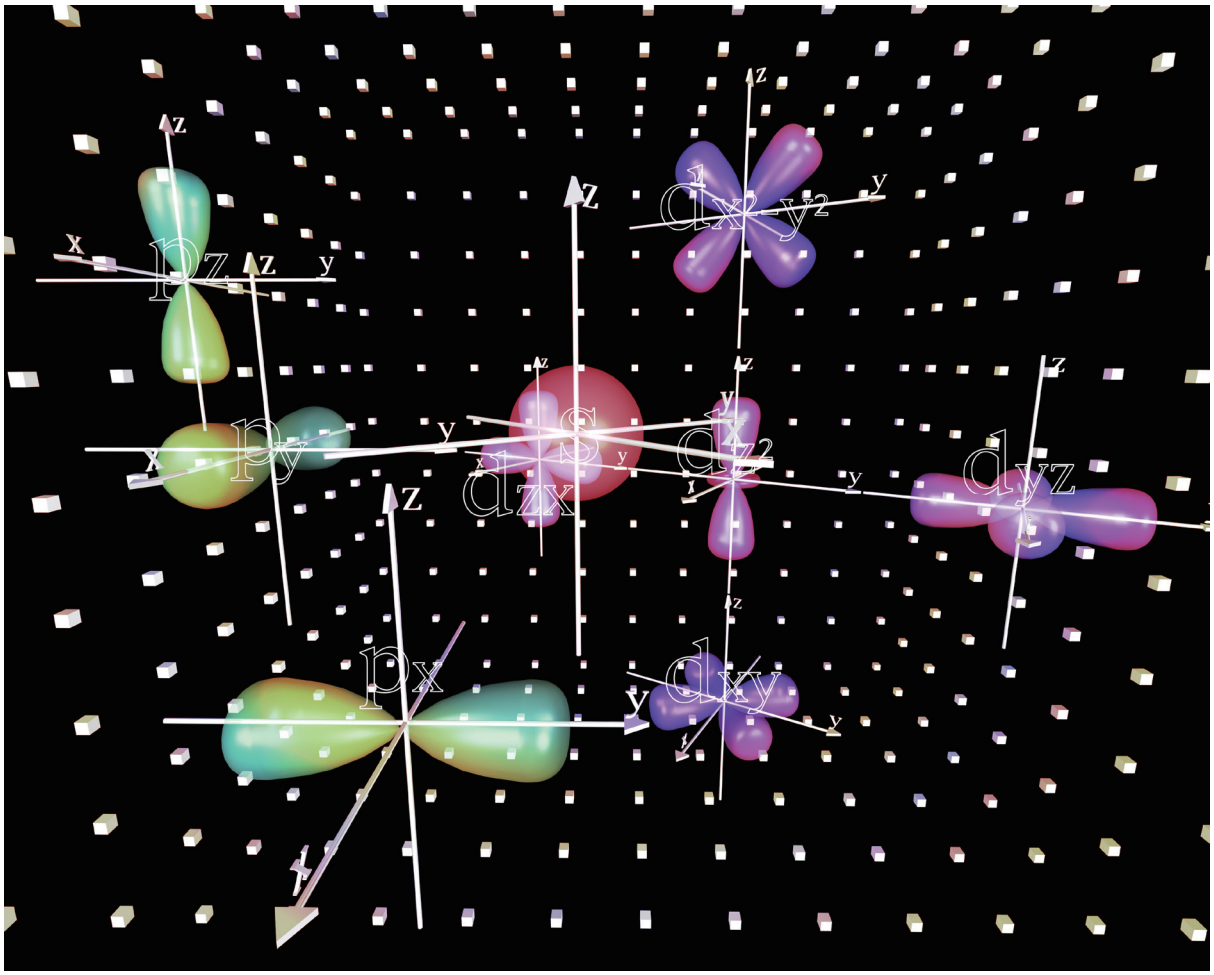
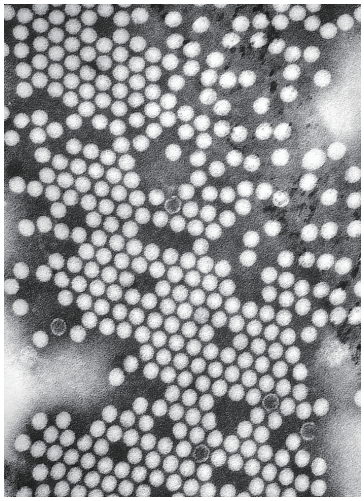
第１０章　量子論の世界と周期表

　原子の世界では、すべてが量子化されます。電子などは波としての性質も併せ持ち、光もまた粒子的な性質を持ちます。そして、そこでは、ニュートンの運動方程式に代わって、量子力学が現れます。またその力学は、化学的な性質の分類を表した、メンデレーフの周期表を見事に説明してくれます。今回は、この量子論の世界と周期表について見てみましょう。



電子顕微鏡

顕微鏡では、光の波長に近い大きさの物体では、光の波が曲がり、回折という現象が起こります。このため、像がぼやけてしまいます。つまり、波長よりも小さな解像度を得ることはできないのです。可視光の波長は数百ナノメートルのため、マイクロメートル程度の大きさ以下の物体を見ることが困難になります。もちろん、波長の短い紫外線やエックス線を使うことも考えられますが、原子ではそうした光は吸収されるかただ単に透過してしまうことになります。したがって、光でマイクロメートルよりも細かい領域を見ることには限界があるのです。

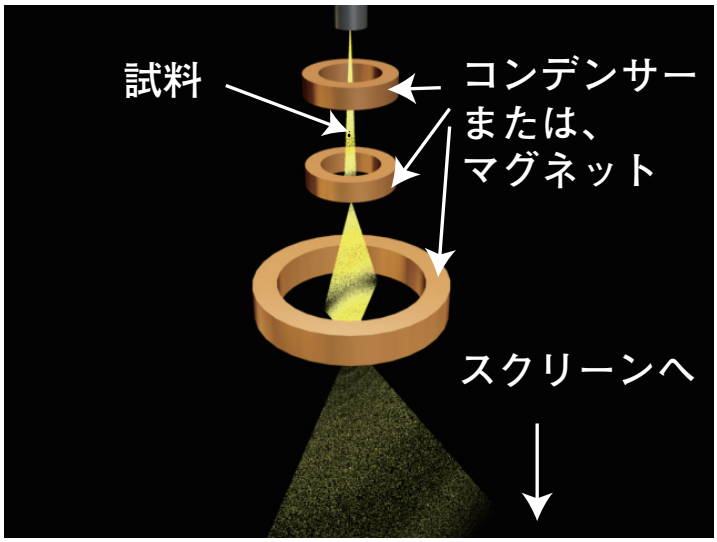


ポリオウイルスの透過型電子顕微鏡による画像

電子顕微鏡では、電子を高電圧で加速すればドブロイ波長は0.1ナノメートル程度とすることができます。したがって、ぼける程度もこのドブロイ波長程度となり、電子が標本を通過するときの解像度をナノメートル程度とすることができるのです。

