



吸光度和漫反射数据均可用于计算禁带宽度

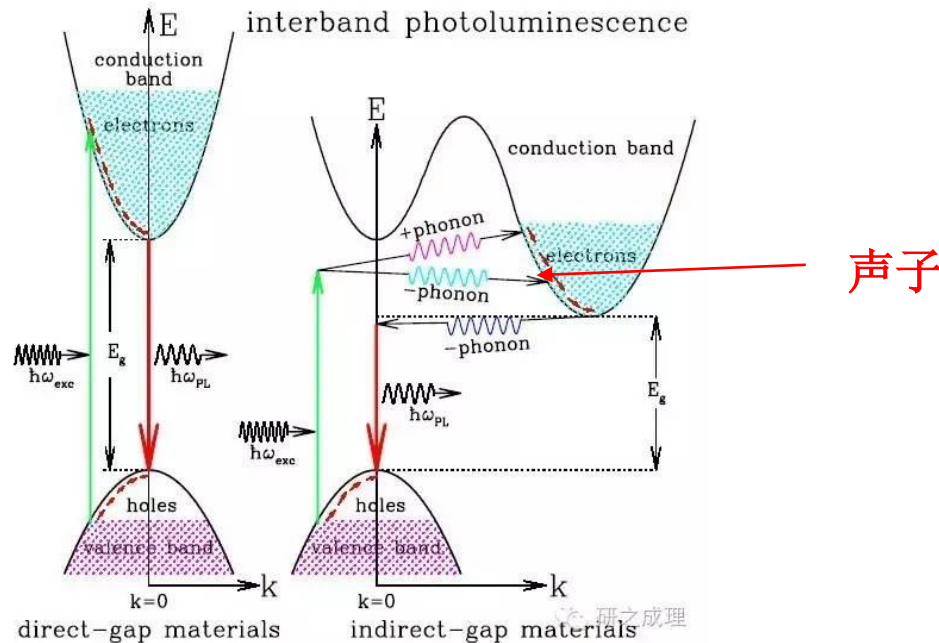


1. 直接带隙半导体与间接带隙半导体概念

直接带隙半导体：导带最小值（导带底）和价带最大值在k空间中同一位置。电子要跃迁到导带上产生导电的电子和空穴（形成半满能带）只需要吸收能量。例如：III-V半导体GaAs、InP等。

直接带隙半导体的重要性质：1) 直接带隙半导体中载流子的寿命很短；2) 导带电子与价带空穴的复合是直接复合，可以把能量几乎全部以光的形式放出（因为没有声子参与，故也没有把能量交给晶体原子）——**发光效率高**，这也就是为什么发光器件（量子点）多半采用直接带隙半导体来制作的根本原因。

