

# 改进的 Morse 势和冲击压缩\*

潘原生 王继海

(北京应用物理与计算数学研究所 北京 100088)

**摘要** 用分子动力学方法模拟凝聚介质中一维分子链上的激波传播,以得到与冲击压缩实验相一致的结果。通过比较分子链上的孤立波解与激波的结果,提出对分子间 Morse 作用势进行与考虑量子效应相一致的修正,从而使分子动力学模拟得到的激波  $U_s-U_p$  关系与实验结果在波后粒子速度达到声速的范围内一致。

**关键词** 分子动力学 激波 Morse 势 冲击压缩

**中图法分类号** O 481

## 1 引言

Fermi Pasta 和 Ulam 于 1954 年在 Los Alamos 首先进行分子动力学 (MD) 问题的研究,他们试图利用此方法来证实一维分子链中的各态历经假设<sup>[1]</sup>。1966 年 Tsai 和 Beckett 首次把 MD 方法用于激波研究,他们研究了分子间以各种不同作用的立方点阵中的激波传播。数值计算发现,分子间以 Morse 势作用时激波传播速度  $U_s$  与粒子速度  $U_p$  之间存在与实验结果类似的近似线性关系<sup>[2-3]</sup>。但是他们得到的结果仅在激波强度较弱时成立,当波后粒子速度  $U_p$  大于 0.3 倍初始声速后,  $U_s-U_p$  间就越来越偏离线性关系。Holian 利用 Toda 晶格中孤立波和孤立波系的解析解<sup>[4]</sup>,把 Toda 晶格中的激波剖面用慢变的孤立波系表示,而激波波头则能用单孤立波定量表示,并给出了以粒子速度  $U_p$  为函数的激波速度公式<sup>[5]</sup>。王继海等<sup>[6]</sup>考虑粒子间作用分别为 Toda L-J Morse 势时,把孤立波解的形状、传播速度与 MD 数值模拟激波传播结果进行比较,发现两者在激波强度较弱时相符较好,当激波强度较大时两者之差相应变大,并且和实验结果之差也加大。

为解决强激波情况下的分子动力学模拟问题,我们对分子间 Morse 作用势进行修正。这种修正与考虑分子间量子效应的修正相一致,从而使 MD 模拟结果与凝聚相的冲击压缩实验结果在  $U_p$  达到声速的范围内符合极好,为分子动力学的进一步模拟工作奠定了基础。

## 2 分子链中的孤立波解及激波的 MD 模拟

为模拟激波在凝聚物质中的传播,使用仅考虑近邻相互作用的一维分子链,其中第  $n$  个分子的运动方程为

\* 中国工程物理研究院基金资助项目。

1996-06-05收到原稿。

$$m \frac{d^2 r_n}{dt^2} = F(r_n - r_{n-1}) - F(r_{n+1} - r_n) \quad (1)$$

$$F = - \frac{\partial H}{\partial r} \quad (2)$$

式中:  $H$  是分子的作用势,  $r_n$  是第  $n$  个分子相对其平衡位置的位移. 令

$$f(r) = \frac{1}{m} F(r) \quad (3)$$

方程变为

$$\ddot{r}_n = f(r_n - r_{n-1}) - f(r_{n+1} - r_n) \quad (4)$$

在连续场近似下<sup>[4]</sup>, 即相邻粒子对的相对位移变化不大, 可把  $r$  看成  $n$  的连续函数, 取

$$\dot{r} \equiv \frac{\partial r}{\partial n} \quad (5)$$

则有

$$r(n \pm 1) = r(n) \pm \dot{r}(n) + \frac{1}{2} r''(n) \pm \frac{1}{3} r'''(n) + \frac{1}{4} r^{(4)}(n) + \dots \quad (6)$$

把以上展开代入方程 (4) 得

$$\begin{aligned} \ddot{r} = & f\left(\dot{r} - \frac{1}{2} r'' + \frac{1}{3} r''' - \frac{1}{4} r^{(4)} + \dots\right) - \\ & f\left(\dot{r} + \frac{1}{2} r'' + \frac{1}{3} r''' + \frac{1}{4} r^{(4)} + \dots\right) \end{aligned} \quad (7)$$

再把  $f$  对  $r$  展开得到

$$\ddot{r} = -f'(0)(r'' + \frac{1}{12} r^{(4)}) - \frac{1}{2} f''(0) 2\dot{r} r'' - \frac{1}{3} f'''(0) 3\dot{r}^2 r'' + \dots \quad (8)$$

