

# 氯化钠晶体在高温高压下热物理参数的 分子动力学计算<sup>\*</sup>

崔守鑫<sup>1) 2) 3)</sup> 蔡灵仓<sup>2)</sup> 胡海泉<sup>1)</sup> 郭永新<sup>3)</sup> 向士凯<sup>2)</sup> 经福谦<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup> 聊城大学物理科学与信息工程学院, 聊城 252059)

<sup>2)</sup> 中国工程物理研究院流体物理研究所冲击波物理与爆轰物理实验室, 绵阳 621900)

<sup>3)</sup> 辽宁大学物理系, 沈阳 110036)

(2004 年 2 月 25 日收到, 2004 年 11 月 18 日收到修改稿)

用分子动力学方法和优化的 Tosi-Fumi 有效两体势函数计算了 NaCl 晶体温度从 298 K 到 773 K 的等温压缩线和体积模量、热膨胀系数和格临爱森系数等热物理参数. 计算结果表明, NaCl 晶体在温度从 298 K 到 1073 K、压力从 0 到 80 GPa 范围内的格临爱森系数  $\gamma = \gamma_0(V/V_0)^q$  的近似公式成立, 且  $q \approx 1.078$ .

关键词: 分子动力学计算, 格临爱森系数, 氯化钠晶体

PACC: 6120J

## 1. 引 言

NaCl 晶体的物态方程和热物理参数研究不仅对凝聚态物理等基础科学有重要的科学意义, 而且在地球物理研究中也有重要的应用背景. NaCl 晶体在静高压物理实验技术中还常用做压标材料. 对它的热物理性质(尤其是高温高压下)的研究在高压物理研究中亦具有重要的实用意义.

2002 年 Deng<sup>[1]</sup>等人利用半经验公式和近似, 计算了 NaCl 晶体的热膨胀系数  $\alpha$  和体积模量  $K$ , 计算结果在低压下与实验值的符合比较好, 但由于在该半经验公式中含有可调参数和各种近似的假设, 在高压下的计算结果与实验值存在较大差异, 它表明半经验公式不适合计算 NaCl 晶体在高温高压下的热物理参数. Birch<sup>[2]</sup>从实验数据出发拟合得到了 NaCl 晶体的体积模量、热膨胀系数和格临爱森系数  $\gamma$ , 由于 Birch 只是在压力很低(3 GPa)的条件下得到的实验数据, 以此低压数据外推的可靠性不高, 这就需要建立一种不含可调参数的数值计算方法, 用于预测更高压力和温度范围的 NaCl 晶体的热物理参数. 在高温高压下 NaCl 晶体热力学参数的研究中,

格临爱森系数尤为重要. 长期以来, 一直是一个很有挑战性的课题. 1999 年 Michael<sup>[3]</sup>在研究 NaCl 晶体作为压标材料时认为, NaCl 晶体的格临爱森系数可用  $\gamma = \gamma_0(V/V_0)^q$  公式描述, 并在分析 Boehler 和 Kennedy<sup>[4]</sup>的数据后给出  $q$  的优选值是 1.45; 但在以  $q = 1.45$  计算的体积模量、热膨胀系数、等容比热  $C_V$  随温度的升高与实验值的偏差越大, 它表明在高温高压下对 NaCl 晶体  $q$  的优化值为 1.45 的数据存在疑问, 需要进一步澄清. 针对上述情况, 我们认为, 如果有了合理的势函数, 利用分子动力学(MD)方法计算热物理参数的精度能够达到令人满意的程度<sup>[5]</sup>, 对解决以上所说的存疑是一个值得探索的途径<sup>[6]</sup>. 实际上, 计算机模拟技术(分子动力学或蒙特卡罗方法等)的发展, 改变了过去理论计算与实验的关系. 例如, 分子动力学模拟可以非常接近实验条件, 它的计算结果既可以直接与实验比较, 还可以预测材料在实验室中无法达到的条件的极端高温高压条件下的热物理特性, 为研究地球内部特征和高压物理规律提供参考数据. 2003 年 Chen 等人<sup>[7]</sup>利用多重晶格反演和从头计算方法, 得到了 NaCl 晶体离子之间的相互作用势函数, 并用 MD 方法计算了 NaCl 晶体在低压下的微观结构变化, 与实验值符合得很