光ではレンズによって光を集めたり、拡大したりしますが、電子では磁場や電場がその変わりをします。電場や磁場による力で電子の軌道が変えられるのです。

電子顕微鏡の発達がサイエンスにもたらした貢献は図りしれません。電子顕微鏡のおかげで生物学は大いに発展してきたのです。また生物学の発展がテクノロジーに貢献しました。科学とテクノロジーは車の両輪のようなものなのです。



電子顕微鏡
コンデンサーによる電場やマグネットによる磁場で電子を曲げてレンズの変わりにする

量子力学

ボーアの原子模型は非常に単純なモデルですが、それは正確なものではありません。波動性と粒子性の両立のためには、粒子のニュートンの法則に対応する、量子の力学が必要になります。ミクロな物理を記述する力学を量子力学と言います。この量子力学によると、我々が観測できるものは、粒子の存在する確率だけであり、多数の量子を集めるとその確率は決定的なものとなります。この値は古典的なものに対応し、ニュートンの法則と等価なものになります。確率的平均からのずれは波動性をもたらし、ミクロな領域ではこの波動性が重要となります。

粒子性と波動性をみるのに特徴的なのが、電子の干渉実験です。電子を一個一個スリットを通します。こうしたら他の電子と干渉するおそれはありません。それでも、一個一個は様々な位置に跳び、多数の電子のあたった位置を集めると、干渉縞があらわれるのです。

量子力学は、電子の存在する確率を予言する

量子力学で求められるもの、確率

このようにミクロに見ると電子であっても一つ一つの粒子がどの点に当たるのかを予測することはできません。しかし、多数の電子が干渉するように分布することは予測できます。つまり、一個一個の電子がどの位置に存在するかという確率は予測可能なのです。量子力学が予測するのは個々の粒子の軌道ではなく、粒子がどの位置にあるかという確率なのです。

このような力学は、ニュートンの力学と大変異なっています。ニュートンの力学では、電子の位置と速度とそこに働く力がわかると、ニュートンの法則よりその後に速度の変化がわかり、そのため電子の軌道が一意的に決定できるのです。それでは、このようなニュートンの法則のどこがいけないのでしょうか？それは、次ページで見るように、電子は波としての性質のために、位置と速度とが同時に決定できないのです。

原子の大きさは何がきめる？

原子の大きさは、電子が決めています。ボーアのモデルにより電子の半径は 10^{-10}m 程度となることが計算できるのです。これは、だいたい分子のサイズなので、分子の大きさも電子の原子核を周回する大きさが決定しているのです。ボー波のモデルでは波動性と古典力学を結びつけています。原子の大きさは、電子の電荷やプランク定数などの基本的な量で表されます。一つ一つの電子がどこに跳ぶかははっきりとわからないが、多数の場合の分布はわかる。つまり一回一回は確率的なものであることがわかります。

ハイゼンベルグの不確定性関係とは？

波は、波長などの概念のために広がりを持っています。つまり位置は不確定になります。また逆に位置を確定しようとすれば、波長が不確定になっていきます。一方、量子論によると波長は速度に関係していましたので、波長が不確定ということは速度が不確定になります。アイゼンベルグによると

質量 x 速度の誤差 x 位置の誤差はプランク定数より大きい

ことが示されました。これを**ハイゼンベルグの不確定性関係**と言います。これによると、位置と速度とを同時に厳密に決定することは、原理的にできません。

たとえば、非常に位置を精度良く決定したいときには、回折の影響を避けるために非常にエネルギーの高い光子や電子をミクロな物体にに照射します。しかし、このエネルギーによって見たい物体は飛ばされてしまい、位置を特定できたと思ったところにはすでにいなくなってしまいます。また、物質中を電子などが飛ぶときにも電子が原子をイオン化して化学反応を起こすことで、電子の通った位置を特定したとしても、原子の大きさ以下にはその位置を知ることはできないわけです。このように、波としての性質がエネルギーとも関係しているがために、位置や速度を確定的に知るのには限界があるのです。一方、私たちの日常生活では、原子サイズでの精度を要求しませんので、こうした不確定性関係は無視できます。

また、原子中の電子が中心に落ち込まない理由を次のように解釈することができます。次のように解釈することも出来ます。原子中の電子は一見原子核に落ち込んでいってもよいように思えます。しかし、電子などの粒子を非常に小さいサイズに閉じこめようとすると速度の不確定さが増加し、エネルギーが増加して反発するように力となります。そのためこの不確定性による力と、電気的に落ち込もうとする力が釣り合って落ち込まないとも解釈できるのです。

また、不確定性関係として

エネルギーの誤差 x 時間の誤差はプランク定数よりも大きい

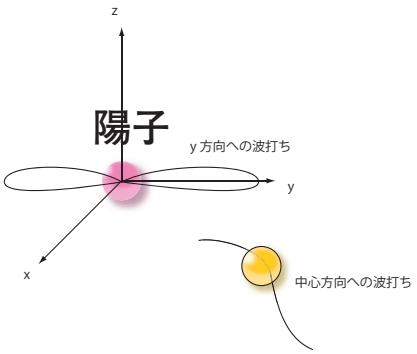
ということもわかります。これはエネルギーの保存則と一瞬矛盾するように思えるかもしれませんね。しかし、実際この関係は非常に短い間ならエネルギーは保存しなくてもよいことを表しています。しかし、日常生活の観測のスケール、たとえば 1 秒くらいの観測ではプランク定数が小さいためエネルギーの誤差は無視できるようになります。

ウェルナー　ハイゼンベルグ (1901-1976)