间接带隙半导体：导带最小值（导带底）和价带最大值在k空间中不同位置。形成半满能带不只需要吸收能量，还要改变动量。典型例子如Si, Ge等元素半导体。





2. 禁带宽度值 E_g 计算方法

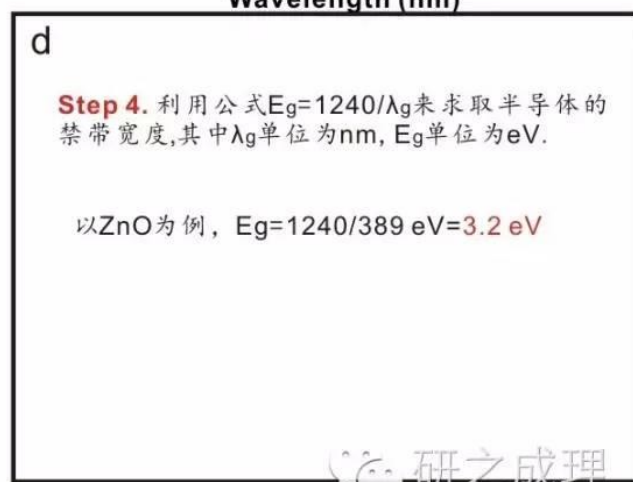
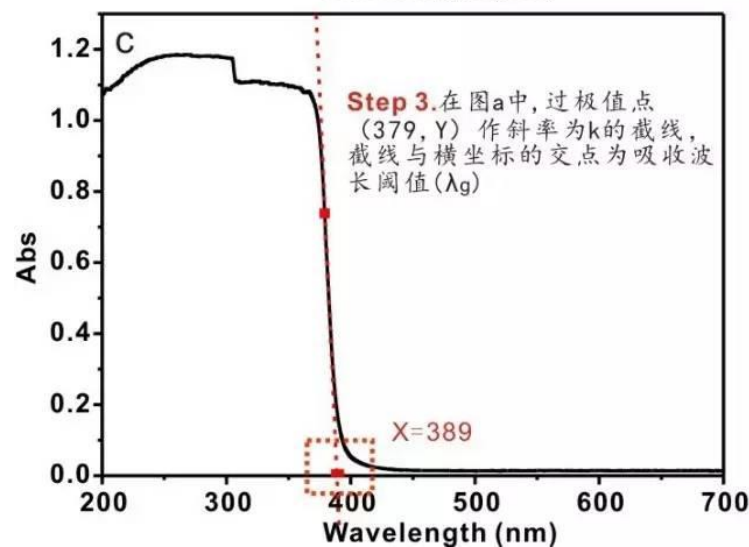
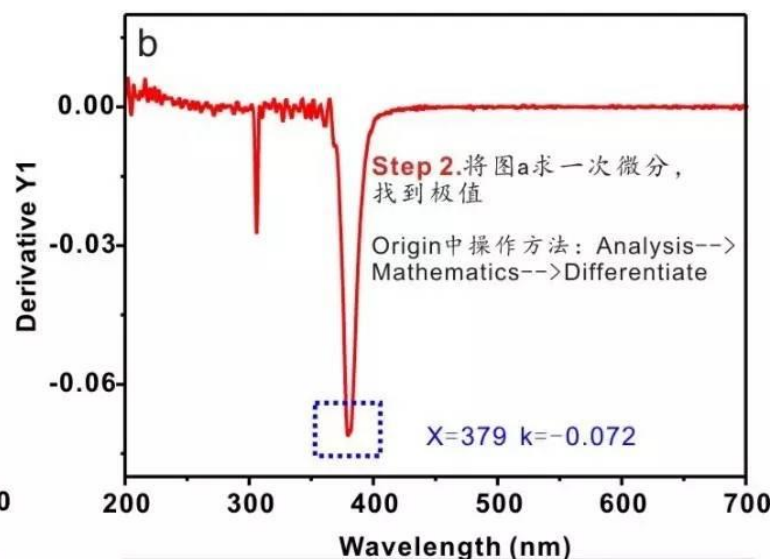
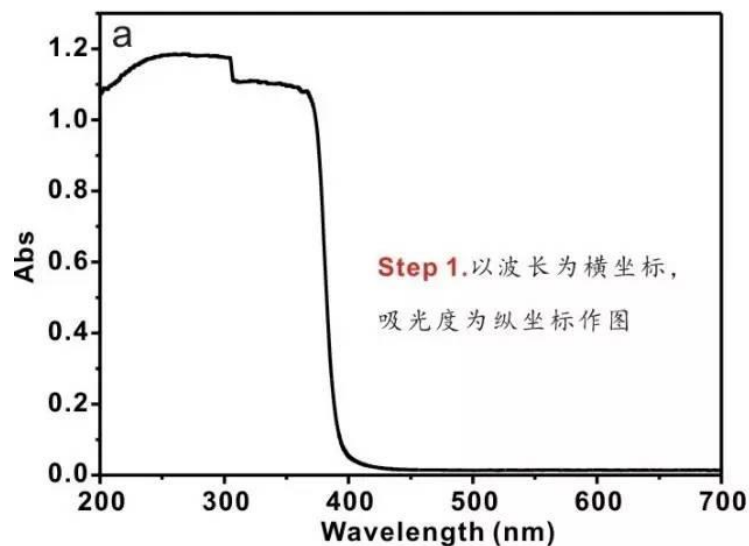
方法1、2用吸光度A计算；方法3用漫反射R计算

