

黄铜矿型铜基硫属半导体材料的电子结构和光学性质研究

余佳豪

(江苏师范大学, 江苏 徐州 325103)

摘要: 随着经济的发展和各行业整体运行理念的转变, 传统的生产活动受到创新、可持续等观念的影响, 在具体的生产用材、生产方式、生产环节等均出现简化、求新、创造、可持续特点, 而黄铜矿型铜基硫属半导体材料作为新型生产材料, 更是凭借其优质的性能被大众关注。因此本文从实际出发, 充分探索黄铜矿型铜基硫属半导体材料的电子结构和光学性质的研究进展与问题, 进而提出相应的改善措施。

关键词: 黄铜矿型铜基硫属半导体材料; 电子结构; 光学性质

半导体材料作为传递介质已经被广泛应用到实际生产生活中, 同时由于消费市场需求的转变, 半导体材料的发展方向开始朝着轻型、迅速、节能迈进, 同时具备特殊性能的半导体材料被应用的概率也在逐渐提高。而黄铜矿型铜基硫属半导体材料作为新兴的半导体材料更是凭借其良好的透光波段与电能传导性质受到大众的喜爱, 因此为确保这一新型半导体能够得到更好的应用, 相关工作人员需要从电子结构与光学性质两个方面对其进行深入研究。

一、黄铜矿型铜基硫属半导体材料电子结构与光学性质概述

黄铜矿作为一种铜铁硫化物矿物, 其构成成分中会含有微量的金、银等贵金属, 其外观大致呈现铜黄色或带有暗黄、斑状铜色, 其主要以四面体或者不规则颗粒聚集的形状呈现在外界, 由于其优秀的物理性质与化学性质, 其大多被用于热液作用或者接触交代作用的工作中, 而不被黄铜矿形态的物质同样会具备一定黄铜矿的性质。而铜基硫属则指该物质以铜为基础并加入硫这一元素而构成的合金材料, 在铜基础上增加硫能够充分增加材料的硬度、导电性、导热性和耐腐蚀性。因此黄铜矿型铜基硫属半导体材料这一新型材料具备黄铜与硫的一部分性质, 并且在其基础上不断提升优化自身的电子结构与光学性质。自其优质的导电性与透光性能够被应用于半导体零件或者集成电路电子零件的制作中。

二、影响黄铜矿型铜基硫属半导体材料结构与性质的因素

(一) 电力结构与光学性质把握不清

虽然黄铜矿型铜基硫属半导体材料受到生产行业的欢迎, 但由于其发现创造研究的时间较短, 专注探索的设备、方向的等均存在模糊状态, 黄铜矿型铜基硫属半导体材料的具体物理性质与化学性质仍然处于不断探索阶段, 因此在实际生产中由于工作人员对半导体材料具体的电子结构与光学性质把握不清, 会对生产活动造成严重影响。

(二) 缺少具体应用环境与人才

黄铜矿型铜基硫属半导体材料作为新型半导体材料, 其在具体探索与应用过程中遇到在充分的探索总结基础上进行, 但是当黄铜矿型铜基硫属半导体材料的试验环境与应用环境并不理想。缺少专业的实验装备与操作人才、没有完备的实验与操作流程等均影响着其实际应用效果。

(三) 尚未确立半导体材料运用监督体系

在生产过程中应用新型材料时, 为避免新型材料给生产线路、生产状态造成不良影响, 需要强有力的监督制度对其进行监管。但是在黄铜矿型铜基硫属半导体材料的具体探索与应用过程中却缺少相应的监督体系, 这直接导致在研究半导体材料电子结构与光学性质时出现操作危险。

三、提升黄铜矿型铜基硫属半导体材料结构与性质的措施

(一) 加强科学研究, 提升电力结构与光学性质了解程度

为充分提升半导体材料自身的性质和应用状态, 进一步加强半导体领域向节能高效方向发展, 工作人员对新型半导体材料的性质与应用关注较大, 但是由于新型材料的未知性与探索性, 需要工作人员克服传统的研究思维, 在现有性能了解程度的基础上深入探索黄铜矿型铜基硫属半导体材料的电子结构与光学性质。