ドイツのベルツブルグで生まれました。大学はスイスのミュンヘンで主に流体力学の研究を行いました。1926 年に量子力学を記述する行列力学を作り、またその翌年には不確定性関係を提唱しました。そして 1932 年に 31 才にしてノーベル賞を受賞しました。若くしてライプツィッヒの理論物理学教授となり物理学の一学派を築きます。ナチスの時代には、ドイツで原爆製造の責任者となり、核分裂実験のために多量の重水を購入したりしていましたが、結局は大きく進展しませんでした。

水素原子のエネルギー順位とその数は？

量子力学によると、ボーアの模型では解らなかった、同じエネルギーを持った状態がいくつあるのかも解ります。空間には波打つ方向が、縦横高さと、基本的に３方向もあり実際には複雑です。



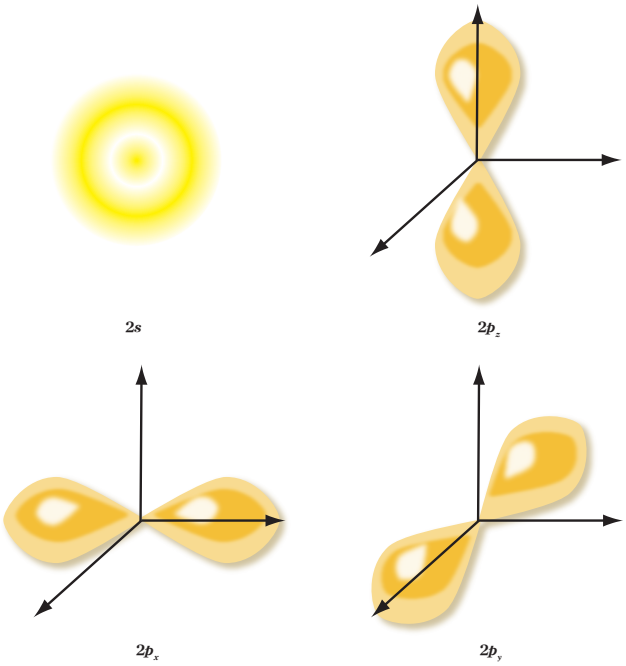
ここでは、波を中心からの距離の方向と、回転する方向に分けて考えてみます。そしてまず、中心周りに波打つ方向がいくつあるのかを見てみましょう。まず何も波打たない状態でこれを s 軌道と言います。波打つ方向は縦、横、高さと３つの方向がありますね。これを x,y,z と座標をおいて陽子の位置を原点においておきます。すると x,y,z とそれぞれの方向を向いたものが独立にあります。もちろん $x+y$ なんてのもありますが、基本的には x,y というのを足し上げただけなので基本は３つの方向です。これを p 軌道と言います。次に、二つの方向を掛け合わせたもの $,x^2,y^2,z^2,xy,yz,zx$ がありますが、このうち足しあわせたもの、$x^2+y^2+z^2$ は中心からの距離を表していますので方向を持ちませんね。よってこれを除いておきます。すると５つです。これを d 軌道と言います。このように回転方向の波打つ数に応じては s,p,d となりそれぞれの個数は 1,3,5 となっていきます。

$1s$

1s 軌道

波打つ数が多いほどドブロイの関係より速さが大きく、エネルギーが大きいことに注意しましょう。

一方、中心から放射状に伸びた方向への波の個数でもエネルギーは変わってきます。放射状に伸びた方向にも回転方向にも内打たない状態を $1s$ 状態と言います。次に回転方向に波打つか、中心方向に波打つかの状態があり、中心方向に波打つのが１つで，回転方向に波打つのが x,y,z と３つあり合計４つあります。これらを $2s,2p$ 状態と言います。次に、中心方向に２回波打ち、回転方向に波打たないものを $3s$ といい、中心方向に１回で回転方向に１回を $3p$, 回転方向に２回波打つのを $3d$ と言います。あわせると 1+3+5=9 個になりますね。つまり、エネルギーレベルでの独立な状態の数は、1，4，9となっていきます。また、1,2,3 の指数を**主量子数**と言います。

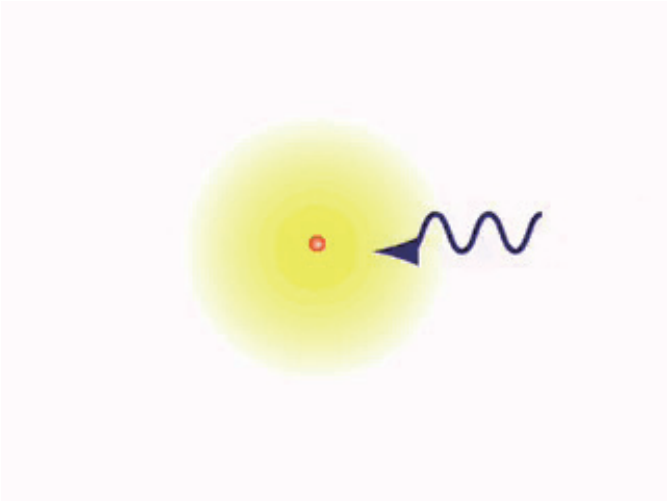


第一励起状態の４つの状態
１ｓ、２ｐ状態

量子力学での光の救出と放出は？

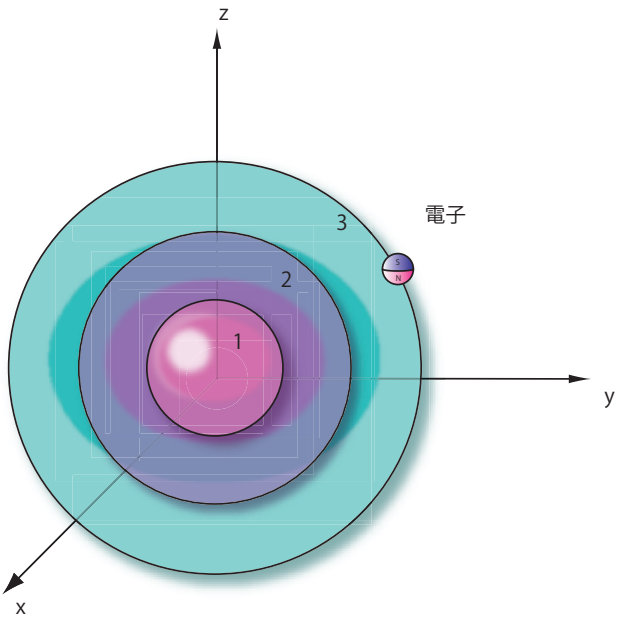
　量子力学では、ボーアの理論よりもさらに定量的な予測が可能になります。たとえば、光の吸収率なども計算できるようになるのです。

