## 采用光谱技术研究[C<sub>4</sub>mim][BF<sub>4</sub>]的传压和测压性能

朱 祥<sup>1,2\*</sup>,袁朝圣<sup>1</sup>,程学瑞<sup>1</sup>,李 涛<sup>1</sup>,周 松<sup>1</sup>,张 欣<sup>1</sup>,董兴邦<sup>1</sup>,梁永福<sup>2</sup>,王 征<sup>2</sup>

1. 郑州轻工业大学物理与电子工程学院,河南郑州 450001

2. 郑州轻工业大学河南省磁电信息功能材料重点实验室,河南郑州 450001

摘 要 金刚石压腔是一种在实验室被频繁使用的高压产生装置,它在高压领域占据着重要地位。当金刚 石压腔内传压介质只能提供非静水压环境时,利用传统的红宝石荧光光谱测压方法将很难准确测量样品压 强,这也是目前超高压实验面临的普遍困难。若有一种兼具"传压"和"测压"双重功能的物质,根据"相邻位 置、相近压强"原则,将能够解决在非静水压环境中测不准样品压强问题。显然,探寻兼具"传压"和"测压" 双重功能的物质是一项非常重要的工作。本文将红宝石微粒与离子液体「C4mim」「BF4 ]装入金刚石压腔,然 后利用金刚石压腔压缩[C<sub>4</sub>mim][BF<sub>4</sub>]使其提供高压环境,同时采集红宝石的荧光光谱及其附近[C<sub>4</sub>mim]  $[BF_4]$ 的拉曼光谱。通过分析红宝石特征荧光峰  $R_1$  的峰位,得到了 $[C_4 \text{ mim}]$  BF<sub>4</sub>]在加压过程中提供的一系 列高压环境的压强值。通过分析红宝石特征荧光峰  $R_1$  的峰宽,发现 $[C_4 \text{ mim}][BF_4]$ 在 0~6.26 和 6.26~ 21.43 GPa 两个压强范围内可分别提供静水压环境和准静水压环境,表明[C4 mim][BF4]在 0~21.43 GPa 范 围内可以作为传压介质使用。此外,还发现「C4 mim] [BF4] 在 0~2.28, 2.28~6.26, 6.26~14.39 和 14.39 ~21.43 GPa 四个压强范围内分别为"液相Ⅱ"、"液相Ⅱ"、"非晶相Ⅱ"和"非晶相Ⅱ"。通过分析「C4 mim] [BF4]中特征拉曼峰<sub>V(B-F)</sub>和<sub>V(ring)</sub>的峰位,发现在[C4mim][BF4]四个相态内<sub>V(B-F)</sub>和<sub>V(ring)</sub>的峰位随压强增加 均满足线性变化关系,并给出了相应的压强与峰位关系函数,这些函数是[C4mim][BF4]用作压标物质的重 要依据。综上所述,「C4 mim] [BF4]不仅具有"传压"功能,同时还具有"测压"功能,可同时用作"传压介质" 和"压标物质"。研究结果为在非静水压环境中准确测量样品压强提供了重要依据,也为超高压条件下样品 压强测量不准确问题提供了新的解决思路。

关键词 荧光光谱; 拉曼光谱; 金刚石压腔; 离子液体; 传压介质; 压标物质 中图分类号: O433.4 文献标识码: A DOI: 10.3964/j.issn.1000-0593(2022)06-1674-05

### 引 言

金刚石压腔是一种在实验室被频繁使用的高压装置,可 与拉曼、红外、同步辐射X射线衍射等多种测试技术联用开 展高压原位研究,因此在高压领域占据重要地位<sup>[1]</sup>。使用金 刚石压腔进行高压实验时,需要将样品(固态)与某种传压介 质一起装入其中,然后通过该装置压缩传压介质,从而产生 作用于样品的高压环境。样品压强通常采用红宝石荧光光谱 间接测压法<sup>[2]</sup>,即利用红宝石(压标物质)特征荧光峰确定传 压介质压强,再利用传压介质静水压性质(无压力梯度,压 强处处相等)间接确定样品压强,因此该测压方法要求传压 介质提供静水压环境。目前,绝大多数物质静水压阈值小于 10 GPa<sup>[3]</sup>,导致更高压力下样品压强很难得到准确测量,这 也是超高压实验面临的普遍困难。若能找到一种兼具"传压" 和"测压"功能于一身的特殊物质,即使在非静水压环境中 (有压力梯度,不同位置压强不等)也将能准确测量样品压 强。以固体样品为例,将兼具"传压"和"测压"功能的特殊物 质与固体样品同时放入金刚石压腔,始终选取样品附近该物 质进行测压,即使该物质不能提供静水压环境,根据"相邻 位置、相似压强"原则,仍然能够准确获得样品压强。显然, 寻找兼具"传压"和"测压"功能的特殊物质是使用该方法准确 测压的重要前提。

