文章编号:1000-5773(2011)03-0275-07

$(Fe_{0.03}Ni_{0.97})_8(Si_{0.79}P_{0.21})_3$ 的等温状态方程研究*

杨 晶,巫 翔,秦 善

(北京大学地球与空间科学学院造山带与地壳演化教育部重点实验室,北京 100871)

摘要:采用固态高温烧结反应方法,成功合成出了陨硅镍铁石样品$(Fe_{0.03}Ni_{0.97})_8(Si_{0.79}P_{0.21})_3$。X 射线衍射结果表明,合成样品的结构为 $R\bar{3}c$,对应的晶胞参数为 $a=b=0.6638(1)$ nm,$c=3.7892(2)$ nm,$V=1.44615(6)$ nm^3。在室温下,对样品进行原位高压 X 射线衍射研究,实验最高压力达到 21.3 GPa,随着压力的升高,晶胞体积逐渐减小,但并没有观察到结构相变。利用 Birch-Murnaghan 状态方程对体积与压力的关系进行拟合,获得常温常压下的体积 $V_0=1.4414(24)$ nm^3,体积模量 $K_0=220(7)$ GPa。晶轴与压力的关系利用 Murnaghan 状态方程拟合,获得 a 轴和 c 轴的模量分别为 $K_a=257(9)$ 和 $K_c=165(4)$,c 轴较 a 轴容易压缩。

关键词:陨硅镍铁石;高压;状态方程

中图分类号:O521.2;P574.12 **文献标识码**:A

1 引 言

地球具有液态外核和固态内核。外核的主要成分为 Fe-Ni 合金[1-2],但是地震学研究观测所得到的外核的密度与在地核温压条件下的纯 Fe 的密度不同,存在明显的密度亏损。一些关于地核组成的地球化学研究表明:地核的密度亏损是 10%[1,3],因此得出外核是由 Fe-Ni 合金与一种或多种轻元素组成的结论[4-5],如 C、Si、S、P、O 等轻元素。将这些元素与 Fe 或 Fe-Ni 合金相混合时,可以建立地核的地球化学模型。然而,迄今为止,地核中到底存在哪种或哪几种轻元素还没有完全的定论。前人对 Fe 或 Fe-Ni 合金与轻元素组成的化合物在高压下的行为做了大量的研究[6-13],例如对 Fe 或 Fe-Ni 合金与轻元素组成的化合物体系在不同条件下的相图进行更新和完善[8,11-12],对其熔融行为的研究[7],对其在高压下的声速与密度之间的关系进行验证[6,9],以及对其在高压下的结构和压缩性质的研究[10,13]。但大多数研究只针对 Fe 或 Fe-Ni 合金与一种轻元素组成的化合物。为了更好地模拟地核的物质组成,开展 Fe-Ni 合金与多种轻元素组成的复杂体系的研究具有十分重要的意义。

Si 元素和 P 元素已被证实是地核中两种重要的轻元素。Kuwayama 认为,在所有轻元素中 Si 元素存在于地核中的可能性最大[8]。例如采用金刚石对顶砧(Diamond Anvil Cell,DAC)装置进行的实验结果表明,在熔融的外核与下地幔底部的矿物达到地球化学平衡时,Si 能够溶解在液态外核中的含量显著增加[14-17]。陨石、月岩以及地球样品 Si 同位素丰度的研究也表明,Si 可能存在于地核中[18]。McDonough指出,P 的地核丰度为 0.25%(质量分数),列第四位[19]。P 作为地核主量元素,在陨石中陆续被发现并报道,如 Schreibersite($Fe_{2.25}Ni_{0.75}P$)、Nickelphosphide($Fe_{1.7}Ni_{1.3}P$)、Allabogdanite($Fe_{1.5}Ni_{0.5}P$)

* **收稿日期**:2010-03-04;**修回日期**:2010-08-27

基金项目:国家自然科学基金(40972029)