忽略最后一项, 得 Boussinesq 方程

$$\ddot{r} = -f'(0)(r'' + \frac{1}{12} r^{(4)}) - \frac{1}{2} f''(0) 2\dot{r} r'' \quad (9)$$

有孤立波解<sup>[11]</sup>

$$r = A_m \operatorname{sech}^2 \frac{1}{2} a [n - k(A_m)t + W] \quad (10)$$

这里

$$\begin{aligned} \frac{A_m}{k} &= - \frac{f'(0)a^2}{4f''(0)} \\ k^2 &= -f'(0) \left| 1 - \frac{f''}{3f'} \left[ \frac{A_m}{k} \right] \right| \end{aligned} \quad (11)$$

为求进一步近似<sup>[5]</sup>, 令

$$\theta = t - \frac{n}{k}, \quad r = p, \quad \dot{r} = -\frac{1}{k} p \quad (12)$$

方程 (8) 变为

$$p = -\frac{f'}{k^2 p} - \frac{f''}{12k^4 p} + f'' \frac{p p'}{k^3} - \frac{f'''}{2k^4 p^2} p \quad (13)$$

考虑到

$$\int_{-\infty}^{\theta} p^n \dot{p} dt = \frac{1}{n+1} p^{n+1} \quad (14)$$

积分 (13) 式可得到

$$\ddot{p} = -12k^2 \left(1 + \frac{k^2}{f'}\right) p + 6k \frac{f''}{f'} p^2 - 2 \frac{f'''}{f'} p^3 = -\frac{\partial J(p)}{\partial p} \quad (15)$$

其中

$$J(p) = 6k^2 \left(1 + \frac{k^2}{f'}\right) p^2 - 2k \frac{f''}{f'} p^3 + \frac{1}{2} \frac{f'''}{f'} p^4 \quad (16)$$

这相当于一个单位质量的“假粒子”在空间“ $p$ ”、时间“ $\theta$ ”中运动, 其运动的“势”为  $J(p)$ , 当“假粒子”运动到最大  $p$  时, 即  $p = A_m$ , 有

$$J(p) = 0$$

所以得到

$$k^2 = -f' + \frac{1}{3} f'' \frac{A_m}{k} - \frac{f'''}{12} \left[\frac{A_m}{k}\right]^2 \quad (17)$$

数值计算表明<sup>[4]</sup>, 孤立波的峰值为其平均值的两倍, 即  $A_m = 2\bar{A}$ 。孤立波的传播速度为

$$U_s = k r_0 \quad (18)$$

此外, 当  $\bar{A} = 0$  时, 孤立波应以声速传播, 即有

$$U_s = c_0 \equiv (-f' r_0^2)^{1/2} \quad (19)$$

可以得到孤立波的传播速度和其粒子运动平均速度之间的关系为

$$U_s^2 = c_0^2 + \frac{2f'' r_0^3 \bar{A}}{3U_s} - \frac{f''' r_0^4 \bar{A}^2}{3U_s^2} \quad (20)$$

在  $\bar{A}$  较小的情况下, 可展开上式得

$$U_s = c_0 - \frac{f'' r_0 \bar{A}}{3f'} + \left[ \frac{f'''}{f'} - \frac{f''^2}{f'^2} \right] \frac{r_0 \bar{A}^2}{6(-f')^{1/2}} \quad (21)$$

如采用 Morse 势描述分子间的作用

$$H(r_{ij}) = D \left[ e^{-2\Gamma(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-\Gamma(r_{ij}-r_0)} \right] \quad (22)$$

有

$$F(r_{ij}) = -\frac{\partial H}{\partial r_{ij}} = 2\Gamma D \left[ e^{-2\Gamma(r_{ij}-r_0)} - e^{-\Gamma(r_{ij}-r_0)} \right] \quad (23)$$

$$F'(0) = -2\Gamma^2 D \quad (24)$$

$$F''(0) = 6\Gamma^3 D \quad (25)$$

$$F'''(0) = -14\Gamma^4 D \quad (26)$$

$$c_0 = \sqrt{\frac{2(\Gamma r_0)^2 D}{m}} \quad (27)$$

把以上各式代入 (20) 式得

$$\left[ \frac{U_s}{c_0} \right]^2 = 1 + \frac{2(\Gamma r_0) \bar{A}}{U_s} + \frac{7(\Gamma r_0)^2 \bar{A}^2}{3U_s^2} \quad (28)$$

