文章编号:1000-5773(2009)03-0181-08

金和铂的室温等温物态方程及其压标的意义*

金 柯,吴 强,李欣竹,蔡灵仓,经福谦

(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
国防科技重点实验室,四川绵阳 621900)

摘要:在对 Grüneisen 系数高温高压特性不作任何假设的前提下,由冲击雨贡纽数据直接确定了材料零温零压体积、等温体模量及其对压力的一阶偏导。基于上述参数,计算了两种常用压标材料金和铂压缩比至 0.5～0.6 的 0 K 物态方程,并通过相应的热压修正得到了金和铂的室温等温物态方程。计算结果与准静水压条件下静高压实验结果具有非常好的吻合性,缩小了早期不同金和铂压标之间的差异。独立来源实验数据和理论计算结果的交叉检验表明,金和铂的室温等温物态方程计算结果可以用于今后静高压实验的压标。

关键词:等温物态方程;金;铂;压标
中图分类号:O411.1;O521.2 **文献标识码**:A

1 引 言

物态方程研究对于地球物理、材料科学和高压物理等诸多物理领域的发展具有重要的科学意义[1-2]。实验方面,材料物态方程可以由静态 Diamond-Anvil-Cell (DAC)实验[3-5]和动态冲击波实验[6-8]在兆巴范围内实现精确测量。虽然 DAC 实验广泛应用于极端条件下材料物性研究,但是 DAC 实验不可避免地面临的难题是样品压力通常是间接地由与样品混合的所谓压标材料的物态方程确定,其前提就是压标材料的物态方程必须精确已知。因而,精确确定压标材料物态方程在高压物理研究中具有极其重要的应用价值。金属如金(Au)[9-10]和铂(Pt)[7],非金属如 B1 相氯化钠[11-12](B1-NaCl,B1 相为 NaCl 结构)和氧化镁[13](MgO),这些材料由冲击压缩实验数据和热力学数据确定的物态方程被广泛接受作为 DAC 实验的压标。然而,不同压标之间仍然存在较大差异,由此导致在同一实验中基于不同压标确定的实验压力偏差巨大。Shigeaki Ono[14]在 DAC 实验中分别使用 Jamieson[9]和 Anderson[10]提出的 Au 的物态方程作为压标,在相同压缩比条件下,两种压标确定的压力出现较大偏差,并随着压力的升高偏差逐渐增大。最近的实验结果显示[15],基于 Holmes[7]提出的 Pt 压标比一些广泛使用的 Au 压标[9-10]确定的压力在室温和 150 GPa 时偏高约 13%,并且如果使用其它 Au 压标[16-17],压力偏差甚至更大。基于 Au 和 Ag 压标确定压力时同样出现了类似的压力非一致性[18]。因而,DAC 实验迫切需要建立可靠的、实用的和具有相容性的压标。在此意义上,相关压标的交叉检验成为建立相容性压标的重要因素。

最近,我们提出了一种由冲击雨贡纽数据准确确定材料初始比容 v_{0K}、等温体模量 B_{0K} 及其压力的

* **收稿日期**:2008-07-02;**修回日期**:2008-10-21
基金项目:国家自然科学基金(10776029)
作者简介:金 柯(1976—),男,博士研究生,助理研究员,主要从事材料高压物性和动态加载技术研究.
E-mail:jinke_102@yahoo.com.cn

一阶偏导 B_{0K}'等 0 K 物态方程参数的方法[19]。v_{0K}、B_{0K}和 B_{0K}'计算结果与超声实验结果的对比表明，这一方法不但简便易行，而且具有较高的精度。上述研究成果和建立相容性压标的迫切性激励我们开展了 Au 和 Pt 室温等温物态方程及其压标意义的研究。之所以选择 Au 和 Pt 作为研究对象，主要是考虑到 Au 和 Pt 被广泛应用为 DAC 实验的压标材料，具有丰富的实验测量和理论计算结果，便于进行全面的比对分析。我们期望本研究确定的 Au 和 Pt 的室温等温物态方程可以作为今后 DAC 实验的压标。

