

原子物理学

ボーアの理論

ラザフォードらによる1909年のアルファ線散乱実験から1911年には原子核を中心とする原子モデルが確立していった。ドブロイ波の提唱(1924)に先立ち1913年にはボーアによって水素原子のスペクトルを説明することのできる原子スペクトル理論が誕生した。これはある面で過渡的な理論と言えるものだが、原子の重要な性質を簡単に説明できる点で驚異的なものと考えることができる。まず単純化された仮定として、質量 m の電子の軌道は半径 r の円軌道であるとする。軌道の長さは波長の整数倍とする。これをボーアの量子条件と呼ぶ。電子の速度を v とすると、波の波長 λ は $mv = h/\lambda$ となる。古典力学では全エネルギー E と運動エネルギーとポテンシャルエネルギーのあいだには以下の関係が成り立つ。

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

ここでエネルギーを決定する変数は電子の速度 v と電子の軌道半径 r であると言えるが遠心力釣り合いの式と、量子条件でこの二つの変数が決まってしまう。つまり次の式が成り立つ。

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r}$$

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

2番目の式は $rmv = L = n\hbar$ とかけて、角運動量 L が \hbar の整数倍となることがわかる。この式を使って r を一番目の式に代入して、

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{mv}{n\hbar} = mv^2$$

この式は微細構造定数 $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}$ をつかうと $\alpha c/n = v$ と書ける。エネルギーを表す式は遠心力釣り合いの式と組み合わせると $E = -\frac{1}{2}mv^2$ と書けるので

$$E = -\frac{1}{2}mv^2 = -\frac{mc^2\alpha^2}{2}$$

また量子条件と速度の式から $n = 1$ の原子の最小半径 r_0 は

$$r_0 = \frac{\hbar c}{mc^2\alpha}$$

となる。

周期表の説明

原子番号 Z の原子は中心に Ze の電荷をもつ。電子の軌道は不思議なことに主量子数 n に対し、0 から $n-1$ の角運動量 l をもつ軌道があるとし、各角運動量に対し $-l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$ の $2l+1$ 個の軌道をもつとすると、周期表の説明ができることになる。この軌道には電子スピンによる二つずつの軌道がさらに加えられるべきことがナトリウムの線スペクトルの観察によって明らかになった。なぜこのような軌道ができるかは、ボーア理論では説明できない。この説明が簡潔にできるのはシュレディンガーの波動方程式を使うやり方である。

電子軌道は内側のエネルギーの低い軌道から埋まっていく。同じ軌道にはいることはできない。また最後の外側の電子にとって原子核に引き付けられる力は水素原子と同じになり、ボーア半径と軌道は同じになる。結局すべての原子はボーア半径とほぼ同じ半径をもつことになる。