离子液体是一种完全由离子组成,且在室温或室温附近 呈液态的独特物质<sup>[4]</sup>。离子液体具有较宽的液态压强范 围<sup>[5]</sup>,而且容易出现过压现象<sup>[6]</sup>,可能是一种理想传压介 质。离子液体还具有显著的压力效应,其特征拉曼峰在压力 作用下能够产生较大蓝移<sup>[7]</sup>,可能是一种理想压标物质。综

#### 收稿日期: 2021-04-22,修订日期: 2021-06-28

**基金项目:**河南省重点研发与推广专项(科技攻关)(202102210010,212102210129,202102210205),国家自然科学基金项目(11975211)资助 作者简介:朱 祥,1982年生,郑州轻工业大学物理与电子工程学院讲师 e-mail:zhuxiang123zx@163.com \* 通讯作者

上所述,离子液体可能是一种兼具"传压"和"测压"功能的理 想物质<sup>[8]</sup>。本文选取[C<sub>4</sub>mim][BF<sub>4</sub>]为研究对象,利用荧光 光谱和拉曼光谱等技术研究其传压和测压性能,探究其同时 用作传压介质和压标物质的可行性。

#### 1 实验部分

1-丁基-3-甲基咪唑四氟硼酸盐([C<sub>4</sub> mim][BF<sub>4</sub>])购买于河南利华制药有限公司,其纯度大于 99.5%。常温常压下,[C<sub>4</sub> mim][BF<sub>4</sub>]为液态,分子量为 225.89 g·mol<sup>-1</sup>。图 1 给出了[C<sub>4</sub> mim][BF<sub>4</sub>]的分子结构示意图。



实验采用金刚石压腔作为高压实验装置。图2给出了金 刚石压腔的结构示意图。如图所示,金刚石压腔的核心部分 是由两个金刚石砧面和一个带有小孔的 T301 不锈钢密封垫 片组成。其中,金刚石砧面直径约为 350 μm,经预压后密封 垫片厚度约为 60 μm,小孔的直径约为 100 μm。实验时,将 一颗直径约 20 μm 的红宝石微粒(固体)与[C<sub>4</sub>mim][BF<sub>4</sub>](液 体)一起装入金刚石压腔。加压过程中,在相同压强下采集 红宝石的荧光光谱和红宝石附近[C<sub>4</sub>mim][BF<sub>4</sub>]的拉曼光谱。



Fig. 2 Sketch of diamond anvil cell

文中所有荧光光谱和拉曼光谱均使用英国雷尼绍(Renishaw)公司生产的 inVia 型拉曼光谱仪采集得到,并采用该 公司提供的 wire 3.0 软件对荧光峰和拉曼峰的中心位置和 半高宽等参数进行 Gauss 和 Lorentz 混合方式拟合确定。拉 曼光谱仪主要参数包括:激发光波长为 532 nm,激发光功率 为 50 mW,光栅常数为 2 400 gr • mm<sup>-1</sup>,狭缝宽度为 65 μm,光谱分辨率好于 0.5 cm<sup>-1</sup>。

#### 2 结果与讨论

图 3 给出了加压过程中红宝石的荧光光谱。如图 3 所

示,在加压过程中,红宝石特征荧光峰  $R_1$ 和  $R_2$ 的峰位(中 心波长)向较长的波长方向移动,同时  $R_1$ 和  $R_2$ 的峰宽(半高 宽)也有变化。 $R_1$ 和  $R_2$ 的峰位向较长的波长方向移动,表明 高压会引起红宝石发出的荧光频率减小; $R_1$ 和  $R_2$ 的峰宽变 化,表明由[ $C_4$ mim][BF<sub>4</sub>]提供的高压环境会引起红宝石微 粒受到的应力分布情况发生变化。