2 计算方法

冲击压缩状态下材料冲击波速度与粒子速度的关系常用线性关系式描述，即

$$u_s = C + Su_p \tag{1}$$

式中：u_s 为冲击波速度，u_p 为粒子速度，C 和 S 为拟合参数。在对 Grüneisen 系数高温高压特性不作任何假设的前提下，推导出了参数(C_{0K}，S_{0K})和(C_0，S_0)的关系式[19]，即

$$C_{0K}^2 = C_0^2 \frac{(1-\varphi)^2}{(1-S_0\varphi)^3}[1+(S_0-\gamma_0)\varphi] \tag{2}$$

$$S_{0K} = S_0\left(\frac{C_0}{C_{0K}}\right)^2 \frac{(1-\varphi)^3}{(1-S_0\varphi)^4}\left[\left(1+\frac{1}{2}S_0\varphi\right)\left(1-\frac{1}{2}\gamma_0\varphi\right)-\frac{\gamma_0^2\varphi}{4}\left(\frac{1}{S_0}-\varphi\right)\right] = S_0\left(\frac{1-\varphi}{1-S_0\varphi}\right)\left[\frac{1}{1+(S_0-\gamma_0)\varphi}\right]\cdot\left[1+\frac{1}{2}\left(S_0-\gamma_0-\frac{1}{2}\frac{\gamma_0^2}{S_0}\right)\varphi+\frac{1}{4}(\gamma_0^2-\gamma_0 S_0)\varphi^2\right] \tag{3}$$

式中：γ_0 为室温零压 Grüneisen 系数，$\varphi=\eta(v_{0K})=1-v_{0K}/v_0$，$v$ 是比容，下标 0 和 0K 分别代表室温雨贡纽和 0 K 雨贡纽的初始状态。

零温零压条件下的初始比容 v_{0K}、体模量 B_{0K}及其对压力的一阶偏导 B_{0K}'为

$$B_{0K} = -v_{0K}\left(\frac{\mathrm{d}p_c}{\mathrm{d}v}\right)_{v_{0K}} = \rho_{0K}C_{0K}^2 \tag{4}$$

$$B_{0K}' = \left(\frac{\mathrm{d}B}{\mathrm{d}p}\right)_{v_{0K}} = -1 - v_{0K}\frac{(\mathrm{d}^2p_c/\mathrm{d}v^2)_{v_{0K}}}{(\mathrm{d}p_c/\mathrm{d}v)_{v_{0K}}} = 4S_{0K}-1 \tag{5}$$

$$v_{0K} = \gamma(v_{0K})\left[\frac{\varphi}{2\rho_0}+\frac{(1-S_0\varphi)^2}{\rho_0 C_0^2\varphi}e_0\right] \tag{6}$$

式中：p_c 为冷能，e_0 为比内能。考虑到 v_0 和 v_{0K}差别很小，Grüneisen 系数可用经验关系式 $\gamma/v=\gamma_0/v_0$ 描述。因而

$$\gamma(v_{0K}) = (\gamma_0/v_0)v_{0K} \tag{7}$$

根据 Einstein 理论，e_0 可以表示为

$$e_0 = \frac{3Nk\theta_E}{\exp(\theta_E/T_0)-1} \tag{8}$$

式中：θ_E 是 Einstein 温度，且 $\theta_E=0.75\theta_D$，θ_D 为德拜温度，室温 $T_0=300$ K，Avogadro 常数 $N_A=6.022\times10^{23}$/mol，Boltzmann 常数 $k=1.380\times10^{-23}$ J/K。

根据公式(2)～公式(8)，可以直接由冲击雨贡纽数据和材料常数确定 0 K 物态方程参数 v_{0K}、B_{0K}和 B_{0K}'。表 1 给出了本研究计算使用的 Au 和 Pt 的 ρ_0、C_0、S_0、和 θ_D 的值。

表 1 Au 和 Pt 的计算参数

Table 1 Model parameters used in the present calculations for Au, Pt, B1-NaCl and MgO at ambient conditions

Material	ρ_0/(g/cm^3)	C_0/(km/s)	S_0	γ_0	θ_D/(K)
Au	19.240	3.071[20-21]	1.535[20-21]	2.97[20]	165[22]
Pt	21.449	3.641[7,20]	1.541[7,20]	2.69[16]	234[16]

Au 和 Pt 的 0 K 物态方程参数计算结果如表 2 所示，将计算结果代入通用物态方程即可得到 Au

和 Pt 的 0 K 物态方程。为获得室温等温物态方程,并与 DAC 实验数据和早期理论计算结果比对分析,根据热压 p_T 与比容非相关的假定,可以直接由 0 K 物态方程计算相应的热压。具体的算法为:0 K 和室温等温物态方程分别表示为 $p(0\ \mathrm{K},v)$ 和 $p(300\ \mathrm{K},v)$。当 $v=v_0$ 时,$p(300\ \mathrm{K},v_0)=0$。所以

$$p_T(300\ \mathrm{K})=p(300\ \mathrm{K},v_0)-p(0\ \mathrm{K},v_0)=-p(0\ \mathrm{K},v_0) \tag{9}$$

