, vol. 75, pp. 1272-1296, 2011.
- [14] G. B. Martin, F. J. Spera, M. S. Ghiorso, and N. Nevins, "Structure, thermodynamic and transport properties of liquid MgSiO_3 : Comparison of molecular models and laboratory results," *American Mineralogist*, vol. 94, pp. 693-703, 2009.
- [15] S.L. Chaplot and N. Choudhury, "Molecular dynamics simulation of seismic discontinuities and phase transitions of MgSiO_3 from 4 to 6-coordinated silicate via a novel 5-coordinated phase," *American Mineralogist*, vol. 86, pp. 752-761, 2001.
- [16] T. N. Nguyen, T. T. T. Giap, T. Iitaka, and V. H. Nguyen, "Crystallization of amorphous silica under compression," *Canadian Journal of Physics*, vol. 97, pp. 1133-1139, 2019.
- [17] A. R. Oganov, J. P. Brodholt, and G. D. Price, "Comparative study of quasiharmonic lattice dynamics, molecular dynamics and Debye model applied to MgSiO_3 perovskite," *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, vol. 122, pp. 277-288, 2000.