作者简介:杨 晶(1987—),女,硕士研究生,主要从事晶体结构和材料高压物性的研究. E-mail:yangjing2009@pku.edu.cn

通讯作者:巫 翔(1978—),男,博士,教授,主要从事晶体结构和材料高压物性的研究. E-mail:xiang.wu@pku.edu.cn

和 Perryite($(Fe,Ni)_8(Si,P)_3$)等。P 在富铁陨石中的普遍存在表明,在适当的压力和高温下磷很容易进入富铁的物质[20],说明 P 也是一种亲铁元素,且在地核中的作用不可忽略。

值得一提的是,Stevenson 认为,地核可能是富铁的星际物质(包括陨石,有的可能含有铁核)被原始地球俘获后逐渐沉积而形成的[21]。因此对陨石的成分进行研究并结合高压实验提供的数据,对于揭示地球深部物理特性,研究地球动力学原理具有重要意义。由于天然陨石样品的稀少和珍贵,很难进行原位的高压结构表征,因此常用人工合成样品代替天然陨石进行相关的结构和物性研究。

陨硅镍铁石中同时含有 Si 和 P 两种重要的轻元素,是一个非常好的样本。在本研究中,我们采用固态高温烧结方法成功合成陨硅镍铁石$(Fe,Ni)_8(Si,P)_3$,利用 DAC 实验技术原位地开展了高压 X 射线衍射(XRD)测试,得到了该矿物的等温状态方程和可压缩性。

2 陨硅镍铁石的结构特征

天然陨硅镍铁石的粒径通常小于 20 μm,以至于难以进行单晶结构分析。直到 1991 年,Okada 等人在实验室中成功合成出与天然陨硅镍铁石成分一致的单晶体,测定出其理想化学式$(Fe_{0.03}Ni_{0.97})_8(Si_{0.79}P_{0.21})_3$ 和晶体结构($R3c$ 和 $Z=12$)[22]。随后该晶体结构被修正为 $R\bar{3}c$,对应的晶胞参数为 $a=0.664\,0(2)$ nm,$c=3.798\,2(7)$ nm[23]。在$(Ni,Fe)_8(Si,P)_3$ 结构中,Ni、Fe 占据同一位置,占位度分别为 0.97 和 0.03,有 4 种不同的占位,Ni(Fe)1、Ni(Fe)2、Ni(Fe)3 和 Ni(Fe)4,如图 1 所示。其中 Ni(Fe)1(图 1(a))的配位数为 14,与 10 个 Fe(Ni)和 4 个 Si(P)相联;Ni(Fe)2(图 1(b))和 Ni(Fe)4(图 1(d))的配位数是 13,与 9 个 Fe(Ni)和 4 个 Si(P)相联;Ni(Fe)3(图 1(c))的配位数是 11,与 7 个 Fe(Ni)和 4 个 Si(P)相联。结构中 Si,P 占据同一位置,占位度分别为 0.79 和 0.21,分别有 3 种不同的占位,Si(P)1、Si(P)2 和 Si(P)3。