根据公式(9)确定的 Au 和 Pt 的 300 K 热压同样列于表 2,则室温等温物态方程可以写为

$$p(300\ \mathrm{K},v)=p(0\ \mathrm{K},v)+p_T(300\ \mathrm{K})=p(0\ \mathrm{K},v)-p(0\ \mathrm{K},v_0) \tag{10}$$

表 2　Au 和 Pt 的 0 K 物态方程参数计算结果及 300 K 物态方程热压值

Table 2　The calculated 0 K EOS parameters and thermal pressure corrections for 300 K isothermal EOS

Material	$\rho_{0\mathrm{K}}$/(g/cm^3)	$B_{0\mathrm{K}}$/(GPa)	$B_{0\mathrm{K}}'$	p_T/(GPa)
Au	19.433	185.13	5.15	1.73
Pt	21.574	286.47	4.88	1.44

3　计算结果与讨论

由于 Au 具有的化学惰性、较高的等温压缩性和在较宽的压力和温度范围内保持稳定的 fcc(面心立方)相结构等特性,Jamieson[9] 推荐 Au 作为 DAC 实验的重要压标材料。然而,随后的一些研究分别给出了一些不同的 Au 的等温物态方程。实验方面,Heinz[23]、Bell[24] 和 Dewaele[25] 基于 DAC 实验和红宝石荧光压标测量了 Au 的室温等温压缩性,在实验测量范围内他们的实验结果相互具有较好的吻合程度。但是,实验测量的最高压力仅为 180 GPa,因而理论工作者付出了巨大的努力,试图将 Au 压标拓展至更为宽广的压力区域,其采用的主要理论计算方法包括由冲击雨贡纽数据计算等温物态方程的经验方法、分子动力学方法和第一原理方法。从交叉检验的角度出发,我们计算了压力直到 500 GPa 的 Au 的室温等温物态方程,并与早期实验测量和理论计算结果同示于图 1。为了更清晰地展示诸多数据之间的微小差异,图 2 为本研究 Au 等温物态方程计算结果与早期实验测量和理论计算结果在给定压缩比时的压力偏差,其中 $\Delta p=p_{\mathrm{our}}-p_{\mathrm{other}}$,$p_{\mathrm{our}}$是本研究计算结果,$p_{\mathrm{other}}$是其他实验测量和理论计算结果。可以看出,除了 Boettger[26] 的第一原理计算结果外,所有数据在低压区吻合得较好。然而,在较高的压力区,不同的物态方程在相同压缩比条件下确定的压力开始出现偏离,230 GPa 时的最大偏差就达到了 35 GPa。Souvatzis[27] 和 Take Tsuchiya[28] 基于第一原理计算的 Au 的室温等温物态方程在 250 GPa 范围内与近期由 Dorogokupets[29] 提出的经验物态方程结果较为吻合。但是,这 3 个物态方程确定的压力远大于实验测量和其他理论计算结果。与之相反,Shim[17] 基于冲击波数据和准静水压压缩数据确定的 Au 的物态方程明显小于其他的物态方程。Greeff[30] 的第一原理计算结果仅在 150 GPa 以内与实验数据较为吻合,在高压区确定的压力则明显偏小。Wang[31] 根据第一原理和平均场理论由冲击波数据得到了 Au 的室温等温物态方程。通过对比分析发现,本研究计算结果与全部实验数据[23-25] 和一些理论

