

粉末样品禁带宽度计算方法

A.1 原理

拥有禁带宽度（也称带隙）的物质，在受到特定波长光照时，物质的价电子会从价带跃迁到导带。粉末样品的禁带宽度可以由漫反射率-波长曲线的数据通过 Tauc 方程和 Kubelka-Munk 方程进行计算。Tauc 方程描述了具有禁带宽度材料的吸收系数同禁带宽度之间的关系。Kubelka-Munk 方程描述了材料反射率与吸收系数之间的关系。

Tauc 方程为式（1）：

$$(\alpha h\nu)^{1/n} = C(h\nu - E_g) \quad \dots\dots\dots (1)$$

式中：

α ——样品的吸收系数；

h ——普朗克常数；

ν ——光子的频率；

C ——常数；

E_g ——禁带宽度，单位为电子伏特（eV）；

n ——Tauc 指数，常为 1/2、2/3、2、3 等常数，与材料的性质有关，直接带隙半导体取 1/2，间接带隙半导体取 2。

根据 Tauc 方程，作 $(\alpha h\nu)^{1/n} - h\nu$ 曲线，将得到一条有线性吸收边的曲线。将线性吸收边的线性关系延伸到与能量轴相交，横轴交点即为 E_g 值。因为线性吸收边的线性关系是一次曲线（即直线），所以它与横轴的交点与 C 值无关。

Kubelka-Munk 方程为式（2）：

$$F(R_\infty) = \frac{(1 - R_\infty)^2}{2R_\infty} = \frac{K}{S} \quad \dots\dots\dots (2)$$

式中：

R_∞ ——样品厚度为无穷大时的反射率；

K ——样品的吸收系数，与式（1）中 α 的表示同一物理量；

S ——样品的散射系数。

实际测试及使用时，当样品厚度达到不透光后，所测得的反射率 R 可等同于 R_∞ ，此时式（2）可以转变为式（3）

$$F(R) = \frac{(1 - R)^2}{2R} = \frac{K}{S} \quad \dots\dots\dots (3)$$

R ——样品厚度达到不透光后，所测得的反射率。

对于均匀的粉末样品， R 为漫反射率。

由式 (3) 可得， $K = F(R) \cdot S$ 对于粉末样品，散射系数随波长变化很小，可以视为常数，即吸收系数 K 与 $F(R)$ 成正比。所以可以得到式 (4)。