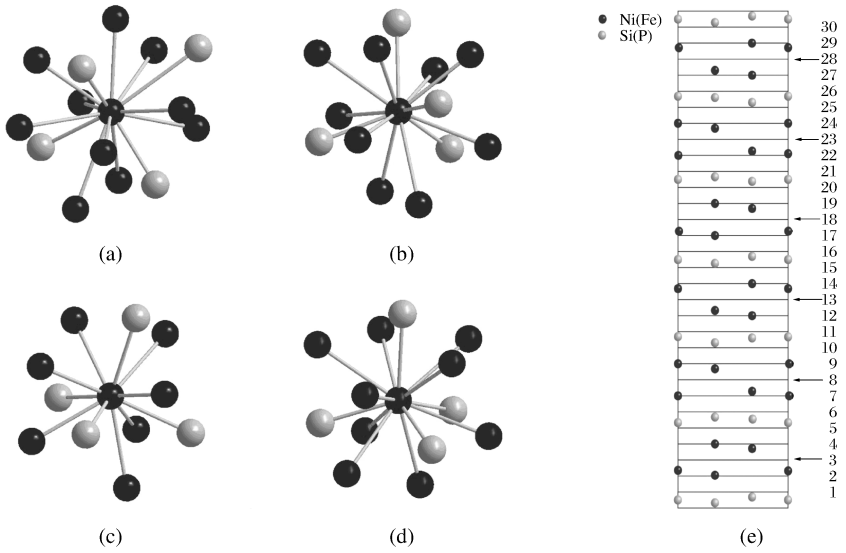


图 1 $(Fe_{0.03}Ni_{0.97})_8(Si_{0.79}P_{0.21})_3$ 的结构特征

(图中黑色小球代表 Ni(Fe)原子,灰色小球代表 Si(P)原子;图 1(a)、图 1(b)、图 1(c)和图 1(d)分别代表结构中 Ni(Fe)1、Ni(Fe)2、Ni(Fe)3 和 Ni(Fe)4 四种不同配位环境;图 1(e)为$(Fe,Ni)_8(Si,P)_3$ 沿着 c 轴的层状结构示意图)

Fig. 1 The structure of $(Fe,Ni)_8(Si,P)_3$

(The black balls indicate Ni(Fe) atoms, the grey ones indicate Si(P) atoms; Fig. 1(a), Fig. 1(b), Fig. 1(c) and Fig. 1(d) indicate the coordination environments of 4 kinds of Ni(Fe) atoms; Fig. 1(e) indicates the layer structure of $(Fe,Ni)_8(Si,P)_3$ along the c axis.)

$(Fe_{0.03}Ni_{0.97})_8(Si_{0.79}P_{0.21})_3$ 结构由 30 个基本层构成,每层均由同种原子组成,Ni(Fe)或 Si(P)。结构中 Ni(Fe)原子层、Si(P)原子层平行于(0001)面呈交替分布,如图 1(e)所示,图中箭头所指的基本层

由 Si(P)填充，其余的基本层由 Ni(Fe)填充。1～10 基本层、11～20 基本层和 21～30 基本层是通过 3_1 螺旋轴对称操作相互重复的。

3　实验方法

样品的合成工作是在日本冈山大学地球物质科学研究所进行的。$(Fe_{0.03}Ni_{0.97})_8(Si_{0.79}P_{0.21})_3$ 样品由 Fe、Ni 与 Si、P 单质通过固-固高温烧结反应而成。纯度均为 99.99%的 Fe、Ni、Si 和 P 商用化学药品严格按照化学计量比配比，在玛瑙研钵中混合研磨均匀后压成直径为 3 mm 的“药片”，将这些“药片”密封在直径为 4 mm 的真空石英试管中。然后将密封的试管放置高温炉中，加热至 900 ℃，恒温保持 48 h 后，冷却至室温。取出生成物，并重复上述研磨、压片、加热、冷却步骤，最终可得所需样品。合成的样品通过 XRD 进行结构的表征，采用 Cu 靶，2θ 范围 25°～70°，步进扫描方式，步长为 0.02°，每步时间 1.5 s。

高压装置采用四柱 Merrill-Basset 型金刚石对顶砧(DAC)。金刚石压砧台面直径为 400 μm，封垫材料为 260 μm 厚的金属 Re 片，预压后封垫厚度约为 54 μm，样品腔的直径约为 200 μm。氖作为传压介质。使用红宝石荧光光谱测定对应的压力值[24]。原位的高压实验在德国巴伐利亚地质研究所进行。测试条件：微聚焦的 X 射线 Mo 靶(波长为 0.071 08 nm，聚焦光斑直径大约为 50 μm)、管压为55 kV、管流 60 mA、Bruker APEX CCD 探测器，每个衍射图谱的曝光时间为 1 800 s。最后通过 Fit2D 软件对二维衍射图谱进行积分，得到一维衍射谱。所有实验均在常温下完成，实验的最高压力为21.3 GPa。常压和高压下所得到的衍射数据均采用 Le Bail 方法进行全谱拟合，进而获得对应的晶胞参数。