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金重点项目(批准号:10299040)和中国工程物理研究院科学技术基金(2000103)资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯作者: shouxincui@126.com

好.但他们在考虑  $\text{Na}^+$  和  $\text{Na}^+$  之间的相互作用时只考虑了库仑相互作用,这种做法在低压是可以接受的一种近似,但在高压下, $\text{Na}^+$  和  $\text{Na}^+$  的非库仑相互作用就不能忽略.因此他们给出的 NaCl 晶体的相互作用势不适合高压下对 NaCl 晶体热物理参数的计算. Belonoshko 和 Dubrovinsky<sup>[8]</sup> 用 Hofer 等人提出的用于描写碱金属卤化物离子之间相互作用的势函数,利用 MD 方法计算了 NaCl 晶体分别在温度  $T = 298 \text{ K}$ ,  $373 \text{ K}$ ,  $473 \text{ K}$ ,  $573 \text{ K}$ ,  $673 \text{ K}$ ,  $773 \text{ K}$  下的等温压缩线,他们的计算结果与实验值的偏差随着温度的升高而变大,例如在  $T = 773 \text{ K}$  时,计算值与实验值的最大偏差超过 15%. 它表明 Belonoshko 等人所用的势函数和势参数,对描写高温高压下 NaCl 晶体的凝聚特性不是很适合.

我们认为描述碱金属卤化物离子之间非库仑相互作用, Tosi-Fumi<sup>[9]</sup> 对势可能是一种比较好的形式. 本文将采用该势函数和陈栋泉等人<sup>[10]</sup> 的优化势参数,计算 NaCl 晶体的有关热物理参数.

## 2. 模拟计算原理及方法

分子动力学方法是一种涉及力学、热力学、统计力学、固体力学和计算方法等学科的数值模拟方法,该方法利用牛顿运动方程来模拟介质内原子的运

动,以确定系统内每个原子在所选的势函数下作用的瞬时位置和速度的变化情况,并进行系统的能量以及受力的统计计算,这样就可以得到凝聚介质的物态方程和有关的热物理参数值.

对离子晶体进行分子动力学模拟研究,关键在于离子间相互作用势函数的选取. 这种相互作用由非库仑和库仑作用两部分组成,即:

$$\phi = \phi_{\text{NC}} + \phi_{\text{C}}, \quad (1)$$

式中  $\phi$ 、 $\phi_{\text{NC}}$  和  $\phi_{\text{C}}$  分别是总相互作用能、非库仑能和库仑作用能. 其中,非库仑能部分为:

$$\phi_{\text{NC}} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha, \beta=1 \\ \beta \neq \alpha}}^N \mu_{\alpha\beta}, \quad (2)$$

$\mu_{\alpha\beta}$  是  $\alpha$  和  $\beta$  粒子之间的非库仑对势,本文中  $\mu_{\alpha\beta}$  选用 Tosi-Fumi<sup>[9]</sup> 形式,即:

$$\mu_{\alpha\beta} = A_{\alpha\beta} \exp[B_{\alpha\beta}(\sigma_{\alpha\beta} - r)] - \frac{C_{\alpha\beta}}{r^6} - \frac{D_{\alpha\beta}}{r^8}, \quad r < r_c, \quad (3)$$

其中,  $C_{\alpha\beta}$  和  $D_{\alpha\beta}$  是 Van der Waals 常数,  $A_{\alpha\beta}$  和  $B_{\alpha\beta}$  是排斥势参数. 计算中我们选用了 1987 年陈栋泉等人<sup>[10]</sup> 优化的势参数,见表 1.