　量子力学では、電子の存在確率密度が光の吸収や放出によって変化します。



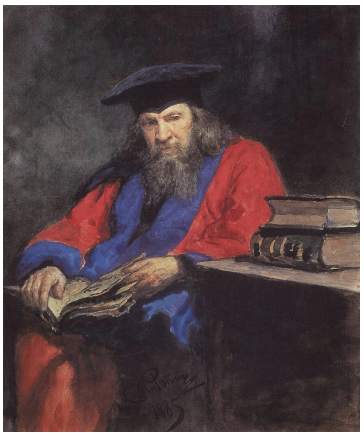
シェルモデル

　波の考え方が実際の電子の分布を表しますが、わかりにくいのですこし現実から外れた次のモデルの方が覚えやすくなります。これは電子が波打つ数に応じて中心からある距離の整数倍のところに主にあると思います。それぞれを殻（シェル）と言います。そして、波は面のようなものなので、状態の数はそれぞれの面積の比になります。つまり、1,4,9 という面積比ですね。これを**シェルモデル**と言います。この考え方の方が便利な面があるので通常はこれを使います。



電子の構造を見やすく簡略化したモデル
シェルモデル

メンデレーフの周期表



サイエンスでは、それまでに発見されていないパターンを認識し分類することが発展に非常に重要になることがあります。メンデレーフ（１８３４－１９０７）はロシアの化学者です。１８３４年にシベリアで、１４人兄弟の末っ子として生まれました。非常に優れた教育を受け、セイントペテルスブルグ大学に進み、化学を研究しました。そして、1869 年に偉業を成し遂げました。

日常のほとんどの分子は様々な元素からなる化合物です。そのため、これ以上分けられないという元素の特定には長い歴史が必要でした。古来から知られている元素のほとんどは金属です。たとえば、金、銀、銅があります。また金属でないものとしては、石炭に含まれる炭素や、火山岩に含まれる硫黄などがあります。

１２世紀から１６世紀の間に学者達は、非常に強い炎により元素を分離する手段を編み出しました。これにより、亜鉛、リン、ビスマスなどの元素が特定されていきます。1735 年から 1805 年の間に学者達はさらに強い炎を作る装置を編み出しニッケル、コバルト、マグネシウム、ウランなどを精製していきました。そして 1772 年から 1774 年にかけて水素、酸素、窒素が分離されました。1797 年に電池が実用化され、ハンフリー・デービーによって電気分解が化学に応用され、塩素、ナトリウム、カドニウム、バリウム、カルシウムが分離されました。ちなみに電気分解は現在でも元素の分離によく使われています。たとえばアルミニウムは電気分解で精製されるため、アルミニウムの精製コストの多くは電気代です。

メンデレーフはそれまで知られていた６３個の元素の分類を試みます。それまでの化学者は、化学反応で非常に似た振る舞いをする元素があることに気づいていました。また、これらの元素の化学反応により元素の相対的な質量を割り出すことができます。メンデレーフはこれらを縦の列に並べてきます。たとえば、リチウム、ナトリウム、カリ、ルビジウムは金属光沢があり比較的柔らかい性質があります。しかもこれらは塩素やヨウ素などハロゲン属と１：１の割合で反応します。また水と非常に強く反応します。これらをアルカリ金属と呼びます。また横には質量の小さいものから大きいものの順に並べていきました。また、ベリリウム、マグネシウムなどをアルカリ土類金属と言います。これらはハロゲン属と１：２の割合で反応します。

そして横には質量の順になるようにすべての元素を並べていきました。このようにして周期表を完成させていったのです。このようにして完成させた周期表には、２番目と１０番目、１８番目、そして２１から３２番目の元素にはまだ対応する元素が発見されていないものがありました。その後、ゲルマニウムやスカンジウムなど、対応する元素が次々に発見されていき現在の周期表が完成されました。

元素の周期表
The Periodic Table

周期＼族	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	1 H 水素 Hydrogen 1.00794																	2 He ヘリウム Helium 4.0026
2	3 Li リチウム Lithium 6.941	4 Be ベリリウム Beryllium 9.01218											5 B 硼(ホウ)素 Boron 10.811	6 C 炭素 Carbon 12.0107	7 N 窒素 Nitrogen 14.0067	8 O 酸素 Oxygen 15.9994	9 F 弗(フッ)素 Fluorine 18.9984	10 Ne ネオン Neon 20.1797
3	11 Na ナトリウム Sodium 22.9898	12 Mg マグネシウム Magnesium 24.305											13 Al アルミニウム Aluminum 26.9815	14 Si 珪(ケイ)素 Silicon 28.0855	15 P 燐(リン) Phosphorus 30.9738	16 S 硫黄 Sulfur 32.065	17 Cl 塩素 Chlorine 35.453	18 Ar アルゴン Argon 39.948
4	19 K カリウム Potassium 39.0983	20 Ca カルシウム Calcium 40.078	21 Sc スカンジウム Scandium 44.9559	22 Ti チタン Titanium 47.867	23 V バナジウム Vanadium 50.9415	24 Cr クロム Chromium 51.9961	25 Mn マンガン Manganese 54.938	26 Fe 鉄 Iron 55.845	27 Co コバルト Cobalt 58.9332	28 Ni ニッケル Nickel 58.6934	29 Cu 銅 Copper 63.546	30 Zn 亜鉛 Zinc 65.39	31 Ga ガリウム Gallium 69.723	32 Ge ゲルマニウム Germanium 72.64	33 As 砒(ヒ)素 Arsenic 74.9216	34 Se セレン Selenium 78.96	35 Br 臭素 Bromine 79.904	36 Kr クリプトン Krypton 83.8
5	37 Rb ルビジウム Rubidium 85.4678	38 Sr ストロンチウム Strontium 87.62	39 Y イットリウム Yttrium 88.9059	40 Zr ジルコニウム Zirconium 91.224	41 Nb ニオブ Niobium 92.9064	42 Mo モリブデン Molybdenum 95.94	43 Tc テクネチウム Technetium [99]	44 Ru ルテニウム Ruthenium 101.07	45 Rh ロジウム Rhodium 102.906	46 Pd パラジウム Palladium 106.42	47 Ag 銀 Silver 107.868	48 Cd カドミウム Cadmium 112.411	49 In インジウム Indium 114.818	50 Sn 錫(スズ) Tin 118.71	51 Sb アンチモン Antimony 121.76	52 Te テルル Tellurium 127.6	53 I 沃(ヨウ)素 Iodine 126.904	54 Xe キセノン Xenon 131.293
6	55 Cs セシウム Cesium 132.905	56 Ba バリウム Barium 137.327	※1	72 Hf ハフニウム Hafnium 178.49	73 Ta タンタル Tantalum 180.948	74 W タングステン Tungsten 183.84	75 Re レニウム Rhenium 186.207	76 Os オスミウム Osmium 190.23	77 Ir イリジウム Iridium 192.217	78 Pt 白金(プラチナ) Platinum 195.078	79 Au 金 Gold 196.967	80 Hg 水銀 Mercury 200.59	81 Tl タリウム Thallium 204.383	82 Pb 鉛 Lead 207.2	83 Bi ビスマス Bismuth 208.98	84 Po ポロニウム Polonium [210]	85 At アスタチン Astatine [210]	86 Rn ラドン Radon [222]
7	87 Fr フランシウム Francium [223]	88 Ra ラジウム Radium [226]	※2	104 Rf ラザホージウム Rutherfordium [261]	105 Db ドブニウム Dubnium [262]	106 Sg シーボーギウム Seaborgium [263]	107 Bh ボーリウム Bohrium [264]	108 Hs ハッシウム Hassium [265]	109 Mt マイトネリウム Meitnerium [268]	110 Ds ダームスタチウム Darmstadtium [269]	111 Rg レントゲニウム Roentgenium [272]	112 ? ? ? [277]	113 ? ? ? [278]	114 ? ? ? [289]		116 ? ? ? [289]		

