半导体材料光学带隙的计算

禁带宽度是半导体的一个重要特征参量，其大小主要决定于半导体的能带结构，即与晶体结构和原子的结合性质等有关。禁带宽度的大小实际上是反映了价电子被束缚强弱程度的一个物理量，也就是产生本征激发所需要的最小能量。

禁带宽度可以通过电导率法和光谱测试法测得,为了区别用电导率法测得禁带宽度值，用光谱测试法测得的禁带宽度值又叫作光学带隙。下面以光谱测试法为例介绍半导体材料光学带隙的计算方法：

对于半导体材料，其光学带隙和吸收系数之间的关系式为[1]：

$$\alpha h\nu=B(h\nu-Eg)^m \qquad (1)$$

其中 α 为摩尔吸收系数,h 为普朗克常数，ν 为入射光子频率，B 为比例常数，Eg 为半导体材料的光学带隙，m 的值与半导体材料以及跃迁类型相关：

（1） 当 m=1/2 时，对应直接带隙半导体允许的偶极跃迁；

（2） 当 m=3/2 时，对应直接带隙半导体禁戒的偶极跃迁；

（3） 当 m=2 时，对应间接带隙半导体允许的跃迁；

（4） 当 m=3 时，对应间接带隙半导体禁戒的跃迁。

下面介绍两种禁带宽度计算公式的推导方法：

推导 1：根据朗伯比尔定律可知：

$$A=\alpha b\, c \qquad (2)$$

其中 A 为样品吸光度，b 为样品厚度，c 为浓度，其中 bc 为一常数，若 $B_1=(B/bc)^{1/m}$，则公式(1)可为：

$$(Ah\nu)^{1/m}=B_1(h\nu-Eg) \qquad (3)$$

根据公式(3),若以 hν 值为 x 轴，以$(Ah\nu)^{1/m}$ 值为 y 轴作图，当 y=0 时，反向延伸曲线切线与 x 轴相交，即可得半导体材料的光学带隙值 Eg。

推导 2：根据 K-M 公式可知：

$$F(R_\infty)=(1-R_\infty)^2/2R_\infty=K/S \qquad (4)$$

其中R_∞为绝对反射率(在日常测试中可以用以硫酸钡做参比测得的样品相对反射率代替[2])，K 为吸收系数，S 为散射系数。若假设半导体材料分散完全或者将样品置于 60^0 入射光持续光照下可认为 $K=2\alpha$[3]。因在一定温度下样品散射系数为一

常数，假设比例常数为 B_2，,我们可通过公式(4)和公式(1)可得：

$$(F(R_\infty)\ h\nu)^{1/m}=B_2(h\nu-Eg) \quad (5)$$

根据公式(5)，若以 hν 值为 x 轴，以 $(F(R_\infty)\ h\nu)^{1/m}$ 值为 y 轴作图，当 y=0 时，反向延伸曲线切线与 x 轴相交，即可得半导体材料的光学带隙值 Eg。

推导方法 1 和推导方法 2 分别为通过测量样品吸收光谱和反射光谱值来计算半导体材料的光学带隙。下面介绍以直接光学带隙半导体材料（m=1/2）S1 和 S2 为例，通过推导方法 1 计算半导体材料的光学带隙值。首先测得 S1 和 S2 的紫外吸收光谱，如图 1 所示。然后通过吸收光谱做$(Ahv)^2$-hν 线性关系图，如图 2 所示。沿曲线做反向切线至 y=0 相交，所得值为光学带隙值，由图 2 即可得出 Eg_{s1}=3.0ev; $Eg_{s2=}$3.1ev。