例如, 相关工作人员首先需要充分了解当下半导体材料研究领域对黄铜矿型铜基硫属半导体材料这一新型材料的研究程度, 明确其已有的物理性质与化学性质、各项数据参数、存在的研究问题以及亟待解决的问题, 在对这一半导体材料进行充分调查后形成专属的调查报告, 为后续即将开展的科研工作奠定稳定的数据与信息基础, 同时问题的汇总同样能够帮助为工作人员后续的研究提供问题导向。在充分了解发展状况后, 为进一步深入探索黄铜矿型铜基硫属半导体材料, 工作人员可以采用基于密度泛函理论(DFT)中的第一性原理超软赝势方法来对黄铜矿型铜基硫属半导体材料中的缺陷结构 XGa_2S_4 ($X=Zn, Cd, Hg$)晶体进行研究, 在专业的研究方式与实验设备的帮助下明确这一缺陷晶体的晶体结构、电子结构、光学性质, 从缺陷角度出发来对黄铜矿型铜基硫属半导体材料进行充分的研究。同时黄铜矿型缺陷晶体的折射率、反射系数、能带结构、态密度晶格常数、键长、介电函数等均能够帮助研究人员进一步明确黄铜矿型铜基硫属半导体材料的电子结构与光学性质。在进一步的研究与探索中, 工作人员将各项实验数据进行对比可以发现黄铜矿型铜基硫属半导体材料在中间能量区域($4\text{ eV} - 10\text{ eV}$)会展现出较为强烈的各向异性, 而在低能区域($< 4\text{ eV}$)

与高能区域 ($> 10 \text{ eV}$) 中的各向异性则较弱, 这一现象可以直接表明黄铜矿型铜基硫属半导体材料具有较为稳定的电子结构。同时由于该半导体材料的折射率曲线与反射率巅峰的研究可以发现其光学性质较为稳定, 能够被应用于后续的紫外线探测与屏蔽环节中。专业工作人员在科学且严谨的材料探索中能够更加深入的理解半导体材料的性质和具体构成状态, 为后续黄铜矿型铜基硫属半导体材料投入实际应用奠定稳定的学术基础, 同时也减轻了具体应用时出现的风险。

(二) 调查科研现状, 打造严谨环境引进专业科研人才

对于新型物质的应用需要建立在完整全面的了解与探索中, 而对新物质的探索与科研则需要建立在安全稳定的研究环境、完备先进的研究设备与技术、专业研究人员的基础上, 因此为充分探索黄铜矿型铜基硫属半导体材料的电子结构与光学性质, 相关工作人员需要调查科研环境, 引进专业科研人才。

例如, 相关工作人员可以先对当下黄铜矿型铜基硫属半导体材料的研究环境与科研设备、人才等进行全方位的调查, 清晰记录当下被用于黄铜矿型铜基硫属半导体材料研究的环境各项指标是否符合国家科研需求, 具体记录实验环境中的设备种类与具体数量, 同时还需要对当下参与黄铜矿型铜基硫属半导体材料研究的人员专业水平进行考察, 在充分调查总结后形成汇总报告, 明确下一步改善措施。由于黄铜矿型铜基硫属半导体材料的出现时间较短, 其具体的研究时间也较短, 由于化学性质与物理性质并不十分明确, 其具体的研究环境需要按照更加严格的标准来要求, 确保整体环境的防辐射性、防腐蚀性、对研究人员的保护性。同时由于对黄铜矿型铜基硫属半导体材料的电子结构与光学性质进行研究时需要涉及低、中、高能量区间, 还需要专业设备释放等离子体频率 ω_p 和紫外线来充分探索黄铜矿型铜基硫属半导体材料的光学性质, 因此工作人员还需要在原有设备基础上着重完善能量区间设备与光学性质研究设备。在黄铜矿型铜基硫属半导体材料研究过程中掌握完备理论知识并具备实践能力的人才更是基础, 因此为对半导体材料进行更好深入充分的研究, 相关工作人员还需要引入新型半导体研究人才, 同时黄铜矿型铜基硫属半导体材料研究项目还可以与大学相关领域展开合作, 借助大学的专业人才和设备对这一新型半导体材料进行充分且完善的研究, 为后续的工作奠定稳定且持续的基础。

