

Q2. バンドギャップが室温の熱エネルギー($1/40\text{eV}$)より十分大きく、不純物がない純粋の半導体では、伝導帯に電子は励起されておらず（存在せず）、価電子帯には電子が席（電子が占められる状態）に満杯になった状況になります。この状況では電子は移動できず（電子の抜け穴がないと席を移れない）電気伝導には寄与しない絶縁体となります。また、価電子帯の電子は全体として動かない（運動エネルギーは持てない）ので量子サイズ効果による運動エネルギーの変化はないことになります。価電子帯から電子が一個抜けると、その空席を使って残りの全電子は移動できますが、空席のみの動きを見てみると、電子と反対の符号を持った1個の荷電粒子が電子の動きと反対方向に動いているように見えます。これが正孔で、その運動エネルギーは電子と正負が逆方向になりますので、量子サイズ効果で価電子帯が下方にシフトするように見えます。（抜けた1個の電子が受けるはずの量子サイズ効果分だけ全電子のエネルギーが減るといってもよい。）

従って、半導体としての電氣的性質を議論するには、伝導帯に電子、価電子帯に電子の抜け穴である正孔が存在し、それらの電界印加時の動きを議論することが必要になります。バンドギャップ以上の光子エネルギーでの光励起では価電子帯の電子を伝導帯に移し、価電子帯に正孔ができることとなりますので、半導体の光学的性質も同様に議論できます。このような状況下で量子サイズ効果を考える際には閉じ込めによる伝導帯電子と価電子帯正孔のエネルギー変化を議論するのです。

従って、価電子帯の電子が伝導帯に遷移することによって引き起こされる半導体の主な光吸収の波長は、半導体微粒子の閉じ込め量子サイズ効果によりバンドギャップが半導体バルク結晶と比べて一般に増大することから短波長側にシフトすることになります。

半導体では一電子近似がうまく成り立つので、量子力学の井戸型ポテンシャルに閉じ込めた粒子の運動が近似的に再現できる好例と言えます。（伊藤 正）