4　结果与讨论

人工合成的陨硅镍铁石的结构用 XRD 方法进行表征，采用 Cu 靶，如图 2 所示。从图 2 可以看出，样品的衍射峰与标准图谱(ICSD-74516)相符，仅含少量杂质(如图 2 中 * 所示)。样品的空间群为 $R\bar{3}c$，精修后得到 $a=b=0.663\,8(1)$ nm，$c=3.789\,2(2)$ nm，$V=1.446\,15(6)$ nm^3，与前人所得结果($a=b=0.664\,0(2)$ nm，$c=3.798\,2(7)$ nm，$V=1.450\,3(7)$ nm^3)一致[23]。

图 3 是不同压力下的衍射峰，最高压力达到 21.3 GPa，采用 Mo 靶，波长为 0.071 08 nm。在衍射峰下方的短线代表 3.5 GPa 下陨硅铁矿石相衍射峰的位置。从图 3 可以看出，随着压力的升高，各衍射峰均向高角发生了不同程度的移动，意味着面网间距 d 随压力的增大而减小。与此同时，并无新的衍射峰产生或者消失，说明在本实验压力范围内无结构相变。不同压力下的晶胞参数在表 1 中列出。

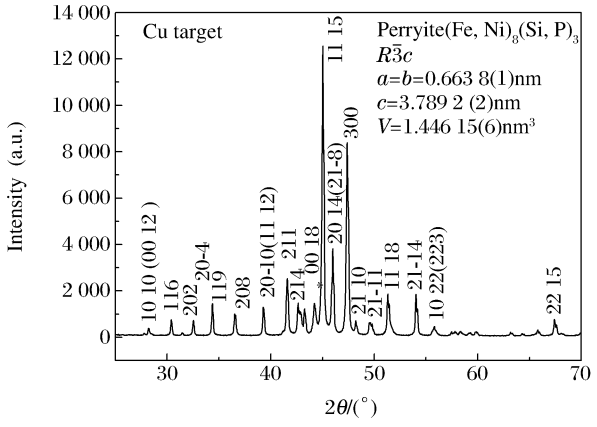


图 2　常温常压下$(Fe_{0.03}Ni_{0.97})_8(Si_{0.79}P_{0.21})_3$ 的 X 射线衍射图谱

Fig. 2　XRD pattern of $(Fe_{0.03}Ni_{0.97})_8(Si_{0.79}P_{0.21})_3$ at room temperature and pressure

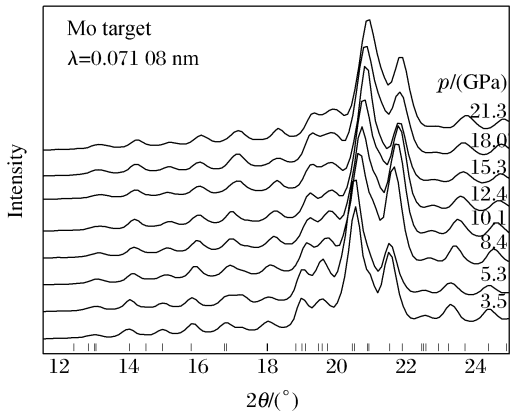


图 3　不同压力下$(Fe_{0.03}Ni_{0.97})_8(Si_{0.79}P_{0.21})_3$ 的衍射图谱

Fig. 3　XRD patterns of $(Fe_{0.03}Ni_{0.97})_8(Si_{0.79}P_{0.21})_3$ at various pressures

表 1 $(Fe_{0.03}Ni_{0.97})_8(Si_{0.79}P_{0.21})_3$ 不同压力下的晶胞参数

Table 1 Unit-cell parameters of $(Fe_{0.03}Ni_{0.97})_8(Si_{0.79}P_{0.21})_3$ at various pressures

p/(GPa)	a/(nm)	c/(nm)	V/(nm^3)
0.0001	0.6638(1)	3.7892(2)	1.4461(1)
3.5	0.6598(2)	3.7612(16)	1.4181(6)
5.3	0.6585(4)	3.7515(23)	1.4090(7)
8.4	0.6561(2)	3.7268(2)	1.3892(7)
10.1	0.6544(2)	3.7165(18)	1.3784(9)
12.4	0.6530(2)	3.7066(17)	1.3697(8)
15.3	0.6511(3)	3.686(17)	1.3531(1.0)
18.0	0.6496(3)	3.6765(23)	1.3435(1.2)
21.3	0.6479(3)	3.6602(22)	1.3308(1.1)