※1 ランタノイド	57 La ランタン Lanthanum 138.906	58 Ce セリウム Cerium 140.116	59 Pr プラセオジム Praseodymium 140.908	60 Nd ネオジム Neodymium 144.24	61 Pm プロメチウム Promethium [145]	62 Sm サマリウム Samarium 150.36	63 Eu ユウロピウム Europium 151.964	64 Gd ガドリニウム Gadolinium 157.25	65 Tb テルビウム Terbium 158.925	66 Dy ジスプロシウム Dysprosium 162.5	67 Ho ホルミウム Holmium 164.93	68 Er エルビウム Erbium 167.259	69 Tm ツリウム Thulium 168.934	70 Yb イッテルビウム Ytterbium 173.04	71 Lu ルテチウム Lutetium 174.967
※2 アクチノイド	89 Ac アクチニウム Actinium [227]	90 Th トリウム Thorium 232.038	91 Pa プロトアクチニウム Protactinium 231.036	92 U ウラン Uranium 238.029	93 Np ネプツニウム Neptunium [237]	94 Pu プルトニウム Plutonium [239]	95 Am アメリシウム Americium [243]	96 Cm キュリウム Curium [247]	97 Bk バークリウム Berkelium [247]	98 Cf カリホルニウム Californium [252]	99 Es アインスタイニウム Einsteinium [252]	100 Fm フェルミウム Fermium [257]	101 Md メンデレビウム Mendelevium [258]	102 No ノーベリウム Nobelium [259]	103 Lr ローレンシウム Lawrencium [262]

表の見方

セル内の表記
原子番号 **元素**
元素名(日本語)
元素名(英語)
原子量

セルの色
- の元素は、単体の物質が**金属**的性質(光沢がある、電気や熱をよく通す、陽イオンになりやすい、など)を持つ。
- の元素は、単体の物質が**非金属**的性質を持つ。
- の元素は、単体の物質がその中間の(**半導体**的)性質を持つ、ことを示す。

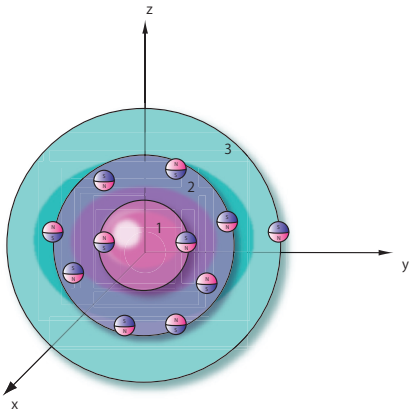
元素記号の色
- **赤字**のものは、単体の物質が室温(15℃くらい)で**気体**。
- **青字**のものは、単体の物質が室温で**液体**。
- **黒字**のものは、単体の物質が室温で**固体**である、ことを示す。

原子番号 112,113,114,116 の元素については、発見されているが、まだ名前が公式には決定されていない。
原子番号 118 の元素については、1999年に一度発見の報告(論文)が出されたが、その後2001年に論文が取り消された。
(Physical Review Letters 83(1999)1104, 同 89(2002)039901

参考文献

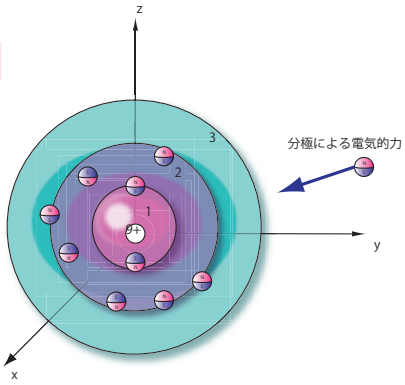
国立天文台編「理科年表 2005年版」、丸善
・・・ 他

原子とパウリの排他原理



ナトリウムのシェルモデル
最外殻に電子が一つある

さて水素原子以外ではどうなっているのでしょうか？シェルモデルで考えてみます。まず、磁石のときに説明したように電子は**スピン**があり、それ自身磁石のような構造をしていることを思い出して起きましょう。たとえばヘリウムでは中心には陽子が２つありますので電子はそれぞれの陽子から力を受けます。そのため中心付近により強く引っ張られて電子の軌道の半径は水素原子よりも小さくなります。リチウムでは中心に陽子が３つありますので、基底状態に３つの電子が入りそうですね。しかし、電子には次のような性質があるのです。電子は他の電子と同じ状態でいることを嫌って必ず互いに異なる状態にいます。電子が同じ状態に二つ以上いることができないということを**パウリの排他原理**と言います。このため、電子は一つ一つがスペースを取ります。たとえば、ヘリウムの場合、２つの電子は磁石の向きを逆にして基底状態にいることができます。一方、リチウムでは、基底状態に２つ詰まった後、次には中心よりより遠くの軌道にいることになります。同様に増えていくと例えば陽子の数が１１個のナトリウムでは図のように２番目の殻がつまってもう一つの電子がさらに外側の殻に飛び出てしまいます。これは中心からの距離が遠く、クーロンの法則による引力が弱いですね。よって電子が取れやすくイオンになりやすいことになります。