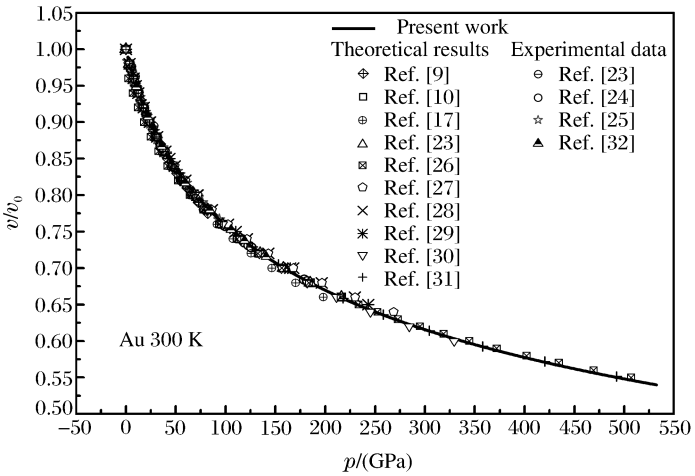


图 1　金的室温等温物态方程

Fig. 1　300 K isothermal EOS for Au

计算结果[9-10,30-31]吻合得非常好。特别是,在 300 GPa 范围内与 Wang[31]计算结果的偏差小于 0.5 GPa,最大相对偏差小于 1.5%。最近,Hirose[32]在 DAC 实验中测量了 11～140 GPa 范围内 Au 的室温等温压缩性,加载压力由目前较为公认的 Speziale MgO 压标[13]确定。可以看出,Hirose 的实验结果与本研究计算结果吻合得非常好,在实验压力范围内最大偏差不大于 1 GPa。因而,独立来源数据的交叉检验结果显示,本研究计算的 Au 的室温等温物态方程可以作为 DAC 实验的压标。

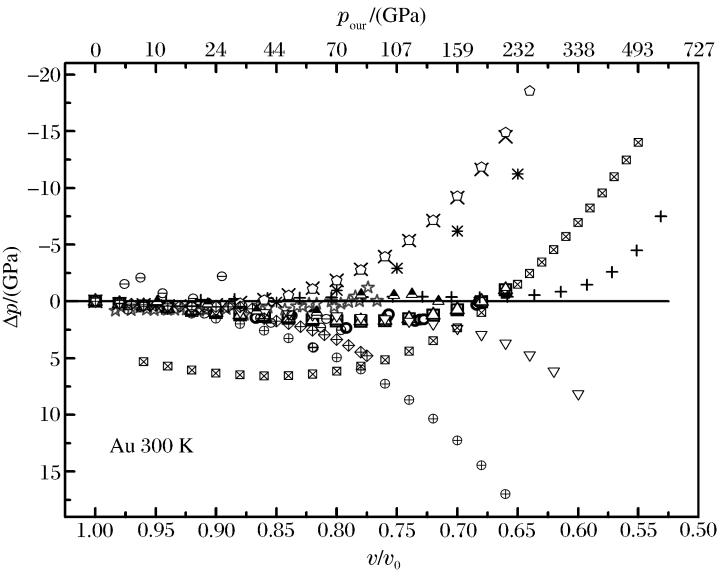


图 2 本研究计算的 Au 的室温等温物态方程与其它实验测量和理论计算结果的偏差

Fig. 2 The difference between our calculated 300 K isothermal EOS and previous determinations for Au

在静高压 X 射线衍射 DAC 实验中,由于具有对 X 射线的高散射性、高压下稳定的 fcc 相结构和化学惰性等特性,Pt 也被常用作压标材料[9]。正是由于此原因,Pt 的热力学性质在实验测量和理论计算方面均被广泛研究。Holmes[7]使用二级轻气炮将 Pt 冲击压缩至 660 GPa,获得了高精度的冲击雨贡纽数据,计算了 Pt 的室温等温物态方程,目前被普遍接受作为 DAC 实验的压标。近年来,由于在压力高于 40 GPa 时,Holmes Pt 压标确定的压力系统性地高于 Dewaele[25]基于红宝石压标的实验结果以及 Jamieson[9]和 McQueen[33]由冲击波数据确定的 Pt 压标,Holmes Pt 压标的有效性受到了质疑。随后,一些理论研究试图通过冲击波数据和第一原理方法预测 Pt 的等温压缩性。Xiang[34]使用 FPLMTO 方法(Full-Potential Linear Muffin-Tin Orbital)并结合振动配分函数平均场理论计算了 Pt 压力直到 1000 GPa 的等温物态方程;Bercegeay[35]基于多种有效赝势在密度泛函框架内计算了 Pt 的物态方程,他们的 Pt 物态方程理论计算结果与 DAC 实验结果的吻合程度较差,并随着压力的升高偏离程度逐渐增大,在 200 GPa 时就超过了 15 GPa。Singh[36]提出了一个一参数物态方程模型用于描述 Pt 的等温物态方程,其计算结果与 Proupin[37]的第一原理结果和 Wang[31]的计算结果较为吻合。但是,这 3 个物态方程的结果却在高压区略微大于 Holmes Pt 压标。与其相反,Dorogokupets[29]提出的半经验物态方程和 McQueen[33]由冲击波数据得到的物态方程在压力大于 100 GPa 时,确定的压力远小于 Holmes Pt 压标。总的来说,除 Xiang 的计算结果以外,其他理论计算结果在 40 GPa 范围内较为吻合。但是,随着压力的升高这些物态方程仍出现了较大偏离,且趋势逐渐增大,在 250 GPa 时达到了 16 GPa。我们计算了压力直到 550 GPa Pt 的室温等温物态方程,早期实验测量和理论计算结果同示于图 3 以便于比较,图 4 为相同压缩比条件

