3　エネルギー帯図

3-0　ボーア(Bohr)の水素構造の理論

ラザフォードの原子模型（古典論）

原子核+q [C]の周りを半径 r で電子-q [C]が円運動をしている。

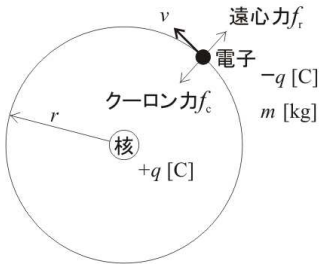


図 1　水素原子モデル

古典論での矛盾点

1)　遠心力とクーロン力の釣り合い

$$\frac{mv^2}{r}=\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} \quad \rightarrow \quad r\propto\frac{1}{v^2}$$:半径 r は任意の速度 v で変化する？

《実際の水素原子の大きさは常に一定》

2)　加速度運動する電子は電磁波を放射してエネルギーを失う。この電磁波のエネルギーは電子の運動エネルギーから得る。

→　電子は電磁波を放出しながら原子核へ落ち込んでいく？（連続的な振動数の電磁波が放出される）

《実際は、電子は安定して回っている。電子はある特定の振動数の電磁波を放出する》

ボーアの理論

仮説 1　電子の運動の**軌道は離散的（半径 r はとびとび)**。また、電子の**エネルギーもとびとび**の値しか取れない。電子がこの一つのエネルギー状態にある時を「**定常状態**」という。

仮説 2　電子が定常状態から他の定常状態に移る（**遷移**という）とき、その 2 状態間のエネルギー差に比例する振動数の光が放射または吸収される（h はプランク定数)。

$$E_{n2}-E_{n1}=h\upsilon=h\frac{c}{\lambda}$$

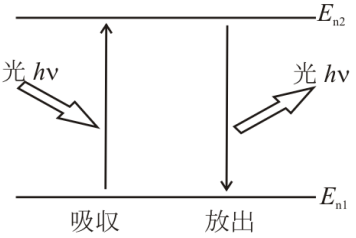


図 2　状態の遷移

3-1　エネルギー準位(energy level)

図 1 に示すように、静止した核(+q)の半径 r の円軌道上を電子(-q)が周回しているとすると、電子には核からのクーロン力 f_c と遠心力 f_r が働く。

クーロン力：$f_c=\dfrac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$　　遠心力：$f_r=\dfrac{mv^2}{r}$

電子が円運動しているとき、二つの力は釣り合っているので、$f_c=f_r$ である。

ここで、ボーアの量子化条件を考える。

ボーアの量子化条件：　$\int_C pdx=nh$　　(n = 1, 2, …)

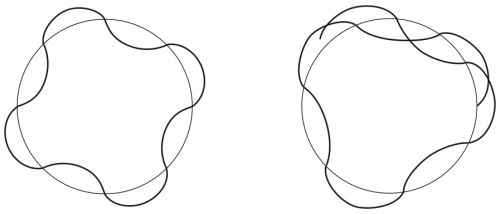
ここで、p は電子の運動量、h はプランク定数である。運動量 $p=mv$ は一定であるので、円軌道に沿って積分すると、

$$\int_C pdx=mv\int_C dx=2\pi rmv=nh$$

となる。これより、円周 $2\pi r$ は

$$2\pi r=\frac{h}{mv}n=\lambda n$$

と、λ（波長）の n（整数）倍となる。これは、電子を粒



(a)　定常状態　　(b)　非定常状態

図 3　電子の波動性

子としてだけではなく、波でもあると考えたとき、その電子の波が安定して存在できる条件となる（図 3(a)定常状態）。このことは、電子が二重性（粒子性と波動性）を持っていることを示している。もし、電子の波長が円周の整数倍になっていないと、円周上を回っているうちにだんだん波が打ち消されていくことになる（図 3(b)）。

量子化条件の式から電子の速度 v は、

$$v = \frac{nh}{2\pi rm}$$

これを、力の釣り合いの式に代入し、半径 r を求めると

$$r = \frac{\varepsilon_0 h^2 n^2}{\pi m q^2} = n^2 \times 0.529 \times 10^{-10} \quad [\mathrm{m}]$$

となる。n は整数であるので、**電子の周回半径 r はとびとび(不連続)な値になる**ことがわかる。

電子の持つエネルギーについて考えると、電子の位置エネルギー（静電エネルギー）U は

$$U = -\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

ただし、電子が無限遠にあるときエネルギーをゼロとする。また、電子の運動エネルギーE_kは

$$E_k = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{q^2}{8\pi\varepsilon_0 r}$$

であるので、全エネルギーE は

$$E = U + E_k = -\frac{q^2}{8\pi\varepsilon_0 r}$$

となる。半径 r を上式に代入すると、各軌道上の電子のエネルギーE_nは

$$E_n = -\frac{mq^4}{8\varepsilon_0^2 h^2 n^2} \quad \left(\propto \frac{1}{n^2}\right)$$

と求められる。ここでも、n は整数であるので、**電子のエネルギーはとびとび（不連続）な値になる**。この電子が取り得るエネルギー値を「**エネルギー準位 energy level**」という。一番低いエネルギー準位は$n=1$のときで

$$E_1 = -\frac{mq^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \cong -13.58 \ [\mathrm{eV}]$$

である。この準位は「**基底準位 ground state**」といい、一番安定した準位である。

Si の原子モデル

図 4 にボーアの原子モデルによる Si 原子のモデルを示す。原子モデルをさらに詳しく議論していくと、軌道(orbital)という考えが必要になる。K 殻には 1s 軌道、L 殻には 2s、2p 軌道、M 殻には 3s、3p、3d という軌道がある。しかし、この講義ではこれ以上詳しい説明はしない。

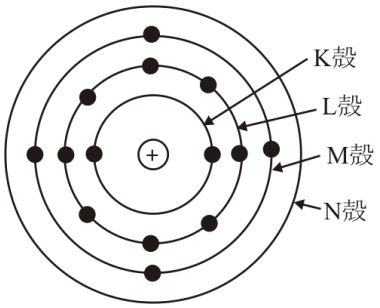


図 4　Si の原子モデル