方法1：截线法

截线法是一种简易的求取半导体禁带宽度的方法，其基本原理是认为半导体的带边波长（也叫吸收阈值， λ_g ）决定于禁带宽度 E_g ，两者之间存在 E_g (eV)=1240/ λ_g (nm)的数量关系。因此，可以通过求取 λ_g 来得到 E_g 。

操作方法（见下一页图）：

- 1) 一般通过系数光谱测试可以得到样品在不同波长下的吸收，如图a所示；
- 2) 在Origin中，通过Analysis--> Mathematics--> Differentiate对图a中的曲线求一次微分，并找到极值（X,k）；
- 3) 在图a中，过极值点（X,Y）作斜率为k的截线，该截线与横坐标轴的交点即为吸收波长的阈值（ λ_g ）；
- 4) 通过公式 $E_g=1240/\lambda_g$ 来求取半导体的禁带宽度。





2. 禁带宽度值 E_g 计算方法

方法2: 利用 $(\alpha h\nu)^2$ 或 $(\alpha h\nu)^{0.5}$ 对 $h\nu$ 做图, 利用直线部分外推至横坐标交点, 即为禁带宽度值。前者适用于直接带隙半导体, 后者适用于间接带隙半导体。 α (Absorption Coefficient) 即为紫外可见漫反射中的吸收系数。 α 与 A 成正比。 **我们一般就是拿测试出来的吸光度来计算。**

具体操作:

1) 利用紫外漫反射光谱数据分别求 $(\alpha h\nu)^{1/n}$ 和 $h\nu$, 其中 $h\nu = hc/\lambda$, c 为光速, λ 为光的波长。

说明: 实验过程中, 我们通过漫反射光谱所测得的谱图的纵坐标一般为吸光度 Abs。

(如果得到的是透过率 T%, 可以通过公式 $Abs = -\lg(T\%)$ 进行换算)

2) α 为吸光系数, 两者成正比。 **通过 Tauc plot 来求取 E_g 时, 不论采用 Abs 还是 α 其实对 E_g 值是不影响的(只不过是系数 A 有差异而已), 所以简单起见, 可以直接用 A 替代 α , 不过在论文中请给出说明。**

