



应用资料

紫外/可见/近红外分光光度计

作者:

Jayant Dharma
PerkinElmer Technical Center

Aniruddha Pisal
Global Application Laboratory
PerkinElmer, Inc.
Shelton, CT USA

用紫外-可见-近红外分光光度计 测量粉末状 TiO_2 带隙的简单方法

介绍

测量材料的带隙对半导体、纳米材料以及太阳能等行业均非常重要。此篇文章描述了如何从某一材料的紫外吸收光谱确定它的带隙。

“带隙”指的是价带跟导带之间的能量差（图 1）；电子能够从某一能带跃迁到另一能带。对于电子来说要从价带跃迁到导带，需要一个一定的最小能量来跃迁，即带隙能。说明带隙的图示如图 1 所示。

在半导体和纳米材料行业测量带隙是非常重要的。绝缘体的带隙大（ $>4\text{eV}$ ），导体的带隙小（ $<3\text{eV}$ ）。某一半导体的带隙特性可以通过不同的半导体合金得到控制，如 GaAlAs 、 InGaAs 和 InAlAs 。参考文献 1 用列表的形式给出了不同材料以及对应的带隙。

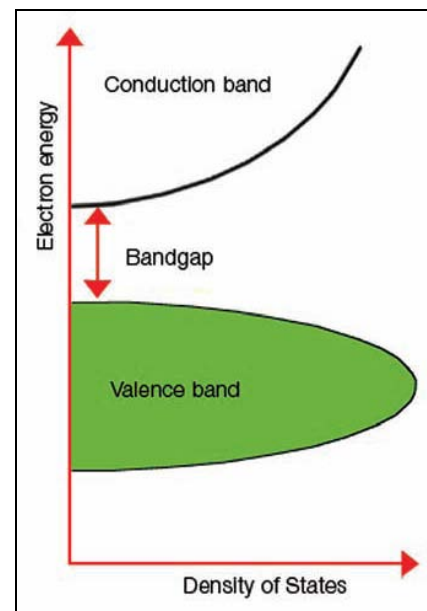


图 1 带隙的解释说明

另一个选择方案是在硅基底上镀上不同材料的多层结构。此方法被广泛应用在制作光伏太阳能电池的太阳能行业。因为带隙决定了一光伏电池所吸收的太阳光谱区域，所以非常重要。到达地球的大部分太阳辐射是由能量值大于硅带隙的波长组成的。这些高的能量将被太阳能电池吸收，但是由于能量上的差异部分被转换为热量而不是可用的电能。因而，除非带隙得到控制，要不然太阳能电池的效率会非常低。使用具有不同带隙的不同材料的多层结构被证明是一种有效的最大化太阳能电池效率的方法。

在半导体和纳米材料行业，二氧化钛 TiO_2 作为其中的一种镀膜材料被使用。 TiO_2 被认为可通过散射从金属电极反射回的光促进内部对光的捕获，并且可以改善电子载体在活性层间的传输。

实验

大家早已发现纳米材料研究此类材料时都用很少量的样品进行的，所以对于此类分析采样方式就成了一个关键问题。此实验在一台 LAMBDA 950 紫外/可见/近红外分光光度计（带有一个 150mm 积分球）完成（PerkinElmer, Inc., Shelton, CT USA）。