文中所选用的模拟系统取为面心立方(fcc)结构的含有 512 个正负离子的元胞,并利用周期性边界条件,把它们向整个晶体空间扩展,使模拟体积变

表 1 NaCl 晶体相互作用势优化参数

	$A_{\alpha\beta}$ (kJ/mole)	$B_{\alpha\beta}$ /nm <sup>-1</sup>	$C_{\alpha\beta}$ (10 <sup>-4</sup> kJ·nm <sup>6</sup> /mole)	$D_{\alpha\beta}$ (10 <sup>-7</sup> kJ·nm <sup>8</sup> /mole)	$\sigma_{\alpha\beta}$ /nm
Na-Na	24.8241	31.545	1.0114	4.816	0.234
Na-Cl	19.8594	31.545	6.7424	83.678	0.2755
Cl-Cl	14.8947	31.545	69.832	1402.66	0.317

成准无限大,更接近宏观实际. 模拟时间步长取为  $\Delta t = 2 \times 10^{-16} \text{ s}$ , 计算 3000 到 6000 步. 系统内离子的初始速度分布由计算机的伪随机数序列来提供,并将速度标定,使系统达到所需的温度. 利用跳点法来求解粒子的运动方程. 差分格式是:

$$\mathbf{r}^{n+1} = \mathbf{r}^n + \Delta t \mathbf{v}^{n+1/2}, \quad (4)$$

$$\mathbf{v}^{n+1/2} = \mathbf{v}^{n-1/2} + (\Delta t/m) \mathbf{F}^n. \quad (5)$$

第  $n$  步速度为

$$\mathbf{v}^n = \frac{1}{2}(\mathbf{v}^{n+1/2} + \mathbf{v}^{n-1/2}). \quad (6)$$

以上式中  $\mathbf{r}$ 、 $\mathbf{v}$  分别为离子的坐标和速度,  $\Delta t$  为时间步长,  $m$  为离子质量,  $\mathbf{F}$  为离子所受的作用力,  $n$  为步数.

在每一步上,我们计算(元胞内)总能

$$E = \phi + K, \quad (7)$$

$\phi$  为总相互作用能,  $K$  为动能. 根据维里定理,压力为

$$p = \left( \frac{2}{3} K + \frac{1}{3} \Psi \right) / V, \quad (8)$$

式中  $V$  为元胞的体积, 动能  $K$  和维里  $\Psi$  分别为

$$K = \frac{1}{2} \sum_i m_i |\mathbf{v}_i^n|^2, \quad (9)$$

$$\Psi = \sum \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{F}_i, \quad (10)$$

$\mathbf{F}_i$  是第  $i$  个离子所受的力.

文中在计算相互作用时,为了节省机时,只考虑

离子之间的最近像点的相互作用,并把范围限制在  $r_c = L/2$  的范围以内,这里  $L$  是元胞的边长.

为了补偿  $r > r_c$  以外的相互作用,在总能和维里中加上非库仑相互作用的修正项.采用球对称平均,非库仑相互作用修正项为

$$\phi_{rc} = \sum_{\alpha \leq \beta} \frac{N_\alpha N_\beta}{V} \left( 1 - \frac{1}{2} \delta_{\alpha\beta} \right) \int_{r_c}^{\infty} \mu_{\alpha\beta}(r) 4\pi r^2 dr, \quad (11)$$

维里修正项为:

$$\Psi_{rc} = - \sum_{\alpha \leq \beta} \frac{N_\alpha N_\beta}{V} \left( 1 - \frac{1}{2} \delta_{\alpha\beta} \right) \int_{r_c}^{\infty} r \frac{d\mu_{\alpha\beta}}{dr} 4\pi r^2 dr. \quad (12)$$

在这里  $r > r_c$  处的电荷被看作是连续分布的.由于指数形式的斥力项仅在粒子相互接近时才明显,所以在计算以上修正项时,  $\mu_{\alpha\beta}$  中只考虑了  $r^{-6}$  和  $r^{-8}$  的引力部分.

本文利用了 Ewald 方法计算了库仑相互作用部分的总能,即:

$$\phi_C = \phi^{RL} + \phi^{RC}, \quad (13)$$

实空间部分为

$$\phi^{RL} = \frac{1}{2} \sum_i q_i \left[ \sum_j q_j \sum_n \frac{\text{erfc}(\alpha r)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j + \mathbf{n}|} - \frac{2q_i \alpha}{\sqrt{\pi}} \right], \quad (14)$$

$r < r_c.$

当  $i = j$  时  $|\mathbf{n}| \neq 0$

$$\text{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} e^{-t^2} dt. \quad (15)$$

倒空间部分为

$$\phi^{RC} = \sum_k \frac{2\pi}{L^3} \frac{\exp(-k^2/4\alpha^2)}{k^2} \left| \sum_i q_i e^{ik \cdot r_i} \right|^2. \quad (16)$$

$$\mathbf{k} = 2\pi [l/L, m/L, n/L]$$

$q_i, q_j$  分别是  $i$  和  $j$  离子所带的电荷数,  $\alpha$  是一个参数.根据程序在  $r = r_c$  处相互作用能有较好的收敛性进行调节.本文中取  $\alpha = 5.6/L$ .

