

3-4 エネルギー帯(energy band)

一つの原子が孤立した状態での電子のエネルギーは既に述べたように

$$E_n = -\frac{mq^4}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2}$$

として表され、とびとびの状態しか取り得ない(図 1)。この孤立状態の原子に近隣する原子の影響を考える。

はじめに水素原子 2 個の互いの距離を近づけてみる。すると原子核を周回する電子は、隣の原子核からの影響を受け、電子のエネルギー準位は分裂する。この他原子核からの影響は原子間距離が近づくほど、また外側の軌道の電子ほど強くなる(図 2)。

次に固体中の原子の様互いに近接している状態を考える。固体では $10^{28} \sim 10^{29}$ 個/m³ の原子が密集しているため、エネルギー準位は原子の数だけ分裂する。それゆえ、個々の準位も密集して 1 つ 1 つ 区別できないので、これを 1 つの領域として考えた方がよい。このように考えると、図 3 に示すように電子のエネルギー準位は幅を持った帯状になる。それぞれのエネルギー領域を「**エネルギー帯(バンド) energy band**」と呼ぶ。特に電子の入り得る帯域を「**許容帯 allowed band**」、許容帯間の電子の存在できない帯域を「**禁制帯 forbidden band**」という。このようにエネルギー状態を帯状の状態とする考え方を「**エネルギー帯理論 band theory**」という。

電子が存在できる**許容帯(allowed band)**のうち、電子が完全に詰まっている許容帯を**充満帯(filled band)**という。その中で最もエネルギーの高い充満帯を**価電子帯(valence band)**という。充満帯の中の電子は完全に電子が詰まっている状態なので、電子が動き得る空席がないため自由に動くことができない。

また、電子が空または一部詰まっている許容帯を**伝導帯(conduction band)**あるいは**導電帯**という。この伝導帯にある電子あるいは伝導帯に励起した電子は空席が存在するので自由に動き回ることができ、電気伝導に寄与することができる。このような電子を**伝導電子(conduction electron)**あるいは**自由電子(free electron)**と呼ばれる。

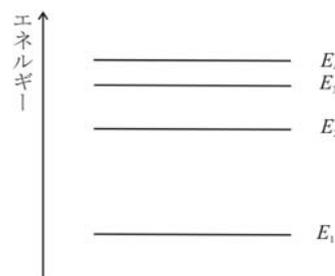


図 1 孤立原子の準位

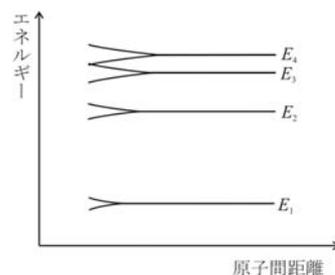


図 2 2 原子の準位

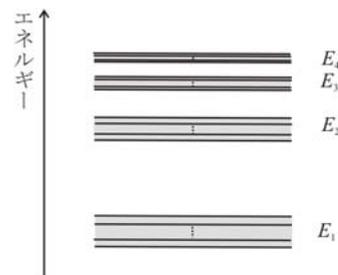


図 3 固体中の準位

3-6 真性半導体のエネルギー帯図

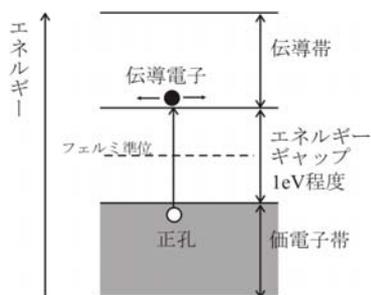


図 4 真性半導体のバンド構造

半導体のエネルギーバンド構造は空きがない構造となっている。すなわち、電子が完全に詰まった価電子帯の上にエネルギーギャップ(禁制帯)を隔てて完全に電子が空の状態の伝導帯が存在している。価電子中の電子は動き回る空席が存在しないため、電界が加えられても動くことができないため電気伝導に寄与することができない。また、禁制帯には電子が存在できないので、電子が自由に動くことができる伝導帯に遷移(励起)するにはエネルギーギャップ以上のエネルギーが必要となる。半導体のエネルギーギャップは 1eV 程度と小さく、室温程度の熱エネルギーにより容易に伝導帯に電子が励起することができる。この伝導帯に励起した電子(数は少ない)が伝導電子として振る舞うため、電気伝導に寄与することになる。

半導体のバンド構造を示す時は、充満帯の一番上のバンドすなわち価電子帯の上部から伝導帯の下部(底)までを表示することが多い。この講義でも価電子带上端および伝導帯下端で表示することとする。