为了表征样品的弹性参量，即体积随压力的变化，用三阶 Birch-Murnaghan 状态方程(B-M EOS)对实验数据 p-V 进行拟合。其数学表达式为

$$p = 3K_0 f_E(1+2f_E)^{5/2}[1+(3/2)(K'_0-4)f_E]$$

式中：p 代表压力(GPa)，K_0 为体积模量(GPa)，K'_0 为体积模量的一阶压力导数，f_E 代表欧拉有限应变状态方程：$f_E=[(V_0/V)^{2/3}-1]/2$。f_E 中 V_0 代表零压体积，V 代表不同压力下的体积。拟合过程中，完全放开 V_0、K_0 和 K'_0 3 个变量，得到 $V_0=1.4458(19)$nm^3、$K_0=168(12)$GPa 和 $K'_0=10.7(18)$。K'_0 值明显偏大，不合理，为此固定 $K'_0=4$，得到 $V_0=1.4414(24)$nm^3，$K_0=220(7)$GPa。实测的 p-V 数据及其拟合的结果如图 4 所示。

文献中没有(Fe,Ni)$_8$(Si,P)$_3$ 状态方程的报道，也很少有关于 Ni 与轻元素组成的化合物的体积模量数据。但关于 Fe 与轻元素组成的化合物的状态方程及体积模量有相关的报道。本研究将部分数据进行了归纳并列于表 2 中，以作对比。

表 2 Fe/Ni 与不同轻元素组成的化合物的状态方程参数

Table 2 Equation of state parameters for Fe/Ni with light element components

Chemical formula	Structure	K_0/(GPa)	K_0'	Reference
Fe-5.2%Ni	hcp	212(15)	4	[25]
Fe-10.3%Ni	hcp	215(25)	4	[25]
ε-FeSi	$P2_13$	209(6)	3.5(4)	[26]
FeSi	$Pm3m$	184(5)	4.2(3)	[27]
FeP_2	$Pnnm$	235(3)	4	[13]
Fe_2P	$P\bar{6}2m$	165(3)	4	[12]
Fe_3P	$I\bar{4}$	159(1)	4	[20]
Fe_3C	$Pnma$	174(6)	4.8(8)	[28]
Fe_3S	$I\bar{4}$	156(7)	3.8(3)	[29]
Ni_2P	$P\bar{6}2m$	201(8)	4.2(6)	[30]
$(Fe,Ni)_8(Si,P)_3$	$R\bar{3}c$	220(7)	4	This study
Fe	hcp	163(8)	5.3(2)	[31]
Ni	fcc	185.4(10)	4	[32]

从表 2 中可以看出，本研究所得到的 $(Fe,Ni)_8(Si,P)_3$ 体积模量（$K_0=220(7)$ GPa，$K'_0=4$）与 Takahashi得到的两种 hcp 结构的 Fe-Ni 合金[25]的体积模量相近，但远大于 hcp 结构 Fe[31]和 fcc 结构 Ni[32]的体积模量。另外可以将 $(Fe,Ni)_8(Si,P)_3$ 化简为 $Fe(Ni)_{8/3}P(Si)$，这个简写式与 Fe_2P、Ni_2P 和 Fe_3P 在化学式形式上具有很强的可比性，Fe_2P 和 Fe_3P 的 K_0 值都远小于本研究所得的 K_0 值，但与 Ni_2P 的 K_0 值相近。