Mao 等<sup>[9]</sup>报道: 红宝石 *R*<sub>1</sub>峰位(或峰位变化量)与压强 满足如式(1)关系

$$P = \frac{1\ 904}{7.\ 665} \left[ \left( 1 + \frac{\Delta\lambda}{\lambda_0} \right)^{7.\ 665} - 1 \right]$$
(1)

式(1)中, P 为压强, 单位为 GPa;  $\lambda_0$  为常压下红宝石  $R_1$  的 峰位,单位为 nm;  $\Delta \lambda$  为高压与常压红宝石  $R_1$  的峰位变化 量,单位为 nm。利用式(1)可确定红宝石微粒所处环境的压 强,该方法被称为"红宝石荧光标压法"。将红宝石微粒与  $[C_4 \min][BF_4]$ 一起放人金刚石压腔,目的之一是利用红宝 石  $R_1$  峰位标定 $[C_4 \min][BF_4]$ 的压强。表 1 给出了红宝石  $R_1$ 

表 1 红宝石  $R_1$  的峰位及压强(298 K) Table 1  $R_1$  line of ruby with pressure

No.	$R_1/\mathrm{nm}$	$P/\mathrm{GPa}$	No.	$R_1/\mathrm{nm}$	$P/\mathrm{GPa}$
1	694.03	0	13	697.59	9.93
2	694.26	0.62	14	697.91	10.84
3	694.47	1.20	15	698.21	11.70
4	694.71	1.88	16	698.56	12.71
5	694.86	2.28	17	698.91	13.69
6	695.12	3.00	18	699.15	14.39
7	695.57	4.27	19	699.45	15.27
8	696.01	5.49	20	699.79	16.25
9	696.29	6.26	21	700.26	17.60
10	696.63	7.22	22	700.70	18.91
11	697.09	8.53	23	701.12	20.13
12	697.29	9.08	24	701.57	21.43

的峰位及压强,该压强也是红宝石附近[C<sub>4</sub>mim][BF<sub>4</sub>]的压强(根据"相邻位置、相似压强"原则)。由表1可知,实验的初始压强为常压(标记为0GPa),最高压强为21.43GPa,共在24个不同压强条件下采集了红宝石的荧光光谱。

Piermarini  $\oplus^{[10]}$  报道: 当红宝石微粒处于静水压环境 时,  $R_1$  的峰宽将保持不变或略微减小,直至静水压环境消 失,随后  $R_1$  的峰宽将因非静水压环境恶化程度而产生不同 程度的增大,该性质被用来判断高压下物质的传压性质<sup>[3]</sup>, 也被用来确定物质发生玻璃化转变的压力点<sup>[5]</sup>,该方法被称 为"红宝石荧光判据"。本文将红宝石微粒与[C<sub>4</sub>mim][BF<sub>4</sub>] 一起放入金刚石压腔,目的之二是利用红宝石  $R_1$  峰宽判定 高压下[C<sub>4</sub>mim][BF<sub>4</sub>]的传压性质。图 4 给出了红宝石  $R_1$  峰 宽变化量与压强关系。如图 4 所示,在 0~21.43 GPa 范围 内,  $R_1$  的峰宽先减小后增大,且在 6.26 GPa 附近出现明显 的"拐点"。当压强小于 6.26 GPa 时,  $R_1$  峰宽略有减小(幅度 小于 1 cm<sup>-1</sup>),表明[C<sub>4</sub>mim][BF<sub>4</sub>]保持液态,提供静水压环 境;当压强大于 6.26 GPa 时, $R_1$  峰宽逐渐增大(幅度小于 5 cm<sup>-1</sup>),表明[C<sub>4</sub>mim][BF<sub>4</sub>]转变为固态,提供准静水压环 境。因此,[C<sub>4</sub>mim][BF<sub>4</sub>]具有较好的传压性能。