在求得了总能  $E$  和压力  $P$  后,体积模量  $K_T$  和热膨胀系数  $\alpha$  可由下式来求得:

$$K_T = - \frac{V}{V_0} \left( \frac{\partial P}{\partial V/V_0} \right)_T, \quad (17)$$

$$\alpha = - \frac{V_0}{V} \left( \frac{\partial V/V_0}{\partial T} \right)_P. \quad (18)$$

格临爱森参数  $\gamma$  和等容比热  $C_V$  可由定义式来得到:

$$\gamma = V \left( \frac{\partial P}{\partial E} \right)_V, \quad (19)$$

$$C_V = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_V. \quad (20)$$

### 3. 计算结果与比较

为了验证本文中所用的势参数,我们计算了 NaCl 晶体在 80 GPa 下的 300 K 等温压缩线和在 3GPa 下六种温度下的等温压缩线,并且与实验值<sup>[11-14]</sup>进行了比较(分别见图 1 和图 2).从图 1 和

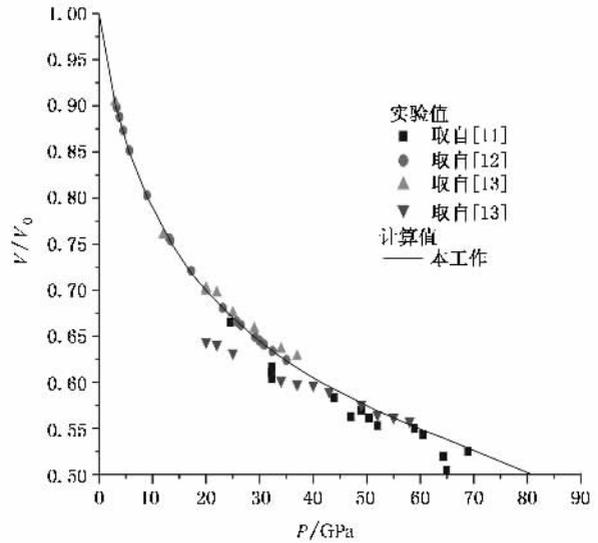


图 1 用 MD 方法计算的 NaCl 晶体 80 GPa 下的 300 K 等温压缩线与实验值的比较

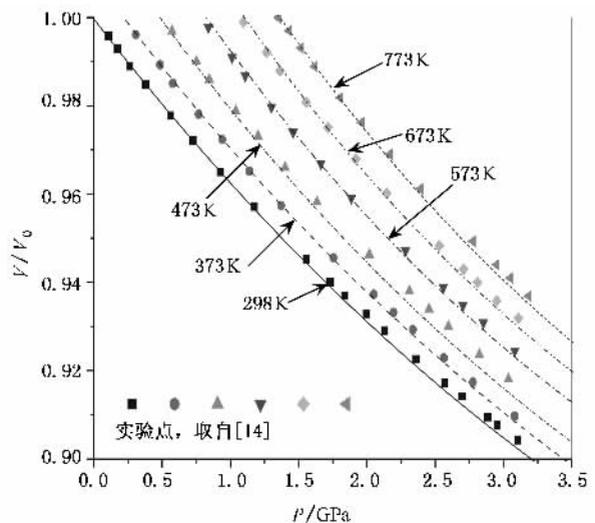


图 2 用 MD 方法计算的 NaCl 晶体在 3 GPa 下的 373 K, 473 K, 573 K, 673 K, 773 K 的等温压缩线与实验值(取自 [14])的比较

图 2 可以看出,本文计算的结果与实验值非常吻合,表明本文选用的 Tosi-Fumi 势函数和陈栋泉等人的

优化势参数比较合理.在以上工作的基础上,再通过 MD 方法进一步计算了体积模量、热膨胀系数、等容比热及 NaCl 在  $T = 298\text{ K}$  时的  $\gamma - V/V_0$  的曲线(图

3)与  $\gamma = \gamma_0(V/V_0)^q$  中  $q$  分别取 1、1.45 和 2 进行了比较.为了便于比较,我们将热力学量以表格的形式给出来(分别见表 2、表 3、表 4 和表 5)<sup>[10-14]</sup>.