对  $\bar{A}$  较小情况有

$$U_s = c_0 + \Gamma r_0 \bar{A} - \frac{(\Gamma r_0)^2}{3c_0} \bar{A}^2 \quad (29)$$

以上两式即为分子链中传播的孤立波速度和分子运动速度之间的关系。

文献 [6]表明, 活塞驱动分子链产生激波时, 如取活塞速度即分子运动的平均速度为孤立波的峰值之半, 即  $\bar{A} = U_p$ , 激波的传播速度在活塞速度不大时与孤立波的传播速度相等。现在我们把这个结论推广到较大活塞速度的情况, 假定此时 (28)、(29)式仍可用于描述激波速度与其波后粒子速度间的关系, 即有  $U_s-U_p$  关系

$$\left(\frac{U_s}{c_0}\right)^2 = 1 + \frac{2(\Gamma_{r0})U_p}{U_s} + \frac{7(\Gamma_{r0})^2U_p^2}{3U_s^2} \tag{30}$$

由实验可知, 凝聚介质中传播的激波速度  $U_s$  与波后粒子速度  $U_p$  间存在如下关系

$$U_s = c_0 + \lambda U_p + \kappa U_p^2 \tag{31}$$

对大多数凝聚材料  $\kappa \approx 0$  比较 (28)式和上式得

$$\Gamma_{r0} = \lambda \tag{32}$$

下面考虑激波在凝聚物质中传播时, 对其中沿激波传播方向的任一分子链进行分子动力学模拟。假设分子间以 (22)式的 Morse 势作用, 并且只考虑最近邻两个分子的作用, 分子链中第  $n$  个分子的运动方程为 (1)式。数值模拟中采用无量纲化计算, 可不必考虑具体金属的势参数, 从而使模拟具有普通性。

活塞在分子链一端以恒定速度  $U_p$  推第一个分子, 从而在分子链中产生传播的激波。将激波传播速度稳定后测出的激波速度  $U_s$  同孤立速度及实验的激波速度进行比较, 见表 1(表中激波速度的实验结果采用 (31)式计算, 孤立波速度由对 (30)式进行迭代求解得到), 表中 MD 结果与孤立波结果在  $U_p < 0.5$  时相符较好,  $U_p > 0.5$  后两者相差变大。这是由于对 (6)、(8)式采用连续场近似展开时, 当激波强度较大, 其展开误差增大所致。尽管如此, 它们两者的最大误差仍在 5% 以内。把表中的 MD 结果与实验结果进行比较, 两者在  $U_p > 0.3$  后就变得很大, 因此以上的 MD 模拟不能很好地表征实验的  $U_s-U_p$  关系。

表 1 MD 模拟、孤立波解及实验结果的激波速度  $U_s$  (单位: 声速)

Table 1 Comparing of shock velocity of MD simulation soliton speed and experimental result

$U_p$	$U_s$								
	$\Gamma_{r0} = 1.2$			$\Gamma_{r0} = 1.5$			$\Gamma_{r0} = 1.8$		
	MD	孤立波	实验	MD	孤立波	实验	MD	孤立波	实验
0.1	1.119	1.115	1.12	1.147	1.142	1.15	1.174	1.168	1.18
0.2	1.225	1.218	1.24	1.276	1.267	1.30	1.327	1.313	1.36
0.3	1.326	1.313	1.36	1.396	1.379	1.45	1.466	1.441	1.54
0.4	1.420	1.400	1.48	1.509	0.481	1.60	1.597	1.557	1.72
0.5	1.509	1.481	1.60	1.618	1.575	1.75	1.723	1.664	1.90
0.6	1.595	1.557	1.72	1.722	1.664	1.90	1.844	1.768	2.08
0.7	1.681	1.629	1.84	1.823	1.750	2.05	1.959	1.872	2.26
0.8	1.764	1.699	1.96	1.921	1.837	2.20	2.004	1.987	2.44
0.9	1.841	1.768	2.08	2.016	1.928	2.35	2.112	2.127	2.62
1.0	1.921	1.837	2.20	2.114	2.030	2.50	2.219	2.318	2.80

为了使 MD 模拟结果与实验结果一致, 首先考虑将分子间作用改为更一般的 Morse 函数<sup>[7]</sup>

$$H(r_{ij}) = \frac{D}{l-1} \left[ e^{-l(r_{ij}-r_0)} - l e^{-l(r_{ij}-r_0)} \right] \quad (33)$$