值得注意的是, 红宝石  $R_1$  峰宽不仅在 6.26 GPa 出现 "拐点", 在 2.28 和 14.39 GPa 同样出现了"拐点"。三个"拐 点"(2.28, 6.26 和 14.39 GPa)与先前报道<sup>[11]</sup>的[C<sub>4</sub>mim] [BF<sub>4</sub>]三个相变点(2.25, 6.10 和 14.00 GPa)基本相同, 表 明压致相变引起了[C<sub>4</sub>mim][BF<sub>4</sub>]的传压性质改变,导致红 宝石  $R_1$  峰宽在不同相态内遵循不同变化规律。

由"红宝石荧光判据"可知,  $[C_4 mim][BF_4]$ 在 6.26 GPa 发生的相变为"液-固"相变,由此推测 $[C_4 mim][BF_4]$ 在 2.28 和 14.39 GPa 发生的相变为"液-液"和"固-固"相变。由文献 可知,  $[C_4 mim][BF_4]$ 在 2.25, 6.10 和 14.00 GPa 发生的相 变均为"无序-无序"结构转变<sup>[12]</sup>。因此,可以判断 $[C_4 mim]$  $[BF_4]$ 在 6.26 和 14.39 GPa 分别发生"液-非晶"和"非晶-非 晶"相变。 $[C_4 mim][BF_4]$ 的相变情况与 $[C_6 mim][BF_4]$ (两者 结构相似)非常相似<sup>[13]</sup>, 一定程度上佐证了上述结论的正确 性。综上所述,  $[C_4 mim][BF_4]$ 在 0~2.28, 2.28~6.26, 6.26~14.39 和 14.39~21.43 GPa 范围内分别是液态(标记 为"液相 I")、液态(标记为"液相 II")、非晶态(标记为"非晶 相 I")和非晶态(标记为"非晶相 II")。

图 5 给出了红宝石附近[C<sub>4</sub>mim][BF<sub>4</sub>]的拉曼光谱及部 分拉曼峰位与压强变化关系。如图 5 所示,在加压过程中, [C<sub>4</sub>mim][BF<sub>4</sub>]所有拉曼峰均向高波数移动,其中拉曼峰 766 和1 025 cm<sup>-1</sup>移动最明显,且在 2.28,6.26 和 14.39 GPa 出 现"拐点"。根据文献报道,766 cm<sup>-1</sup>来源于阴离子([BF<sub>4</sub>]<sup>-</sup>) 中 B-F 的对称伸缩振动(标记为  $\nu_{(B-F)}$ );1 025 cm<sup>-1</sup>来源于阳 离子([C<sub>4</sub>mim]<sup>+</sup>)中咪唑环的呼吸振动(标记为  $\nu_{(ring)}$ )<sup>[14]</sup>。 766 和 1 025 cm<sup>-1</sup>向高波数移动,表明  $\nu_{(B-F)}$ 和  $\nu_{(ring)}$ )<sup>[14]</sup>。 766 和 1 025 cm<sup>-1</sup>向高波数移动,表明  $\nu_{(B-F)}$ 和  $\nu_{(ring)}$ 的振动频 率增大。766 和 1 025 cm<sup>-1</sup>在 2.28,6.26 和 14.39 GPa 出现 "拐点",表明  $\nu_{(B-F)}$ 和  $\nu_{(ring)}$ 的振动频率在[C<sub>4</sub>mim][BF<sub>4</sub>]的 "液相 I"、"液相II"、"非晶相 I"和"非晶相 II"中遵循不同 变化规律,如图 5 所示。值得注意的是,在 0~21.43 GPa 范 围内,766 和 1 025 cm<sup>-1</sup>都没有"跳变"(只有"拐点")。据我 们所知,当物质发生"无序-无序"结构转变时,一般不会发生 结构和体积突变;当物质发生"无序-有序"或"有序-有序"结构



图 5 [C₄mim][BF₄]的拉曼光谱(a)及拉曼峰与压强关系(b)

Fig. 5 Raman spectra (a) and relationship between Raman peak and pressure (b) of  $[C_4 mim][BF_4]$ 

转变时,则通常伴随结构和体积突变。因此,拉曼峰 766 和 1 025 cm<sup>-1</sup>在 0~21.43 GPa 范围内没有"跳变"(只有"拐 点")现象,与文献[12]报道[C4mim][BF4]在 2.25,6.10 和 14.00 GPa 发生的相变均为"无序-无序"结构转变的结论基 本相符。

