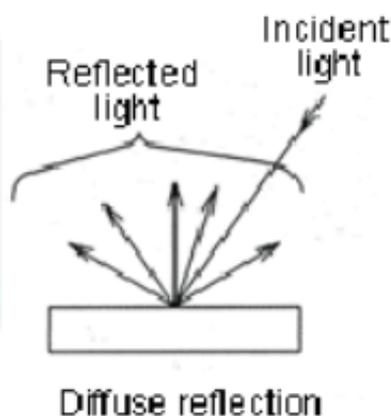


利用天美 UV2600 + 积分球详解如何计算禁带宽度

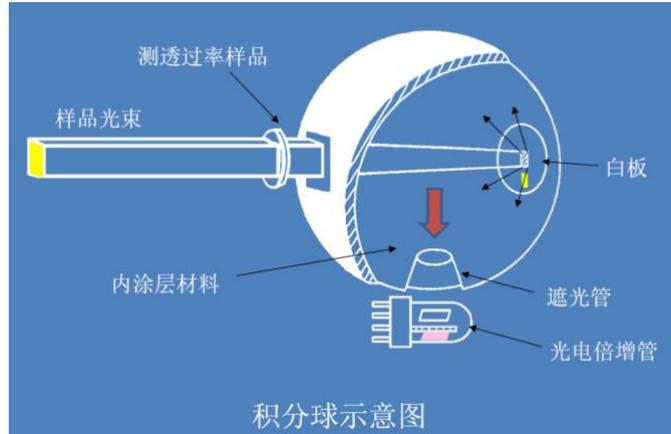
前言

紫外可见漫反射介绍 漫反射光是指从光源发出的光进入样品内部，经过多次反射、折射、散射及吸收后返回样品表面的光，漫反射光谱主要与物质的电子结构有关。



对于不透明样品，如粉末等材料，无法采用直射光系统测试并进一步了解其性能，需要借助积分球测试其漫反射光。漫反射光是与样品内部分子作用以后的光，携带有丰富的样品电子结构和组织信息。

而对于浑浊溶液、悬浊溶液、不规则透镜等样品的测试，如果采用直射光系统测试，由于光在经过样品的过程中会发生散射或光路的改变，导致到达检测器的光斑形状及大小等的变化，这样会导致测试的结果出现误差，为了解决光路便宜及光束改变导致的测试不准，这个时候就需要采用积分球附件去收集，信号光在积分球内经过多次漫反射会以恒定比到达检测器固定的光窗，因此能保证测试结果的准确。



半导体禁带宽度介绍 半导体是指常温下导电性能处于导体和绝缘体之间的材料，具有一定的带隙。通过采用适宜的光激发半导体材料，能使其激发价带的电子到导带，产生电子与空穴对，而导带低端与价带顶端能量差距就是带隙大小。通过对半导体能带结构的测试，能对其光电性能进行解析。采用紫外可见漫反射光谱（UV-Vis DRS）测试是计算带隙值的一种方法。

紫外可见漫反射测试及带隙计算示例

以粉末样品为例，采用天美 UV2600 紫外可见分光光度计和 IS2600 积分球测试，积分球粉末池有正反两个凹槽的设计，分别能满足常规样品量和微量样品的测试，而且粉末池凹槽上面有石英窗，避免了样品粉末可能掉入仪器或积分球内导致出现污染的情况出现。



先用标准白板进行基线测试（R%模式），然后对样品进行漫反射测试，得到样品的紫外可见漫反射光谱。

由漫反射定律也即 Kubelka – Munk 函数可知：

$$F(R_{\infty}) = (1 - R)^2 / 2R = K / S$$

这里 R, K, S 分别代表样品的反射系数, 吸收系数和散射系数

另外, 基于 Tauc, Davis 和 Mott 等人提出的公式, 俗称 Tauc plot:

$$(h\nu \cdot \alpha)^n = A(h\nu - E_g)$$

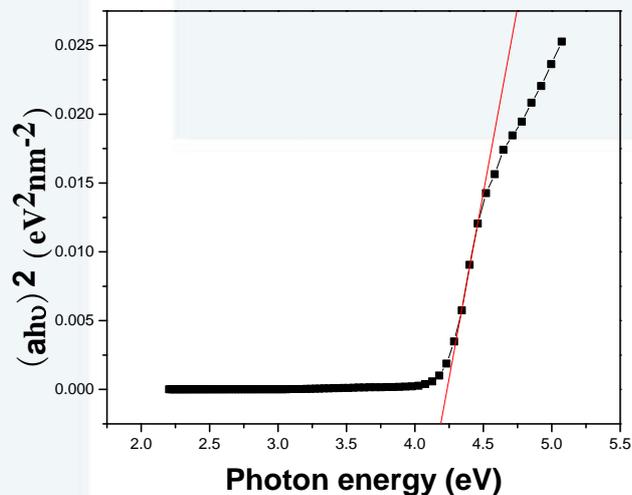
其中, h 为普朗克常数; ν 为频率; A 为常数; α 为吸收指数; E_g 为半导体禁带宽度

这里的 n 对于间接带隙型半导体 $n=1/2$; 对于直接带隙型半导体 $n=2$

$F(R_{\infty})$ 正比于吸收系数 α , 在 Tauc 方程中可以用 $F(R_{\infty})$ 代替 α , 因此, 上式可转变为:

$$[F(R_{\infty})h\nu]^n = A(h\nu - E_g)$$

然后以 $h\nu$ 为横坐标, $(F(R_{\infty})h\nu)^n$ 为纵坐标画图, 当 $(F(R_{\infty})h\nu)^n = 0$ 时, 对应的横坐标 $h\nu$ 即为 E_g 值的大小。如下图某直接型半导体材料示例:



具体数据处理方法示例:

根据 UV-Vis DRS 数据 (横坐标为波长, 纵坐标为反射率), 见下面表格, 那么:

横坐标就转换为 D 列数据: $h\nu = 1240/\text{波长}$, 单位为 eV

纵坐标就转换为 F 列数据, $F(R_{\infty}) = (1 - R)^2 / 2R$, 其中 R 为反射率数值, 也即是表格中 B 列

/100 得到

	A	B	C	D	E	F	G
1	nm	R(%)	R	h ν	F(R ∞)	(F(R ∞)*h ν) ²	
2	240	20.82	0.21	5.17	1.51	60.49	
3	241	23.01	0.23	5.15	1.29	43.91	
4	242	25.42	0.25	5.12	1.09	31.41	
5	243	28.03	0.28	5.10	0.92	22.24	
6	244	30.79	0.31	5.08	0.78	15.62	
7	245	33.73	0.34	5.06	0.65	10.86	
8	246	36.83	0.37	5.04	0.54	7.46	
9	247	40.04	0.40	5.02	0.45	5.08	
10	248	43.31	0.43	5.00	0.37	3.44	
11	249	46.58	0.47	4.98	0.31	2.33	
12	250	49.77	0.50	4.96	0.25	1.58	

由表格数据可得到纵坐标和横坐标的关系图，根据直线外推法与横坐标的交点即为 E_g 值。

结论：

以上是采用天美紫外可见分光光度计 UV2600+积分球 IS2600 进行半导体材料禁带宽度计算的详细过程示例，说明采用天美紫外可见分光光度计 UV2600+积分球 IS2600 能对半导体粉末材料进行漫反射测试，并反应材料的电子结构信息和光吸收性能等。