图 2 LAMBDA 950 紫外/可见/近红外系统带 150mm 积分球

盛有粉末样品的样品架（Prima Industries, Mumbai, India-图 3）夹在积分球的外光窗。使用了一个少量粉末样品压具。

积分球的光路图示于图 4。



图 3 粉末样品压具及样品杯

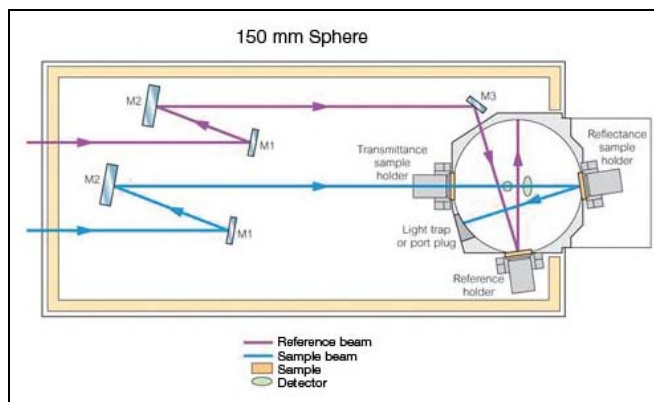


图 4 150-mm 积分球光路图

样品的测试在表 1 所列的参数下进行：

表 1 仪器参数	
波长范围	250-800nm
狭缝宽度	2nm
数据间隔	1nm

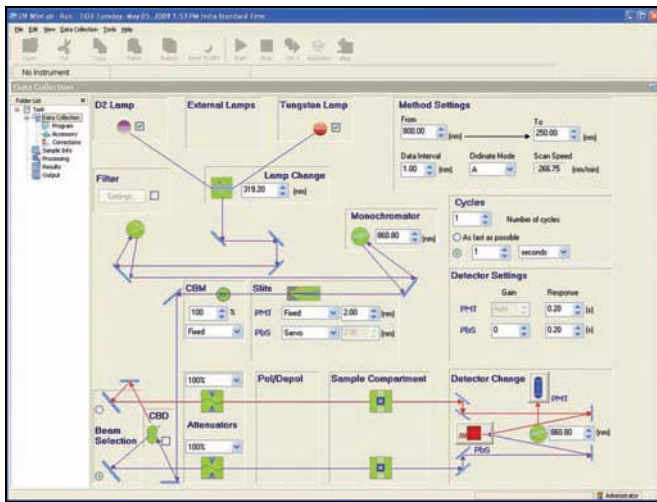


图 5 UV WinLab™ 软件设置

积分球前入射窗口敞开以将镜面反射部分降低到最小。光谱以吸光度-波长和百分反射比-波长模式记录。

用 LAMBDA950 的优点是因为其具有第二样品仓位置可以用来安装积分球，不会遮挡主样品仓。

结果和讨论

所获得的 TiO₂ 的光谱示于图 6.

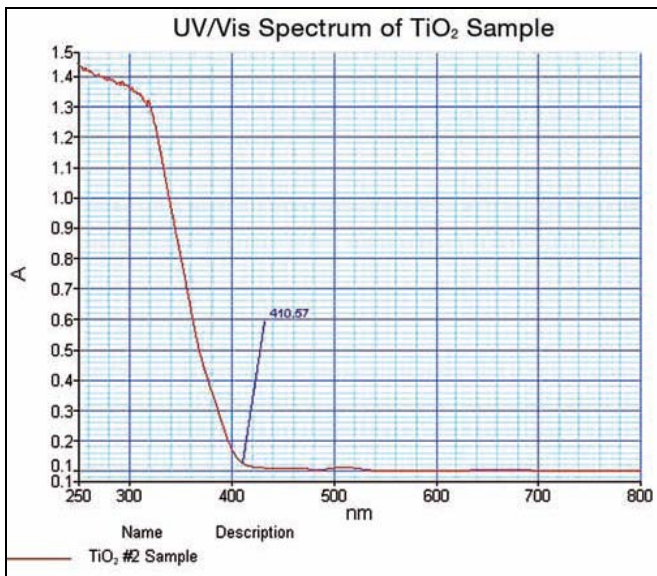


图 6 TiO₂ 的紫外/可见吸收光谱

所记录的光谱数据显示在 410.57nm 有最强烈的截止，此处吸收值最小。百分反射率模式数据也同样可以看到。

计算

$$E = h \cdot C / \lambda$$

$$h = \text{普朗克常数} = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

$$C = \text{光速} = 3.0 \times 10^8 \text{ m/s}$$

$$\lambda = \text{截止波长} = 410.57 \times 10^{-9} \text{ m}$$

H	C	λ	E	eV
6.63E-	3.00E+	4.11E-	4.84156E-	3.0259
34	08	07	19	76
1eV = 1.6 × 10 ⁻¹⁹ J				

结论

使用同样的实验条件和附件，各种粉末状纳米材料的禁带能值均可计算出来。有了这些，TiO₂ 的质量也能进行测定。各种各样其他半导体纳米材料也能用于这种实验，图 7 是文献给出的该实验的例子光谱。

使用专门设计的小粉末样品架的最大特点是：

1. 可以直接分析更小量的粉末样品可以
2. 由于专门设计的手动压片装置，粉末被紧紧地压进杯子里面而且不会滑到积分球里面
3. 所需的样品量比常规粉末样品架少 20-30 倍
4. 压片系统能给出非常平整的表面来进行反射实验
5. 由于样品直接暴露于光束，将镜面反射部分降低到了最低