由上文可知,  $\nu_{(BF)}$ 和  $\nu_{(ring)}$ 的峰位随压强增加明显向高波数移动,表明利用其峰位与压强关系可以实现测压功能。  $\nu_{(BF)}$ 和  $\nu_{(ring)}$ 的峰位随压强增加存在"拐点",表明测压时应采取分段方式进行。此外,  $\nu_{(BF)}$ 和  $\nu_{(ring)}$ 的峰位随压强增加没有 "跳变",表明在[C<sub>4</sub>mim][BF<sub>4</sub>]相变压力点附近也能实现准确测压。表 2 给出了  $\nu_{(BF)}$ 和  $\nu_{(ring)}$ 在不同压强范围([C<sub>4</sub>mim]] [BF<sub>4</sub>]不同相态)内的测压函数。考虑到拉曼光谱仪的分辨率 为 0.5 cm<sup>-1</sup>,则根据公式( $\mu$ =( $\Delta P/\Delta \nu$ )×0.5 cm<sup>-1</sup>)可计算 出利用 $\nu$ (BF)和 $\nu$ (nng)进行测压的不确定度(详见表 2)。

若 $[C_4 \min]$ [BF<sub>4</sub>]用作传压介质和压标物质,则具有如 下优点:(1)可以在非静水压环境(或超高压条件)中准确测 量样品压强;(2)[C\_4 mim][BF<sub>4</sub>]几乎不挥发,且粘度大小适 中,能够简单方便地装入金刚石压腔;(3)固化后的[C<sub>4</sub> mim] [BF<sub>4</sub>]可以提供准静水压环境,有助于降低测压误差;(4)高 压下[C<sub>4</sub> mim][BF<sub>4</sub>]不结晶,没有尖锐衍射峰,适用于晶体 样品高压 X 射线衍射研究。

D/CD		<b>ν</b> (B-F)	ν(ring)		
P/GPa	峰位/cm <sup>-1</sup> )	测压函数	峰位/cm <sup>-1</sup> )	测压函数	
0 0.62 1.20 1.88	766.9 769.2 771.3 774.1	$P = -193.8 \pm 0.2528 \times_{\nu(B-F)} (R^2 = 0.986, \mu = 0.13 \text{ GPa}) (0 < P < 2.28 \text{ GPa})$	1 024.7 1 026.9 1 028.2 1 030.1	$P = -436.5 \pm 0.425 6 \times \nu_{\text{(ring)}}$ (R <sup>2</sup> =0.985, $\mu$ =0.17 GPa) (0 <p<2.28 gp)<="" td=""></p<2.28>	
2.28 3.00 4.27 5.49	775.7 778.0 782.0 785.5	$P = -251.4 \pm 0.3269 \times_{\nu(B-F)} (R^2 = 0.999, \mu = 0.16 \text{ GPa}) (2.28 < P < 6.26 \text{ GPa})$	1 031.1 1 032.8 1 035.9 1 038.8	$P = -427.7 + 0.417 \ 0 \times \nu_{\text{(ring)}}$ $(R^2 = 0.999, \ \mu = 0.21 \ \text{GPa})$ $(2.28 \ll P \ll 6.26 \ \text{GPa})$	
6.26 7.22 8.53 9.08 9.93 10.84 11.70 12.71 13.69	788. 0 792. 3 796. 2 798. 8 801. 9 804. 6 807. 8 810. 9 813. 0	$P = -224.5 \pm 0.2926 \times \nu_{(B-F)}$ (R <sup>2</sup> =0.994, $\mu$ =0.15 GPa) (6.26 <p<14.39 gp)<="" td=""><td><math display="block">1 040. 8 \\ 1 044. 5 \\ 1 047. 6 \\ 1 049. 6 \\ 1 052. 0 \\ 1 054. 1 \\ 1 056. 5 \\ 1 059. 1 \\ 1 060. 7</math></td><td><math display="block">P = -379.0 + 0.369 9 \times \nu_{\text{(ring)}}</math><math display="block">(R^2 = 0.993, \mu = 0.19 \text{ GPa})</math><math display="block">(6.26 &lt; P &lt; 14.39 \text{ GPa})</math></td></p<14.39>	$1 040. 8 \\ 1 044. 5 \\ 1 047. 6 \\ 1 049. 6 \\ 1 052. 0 \\ 1 054. 1 \\ 1 056. 5 \\ 1 059. 1 \\ 1 060. 7$	$P = -379.0 + 0.369 9 \times \nu_{\text{(ring)}}$ $(R^2 = 0.993, \mu = 0.19 \text{ GPa})$ $(6.26 < P < 14.39 \text{ GPa})$	
14. 39 15. 27 16. 25 17. 60 18. 91 20. 13 21. 43	814. 4 817. 4 820. 7 822. 7 827. 0 830. 1 832. 6	$P = -299.7 + 0.3855 \times_{\nu(B-F)}$ $(R^2 = 0.991, \mu = 0.19 \text{ GPa})$ $(14.39 < P < 21.43 \text{ GPa})$	$1 062. 0 \\ 1 064. 3 \\ 1 066. 4 \\ 1 068. 0 \\ 1 070. 8 \\ 1 072. 8 \\ 1 074. 2$	$P = -596.6 + 0.5749 \times \nu_{\text{(ring)}}$ $(R^2 = 0.988, \mu = 0.29 \text{ GPa})$ $(14.39 < P < 21.43 \text{ GPa})$	