为了讨论晶轴压缩率，对实测的 a 轴和 c 轴采用简单的二阶状态方程进行描述，即 Murnaghan 状态方程 $p=\frac{K_{d_0}}{K'_{d_0}}\left[\left(\frac{d_0^3}{d^3}\right)^{K'_{d_0}}-1\right]$ 进行拟合，其中 d_0 代表晶胞轴长，K_d 代表轴压缩模量，K'_d 为轴压缩模量的微商。固定 K'_d 为 4，得到 $a_0=0.6630(3)$ nm，$K_a=257(9)$ GPa；$c_0=3.7872(19)$ nm，$K_c=165(4)$ GPa。归一化的轴压缩数据及其拟合结果如图 5 所示。从图 5 可以看出，晶体的可压缩性表现为各向异性，c 轴比 a、b 轴更容易压缩。这与 $(Fe,Ni)_8(Si,P)_3$ 层状结构的特征相一致，层内的键力较层与层之间的键力大，因此较难被压缩。

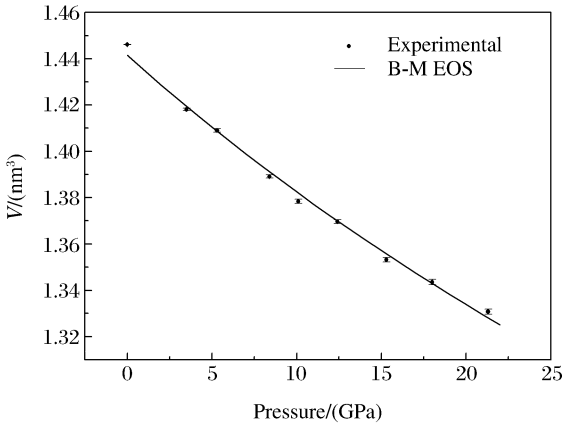


图 4　$(Fe_{0.03}Ni_{0.97})_8(Si_{0.79}P_{0.21})_3$ 的体积与压力的关系

Fig. 4　Volume of $(Fe_{0.03}Ni_{0.97})_8(Si_{0.79}P_{0.21})_3$ as a function of pressure

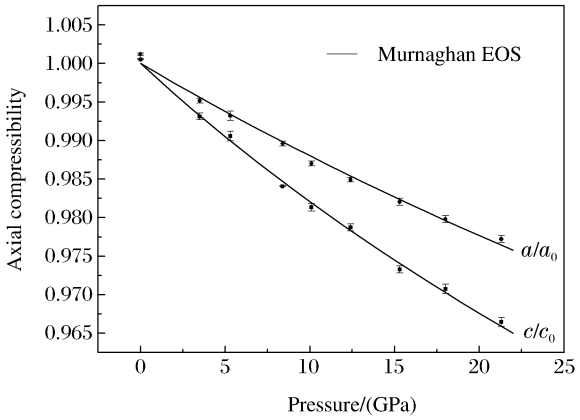


图 5　$(Fe_{0.03}Ni_{0.97})_8(Si_{0.79}P_{0.21})_3$ 的轴压缩率与压力的关系

Fig. 5　Axial compressibilities of $(Fe_{0.03}Ni_{0.97})_8(Si_{0.79}P_{0.21})_3$ as a function of pressure

5　结　论

在室温下，对人工合成的陨硅镍铁石 $(Fe_{0.03}Ni_{0.97})_8(Si_{0.79}P_{0.21})_3$ 进行了原位高压 X 射线衍射研究，实验最高压力达到 21.3 GPa。在研究的压力范围内，随着压力的升高，晶胞体积逐渐被压缩，在此过程中未观测到合成陨硅镍铁石的结构相变。利用 Birch-Murnaghan 状态方程对实验数据 p-V 进行拟合，获得常温下的体积模量 $K_0=220(7)$ GPa。对实测的 p-a 和 p-c 用 Murnaghan 状态方程进行拟合，获得 a 轴和 c 轴的轴压缩模量分别为 $K_a=257(9)$ GPa 和 $K_c=165(4)$ GPa，c 轴的压缩率大于 a 轴的压缩率。

References：

[1]　Birch F. Elasticity and Constitution of the Earth Interior [J]. J Geophys Res, 1952, 57: 227-286.