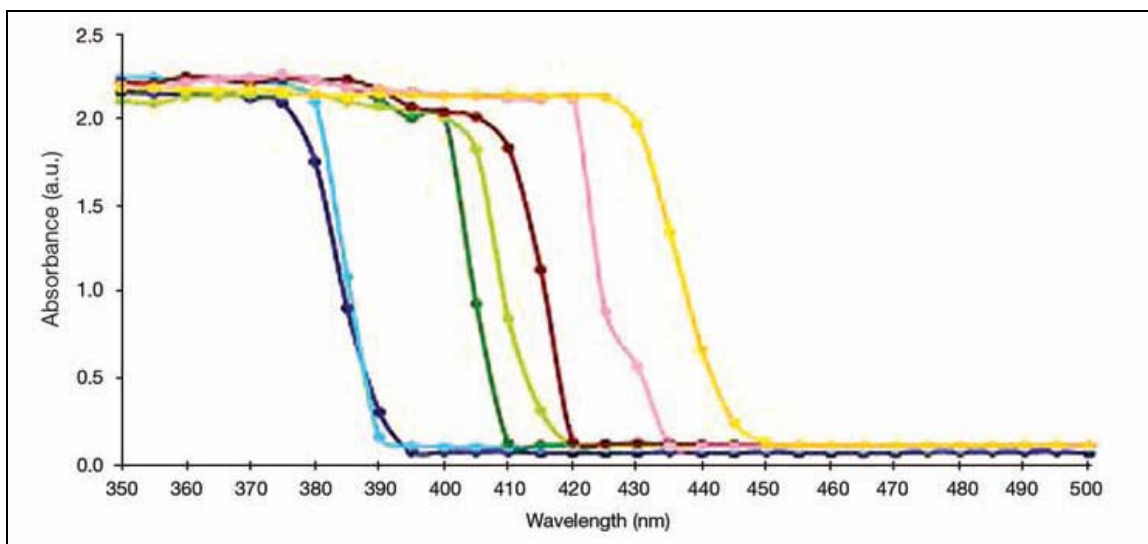


图7 $\text{TiO}_2\text{-(X) ZnFe}_2\text{O}_4$ 纳米材料的紫外/可见吸收光谱

X=不同摩尔浓度的 ZnFe_2O_4

X=0.01(暗绿), 0.05(浅绿), 0.1(咖啡色), 0.15(粉色), 0.20(橘黄色)。

TiO_2 水解(蓝色), 纯 TiO_2 (紫色)。

参考文献

1. Hoffman, M., Martin, S., Choi, W., & Bahnemann, D. (1995). "Environmental applications of semiconductor photo catalysis," Chemical Review, vol. 95, pp. 69-96.
2. Wikipedia: Bandgap definition and diagram, <http://en.wikipedia.org/wiki/Bandgap>.
3. An Investigation of $\text{TiO}_2\text{-ZnFe}_2\text{O}_4$ Nanocomposites for Visible Light Photo catalysis by Jeremy Wade, A thesis submitted to Department of Electrical Engineering; College of Engineering, University of South Florida, March 24, 2005.
4. Fundamentals of Molecular Spectroscopy; C.N. Banwell University of Sussex, 3rd edition, May 1983.
5. Wikipedia: Effect of TiO_2 Nanoparticles on Polymer-Based Bulk Heterojunction Solar Cells <http://jjap.ipap.jp/link?JJAP/45/L1314/>, Bandgap <http://www.ingentaconnect.com/content/els/02540584/2003/00000078/00000001/art00343>

PerkinElmer, Inc.

大中华区总部

地址: 上海张江高科园区李冰路67弄4号

邮编: 201203

电话: (021) 3876 9510

传真: (021) 387 91316

www.perkinelmer.com.cn



要获取全球办事处的完整列表, 请访问 www.perkinelmer.com.cn/ContactUs

©2009 PerkinElmer, Inc. 保留所有权利。PerkinElmer 徽标和外观设计是 PerkinElmer 的注册商标。文中提及的其它非 PerkinElmer 及其子公司所有的其它商标均为其各自所有者的财产。PerkinElmer 保留随时更改此文档的权利, 恕不另行通知。对于编辑、图片或排版错误概不承担任何责任。