	表 2	不同压强范围内压强与 v <sub>(B-F)</sub> 和 v <sub>(ring)</sub> 函数关系(298 K)	
Table 2	Functior	relations of pressure and $v_{(B-F)}$ and $v_{(ring)}$ at different pressure ran	ges

注: R<sup>2</sup> 为拟合优度值, µ 为不确定度

### 3 结 论

通过分析[ $C_4$  mim][ $BF_4$ ]中红宝石微粒的荧光光谱,发现[ $C_4$  mim][ $BF_4$ ]在 0~6.26 和 6.26~21.43 GPa 范围内可 分别提供静水压环境和准静水压环境,且在 0~2.28, 2.28~6.26,6.26~14.39 和 14.39~21.43 GPa 范围内存在 四种相态,分别为"液相 I"、"液相 II"、"非晶相 I"和"非晶相 I"和"非晶相 I"。通过分析  $[C_4 \min] [BF_4]$ 的拉曼光谱,发现  $\nu_{(B-F)}$ 和  $\nu_{(ring)}$ 的峰位在  $[C_4 \min] [BF_4]$ 四种相态内与压强呈线性关系,基于此可进行分段测压。因此, $[C_4 \min] [BF_4]$ 具有"传压"和"测压"双重功能,可以同时用作传压介质和压标物质。该研究结果为利用"相邻位置、相似压强"原则在非静水压环境中准确测量样品压强提供了重要数据。

#### References

[1] LIU Jing(刘 景). Chinese Journal of High Pressure Physics (高压物理学报), 2020, 34(5): 157.

- [2] Chen J, Cheng H, Zhou X, et al. Review of Scientific Instruments, 2021, 92(3): 033905.
- [3] Klotz S, Chervin J C, Munsch P, et al. Journal of Physics D Applied Physics, 2009, 42(7): 075413.
- [4] Ren J, Li J, Lv L, et al. Environmental Science and Pollution Research, 2021, 28: 12909.
- [5] Yoshimura Y, Shigemi M, Takaku M, et al. Journal of Physical Chemistry B, 2015, 119(25): 8146.
- [6] Yoshimura Y, Abe H, Takekiyo T, et al. Journal of Physical Chemistry B, 2013, 117(40): 12296.
- [7] Pison L, Gomes M C C, Pádua A A H, et al. Journal of Chemical Physics, 2013, 139(5): 054510.
- [8] Faria L, Nobrega M M, Temperini M, et al. Journal of Raman Spectroscopy, 2013, 44(3): 481.
- [9] Mao H K, Xu J, Bell P M. Journal of Geophysical Research, 1986, 91(B5): 4673.
- [10] Piermarini G J, Block S, Barnett J D. Journal of Applied Physics, 1973, 44: 5377.
- [11] Su L, Zhu X, Wang Z, et al. Journal of Physical Chemistry B, 2012, 116(7): 2216.
- [12] Li H N, Chen L C, Zhu X, et al. Journal of Solution Chemistry, 2017, 46(1): 3.
- [13] Zhu X, Yuan C S, Li H N, et al. Journal of Molecular Structure, 2016, 1106(1106): 70.
- [14] Berg R W. ChemInform, 2008, 39(4): 1045.