フッ素のシェルモデル
電子が欠けた位置からは原子核によって電子が引きつけられる

このように殻の状態の数は、電子が磁石であることを考慮するとそれぞれの殻の電子の数は 2,8,18 となります。殻に電子が詰まった状態にあるヘリウム、ネオンなどは非常に安定で化学反応をほとんどしません。一方、フッ素などでは、電子が９個と陽子が９個で全体として中性ですね。にもかかわらず、殻の一つの方向のが空いていますので、その方向にある電子にとっては、他の電子は比較的遠くにあり陽子が近くにある状態にあります。従ってクーロンの法則により全体として陽子からの引力が勝り、強力に電子を引きつけます。しかも比較的原子核に近いところまで引きつけるので引きつける力は非常に大きいですね。これがフッ素が化合物となりやすい理由です。

このように量子力学により、化学反応がなぜ起こるかまで含めて、メンデレーフの周期表を説明してくれるのです。

天空の現象で同じことが起こったことを思い出してみましょう。惑星の運動は、ケプラーにより、楕円運動であり、その中にはケプラーの法則が成り立っていました。これは、ニュートンの法則により説明されました。一方、ミクロな世界では、核子の周りを電子が回っています。この性質は、メンデレーフによって周期表という形にまとめられました。そして、量子力学によりその周期表は説明されたのです。ここでも科学的方法が見事に使われたのです。

ヴォルフガング・エルンスト・パウリ (1900-1958)

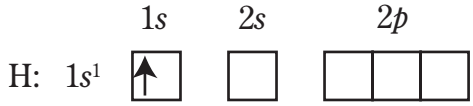
オーストリアのウイーンで生まれる。高校にあたるギムナジウムを卒業した彼は１８才のときに、当時出たばかりのアインシュタインの一般相対性理論に関する論文を発表しました。また、有名な物理学者であるゾンマーフェルトが「数理科学全集」の相対性理論の部分を任されます。その手伝いとして 21 才のパウリがかり出されましたが、ゾンマーフェルトはパウリのあまりの学識の高さに驚き、彼にすべてをまかせます。アインシュタイン自身もパウリ相対性理論の解説に痛く感銘をうけましたが、パウリの年齢を聞いて非常に驚いたと言います。アインシュタインもこの解説で初めて相対性理論が解ったと言ったというううわさがあります。ゲッチンゲン大学のあと、コペンハーゲン理論物理学研究所に滞在しますた。このころ、水素原子を磁場中に入れるとスペクトルにそれまでは説明できない「異常ぜーマン効果」という問題がありました。友人がパウリが公園のベンチでぐったりした姿でいるのでどうしたのか訪ねたら「異常ぜーマン効果のことを考えたらぐったりせざるをえないじゃないか」と答えたといいます。その後パウリはスピンの概念を用いてこの異常ぜーマン効果を説明することに成功します。1923 年以降ハンブルグ大学の講師を務めていましたが、そこで排他原理の提唱、またベータ崩壊でのニュートリノの提唱を行いました。そして 1945 年にノーベル賞を受賞しました。

パウリは辛辣な批評家であり、優秀な理解者であったので新しい概念を発見した人たちに対して判事の役割を果たしたようです。誰かが新しい考え方を彼に話すとほとんどすぐに「くだらない」と答えたといいます。それでもさらに説明をして納得してもらうと今度はその研究の援助になるような考え方を提供してくれました。またパウリが近づくだけで実験器具が壊れると噂されていました。これをパウリ効果と言いました。

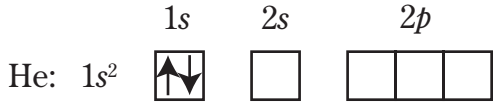
原子と電子配置

原子内の電子の配置は、いろいろな記号が出てきてややこしいですね。ここで整理する意味でも、またより詳しく見てみる意味でも原子番号の小さい方から各元素の基底状態の電子配置を見ていきましょう。

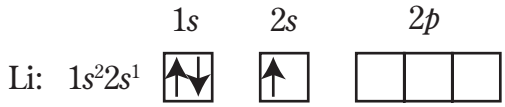
まず、水素では、原子核の電荷が１ですので対応して 1s 状態に１つの電子があります。



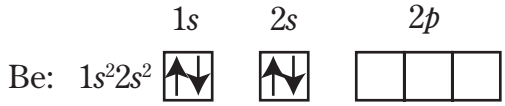
原子核の電荷が２であるヘリウムではスピンの自由度のため 1s 状態に２個の電荷があります。パウリの排他原理のため、電子にスピンの向きはお互いに反対です。



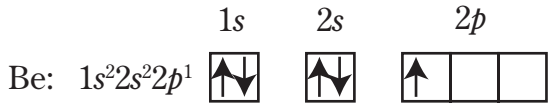
次にリチウムでは、1s 状態に２個でふさがりましたので 2s 状態に１つ電子があります。水素原子のエネルギー順位のときにみたように、電子が全く詰まっていないときには 2s 状態と 2p 状態は同じエネルギー順位にあります。しかし、1s 状態に電子があるので、この状態により中心の原子核から 2s,2p の状態の電子を引きつける力が弱くなります。つまり、1s 状態の電子の影響により p 状態のように中心に電子がいない状態よりも s 状態のように中心に電子がいる確率の高い配意の方が、エネルギーが低くなるのです。一般に同じ殻の電子では、内側の殻の電子の影響により、エネルギーは s,p,d の順で高くなります。このようにして、2s 状態に３つめの電子が入るのです。