式中:  $l$  可为 1.25 1.50 2.00 3.00 4.00 6.00 在此作用势下有

$$F'(0) = -l^2 D \quad (34)$$

$$F''(0) = l(l+1)l^2 D \quad (35)$$

$$F'''(0) = -l(l^2+l+1)l^3 D \quad (36)$$

$$c_0 = \sqrt{\frac{l(T_{r_0})^2 D}{m}} \quad (37)$$

对于所有强度范围的激波都有

$$\left[ \frac{U_s}{c_0} \right]^2 = 1 + \frac{2(l+1)(T_{r_0})}{3} \left[ \frac{U_p}{U_s} \right] + \frac{(l^2+l+1)(T_{r_0})^2}{3} \left[ \frac{U_p}{U_s} \right]^2 \quad (38)$$

对应 (29) 式有

$$\left[ \frac{U_s}{c_0} \right] = 1 + \frac{l+1}{3} (T_{r_0}) \left[ \frac{U_p}{c_0} \right] - \frac{l(T_{r_0})^2}{6} \left[ \frac{U_p}{c_0} \right]^2 \quad (39)$$

为研究  $l$  的变化对  $U_s-U_p$  关系的影响, 这里分别计算了  $l=1.25, 4.00, 6.00$  时的激波速度值, 并把它们同相应的孤立波解及实验结果进行比较, 见表 2。由表 2 可知, 如仍采用 Morse 函数描述分子间的相互作用, 不论  $l$  如何变化, MD 模拟结果仍无法与实验结果一致。此外, 比较表 1 表 2 的孤立波解和实验结果, 发现两者的差异主要由孤立波解的非线性项  $U_p^2$  引起的。因此, 要想使以上两结果一致, 就必须对 Morse 势进行改正, 消去非线性项的影响。

表 2 Morse 函数中  $l$  变化对  $U_s$  影响 (单位: 声速)

Table 2 Effect of change  $l$  in Morse function to relation of  $U_s$

$U_p$	$U_s$								
	$l=1.25$			$l=4.00$			$l=6.00$		
	MD	孤立波	实验	MD	孤立波	实验	MD	孤立波	实验
0.1	1.112	1.108	1.11	1.238	1.229	1.25	1.328	1.312	1.35
0.3	1.304	1.294	1.34	1.639	1.585	1.75	1.887	1.766	2.05
0.5	1.476	1.454	1.56	1.996	1.864	2.25	2.283	2.113	2.75
0.7	1.635	1.595	1.79	2.246	2.108	2.75	2.733	2.406	3.45
0.9	1.784	1.730	2.01	2.556	2.389	3.25	3.165	2.755	4.15

### 3 改正 Morse 势及结果

为了使 MD 模拟的激波及孤立波传播速度与实验结果一致, 考虑对分子间的作用势进行改进。比较表 1 中的 MD 模拟结果与实验结果, 发现激波强度增大时 MD 结果越来越小于实验结果。这表明当激波强度增大而使相邻分子间距偏离平衡距离越来越大时, 由 Morse 势描述的分子间相互作用越来越小于实际分子间的相互作用。因此, 改正后的分子间相互作用势应使分子偏离距离较远时受到的作用比改正前的大, 且满足以下条件: (1)

改正后的作用势在平衡位置附近应与 Morse 势一致; (2) 当分子间距离足够大时, 它们间的作用应趋向于零; (3) 作用势的改正应不影响始声速  $c_0$  和线性项系数  $T_{r_0}$

此外, 要想使孤立波解和 MD 模拟结果与激波实验结果一致, 式 (21) 中的非线性项系数必须满足

$$\frac{r_0}{6(-f')^{1/2}} \left( \frac{f'''}{f'} - \frac{f''^2}{f'^2} \right) = \kappa \quad (40)$$

这需要改变作用势中  $(r_{ij} - r_0)^4$  项的系数。

Murrell 等把 Morse 势与由 RKR 方法 (Rydberg-Klein-Rees Method) 得到的分子间作用势进行比较, RKR 方法中由于考虑了粒子运动的量子化条件而能够较真实地反映分子间的作用, 发现 Morse 势在分子偏离其平衡位置较远时小于 RKR 结果。针对这种情况, Hulbert 和 Hirschfelder 提出了在 Morse 势基础上加修正项形式的分子间作用势<sup>[8]</sup>

$$H(r_{ij}) = D \left\{ \left[ 1 + h T^{\lambda} (r_{ij} - r_0)^4 \right] e^{-2T(r_{ij} - r_0)} - 2e^{-T(r_{ij} - r_0)} \right\} \quad (41)$$