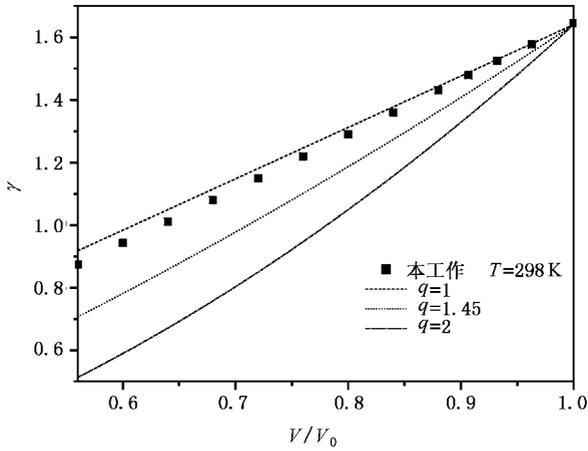


图 3 用 MD 方法计算的 NaCl 晶体 ( $T = 298\text{ K}$ ) 格临爱森系数与近似公式  $\gamma = \gamma_0(V/V_0)^q$  ( $q = 1, 1.45, 2$ ) 计算结果的比较

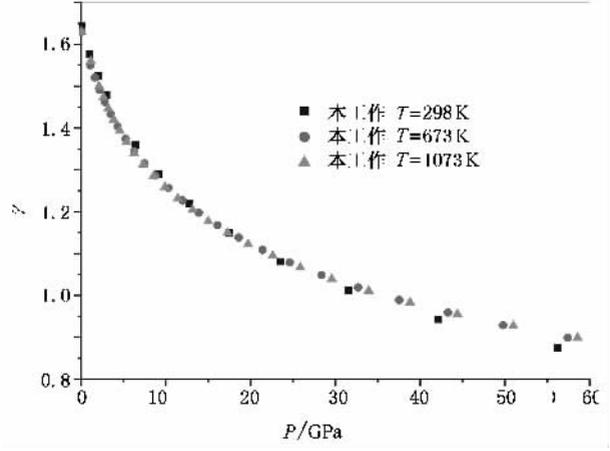


图 4 用 MD 方法计算的 NaCl 晶体 ( $T = 298\text{ K}, 673\text{ K}, 1073\text{ K}$ ) 格临爱森系数与压力  $P$  的关系曲线

表 2 用 MD 方法计算的 NaCl 晶体体积模量(单位:GPa)与 F. Birch<sup>[2]</sup>的实验拟合值比较

$P/\text{GPa}$	298 K		373 K		473 K		573 K		673 K		773 K	
0	24.9	24.0(F)	22.1	22.8(F)	22.0	21.2(F)	20.4	19.7(F)	18.8	18.1(F)	17.2	16.8(F)
1	28.3	28.9(F)	27.6	27.8(F)	26.0	26.4(F)	24.2	25.0(F)	22.3	23.6(F)	21.6	22.1(F)
2	33.0	33.6(F)	32.2	32.6(F)	30.6	31.4(F)	29.3	30.1(F)	28.2	28.8(F)	26.3	27.2(F)
3	37.9	38.2(F)	37.1	37.2(F)	35.9	36.2(F)	35.3	35.0(F)	33.6	33.7(F)	31.9	32.1(F)

注:表中的括号中有 F 的数据是 F. Birch 的结果,下同

表 3 用 MD 方法计算的 NaCl 晶体热膨胀系数与 F. Birch<sup>[2]</sup>的实验拟合值的比较( $10^6 \alpha / \text{deg}^{-1}$ )