Be では 1s に二つはいります。やはりパウリの排他原理のために電子の向きは逆です。

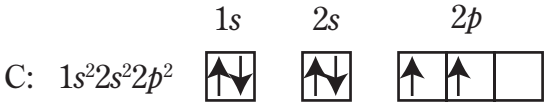


ホウ素 (B) では、2p 軌道に一つ入ります。

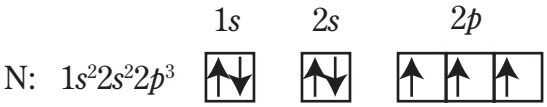


次に、炭素では、2p 軌道に二つの電子が入ります。しかし、この同じエネルギー順位への複数の電子の入り方にはある特徴があります。電子同士はクーロン力による反発のためできるだけ遠くにいようとします。このとき、パウリの排他原理により、同じスピン同士の方がより排他的で遠くにいることができますので、スピンの方向がそろって異なる状態にいた方が安定になります。一般に、電子ができるだけ異なる状態を取ろうとしてそのためにスピンが同じ方向を向こうとすることを**フントの規則**と言います。

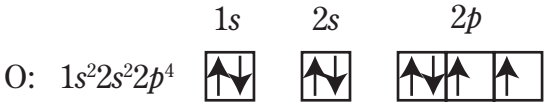
このフントの規則のために、炭素の電子配置は次のようになります。



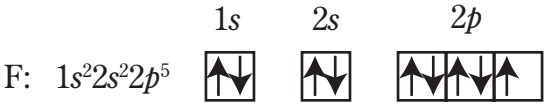
窒素では 2p 軌道を一つづつ埋めます。

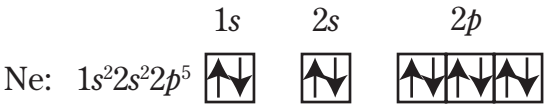


酸素では、2p 状態にお互い離れた状態で３つつまっていますので、、もう一つは反対向きに寝ます。



そして、フッ素、ネオンではどうように詰まって行きます。



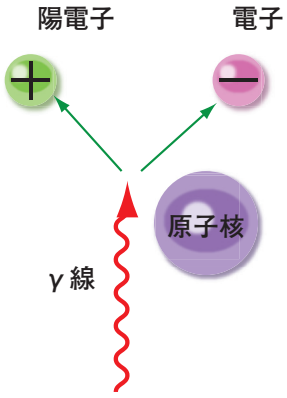


これで殻はすべて閉じられました。

ナトリウムでは、3s 状態に一つとなります。

このように、電子配置は様々ですが、これらはただ単なるルールとして出てきたものでなく、すべて量子力学と電子のスピン、そして排他原理によって導かれることであるのです。化学も一見複雑なんですが、サイエンスのすべての現象には理由があるということを理解しておきましょう。

相対性理論と量子力学の融合から反粒子へ



相対論的量子力学が反粒子を予言

相対性理論と量子力学とは２０世紀の大きな科学革命でした。それでは、相対性理論と量子力学の融合は可能でしょうか？この問題はディラックによって解かれました。ディラックの理論では電子がスピンという自由度を自然に持ち、電子の磁気による影響の強さは実験とほぼ等しくなることが示されたのです。この値はそれまでの量子力学での計算では外部から与えなくてはならなかったのですがこの値が相対性理論との融合により自然に出てくるのです。

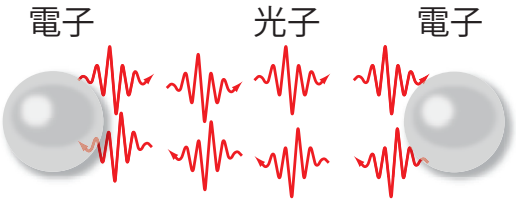
またディラックの理論では、すべての物質には電荷が反対の**反粒子**があることが示されます。つまり、電子には**陽電子**があり、また陽子には**反陽子**などの存在があるのです。この結果は実験により観測されています。実際強いガンマ線がにより、電子と陽電子のペアが作られることが確認できるのです。

量子電磁気学とは？

電子などの古典的な力学はミクロには量子力学によって置き換わられました。それでは、電磁気学はミクロに見るとどうなるのでしょうか？電磁気学と量子論の融合は、朝永、シュウィンガー、ファインマンによってなされました。この電磁気学と量子論の融合された理論を**量子電磁気学**と言います。量子論によると、電場や磁場は量子になるので、電荷を持った粒子の間に光子が飛び交うことにより電場や磁場による力が生まれます。あたかも二人の人がキャッチボールをしているようなものです。ボールを思いっきり投げると反作用で反発し、受け取った方も反発します。

電磁気の力はどのように生まれる？

古典的な解釈では、電気の力は電場によって生まれます。量子電磁気学では、この電場も量子化され、光子によって置き換えられます。それでは粒子のやりとりによる力の発生をどう考えればいいのでしょうか？たとえば、二人でバスケットボールを投げ合ってみます。ボールを投げると反作用で後ろに力を受けますね。またボールを受け取った方もあいてと逆の方向に力を受けます。こにように、ボールのやりとりでお互いに反発力になります。



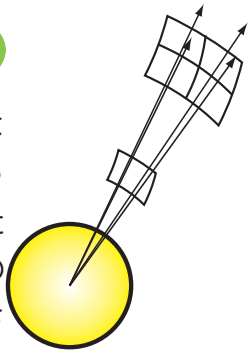
量子論的には光子の交換によって電磁気的相互作用が生まれる

二つの電子があるとその間に多数の光子が飛び交います。これにより反発力が生まれます。

電子は光子を放出してしまうとその分のエネルギーを失うはずです。これは一見おかしいですね。どうしてでしょうか？エネルギーと時間には不確定性があることを思い出しましょう。短時間でならエネルギーは保存していなくてもよいのです。それでも絶えず放出や吸収を繰り返していますので長い目で見ればエネルギーは変わらず保存しています。