这种作用势能较好地反映分子链受压缩时分子间的作用。

根据我们这里的条件和要求, 分子间作用采用 (41) 式提供的势的形式, 式中  $h$  为由 (40) 式确定的待定系数。这种形式的作用势, 能对 Morse 势进行高阶量子效应的修正; 尤其当分子受压偏离其平衡位置较远时, 它能更真实地反映分子间的作用。由 (2) 式及上式可以得到

$$F'(0) = -2TD \quad (42)$$

$$F''(0) = 6TD \quad (43)$$

$$F'''(0) = 2TD(-7 - 12h) \quad (44)$$

把 (42)~(44) 式代入 (3) 及 (40) 式得

$$h = \frac{1}{6} + \frac{c_0 \kappa}{2(T_{r_0})^2} \quad (45)$$

根据式 (19)、(32) 式和以上各式, (41) 式中的系数  $D$ 、 $T_{r_0}$ 、 $h$  可完全由实验测得的  $c_0$ 、 $\lambda$ 、 $\kappa$  和分子质量  $m$  确定。因此改正后的作用势为

$$H(r_{ij}) = \frac{c_0^2 m}{2\lambda^2} \left\{ \left[ 1 + \left[ \frac{1}{6} + \frac{c_0 \kappa}{2\lambda^2} \right] \lambda^4 \left[ \frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right]^4 \right] e^{-2\lambda \left( \frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right)} - 2e^{-\lambda \left( \frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right)} \right\} \quad (46)$$

使用此作用势可使孤立波解与实验结果在一定的激波强度范围内相符, 相应的 MD 模拟结果与它们的比较见表 3 中 U<sub>0</sub> 栏。从表 3 中可知, 分子间作用势的这种修正能使 MD 模拟的激波速度与实验值较接近, 但两者之差最大仍达 7%。

为了使两者结果相符更好, 需要对分子间作用势作进一步的修正。在 (46) 式右端加入  $(r_{ij} - r_0)^5$  的修正项, 分子间作用势变为

$$H(r_{ij}) = \frac{c_0^2 m}{2\lambda^2} \left\{ \left[ 1 + \left[ \frac{1}{6} + \frac{c_0 \kappa}{2\lambda^2} \right] \lambda^4 \left[ \frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right]^4 + U \lambda^5 \left[ \frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right]^5 \right] e^{-2\lambda \left( \frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right)} - 2e^{-\lambda \left( \frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right)} \right\} \quad (47)$$

采用 (47) 式的分子间作用势, 当取  $U = 1/6$  时, 由 MD 模拟得到的激波速度在表 3 中给出。由表可知, 在  $T_{r_0}$  分别取 1.2、1.5、1.8 时, MD 模拟结果与实验结果在所有  $U_p$  上相符

表 3 作用力修正后的 MD 结果和实验结果的激波速度  $U_s$  (单位: 声速)

Table 3 Comparing of MD result and experimental result after modifying of Morse potential

$U_p$	$U_s$								
	$\Gamma_{r0} = 1.2$			$\Gamma_{r0} = 1.5$			$\Gamma_{r0} = 1.8$		
	MD		实验	MD		实验	MD		实验
	$\beta = 0$	$\beta = -1/6$		$\beta = 0$	$\beta = -1/6$		$\beta = 0$	$\beta = -1/6$	
0.1	1.124	1.125	1.12	1.154	1.155	1.15	1.183	1.186	1.18
0.2	1.242	1.248	1.24	1.300	1.310	1.30	1.359	1.374	1.36
0.3	1.359	1.373	1.36	1.445	1.469	1.45	1.532	1.566	1.54
0.4	1.474	1.501	1.48	1.588	1.630	1.60	1.730	1.760	1.72
0.5	1.589	1.630	1.60	1.731	1.792	1.75	1.871	1.884	1.90
0.6	1.702	1.760	1.72	1.871	1.884	1.90	1.963	2.072	2.08
0.7	1.815	1.890	1.84	1.936	2.041	2.05	2.122	2.259	2.26
0.8	1.927	1.946	1.96	2.069	2.197	2.20	2.280	2.442	2.44
0.9	1.936	2.072	2.08	2.202	2.351	2.35	2.435	2.624	2.62
1.0	2.070	2.196	2.20	2.333	2.504	2.50	2.588	2.889	2.80

表 4 几种物质中激波速度  $U_s$  的 MD 模拟 (单位: km/s)