# Study on Performances of Transmitting Pressure and Measuring Pressure of $[C_4 mim][BF_4]$ by Using Spectroscopic Techniques

ZHU Xiang<sup>1, 2</sup>\*, YUAN Chao-sheng<sup>1</sup>, CHENG Xue-rui<sup>1</sup>, LI Tao<sup>1</sup>, ZHOU Song<sup>1</sup>, ZHANG Xin<sup>1</sup>, DONG Xing-bang<sup>1</sup>, LIANG Yong-fu<sup>2</sup>, WANG Zheng<sup>2</sup>

- 1. College of Physics and Electronic Engineering, Zhengzhou University of Light Industry, Zhengzhou 450001, China
- Henan Key Laboratory of Magnetoelectronic Information Functional Materials, Zhengzhou University of Light Industry, Zhengzhou 450001, China

Abstract Diamond anvil cell (DAC) is a kind of high-pressure generator that is frequently used in the laboratory and plays an important role in the field of high-pressure research. When pressure-transmitting medium (PTM) in DAC can just provide nonhydrostatic pressure, it will be difficult to accurately measure the pressure of the sample by using the ruby fluorescence method. The same cases frequently emerge under ultra-high pressure conditions. If there is a material with dual functions of transmitting pressure and measuring pressure, the pressure values of the sample under non-hydrostatic conditions might be measured accurately according to the principle that the closer the positions are, the more similar the pressures are. Apparently, it is important to search for the material with dual functions of transmitting and measuring pressure. In this paper, a ruby particle and a small drop of ionic liquid  $[C_4 mim][BF_4]$  were loaded into a DAC, a series of high-pressure environments were provided by compressing the  $[C_4 \text{ mim}][BF_4]$ . Simultaneously, the fluorescence spectrum of ruby and the Raman spectrum of  $[C_4 \text{ mim}][BF_4]$ was obtained under high pressures. By analyzing the positions of the  $R_1$  line of ruby, the pressure values of  $\lceil C_4 \min \rceil \lceil BF_4 \rceil$  were obtained. By analyzing the widths of the  $R_1$  line of ruby, it was found that the hydrostaticand quasi-hydrostatic pressures provided by  $\lceil C_4 \min \rceil \lceil BF_4 \rceil$  were in the ranges of  $0 \sim 6.26$  and  $6.26 \sim 21.43$  GPa, respectively. It could be speculated that  $[C_4 mim][BF_4]$  can use as PTM in the pressure range of  $0 \sim 21.43$  GPa. In addition,  $[C_4 mim][BF_4]$  is a liquid phase I, liquid phase II, amorphous phase I, and amorphous phase II in the ranges of 0~2.28, 2.28~6.26, 6.26~14.39, and 14.39~21.43 GPa, respectively. By analyzing the positions of  $\nu_{(B-F)}$  and  $\nu_{(ring)}$  as the characteristic Raman peaks from  $[C_4 \text{ mim}][BF_4]$ , it was found that they followed linear changes with increasing pressure during the above four phases of  $\lceil C_4 \min \rceil \lceil BF_4 \rceil$ . What's more, the formulas of pressure and position of  $\nu_{(B-F)}$  and  $\nu_{(ring)}$  were given. The formulas are very important for  $[C_4 \text{ mim}][BF_4]$  to be a pressure gauge. To sum up,  $\lceil C_4 \min \rceil \lceil BF_4 \rceil$  has the dual functions of transmitting pressure and measuring pressure and can use simultaneously as the PTM and the pressure gauge. The research results provided an important basis for accurate measurement of sample pressure in non-hydrostatic environments and provide a new solution to the inaccurate measurement of sample pressure under ultra-high pressure conditions.

**Keywords** Fluorescence spectra; Raman spectra; Diamond anvil cell; Ionic liquids; Pressure transmitting medium; Pressure gauge

\* Corresponding author

(Received Apr. 22, 2021; accepted Jun. 28, 2021)