このように、力、相互作用は粒子を媒介として行われるというのが、場の量子論の基本的な考え方です。

クーロンの法則とは？



クーロンの法則は光の放射の法則と同じ

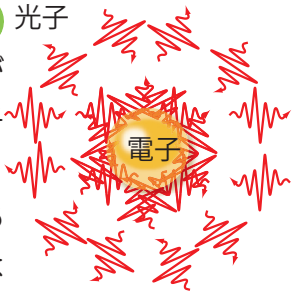
それでは、このような光子のやりとりで生まれる力の大きさはどのようなものになるのでしょうか？光子は波としての性質があるため、まっすぐ進むわけではありません。電子は単体でも光を放出したり吸収したりすることを繰り返しています。これが電場です。この光の密度はどのようなものになるのでしょうか？これは、ちょうど電球からの光の強さと同じですね。受け取る光の量は距離の二乗に反比例しました。よって、電場の大きさは距離の二乗に反比例し、その位置に他の電子がいると、そこには距離の二乗に反比例した数の電子が衝突し力を与えるわけです。また、電子が２つ同じ位置にあれば、これから２倍の光子が放出されますので、電場は電荷に比例しますね。

このようにクーロンの法則は、光子の放出によって説明できるわけです。

一方、光放出は何億という数の光子が飛び出します。このため、単位面積あたりの光の量はやはり距離の二乗に反比例します。

３章で学んだ、逆二乗の法則と光の強さの類似は一見何の関係もなさそうでしたね。しかし、このように量子論の考え方を通じて両者は同じ土俵で説明できるのです。

繰り込み理論とは？



観測される電子の質量は電場を作る光子のエネルギーも含む

古典電磁気学では、電荷を持った粒子の作る電場によって自分が力を受けることは暗黙の了解事として排除されます。しかし、量子論では、電場は粒子によって作られた光子によって作られますので、自分から放出された光子にはどこから出たかという名前が書いたありません。そのため放出した光がもう一度自分に返ってくることは排除されません。曲がってもよいというのは波の考え方であることを思い出しましょう。この自分に返ってくる光はエネルギーを持っています。しかも自分近くですぐに戻ってくる光の強度は大きく、無限に大きなエネルギーとなってしまいます。そして、エネルギーと質量の等価性により電子の質量は無限に重くなってしまうのです。

この困難を救ったのが繰り込みの考え方です。電子はかならずその周りに電場を伴っていますね。しかし、記述のときにはまず電場を伴わない電子を考えています。そこでまず電場のない仮想的な観測されない裸の質量を無限に小さくし、観測される電場を伴ったときの電子の質量を有限の値にするのです。このような取り扱いをする理論を**繰り込み理論**と言います。この繰り込み理論の一つの成果として、水素原子のスペクトルがあります。ディラックの理論によって予言された結果は、当初実験を再現していると思われていましたが、その後の精密な実験で食い違いを見せました。量子電磁気学での計算はこの食い違いを説明するのです。繰り込み理論は、一見かなり恣意的に見えますが、このようにして計算された電子の磁気の強さは１０億分の１の精度で実験と一致するのです。これほどまで実験に会う理論は他にないと言ってもよいでしょう。もちろん、この電場のない状態での電子の質量は本当に無限小なのか、有限なのかは、これが物理的に観測できる質量ではないのでこの理論ではよく解りません。

ポール　ディラック (1902-1984)

ディラックは、イギリスの物理学者です。子供のころ厳格な家庭に育ち、過程では教育のためフランス語しかしゃべるのを許されませんでした。その結果、家ではあまりしゃべらなくなり無口になりました。ディラックは、量子力学の基本的枠組みを作った理論物理学者の一人であり、1928 年に電子などを記述する相対論的量子力学を作りました。

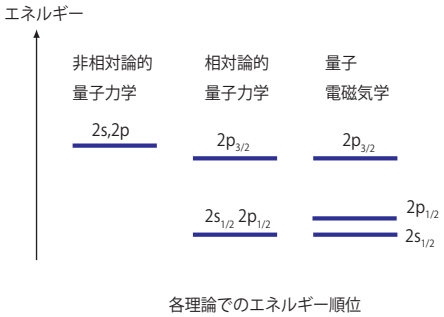
相対論的量子力学は、量子力学を相対性理論と整合性のあるものにするだけであるので、非常に高速な電子のときにだけ変更を受ける理論になると予想できます。ディラックは数学的美しさを指針にして方程式を立てました。その結果は、電子の観測される磁気の強さをほぼ正しく再現していました。しかし、一つだけ大きな欠点がありました。そえは電子だけでなく、正の電荷で同じ質量の粒子が必要になったのです。ディラックは当初それは陽子であると言っていましたがが、その後その質量は電子と同じでないことを指摘されその考えを泣く泣く取りやめました。この正の電荷を持つ粒子の存在は、ディラックの理論の最大の欠点とされその解決法はないと思われていました。ディラック自身も信じていなかったようです。しかし 1932 年にこの正の電荷を持つ電子、陽電子が発見されると、これはディラックの理論の最大の予言であると言われるようになったのです。この知らせを聞いた後にディラックは「方程式は私より賢かった」と言ったようです。

1933 年にこの陽電子の予言によりノーベル賞受賞します。科学の予言や発見は、勝てば官軍といったところがありますね。

朝永振一郎 (1906-1979)

朝永振一郎は量子電磁気学の創始者の一人です。

父親は西洋哲学者であり、京都帝国大学を卒業しました。学生や研究生当時は、湯川秀樹と同室であったこともあり、湯川秀樹が歩き回りながら考えるので気が散って朝永が居室をでることもたびたびであったと言います。湯川秀樹とも、よい文通相手で京都大学を離れてからも物理の研究結果を手紙に書いたりしています。最近発見された湯川秀樹宛の書簡のなかで、核力によるポテンシャル、通称湯川ポテンシャルは実は、朝永真一郎が先に研究していたものであることが明らかになっています。



各理論でのエネルギー順位

水素原子のスペクトルはおおよそディラックの理論と一致していましたが、その後の精密な実験で食い違いが見られました。これをラムシフトと言います。これは、電子や陽子の周りの電場の量子化の効果と思われました。1947 年に朝永は、量子電磁気学に基づき繰り込み理論によりこのラムシフトを計算し実験との一致を見ました。最も正確な実験が出たのは朝永の計算の後ですから、実験の予言とも言えるものでした。これにより、1965 年に、ジュリアンシュウィンガーとリチャードファインマンと共にノーベル賞を受賞しました。

キーワード

ドブロイ波長、電子顕微鏡、量子力学、ハイゼンベルグの不確定性関係、シェルモデル、周期表、パウリの排他原理、スピン、反粒子、陽電子、反陽子、量子電磁気学、繰り込み理論、