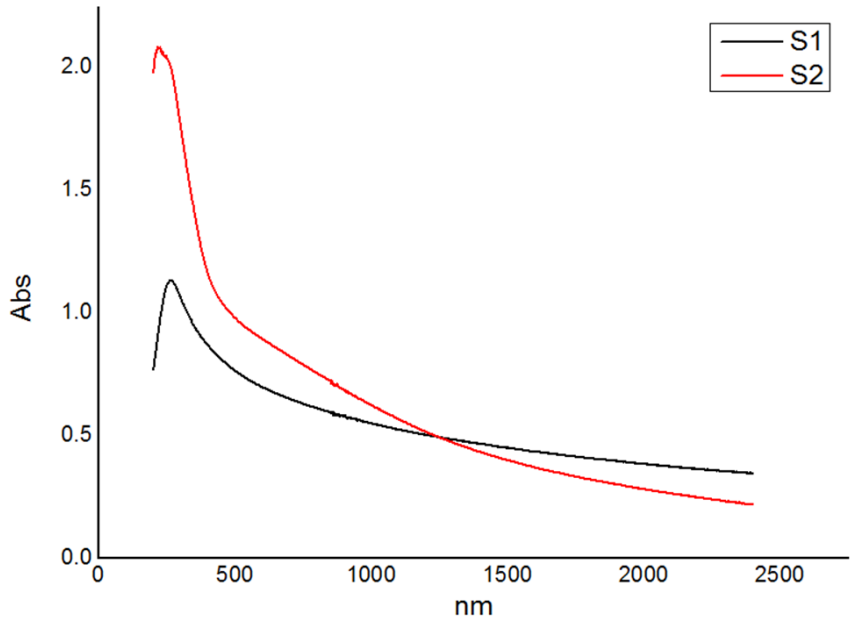


图 1. 样品 S1,S2 的紫外吸收光谱

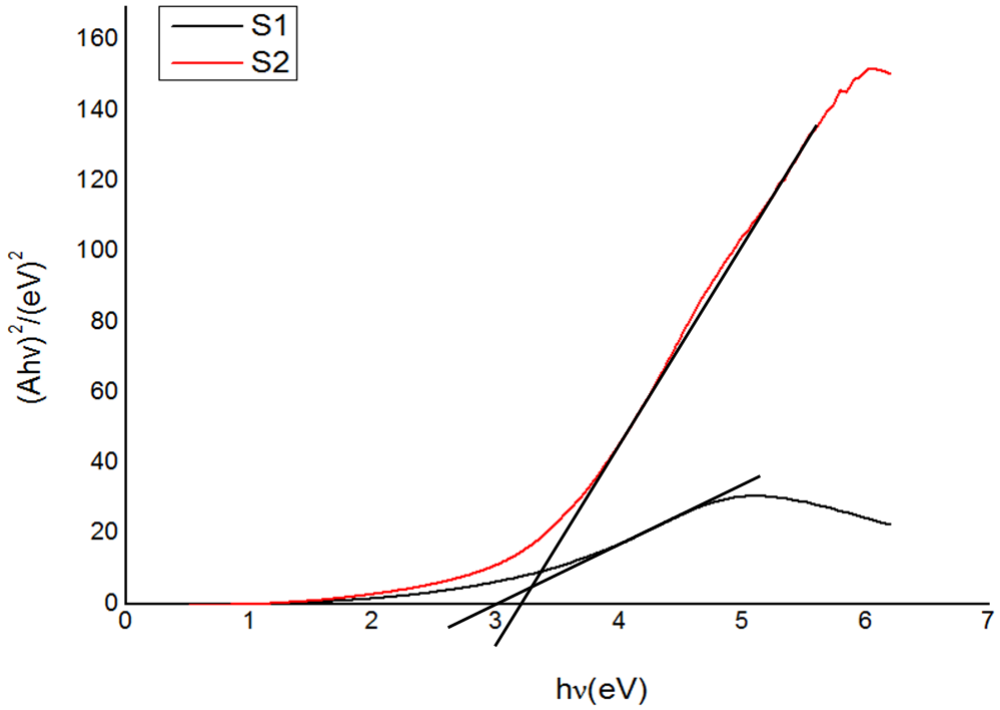


图 2. 样品 S1,S2 的$(\alpha h\nu)^2$-hν 线性关系图

参考文献

1. Smith, R. A. *Semiconductors*, 2nd ed., Cambridge University Press: Cambridge, 1978.

2. Torrent, J.; Barr´on, V. *Encyclopedia of Surface and Colloid Science*. New York: Marcel Dekker, Inc., 2002.

3. Morales, A. E.; Mora, E.S.; Pal, U. *Rev. Mex. Fis. S.* **2007**, 53, 18.