2) 在 origin 中以 $(\alpha h\nu)^{1/n}$ 对 $h\nu$ 作图; 直接带隙半导体 n 取 1/2, 间接带隙半导体 n 取 2

3) 将步骤 2 中所得图形中的直线部分外推至横坐标轴 ($y=0$), 交点即为禁带宽度值。



下面以ZnO为例，对上述过程进行详细解说：注：氧化锌为直接带隙半导体，因此采用 $(\alpha h\nu)^2$ 。

先用EXCLE得出横纵坐标的值，然后，导入origin，一阶微分拐点。外推得到与x轴的截距值，即可。
H普朗克常量，c光速， λ 波长。

Step 1. 计算

计算一般还是直接采用xls比较方便，虽然origin中也

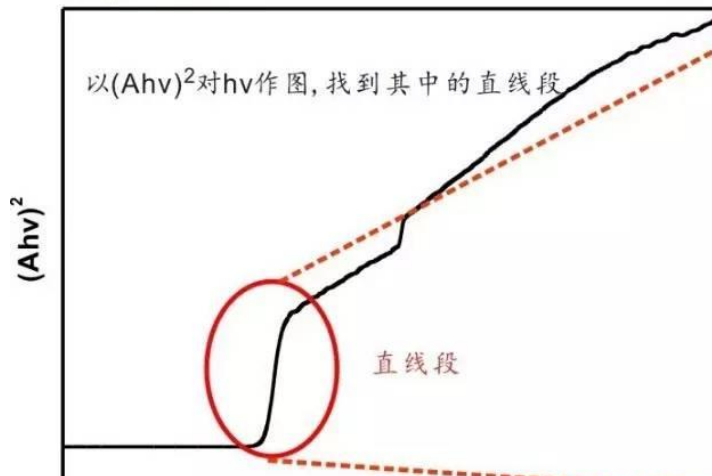
可以计算
 $E = hc/\lambda$, $h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J s}$, $c = 3 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$
列中单位为J, 要换算成eV, 得到D列. $1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$

列(B*D)²
波长单位转化为m

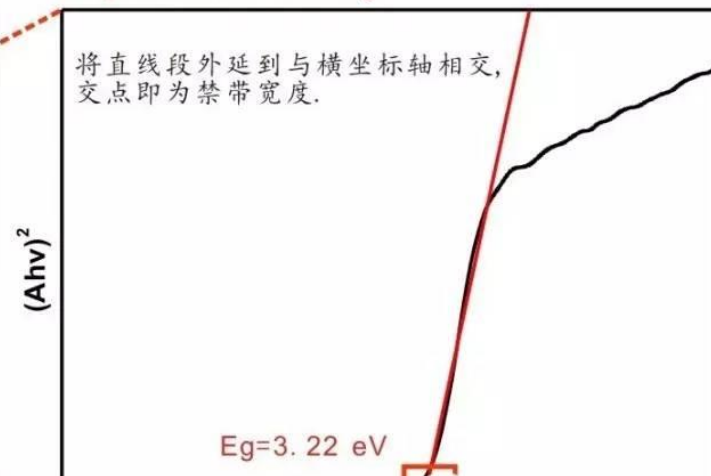
A	B	C	D	E	F
200	Abs	hv (J)	hv (eV)	(Ahv) ²	
201	1.07306	9.945E-19	6.215625		
202	1.07445				
203	1.08073				
204	1.08875				
205	1.09016				
206	1.08849				
207	1.08502				
208	1.09016				
209	1.09702				
210	1.09567				