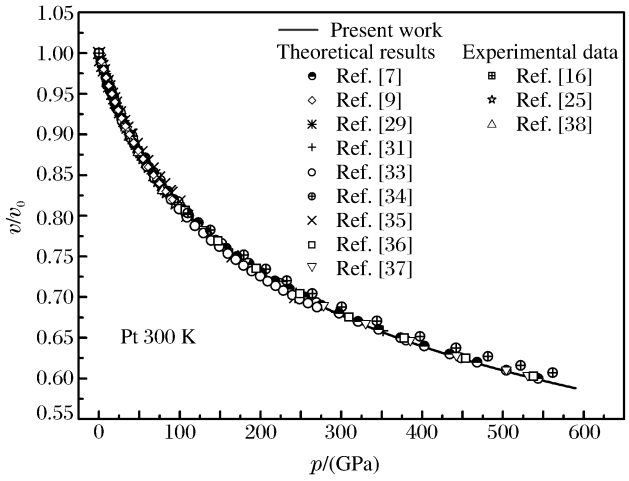


图 3 铂的室温等温物态方程

Fig. 3 300 K isothermal EOS for Pt

下本研究计算结果与其他来源数据在给定压缩比时的压力偏差。可以看出,我们的计算结果与 Holmes Pt 压标吻合得非常好,在 120 GPa 范围内两者的最大偏差不超过 1 GPa,120～550 GPa 范围内相对偏差小于 1%。本研究计算结果表明 Holmes Pt 压标在 DAC 实验中并未过高估计压力,且本研究计算结果有效地减小了目前存在于 Pt 压标之间的差异。最近,Zha[38] 在 DAC 实验中测量了压力直到 80 GPa Pt 的等温压缩性,加载压力由 Speziale MgO[13] 压标确定。在给定压缩比条件下,Zha 确定的压力是最低的。他认为比容的不确定度是实验数据分散的主要来源,综合考虑 Pt 和 MgO 的比容测量不确定度,其实验测量压力的最大不确定度为 3.4 GPa,即最大实验压力的 4%,这与其实验结果和本研究计算结果的偏差相一致。

表 3 列出了 Au 和 Pt 的室温等温物态方程计算结果,即压力随压缩比的关系。压缩比的选择主要是为在高压区进行内插时获得较高数据精度。我们认为在此压力-比容范围内,表 3 所列数据可以作为 DAC 实验的 Au 和 Pt 压标。

表 3　Au 和 Pt 室温等温物态方程在选定压缩比时所对应的压力

Table 3　Pressure at selected compression ratios at room temperature using the present method for Au, Pt

$x=v/v_0$	p/(GPa)		$x=v/v_0$	p/(GPa)	
	Au	Pt		Au	Pt
1.000	0.000	0.000	0.700	158.636	252.502
0.990	1.731	2.886	0.695	164.847	262.408
0.980	3.754	5.959	0.690	171.280	272.670
0.970	5.814	9.229	0.685	177.945	283.281
0.960	8.000	12.707	0.680	184.850	294.297
0.950	10.334	16.405	0.675	191.990	305.714
0.940	12.815	20.344	0.670	199.405	317.548
0.930	15.451	24.535	0.665	207.091	329.816
0.920	18.260	28.992	0.660	215.060	342.536
0.910	21.250	33.740	0.655	223.322	355.727
0.900	24.429	38.795	0.650	231.874	369.382
0.890	27.817	44.173	0.645	240.762	383.574
0.880	31.421	49.905	0.640	249.982	398.300
0.870	35.263	56.012	0.635	259.549	413.582
0.860	39.356	62.519	0.630	269.477	429.444
0.850	43.713	69.446	0.625	279.762	445.911
0.840	48.362	76.838	0.620	290.462	462.974
0.830	53.313	84.720	0.615	301.571	480.730
0.820	58.599	93.119	0.610	313.110	499.173
0.810	64.237	102.089	0.605	325.096	518.335
0.800	70.249	111.664	0.600	337.525	538.248
0.790	76.672	121.887	0.595	350.466	—
0.780	83.525	132.796	0.590	363.919	—
0.770	90.854	144.464	0.585	377.904	—
0.760	98.686	156.938	0.580	392.448	—
0.750	107.053	170.265	0.575	407.545	—
0.740	116.012	184.538	0.570	423.282	—
0.730	125.601	199.818	0.565	439.659	—
0.720	135.858	216.166	0.560	456.704	—
0.710	146.857	233.701	0.555	474.450	—