[2]　Poirier J P. Light Elements in the Earths Outer Core: A Critical Review [J]. Phys Earth Planet Inter, 1994, 85: 319-337.

[3]　Dziewonski A M, Anderson D L. Preliminary Reference Earth Model [J]. Phys Earth Planet Int, 1981, 25: 297-356.

[4]　McDonough W F, Sun S S. The Composition of the Earth [J]. Chemical Geology, 1995, 120: 223- 253.

[5] Hemley R J, Mao H K. In Situ Studies of Iron under Pressure: New Windows on the Earth's Core [J]. Int Geol Rev, 2001, 43: 1- 30.

[6] Fiquet G, Badro J, Gregoryanz E, et al. Sound Velocity in Iron Carbide (Fe_3C) at High Pressure: Implications for the Carbon Content of the Earth's Inner Core [J]. Physics of the Earth and Planetary Interiors, 2009, 172: 125-129.

[7] Lord O T, Walter M J, Dasgupat R, et al. Melting in the Fe-C System to 70 GPa [J]. Earth and Planetary Science Letters, 2009, 284: 157-167.

[8] Kuwayama Y, Sawai T, Hirose K, et al. Phase Relations of Iron-Silicon Alloys at High Pressure and High Temperature [J]. Phys Chem Minerals, 2009, 36: 511-518.

[9] Lin J F, Struzhkin V V, Sturhahn W, et al. Sound Velocities of Iron-Nickel and Iron-Silicon Alloys at High Pressures [J]. Geophysical Research Letters, 2003, 30: 2112

[10] Fei Y W, Li J, Bertka C M, et al. Structure Type and Bulk Modulus of Fe_3S, a New Iron-Sulfur Compound [J]. American Mineralogist, 2000, 85: 1830-1833.

[11] Morard G, Andrault D, Guignot N, et al. In Situ Determination of Fe-Fe_3S Phase Diagram and Liquid Structural Properties up to 65 GPa [J]. Earth and Planetary Science Letters, 2008, 272: 620-626.

[12] Scott H P, Kiefer B, Martin C D, et al. p-V Equation of State for Fe_2P and Pressure-Induced Phase Transition in Fe_3P [J]. High Pressure Research, 2008, 28: 375-384.

[13] Wu X, Kanzaki M, Qin S, et al. Structural Study of FeP_2 at High Pressure [J]. High Pressure Research, 2009, 29: 235-244.

[14] Takafuji N, Hirose K, Mitome M, et al. Solubilities of O and Si in Liquid Iron in Equilibrium with $(Mg, Fe)SiO_3$ Perovskite and the Light Elements in the Core [J]. Geophys Res Lett, 2005, 32: L06313.

[15] Sakai T, Kondo T, Ohtani E, et al. Interaction between Iron and Post-Perovskite at Core-Mantle Boundary and Core Signature in Plume Source Region [J]. Geophys Res Lett, 2006, 33: L15317.

[16] Ozawa H, Hirose K, Mitome M, et al. Chemical Equilibrium between Ferropericlase and Molten Iron to 134 GPa and Implications for Iron Content at the Bottom of the Mantle [J]. Geophys Res Lett, 2008, 35: L05308.

[17] Ozawa H, Hirose K, Mitome M, et al. Experimental Study of Reaction between Perovskite and Molten Iron to 146 GPa and Implications for Chemically-Distinct Buoyant Layer at the Top of the Core [J]. Phys Chem Miner, 2009, 36: 355-363

[18] Georg R B, Halliday A N, Schauble E A, et al. Silicon in the Earth's Core [J]. Nature, 2007, 447: 1102-1106.

[19] McDonough W F. Compositional Model for the Earth's Core [J]. Treatise on Geochemistry, 2004, 120: 223-253.

