

Application News

No. A460A

光吸収分析
Spectrophotometric Analysis

二酸化チタンのバンドギャップ測定

Measurements of Band Gap for Titanium (IV) Oxide.

二酸化チタン (TiO₂) は有用な光触媒作用を持ち、抗菌製品や顔料、化粧品等に広く用いられています。二酸化チタンの物性研究においては、基本的な物性量であるバンドギャップ (禁制帯幅) の測定がよく行われます。アプリケーションニュース A428 「化合物半導体のバンドギャップ測定」では化合物半導体のバンドギャップ測定とその計算方法を解説しましたが、行った計算は複雑で時間のかかるものでした。そこで、計算の困難を解消するため、バンドギャップ計算を簡便に行うことができるソフトウェア「バンドギャップ計算エクセルマクロ」¹⁾を開発しました。今回は、同ソフトウェアを使用し、紫外可視分光光度計 UV-2600 で測定した二酸化チタンの拡散反射スペクトルを用いてそのバンドギャップを計算しましたのでご紹介します。

M. Sugioka

測定方法と結果

Measurement and Result

ルチル型とアナターゼ型の異なる結晶構造を持つ和光純薬工業製二酸化チタン (TiO₂) を測定しました。ガラス棒で試料皿に押し固めた試料を積分球付属装置 ISR-2600Plus に設置して、その拡散反射率を測定しました。試料皿に押し固めた状態の試料を Fig. 1 に、積分球に設置した状態の図を Fig. 2 に示します。

硫酸バリウムを基準として測定した試料の拡散反射スペクトルを Fig. 3 に、分析条件を Table 1 に表示します。Fig. 3 より、ルチル型とアナターゼ型で吸収端の波長位置が異なっていることが分かります。この違いがバンドギャップの違いを表しています。

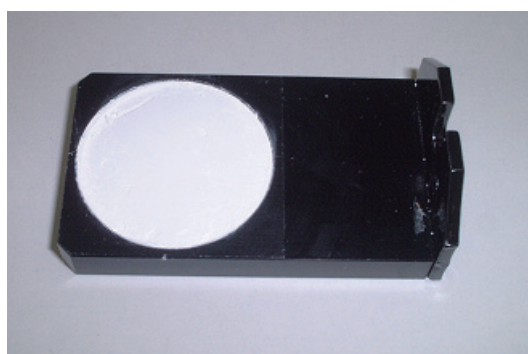


Fig. 1 試料を試料皿に詰めた状態
Sample Put in Sample Cup

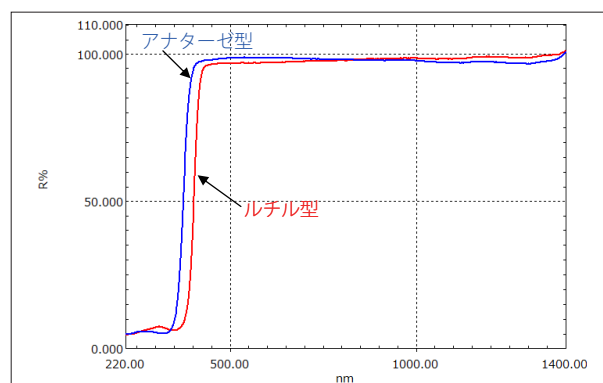


Fig. 3 拡散反射スペクトル (赤：ルチル型, 青：アナターゼ型)
Diffuse Reflectance Spectra (Red: Rutile type, Blue: Anatase type)



Fig. 2 積分球に試料を設置した状態
Sample Set in Integrating Sphere

Table 1 分析条件
Analytical Conditions

使用装置	: 島津紫外可視分光光度計 UV-2600, 積分球付属装置 ISR-2600Plus
測定波長範囲	: 220 nm ~ 1400 nm
スキャンスピード	: 中速
サンプリングピッチ	: 1.0 nm
測光値	: 反射率
スリット幅	: 5 nm
検出器切替波長	: 830 nm