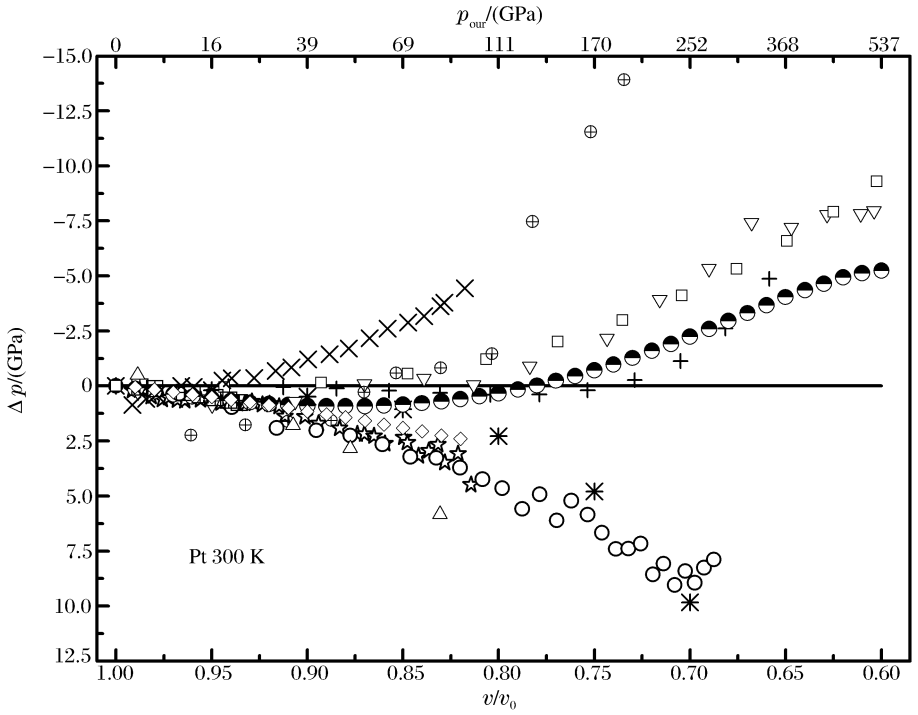


图 4 本研究计算的 Au 的室温等温物态方程与其它实验测量和理论计算结果的偏差

Fig. 4 The difference between our calculated 300 K isothermal EOS and previous determinations for Pt

4 结 论

在对 Grüneisen 系数高温高压特性不作任何假设的前提下，由冲击雨贡纽数据直接确定了材料的零温零压比容、等温体模量及其压力的一阶偏导，并计算了 Au 和 Pt 的 0 K 物态方程。通过适当的热压修正，得到了 Au 和 Pt 在较宽压力区域的室温等温物态方程，计算结果与现有的准静水压条件下的 DAC 实验结果吻合得非常好；缩小了以前存在于不同 Au 和 Pt 压标之间的差异。基于独立来源数据的交叉检验以及本研究计算结果与实验结果非常好的吻合程度，我们认为本研究提出的 Au 和 Pt 的等温物态方程可以作为今后静高压实验的压标。

References:

[1] Jing F Q. Introduction to Experimental Equation of State [M]. Beijing: Science Press, 1986. (in Chinese)
经福谦. 实验物态方程导引 [M]. 北京：科学出版社，1986.

[2] Xu X S, Zhang W X. Introduction to Theoretical Equation of State [M]. Beijing: Science Press, 1986. (in Chinese)
徐锡申，张万箱. 实用物态方程导引 [M]. 北京：科学出版社，1986.