Table 4 Shock velocity of MD simulation in several materials

材料	$U_p$	$U_s$		材料	$U_p$	$U_s$	
		MD	实验			MD	实验
2024 铝	0.84	6.49	6.45	铜	0.68	4.99	4.95
	1.66	7.64	7.55		1.18	5.77	5.70
	2.49	8.83	8.66		1.84	6.83	6.68
	3.18	9.83	9.59		2.49	7.59	7.65
	4.02	10.65	10.71		3.13	8.59	8.60
铍	0.62	8.72	8.70	镁	0.88	5.64	5.65
	1.65	9.91	9.85		1.72	6.76	6.67
	2.50	10.91	10.81		2.84	8.29	8.08
	3.25	11.81	11.65		3.74	9.17	9.22
	3.92	12.61	12.40		4.51	10.18	10.19
钨	0.45	4.61	4.59	铀 钼 合金	0.51	3.38	3.35
	0.82	5.08	5.05		1.03	4.22	4.14
	1.22	5.59	5.54		1.54	4.88	4.92
	1.63	6.14	6.05		2.31	6.10	6.10
	2.11	6.78	6.64		2.75	6.79	6.78
304 不 锈钢	0.48	5.31	5.28	铁	0.31	4.18	4.16
	0.86	5.89	5.86		1.13	5.78	5.66
	1.49	6.89	6.79		1.72	6.71	6.67
	2.01	7.72	7.56		2.44	8.09	7.85
	2.77	8.62	8.69		3.23	9.56	9.07

很好, 它们的最大误差不到 3%。因此, 采用 (47) 式的分子间作用势能够得到与实验结果一致的 MD 模拟结果。

下面, 我们对几种真实凝聚材料中的激波进行 MD 模拟。分子间的作用由 (47) 式描述, 各种物质的  $c_0$ ,  $\lambda$ ,  $\kappa$  由实验给出<sup>[9-10]</sup>。表 4 给出由 MD 模拟得到的  $U_s$ - $U_p$  关系, 这里也包括  $\kappa \neq 0$  的情况 (其中材料铁的  $\kappa = -0.068$ ), 表中同时也列出实验结果。从表中可见, 我们已经能够由 MD 模拟得到与实验结果一致的  $U_s$ - $U_p$  关系, 从而为激波传播的进一步模拟打下良好的基础。

### 参 考 文 献

- 1 Fermi E, Pasta J R, Ulam S M. Studied of Nonlinear Problems Los Alamos Rep LA-1940 1955
- 2 Tsai D H, Beckett C W. Shock Wave Propagation in Cubic Lattices J Geophys Res 1966 71: 2601
- 3 Tsai D H, MacDonald R A. An Atomistic View of Shock Wave Propagation in a Solid High Temperatures-High Pressures 1976 8: 403-418
- 4 Toda M. Studies of a Non-linear Lattice Phys Rep 1975 C18: 1
- 5 Holian B L, Flaschka H, McClauglin D W. Shock Wave in the Toda Lattice Analysis Phys Rev 1981, A 24: 2595-2623
- 6 Wang Jihai, Duan Wenshan, Pan Yuansheng. Molecular Dynamics Investigation of Shock Wave in One-dimension. In Science of High Pressure and Technology. USA: Institute of Am Phys Press 1994
- 7 Milstein F. Applicability of Exponentially Attractive and Repulsive Interatomic Potential Functions in the Description of Cubic Crystals J Appl Phys 1973 44: 3825
- 8 Murrell J N. Molecular Potential Energy Functions Chichester Wiley, 1984 7
- 9 Kinslow R. High-velocity Impact Phenomena New York: Academic Pr, 1970 515
- 10 Asay J R. High-pressure Shock Compression of Solids New York: Springer-Verlag 1993 379-382
- 11 Dodd R K, Eilbeck J C, Gibbon J D, et al Solitons and Nonlinear Wave Equations London: Academic Press 1982 6-9

## MODIFIED MORSE POTENTIAL AND SHOCK COMPRESSION

Pan Yuansheng Wang Jihai

(Beijing Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing, 100088)

**ABSTRACT** In order to obtain a result which is agreement with the shock compression experiment, molecular dynamical simulations of shock wave propagation in one-dimensional chain are investigated in this paper. Comparing the soliton speed in the chain with the shock compression result, we propose a modifying Morse potential which is in accord with the considering quantum effect. Using this modifying Morse potential in MD simulation, we can well simulate the experimental result in a range when the particle velocity get to the sound velocity.

**KEY WORDS** molecular dynamics, shock wave, Morse potential, shock compression