双击单元格右下角，可以将公式应用到整列

Step 2. 作图



Step 3. 直线外延求取Eg



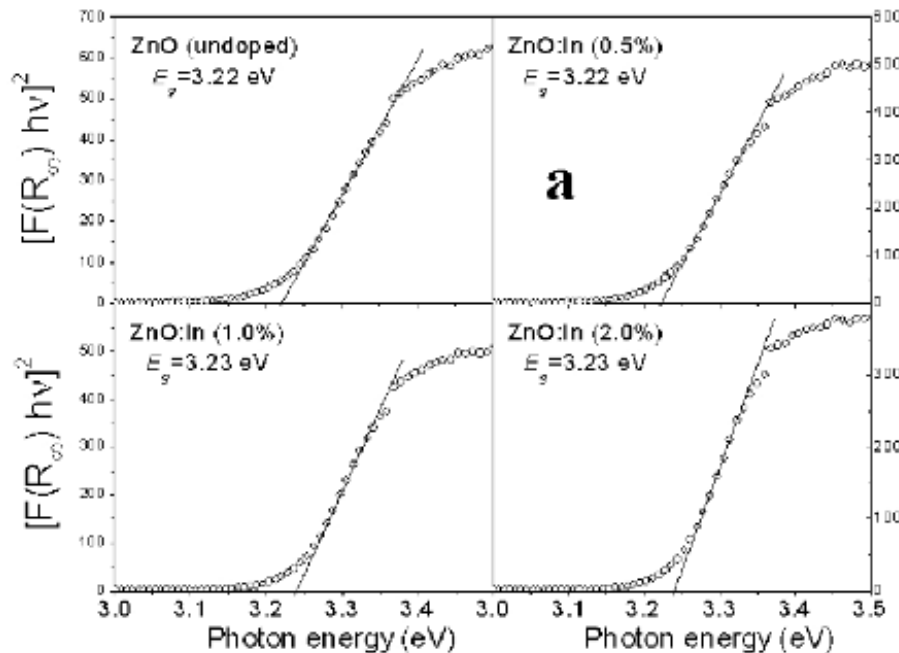


方法3：利用 $[F(R_{\infty})hv]^2$ 或者 $[F(R_{\infty})hv]^{0.5}$ 对 hv 做图，利用直线部分外推至横坐标交点，即为禁带宽度值。前者为直接带隙半导体值，后者为间接带隙半导体。

$F(R_{\infty})$ 即为 Kubelka-Munk 函数，简称为 K-M 函数， $F(R_{\infty}) = (1 - R_{\infty})^2 / 2R_{\infty}$

R_{∞} 即为相对漫反射率，简称漫反射率， $R_{\infty} = R'_{\infty}(\text{样品}) / R'_{\infty}(\text{参比})$

R'_{∞} 即为绝对漫反射率，常用参比样品为 BaSO_4 ，其绝对漫反射率 R'_{∞} 约等于 1。



用反射的数据计算

K-M得出的纵坐标，
然后代入上述的公式，
得出结果。

利用 $[F(R_{\infty})hv]^2$ 或者
 $[F(R_{\infty})hv]^{0.5}$ 对 hv
做图

一定要结合文献或者原有发表数据的参考，光谱学的测试一般都比较准确

史上最全半导体—导带/价带/禁带宽度

半导体	Eg(eV)	ECB (VS. NHE)	EVB (VS. NHE)	半导体	Eg(eV)	ECB (VS. NHE)	EVB (VS. NHE)
Ag2O	1.2eV	0.19	1.39	AlTiO3	3.6eV	-0.86	2.74
BaTiO3	3.3eV	0.08	3.38	Bi2O3	2.8eV	0.33	3.13
CdO	2.2eV	0.11	2.31	CdFe2O4	2.3eV	0.18	2.48
Ce2O3	2.4eV	-0.5	1.9	CoO	2.6eV	-0.11	2.49
CoTiO3	2.25eV	0.14	2.39	Cr2O3	3.5eV	-0.57	2.93
CuO	1.7e V	0.46	2.16	Cu2O	2.2eV	-0.28	1.92
CuTiO3	2.99eV	-0.18	2.81	FeO	2.4eV	-0.17	2.23
Fe2O3	2.2eV	0.28	2.48	Fe3O4	0.1eV	1.23	1.33
FeOOH	2.6eV	0.58	3.18	FeTiO3	2.8eV	-0.21	2.59
Ga2O3	4.8eV	-1.55	3.25	HgO	1.9eV	0.63	2.53
Hg2Nb2O7	1.8eV	0.81	2.61	Hg2Ta2O7	1.8eV	0.84	2.64
In2O3	2.8eV	-0.62	2.18	KNbO3	3.3eV	-0.86	2.44
KTaO3	3.5eV	-0.93	2.57	La2O3	5.5eV	-1.97	3.53
LaTi2O7	4eV	-0.6	3.4	LiNbO3	3.5eV	-0.73	2.77
LiTaO3	4eV	-0.95	3.05	MgTiO3	3.7eV	-0.75	2.95
MnO	3.6eV	-1.01	2.59	MnO2	0.25eV	1.33	1.58
MnTiO3	3.1eV	-0.46	2.64	Nb2O5	3.4eV	0.09	3.49
Nd2O3	4.7eV	-1.63	3.07	NiO	3.5eV	-0.5	3
NiTiO3	2.18eV	0.2	2.38	PbO	2.8eV	-0.48	2.32
PbFe12O19	2.3eV	0.2	2.5	PdO	1eV	0.79	1.79
Pr2O3	3.9eV	-1.26	2.64	Sb2O3	3eV	0.32	3.32
Sm2O3	4.4eV	-1.43	2.97	SnO	4.2eV	-0.91	3.29
SnO2	3.5eV	0	3.5	SrTiO3	3.4eV	-1.26	2.14
Ta2O5	4eV	-0.17	3.83	Tb2O3	3.8eV	-1.06	2.74
TiO2	3.2eV	-0.29	2.91	Tl2O3	1.6eV	0.05	1.65
V2O5	2.8eV	0.2	3	WO3	2.7eV	0.74	3.44
Yb2O3	4.9eV	-1.48	3.42	YFeO3	2.6eV	-0.2	2.4
ZnO	3.2eV	-0.31	2.89	ZnTiO3	3.06eV	-0.23	2.83
ZrO2	5eV	-1.09	3.91	Ag2S	0.92eV	0	0.92
AgAsS2	1.95eV	0.01	1.96	AgSbS2	1.72eV	0.01	1.73
As2S3	2.5eV	0.08	2.58	CdS	2.4eV	-0.52	1.88
Ce2S3	2.1eV	-0.91	1.19	CoS	0eV	0.67	0.67