[3] Mao H K, Wu Y, Hemley R J, et al. X-Ray Diffraction to 302 Gigapascals: High Pressure Crystal Structure of Cesium Iodide [J]. Science, 1989, 246: 649-651.

[4] Ruoff A L, Xia H, Xia Q. The Effect of a Tapered Aperture on X-Ray Diffraction from a Sample with a Pressure Gradient: Studies on Three Samples with a Maximum Pressure of 560 GPa [J]. Rev Sci Instrum, 1992, 63: 4342-4348.

[5] Cynn H, Yoo C S. Equation of State of Tantalum to 174 GPa [J]. Phys Rev B, 1999, 59: 8526-8529.

[6] Mitchell A C, Nellis W J. Shock Compression of Aluminum, Copper, and Tantalum [J]. J Appl Phys, 1980, 52: 3363-3374.

[7] Holmes N C, Moriarty J A, Gathers G R, et al. The Equation of State of Platinum to 660 GPa(6.6Mbar) [J]. J Appl Phys, 1989, 66: 2962-2967.

[8] Hixson R S, Fritz J N. Shock Compression of Tungsten and Molybdenum [J]. J Appl Phys, 1992, 71: 1721-1728.

[9] Jamieson J C, Fritz J N, Manghnani M H. Pressure Measurement at High Temperature in X-Ray Diffraction Studies: Gold as a Primary Standard [A]//Akimoto S, Manghnani M H. High-Pressure Research in Geophysics [C]. Tokyo: Center for Academic Publishing, 1982: 27-48.

[10] Anderson O L, Isaak D G, Yamamoto S. Anharmonicity and the Equation of State for Gold [J]. J Appl Phys, 1989, 65: 1534-1543.

[11] Decker D L. High Pressure Equation of State for NaCl, KCl and CsCl [J]. J Appl Phys, 1971, 42: 3239-3244.

[12] Brown J M. The NaCl Pressure Standard [J]. J Appl Phys, 1999, 86: 5801-5808.

[13] Speziale S, Zha C S, Duffy T S. Quasi-Hydrostatic Compression of Magnesium Oxide to 52 GPa: Implications for the Pressure-Volume-Temperature Equation of State [J]. J Geophys Res, 2001, 106: 515-528.

[14] Shigeaki Ono, Takumi Kikegawa, Yasuo Ohishi. Structural Property of CsCl-Type Sodium Chloride under Pressure [J]. Solid State Commun, 2006, 137: 517-521.

[15] Yuichi Akahama, Haruki Kawamura, Singh A K. Equation of State of Bismuth to 222 GPa and Comparison of Gold and Platinum Pressure Scales to 145 GPa [J]. J Appl Phys, 2002, 92: 5892-5897.

[16] Fei Y, Li J, Hirose K. A Critical Evaluation of Pressure Scales at High Temperatures by *in situ* X-Ray Diffraction Measurements [J]. Phys Earth Planet Inter, 2004, 143/144: 515-526.

[17] Shim S, Duffy T S, Takemura K. Equation of State of Gold and Its Appllication to the Phase Boundaries Near 660 km Depth in Earth's Mantle [J]. Earth Planet Sci Lett, 2002, 203: 729-739.

[18] Akahama Y, Kawamura H, Singh A K. A Comparison of Volume Compressions of Silver and Gold up to 150 GPa [J]. J Appl Phys, 2004, 95: 4767-4771.

[19] Wu Q, Jing F Q, Li X Z. Determination of the Input Parameters B_{0K}, B_{0K}' and ρ_{0K} for 0 K Universal Isothermal Equation of State [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2005, 19(2): 97-104. (in Chinese)
吴　强,经福谦,李欣竹. 零温物态方程输入参数 B_{0K}, B_{0K}' 和 ρ_{0K} 的确定 [J]. 高压物理学报, 2005, 19(2): 97-104.

[20] Marsh S P. Los Alamos Shock Hugoniot Data [Z]. Berkeley: University of California Press, 1980.

[21] Jones A H, Isbell W M, Maiden C L. Measurement of the Very High Pressure Properties of Materials Using Light Gas Gun [J]. J Appl Phys, 1966, 37: 3493-3499.

[22] Holzapfel W B, Hartwig M, Sievers W. Equations of State for Cu, Ag, and Au for Wide Ranges in Temperature and Pressure up to 500 GPa and Above [J]. J Phys Chem Ref Data, 2001, 30: 515-529.

