

高压下非晶化二硫化碳结构研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/15236.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

近期，中国科学院合肥物质科学研究院固体所计算物理与量子材料研究部高压研究团队采用光谱分析和分子动力学模拟研究了高压下

非晶化二硫化碳（ CS_2 ）的结构，表明高压下无序的 CS_2

并不是传统认为的布里季曼黑色聚合物

结构（ $[-(\text{C}=\text{S})-\text{S}]_n$ ），而是包含了三配位（ CS_3 ）、四配位（ CS_4

）的多个聚合物。相关研究结果发表在Journal of Physical Chemistry Letters上。

1941年，布里季曼利用高压科学技术发现

，分子态的 CS_2

在高压下将转化为黑色的无序形式聚合物，随后Whally等人通过红外光谱分析确定该聚合物为线性的 $[-(\text{C}=\text{S})-\text{S}]_n$ ，并命名为Bridgman's black polymer（BBP，布里季曼黑色聚合物）。在之后的研究中，虽有其他的类似结构不断被提出，但大多是基于BBP，且这些结构均未在实验上证实。

因此BBP一直被认为是非晶化无序二硫化碳的基本结构，并确定其配位数为3。

合肥研究院固体所研究团队通过高质量高压拉曼实验平台，严格限制激光功率，成功避免了激光导致的二硫化碳的分解，进而观测到更多的样品本征信号，红外吸收光谱中也观测到类似的信号。结合光谱分析以及分子动力学模拟，通过对比振动态密度函数，可以确定拉曼和红外中的本征信号不是来自于BBP中的碳硫键，而是来自于碳碳双键。随后的结构搜索也表明BBP并不是最稳定的结构，相比之下，四配位的聚合物更有可能出现，且在拉曼和红外光谱中能观测到四配位碳的信号。

上述研究结果表明，非晶化的二硫化碳是一个包含三配位与四配位的混合物，高压下二硫化碳中碳原子配位数的变化依次为二配位、三/四配位、四配位。该工作促进了对元素周期表中第IV与VI族成键行为的认识。

该工作得到了国家自然科学基金和挑战计划等的支持。

[论文链接](#)

研究团队单位：合肥物质科学研究院

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://iikx.com)转发