



## 高压下雄黄的谱学、结构和电性研究

杨林飞<sup>1</sup> 和 代立东<sup>2\*</sup>

- 1、北京高压科学研究中心，北京 100094；
- 2、中国科学院地球内部物质高温高压重点实验室，中国科学院地球化学研究所，贵阳，贵州，550081，中国

\*E-mail: dailidong@vip.gyig.ac.cn

研究表明硫每年进入俯冲带的总量明显高于火山喷发出来的量，这表明至少有相当一部分的含硫矿物例如硫化物进入到了深部地幔 (Jego and Dasgupta, 2013)<sup>[1]</sup>。雄黄 (As<sub>4</sub>S<sub>4</sub>) 是地球表面一种重要的硫化物矿物，广泛产出在浅成低温热液矿床中。研究雄黄在高压的物性对于理解地球深部的硫循环有着重要的意义。本工作在金刚石压腔中结合拉曼光谱、阻抗谱和第一性原理理论计算系统研究了雄黄在高压至 30.8 GPa 下的结构、谱学以及电学研究。结果表明在 6.3 GPa 下，雄黄的拉曼特征峰、电导率和 As-S 键长均出现了明显的不连续变化，表明发生了等结构相变；在 23.5 GPa 下，雄黄发生了半导体-金属的电子结构相变，我们认为这个金属化相变是带隙逐渐闭合的结果而不是结构相变导致的。我们的结果表明雄黄在最高至 30.8 GPa 时仍然保持稳定的单斜晶系结构，但是其电导率在金属化相变后突然提高了约 3 个数量级。这表明雄黄可以作为载体将硫的带入深部地幔，此外，在高压下雄黄展现出极高的电导率也可能是导致地幔电性不均一性的一个潜在影响因素。相关研究成果，杨林飞博士以第一作者，最近发表在《Earth Geoscience Frontiers》<sup>[2]</sup>。

### 参考文献:

- [1] Jego, S., and Dasgupta R. Fluid-present melting of sulfide-bearing ocean-crust: experimental constraints on the transport of sulfur from subducting slab to mantle wedge. *Geochim. Cosmochim. Ac.*, 2013, 110: 106–134.
- [2] Yang Linfei, Dai Lidong\*, Li Heping, Hu Haiying, Hong Meiling, Zhang Xinyu and Liu Pengfei. High-pressure investigations on the isostructural phase transition and metallization in realgar with diamond anvil cells. *Geoscience Frontiers*, 2021, 12: 1031–1037.