$P/\text{GPa}$	298 K		373 K		473 K		573 K		673 K		773 K	
0	125	119(F)	129	126(F)	135	135(F)	144	144(F)	155	153(F)	162	161(F)
1	105	98(F)	107	102(F)	112	108(F)	117	114(F)	121	120(F)	124	125(F)
2	84	85(F)	85	88(F)	88	91(F)	93	95(F)	98	99(F)	100	102(F)
3	75	77(F)	76	78(F)	78	80(F)	80	82(F)	84	84(F)	88	86(F)

表 4 用 MD 方法计算的 NaCl 晶体格临爱森系数与 F. Birch<sup>[2]</sup>的实验拟合值的比较

$P/\text{GPa}$	298 K		373 K		473 K		573 K		673 K		773 K		1073 K
0	1.65	1.62(F)	1.58	1.62(F)	1.6	1.63(F)	1.6	1.63(F)	1.63	1.61(F)	1.57	1.59(F)	1.63
1	1.58	1.55(F)	1.53	1.54(F)	1.52	1.55(F)	1.53	1.56(F)	1.55	1.56(F)	1.55	1.54(F)	1.55
2	1.52	1.52(F)	1.5	1.51(F)	1.53	1.50(F)	1.51	1.51(F)	1.5	1.51(F)	1.48	1.47(F)	1.5
3	1.48	1.53(F)	1.48	1.49(F)	1.46	1.48(F)	1.43	1.47(F)	1.45	1.45(F)	1.4	1.41(F)	1.45

表 5 用 MD 方法计算的 NaCl 晶体等容比热与 F. Birch<sup>[2]</sup>的计算结果的比较(单位: $\text{J}/(\text{g}\cdot\text{K})$ )

$P/\text{GPa}$	298 K		373 K		473 K		573 K		673 K		773 K	
0	0.850	(0.813)	0.857	(0.827)	0.847	(0.833)	0.846	(0.837)	0.846	(0.832)	0.844	(0.835)
1	0.855	(0.813)	0.858	(0.822)	0.856	(0.834)	0.850	(0.835)	0.845	(0.844)	0.843	(0.844)
2	0.854	(0.809)	0.858	(0.819)	0.856	(0.836)	0.858	(0.841)	0.852	(0.845)	0.853	(0.851)
3	0.850	(0.812)	0.858	(0.824)	0.860	(0.833)	0.859	(0.842)	0.859	(0.850)	0.857	(0.859)

注:括号中的数据是根据 F. Birch 的等压比热结果计算出来的

## 4. 结果讨论

(1) 用上面给出的计算方法计算的 NaCl 晶体的 80 GPa 以下 300 K 等温压缩线(图 1)和 3 GPa 以下的 298 K, 373 K, 473 K, 573 K, 673 K, 773 K 等温压缩线(如图 2 所示). 图 1 中同时给出了 B1 和 B2 结构 NaCl 晶体在  $T = 300$  K 等温压缩线的实验值<sup>[11-13]</sup>. 图 2 中也给出了 B1 结构 NaCl 晶体在  $T = 298$  K, 373 K, 473 K, 573 K, 673 K, 773 K 等温压缩线实验值<sup>[14]</sup>. 从图 1 和图 2 可看出, 我们的计算值在  $P = 80$  GPa 左右与实验结果的最大偏差小于 5%, 比 Belonoshko 等人<sup>[8]</sup>的计算结果的精度提高了很多, 说明本文选择的 NaCl 晶体的有效两体势参数是合理的, MD 计算方法也是可靠的. 这也证明了陈栋泉等人<sup>[10]</sup>优化给出的 NaCl 晶体的有效两体势参数较 Tosi 和 Fumi<sup>[9]</sup>给出的势参数更适合更高压力 NaCl 晶体凝聚特性的描述.

(2) 用 MD 方法计算的 NaCl 晶体的体积模量  $K_T$ , 热膨胀系数  $\alpha$  和等容热容量  $C_v$  与 F. Birch 的实

验拟合结果比较如表 1、表 2、表 3 所示. 从表 1 看出, 我们计算的体积模量与 Birch 的实验拟合值的最大偏差小于 6%, 热膨胀系数与 Birch 的实验拟合值的最大偏差小于 8%, 等容热容量与 F. Birch 的实验拟合值的最大偏差小于 6%, 说明我们的计算方法具有较高的计算精度.