(三) 充分总结材料应用与发展, 确立科学严谨监督体系

随着科学技术的发展与大众需求的提升, 传统的半导体材料已经无法满足市场, 因此更多合成材料开始出现, 而这些具备特殊性质的物质为更好的被应用于生产生活中时更加需要专业人才对其进行探索与研究的。而在具体的研究中, 科学且严谨的监督体系更是不可或缺。因此相关工作人员为充分研究黄铜矿型铜基硫属半导体材料, 需要充分总结材料应用与发展, 确立科学严谨监督体系。

例如, 相关工作人员可以先对当下黄铜矿型铜基硫属半导体材料的研究步骤与具体操作流程进行总结, 组织专业监督小组进行为期五天的监督调查工作, 在五天的调查中工作人员需要明确当下实验过程中涉及的环节与步骤, 明确容易出现实验风险的环节, 同时还需要记录实验人员是否出现基础操作失误。在对现状记性充分调查后, 工作人员便可以结合国家具体规定与行业规范制定专属黄铜矿型铜基硫属半导体材料电子结构与光学性质研究时的监督体系。其中主要是对研究人员的研究环境安全性能进行检查, 对各种研究设备与研究材料进行检查与定期维护, 对工作人员的研究方式与技术操作进行远程监控。同时由于黄铜矿型铜基硫属半导体材料具有较宽的透光波段、感光性质较好、电子结构稳定等特点, 在后续生产中会被应用于光电器件、太阳能电池、非线性光学设备、光电子器件的建造中。这些较为敏感的生产领域对半导体材料的稳定性和传导透光性能要求极高, 因此在具体黄铜矿型铜基硫属半导体材料电子结构与光学性质研究过程中需要加强对其数据的监督。相关工作人员可以在现有数据记录的基础上制定稳定完善的数据记录监督体系, 严格监督工作人员在具体半导体材料研究过程中按照实验前填写实验预设, 每一步实验出现的数据均需要记录, 在实验完成后严格填写实验报告和本次实验中得出的结论与仍然存在的问题。这样严格的数据填写监督流程既能够帮助实验工作人员明确自己的实验成果又能够为后续的黄铜矿型铜基硫属半导体材料电子结构与光学性质实验奠定请打的数据基础, 帮助实验人员更好的掌握黄铜矿型铜基硫属半导体材料的各项性能, 为后续的应用奠定基础。

四、结语

为充分研究黄铜矿型铜基硫属半导体材料的电子结构和光学性质, 为后续对半导体材料的应用奠定稳定且持续的基础, 相关工作人员可以通过采取加强科学研究, 提升电力结构与光学性质了解程度; 调查科研现状, 打造严禁环境引进专业科研人才; 充分总结材料应用与发展, 确立科学严谨监督体系等措施来充分提升当下对新型半导体的了解与掌握程度, 进而进一步推动后续的研究与应用。

参考文献:

- [1] 周和根, 金华, 郭辉瑞, 等. 黄铜矿型铜基硫属半导体材料的电子结构和光学性质 [J]. 高等学校化学学报, 2019, 40 (3): 1036-1040.
- [2] 陈懂, 肖河阳, 加伟, 等. 半导体材料 $\text{AAI}^{\prime}\text{2C4}$ ($\text{A}=\text{Zn}, \text{Cd}, \text{Hg}; \text{C}=\text{S}, \text{Se}$) 的电子结构和光学性质 [J]. 物理学报, 2012, 61 (012): 127103.
- [3] 焦照勇, 郭永亮, 牛毅君, 等. 缺陷黄铜矿结构 XGa_2S_4 ($\text{X}=\text{Zn}, \text{Cd}, \text{Hg}$) 晶体电子结构和光学性质的第一性原理研究 [J]. 物理学报, 2013 (7): 133-139.