■計算結果

Result of Calculation

バンドギャップ計算エクセルマクロを用いて、ルチル型二酸化チタンとアナターゼ型二酸化チタンのバンドギャップを計算しました。

手順として、まず測定したスペクトルをCSVフォーマットで保存します。CSVデータをFig.4のファイル選択画面で読み込みます。「測光値」では測定データの測光値の種類(透過率, 反射率)を選択します。「nの値」に関しては、試料の遷移過程の種類に対応する値を選択します。1/2は直接許容遷移, 3/2は直接禁制遷移, 2は間接許容遷移, 3は間接禁制遷移に対応しています。

データを読み込むと、Fig.5のようにメイン画面上部にスペクトルが表示され、また下部にTaucプロット曲線が表示されます。Taucプロット曲線は、スペクトルに対しTaucプロット近似を適用して算出されます。

Taucプロット曲線の変曲点で接線を引き、その接線が横軸と交わる点(eV値)が求めるバンドギャップ値となります。接線を引く方法に関して、本ソフトウェアでは変曲点周辺でほぼ直線と見なせる適当な範囲を設定し、その範囲において最小二乗法で求めた直線を接線とするアルゴリズムを採用しています。Fig.6ではアナターゼ型の例を示しています。直線範囲を3.55 eV ~ 3.7 eVとして計算した結果、アナターゼ型のバンドギャップは3.49 eVと求まりました。同様にルチル型では、3.20 eVと求まりました。両試料とも直接許容遷移として計算しました。

このように本ソフトウェアを用いると、バンドギャップを簡単に求めることができます。なお、計算の詳細に関しては、アプリケーションニュースA428「化合物半導体のバンドギャップ測定」をご参照ください。



Fig.4 ファイル選択画面
Selection Screen for Files

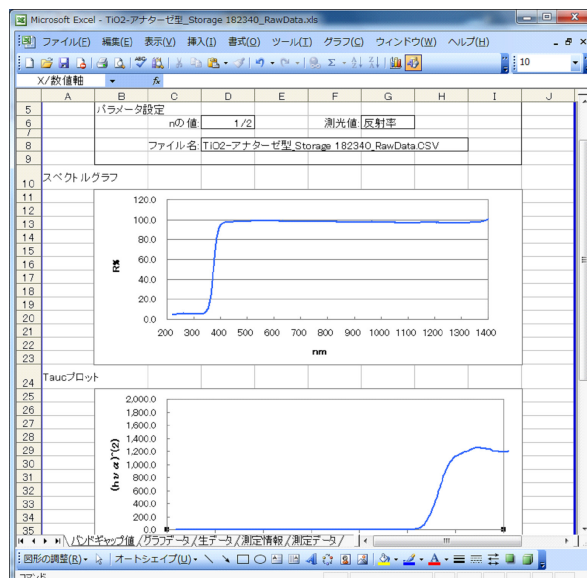


Fig.5 メイン画面
Main Screen

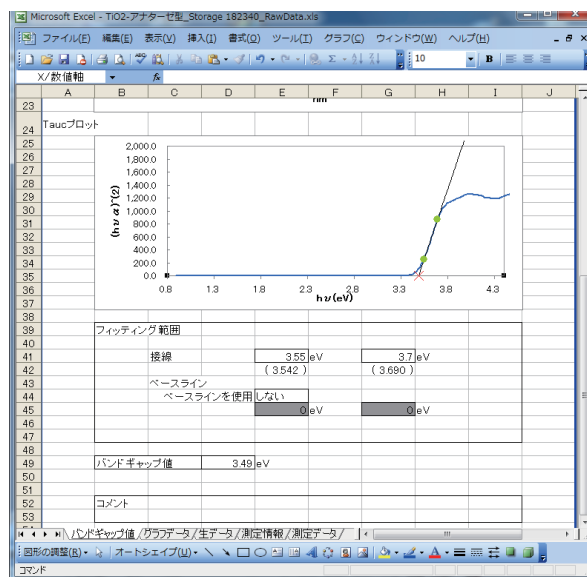


Fig.6 メイン画面 (バンドギャップ計算)
Main Screen (Band gap Calculation)

■まとめ

Conclusion

試料のバンドギャップを求める場合、通常Taucプロットが用いられますが、その計算は複雑で時間のかかるものとなります。本ソフトウェアを用いると、グラフ上で計算範囲を設定するだけで簡単にバンドギャップを計算することが可能となります。

1) エクセルは、Microsoft Corporationの米国およびその他の国における登録商標または商標のMicrosoft Excelを指します。