$$[F(R)hv]^{1/n} = C'(hv - E_g) \dots\dots\dots (4)$$

C' ——常数，区别于式 (1) 中的 C ，两者值不一样。

因为 Tauc 方程中 C' 值的大小不影响 E_g 值，所以实际作图计算时可以将此常数值设为 1 进行数据处理。

A.2 数据处理及禁带宽度计算

下面以某禁带宽度粉末（间接带隙半导体）样品的漫反射率测试结果（如图 A.1）为例，进行数据处理及禁带宽度计算。

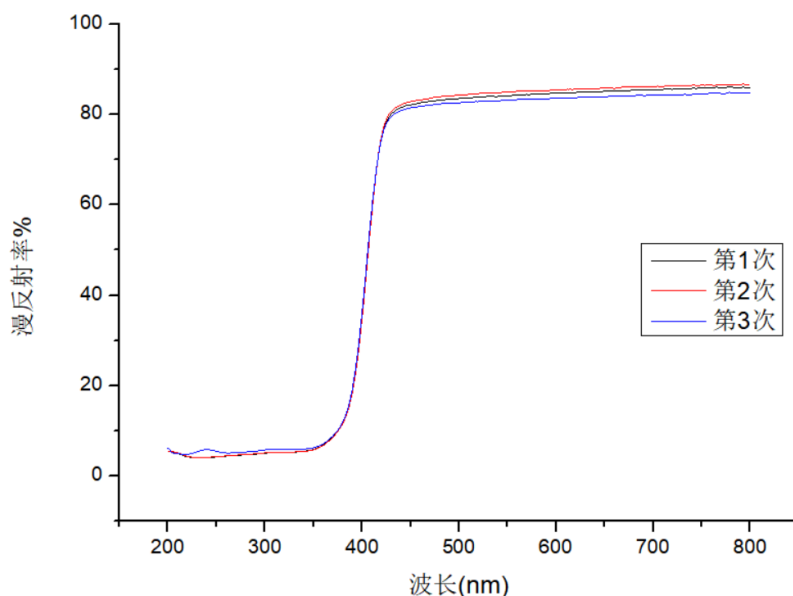


图 A.1 粉末样品的漫反射率测试结果，平行 3 次

取 $n=1/2$ ，计算每个波长下的 $F(R)$ 值，作 $[F(R)hv]^{1/n} - hv$ 曲线（如图 A.2）。

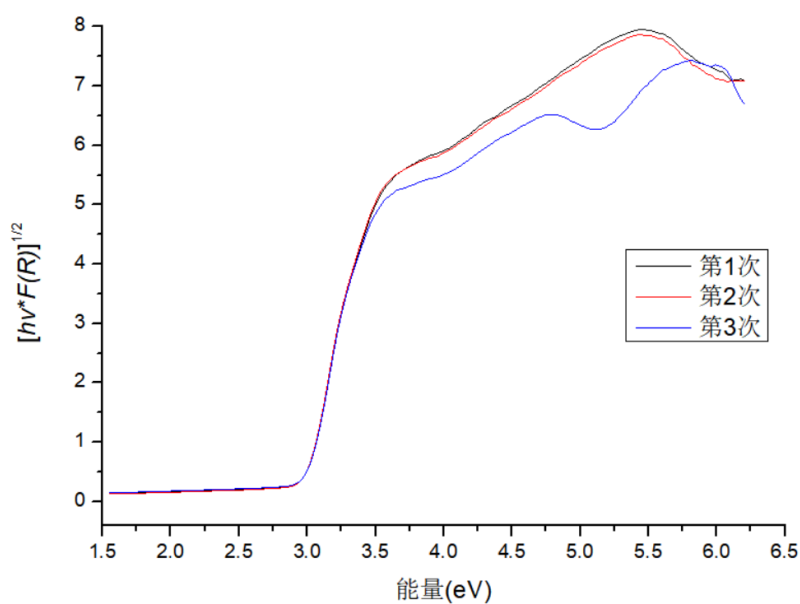


图 A.2 $[F(R)hv]^{1/n} - hv$ 曲线

选取图 A.2 曲线中，线性性最好的部分（如图 A.3 中虚线框），进行线性拟合。然后根据线性拟合曲线方程得到线性拟合曲线与能量轴交点（如图 A.4），即为 E_g 值。也可采用 GB / T 37131-2018 标准中对 $[F(R)hv]^{1/n} - hv$ 曲线求导、取极值，然后在极值点处对 $[F(R)hv]^{1/n} - hv$ 曲线做切线的方式来求得 E_g 值（参见 GB / T 37131-2018 附录 A）。

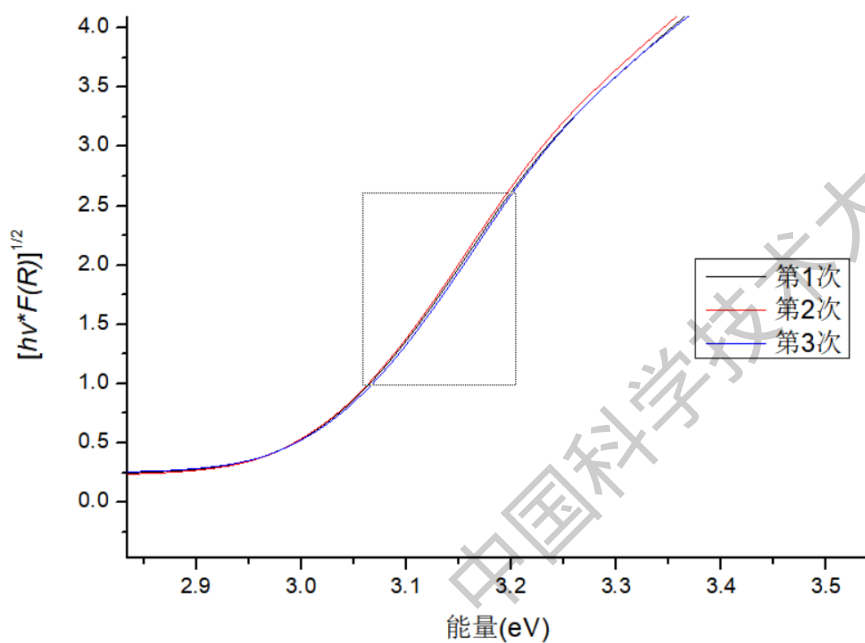


图 A.3 $[F(R)hv]^{1/n} - hv$ 曲线局部放大图及线性性最好区域

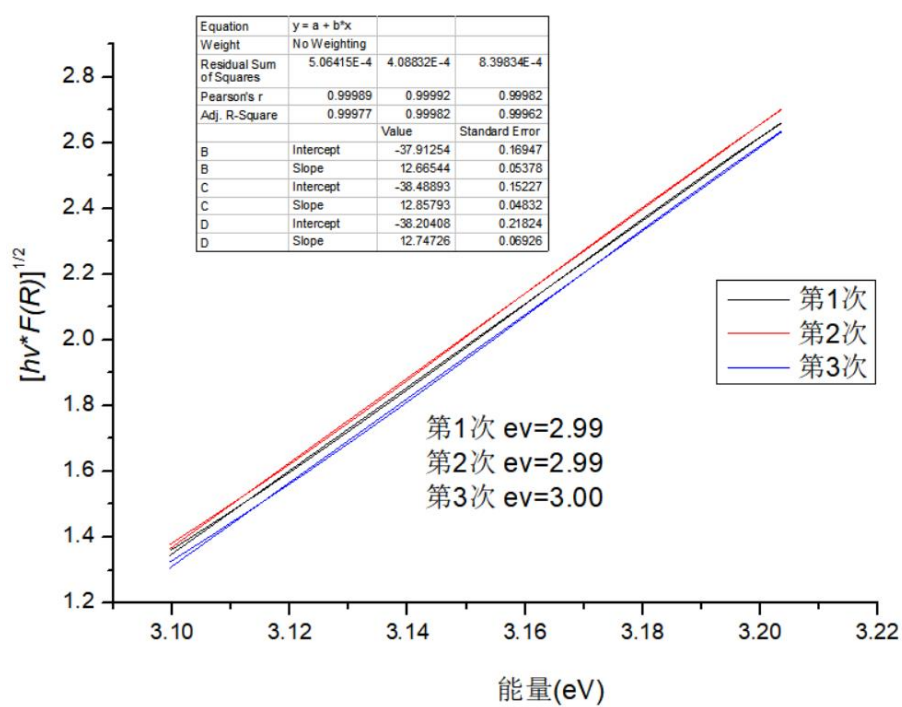


图 A.4 $[F(R)hv]^{1/n} - hv$ 曲线线性性最好区域放大图、线性拟合曲线、线性拟合方程

以及算得的 E_g 值。

中国科学技术大学理化中心