[23] Heinz D L, Jeanloz R. The Equation of State of the Gold Calibration Standard [J]. J Appl Phys, 1984, 55: 885-893.

[24] Bell P M, Xu J, Mao H K. Static Compression of Gold and Copper and Calibration of the Ruby Pressure Scale to Pressure to 1.8 Mbar [A]//Gupta Y M. Shock Waves in Condensed Matter-1985 [C]. Nork York: Plenum, 1986: 125-130.

[25] Dewaele A, Loubeyre P, Mezouar M. Equation of State of Six Metals above 94 GPa [J]. Phys Rev B, 2004, 70: 094112.

[26] Boettger J C. Theoretical Extension of the Gold Pressure Calibration Standard beyond 3 Mbar [J]. Phys Rev B, 2003, 67: 174107.

[27] Souvatzis P, Delin A, Eriksson O. Calculation of the Equation of State of fcc Au from First Principles [J]. Phys Rev B, 2006, 73: 054110.

[28] Tsuchiya T. First Principles Prediction of the *p-V-T* Equation of State Gold and The 660 km Discontinuity in Earth's Mantle [J]. J Geophys Res, 2003, 108: 2462.

[29] Dorogokupets P I, Oganov A R. Ruby, Metals, and MgO as Alternative Pressure Scales: A Semiempirical Description of Shock-Wave, Ultrasonic, X-Ray, and Thermochemical Data at High Temperatures and Pressures [J]. Phys Rev B, 2007, 75: 024115.

[30] Greeff C W, Graf M J. Lattice Dynamic and the High Pressure Equation of State of Au [J]. Phys Rev B, 2004, 69: 054107.

[31] Wang Y, Rajeev Ahuja, Börje Johansson. Reduction of Shock Wave Data with Mean Field Potential Approach [J]. J Appl Phys, 2002, 92: 6616-6620.

[32] Kei Hirose, Nagayoshi Sata, Tetsuya Komabayashi, et al. Simultaneous Volume Measurements of Au and MgO to 140 GPa and Thermal Equation of State of Au on the MgO Pressure Scale [J]. Phys Earth Planet Inter, 2008, 167: 149-154.

[33] McQueen R G, Marsh S P, Taylor J W, et al. High Velocity Impact Phenomena [M]. New York: Academic, 1970.

[34] Xiang S K, Cai L C, Bi Y, et al. Thermal Equation of State for Pt [J]. Phys Rev B, 2005, 72: 184102.

[35] Bercegeay C, Bernard S. First Principles Equation of State and Elastic Properties of Seven Metals [J]. Phys Rev B, 2005, 72: 214101.

[36] Singh A K. Pressure-Volume Data for Epsilon Iron and Platinum to Earth-Core Pressures and above from One-Parameter Equation of State Implication on Platinum Pressure Scale [J]. Phys Earth Planet Inter, 2007, 164: 75-82.

[37] Menéndez-Proupin E, Singh A K. *Ab Initio* Calculations of Elastic Properties of Compressed Pt [J]. Phys Rev B, 2007, 76: 054117.

[38] Zha C S, Mibe K, Bassett W A, et al. p-V-T Equation of State of Platinum to 80 GPa and 1 900 K from Internal Resistive Heating/X-Ray Diffraction Measurements [J]. J Appl Phys, 2008, 103: 054908.

Isothermal Equations of State of Au and Pt at Room Temperature: Implication for Pressure Scales

JIN Ke, WU Qiang, LI Xin-Zhu, CAI Ling-Cang, JING Fu-Qian

(*National Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics, Institute of Fluid Physics, CAEP, Mianyang* 621900, *China*)

Abstract: Isothermal equations of state at room temperature of Au, Pt were investigated to the relative volume change of 0.5～0.6. The isothermal bulk modulus B_{0K}, its first pressure derivative B_{0K}', and the specific volume v_{0K} at zero pressure and temperature were derived directly from the experimental shock wave data with a simple method, independent of any assumption on the behavior of Grüneisen parameter at high pressures and temperatures. Based on the derived parameters, the isothermal equations of state for the four pressure standard materials were calculated, which show excellent agreements with the available quasi-hydrostatic measurements in diamond-anvil-cell experiment. Comparison of the calculated results with the previous theoretical investigations was also performed. The crosscheck on independent data and the excellent agreements with experimental data confirm that the present isothermal equations of state for Au and Pt can be used as high-pressure scales for future static DAC experiments.

Key words: isothermal equation of state; Au; Pt; pressure scales