(3) 我们计算的 NaCl 晶体的格临爱森系数与 Birch 的实验拟合值的比较如表 4 所示.  $T = 298$  K 计算的格临爱森系数与近似公式  $\gamma = \gamma_0(V/V_0)^q$  ( $q = 1.45$ ) 计算结果比较如图 3 所示. 温度  $T = 298$  K, 673 K, 1073 K 和压力  $P$  从 0—60 GPa 范围计算的格临爱森系数如图 4 所示. 从表 4 可看出, 我们用 MD 方法计算的格临爱森系数与 F. Birch 的实验拟合值的最大偏差小于 4%, 说明我们的方法计算 NaCl 晶体的格临爱森系数具有较高的计算精度. 从图 3 和图 4 可看出 NaCl 晶体的格临爱森系数在温度达到 1073 K 时仍与温度是弱相关的, 只是体积或压力的函数. 近似公式  $\gamma = \gamma_0(V/V_0)^q$  仍然成立, 且在  $T$  从 300 K 到 1073 K 和压力从 0 到 60 GPa 范围内  $q$  的优化值为 1.078, 而不是文献 3 给出的 1.45.

- [1] Deng X Q and Yan Z T 2002 *J. Phys. Chem. Solids* **63** 1737  
 [2] Birch F 1986 *J. Geophys. Res.* **91** 4949  
 [3] Michael B J 1999 *J. Appl. Phys.* **86** 5801  
 [4] Boehler R and Kennedy G C 1980 *J. Phys. Chem. Solids* **41** 517  
 [5] Barton M A and Stacey F D 1985 *Phys. Earth Planet. Inter.* **39** 167  
 [6] Chen Q F and Cai C L 2004 *Chin. Phys.* **13** 1091  
 [7] Zhang S and Chen N X 2002 *Phys. Rev. B* **66** 64106  
 [8] Belonoshko A B and Dubrovinsky L S 1996 *American Mineralogist* **81**

- 317  
 [9] Fumi F G and Tosi M P 1964 *J. Phys. Chem.* **25** 31  
 [10] Chen D Q, Xie G X 1987 *Acta Highpressure Phys.* **1** 50 (in Chinese) [陈栋泉, 谢国强 1987 高压物理学报 **1** 50]  
 [11] Heinz D L and Jeanloz Raymond 1984 *Phys. Rev. B* **30** 6045  
 [12] Liu L G and Bassett W A 1973 *J. Appl. Phys.* **44** 1475  
 [13] Yosiko S S 1983 *J. Geophys. Res.* **88** 3543  
 [14] Reinhard B and George C Kennedy 1980 *J. Phys. Chem. Solids* **41** 517

# Molecular dynamics simulation for thermophysical parameters of sodium chloride solids at high temperature and high pressure<sup>\*</sup>

Cui Shou-Xin<sup>1,2,3)†</sup> Cai Ling-Cang<sup>2)</sup> Hu Hai-Quan<sup>1)</sup> Guo Yong-Xin<sup>3)</sup> Xiang Shi-Kai<sup>2)</sup> Jing Fu-Qian<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup> School of Physics Science and Information Technology, Liaocheng University, Liaocheng 252059, China )

<sup>2)</sup> Laboratory for Shock Wave and Detonation Physics Research, Institute of Fluid Physics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China )

<sup>3)</sup> Department of Physics, Liaoning University, Shenyang 110036, China )

( Received 25 February 2004 ; revised manuscript received 18 November 2004 )

## Abstract

By means of molecular dynamics simulation and the effective optimized two-body Tosi-Fumi potential, the isothermal compression curve and thermophysical parameters of sodium chloride solids in the temperature range 298—1073 K are calculated. The result demonstrates that the Gruneisen parameter of sodium chloride  $\gamma = \gamma_0(V/V_0)^q$  is approximately correct in the temperature range 298—1073 K and the pressure range 0—80 GPa, and the exponent  $q$  in the formula is about 1.078.

**Keywords** : molecular dynamics, Gruneisen parameter, sodium chloride

**PACC** : 6120J

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 10299040 ) and the Science and Technology Foundation of China Academy of Engineering Physics ( 2000103 ).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail : shouxincui@126.com