[20] Scott H P, Huggins S, Frank M R, et al. Equation of State and High-Pressure Stability of Fe_3P-Schreibersite: Implications for Phosphorus Storage in Planetary Cores [J]. Geophysical Research Letters, 2007, 34: L06302.

[21] Steveson D J. Models of the Earth's Core [J]. Science, 1981, 214: 611-619.

[22] Okada A, Kobayashi K. Structure of Synthetic Perryite, $(Ni, Fe)_8(Si, P)_3$ [J]. Acta Cryst, 1991, C47: 1358-1361.

[23] Richard E M. The Centrosymmetric-Noncentrosymmetric Ambiguity: Some More Examples [J]. Acta Cryst, 1994, A50: 450-455.

[24] Mao H K, Xu J, Bell P. Calibration of the Ruby Pressure Gauge to 800 kbar under Quasi-Hydrostatic Conditions [J]. J Geophys Res, 1986, 91: 4673-4676.

[25] Takahashi T, Bassett W A, Mao H K. Isothermal Compression of the Alloys of Iron up to 300 kbar at Room Temperature: Iron-Nickel Alloys [J]. J Geophys Res, 1968, 73: 4717-4725.

[26] Knittle E, Williams Q. Static Compression of ε-FeSi and an Evaluation of Reduced Silicon as a Deep Earth Constituent [J]. Geophys Res Lett, 1995, 22: 445-448.

[27] David P D, Wilson A C, Pierre B. The Equation of State of CsCl-Structured FeSi to 40 GPa: Implications for Silicon in the Earth's Core [J]. Geophysical Research Letters, 2003, 30: 1014

[28] Li J, Mao H K, Fei Y, et al. Compression of Fe_3C to 30 GPa at Room Temperature [J]. Phys Chem Minerals, 2002, 29: 166-169.

[29] Seagle C T, Campbell A J, Heinz D L, et al. Thermal Equation of State of Fe_3S and Implications for Sulfur in Earth's Core [J]. J Geophys Res, 2006, 111: B06209: 1-7.

[30] Dera P, Lavina B, Borkowski L A, et al. Structure and Behavior of the Barringerite Ni End-Member, Ni_2P, at Deep Earth Conditions and Implications for Natural Fe-Niphosphides in Planetary Cores [J]. J Geophys Res, 2009, 114: B03201

[31] Dewaele A, Loubeyre P, Occeli F, et al. Quasihydrostatic Equation of State of Iron above 2 Mbar [J]. Phys Rev Lett, 97: 215504.

[32] Chen B, Penwell D, Kruger M B. The Compressibility of Nanocrystalline Nickel [J]. Solid State Commun, 2000, 115: 191- 194.

p-V Equation of State of $(Fe_{0.03}Ni_{0.97})_8(Si_{0.79}P_{0.21})_3$

YANG Jing, WU Xiang, QIN Shan

(*School of Earth and Space Sciences, Peking University, Key Laboratory of Orogenic Belts and Crustal Evolution, Ministry of Education, Beijing* 100871, *China*)

Abstract: Perryite $(Fe_{0.03}Ni_{0.97})_8(Si_{0.79}P_{0.21})_3$ sample was synthesized using the standard solid-state reaction. The X-ray diffraction results show that its space group is $R\bar{3}c$ with the lattice parameters ($a=b=0.6638(1)$ nm, $c=3.7892(2)$ nm, $V=1.44615(6)$ nm^3). In situ high-pressure X-ray diffraction experiments were carried out up to 21.3 GPa at room temperature. No phase transition was observed in the present pressure range. The unit-cell volumes show a smooth decrease with increasing pressure. The variation of the unit-cell volume with pressure was analyzed by Birch-Murnaghan equations of state. Results of the B-M equations of state yield a unit-cell volume (V_0) of 1.4414 (24) nm^3 at zero GPa, an isothermal bulk modulus (K_0) of 220(7) GPa. Axial compressibility was fitted linearly by Murnaghan equations of state. We obtained $K_a=257(9)$, $K_c=165(4)$. The *c*-axis was more compressible than the *a*-axis.

Key words: perryite; high pressure; equation of state