半导体	Eg(eV)	ECB (VS. NHE)	EVB (VS. NHE)	半导体	Eg(eV)	ECB (VS. NHE)	EVB (VS. NHE)
CoS2	0eV	0.99	0.99	CoAsS	0.5eV	0.46	0.96
CuS	0eV	0.77	0.77	Cu2S	1.1eV	-0.06	1.04
CuS2	0eV	1.07	1.07	Cu3AsS4	1.28eV	0.25	1.53
CuFeS2	0.35eV	0.47	0.82	Cu5FeS4	1eV	0.05	1.05
CuInS2	1.5eV	-0.44	1.06	CuIn5S8	1.26eV	-0.41	0.85
Dy2S3	2.85eV	-1.14	1.71	FeS	0.1eV	0.47	0.57
FeS2	0.95eV	0.42	1.37	Fe3S4	0eV	0.68	0.68
FeAsS	0.2eV	0.51	0.71	Gd2S3	2.55eV	-0.93	1.62
HfS2	1.13eV	0.21	1.34	HgS	2eV	0.02	2.02
HgSb4S8	1.68eV	0.31	1.99	In2S3	2eV	-0.8	1.2
La2S3	2.91eV	-1.25	1.66	MnS	3eV	-1.19	1.81
MnS2	0.5eV	0.49	0.99	MoS2	1.17eV	0.23	1.4
Nd2S3	2.7eV	-1.2	1.5	NiS	0.4eV	0.53	0.93
NiS2	0.3eV	0.89	1.19	OsS2	2eV	0.24	2.24
PbS	0.37	0.24	0.61	Pb10Ag3Sb11S28	1.39eV	0.09	1.48
Pb2As2S5	1.39eV	0.21	1.6	PbCuSbS3	1.23eV	0.11	1.34
Pb5Sn3Sb2S14	0.65eV	0.45	1.1	Pr2S3	2.4eV	-1.07	1.33
PtS2	0.95eV	1.03	1.98	Rh2S3	1.5eV	0.11	1.61
RuS2	1.38eV	0.39	1.77	Sb2S3	1.72eV	0.22	1.94
Sm2S3	2.6eV	-1.11	1.49	SnS	1.01eV	0.16	1.17
SnS2	2.1eV	-0.06	2.04	Tb2S3	2.5eV	-0.99	1.51
TiS2	0.7eV	0.26	0.96	TlAsS2	1.8eV	-0.34	1.46
WS2	1.35eV	0.36	1.71	ZnS	3.6eV	-1.04	2.56
ZnS ₂	2.7eV	-0.29	2.41	Zn3In2S6	2.81eV	-0.91	1.9
ZrS ₂	1.82eV	-0.21	1.61				