

ボーアの量子仮説

量子物理学の世界を身近な事象で理解するために、古典物理学的な見方に少しの仮説を混ぜながら説明したのが、ボーアの原子理論(Bohr's theory of atomic structure)である。

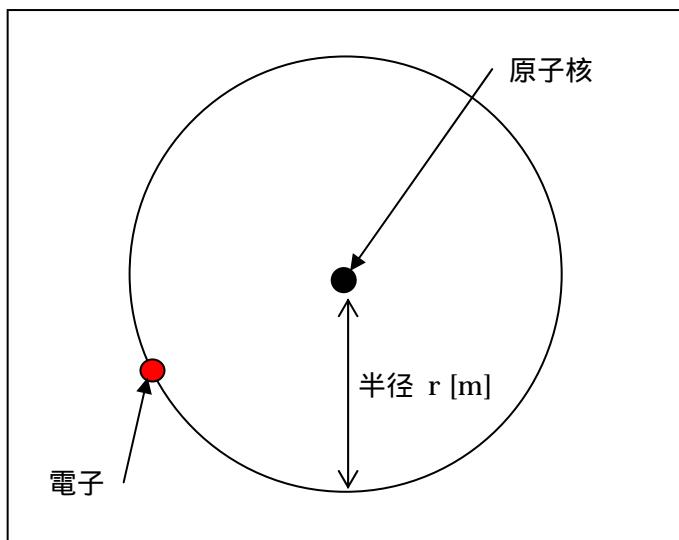


図 1 ボーアの原子模型

(1) 電子が存在できる円に係わる条件

$$mr\nu = n\hbar = n \frac{h}{2\pi} \quad (1)$$

$mr\nu$: 電子の角運動量 (m : 電子の質量、 r : 半径、 v : 電子の速度)

h : プランク定数

n : 1 以上の整数

A . 式(1)を用いて、電子が回転できる半径を求める。

電子の回転による遠心力と、負の電荷をもつ電子(電荷量 e)と正の電荷をもつ原子核(電荷量 e)との間にはたらく吸引力(ケーロン力)がつりあって、安定する。

遠心力 ケーロン力

$$m \frac{v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon} \cdot \frac{q^2}{r^2} \quad (2)$$

: 誘電率

q : 電子の電荷量

式(1)を2乗すると

$$mr^3 \left(m \frac{v^2}{r} \right) = n^2 \hbar^2 \quad (3)$$

となり、この括弧の中に式(2)を代入すると、

$$r_n = \frac{4\hbar^2 \pi \epsilon}{mq^2} n^2 \quad (4)$$

となる。 n は 1 以上の整数であるから、電子の回転できる半径 r_n は、飛び飛びになる。

また、誘電率($\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_s$)、有効質量(m^*)の物質(半導体)中では、

$$r_n = \frac{4\hbar\pi\epsilon_0}{m_0 q^2} \cdot \frac{\epsilon_s}{(m^*/m_0)} \cdot n^2$$

$$r_n = 5.29 \times 10^{-2} \frac{\epsilon_s}{(m^*/m_0)} \cdot n^2 \quad \text{nm}$$

B . 電子のエネルギーを計算する。

原子核から離れて、自由になろうとするエネルギーを正とする。
電子の運動エネルギーは原子核から離れようとするエネルギーであるから正である。
一方、原子核と電子との引き合うエネルギー（クーロンポテンシャル）は負である。
したがって、全エネルギーは

運動エネルギー クーロンポテンシャル

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q^2}{r} \quad (5)$$

と表される。式(5)に式(2)を代入すると、

$$E = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q^2}{2r} \quad (6)$$

となり、エネルギーが負であることより、電子は原子核から離れることができない。
r に式(4)を代入すると、

$$E_n = -\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{q^4 m}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (7)$$

と求められる。n は 1 以上の整数であるから、電子のもちうるエネルギーは飛び飛びになる。

真空中では ($\epsilon_0 = \epsilon_0$)

$$E_n = -13.6 \frac{1}{n^2} \text{ eV} \quad (8)$$

である。

また、誘電率 ($\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_s$)、有効質量 (m^*) の物質（半導体）中では、

$$E_n = -13.6 \frac{(m^*/m_0)}{\epsilon_s^2} \cdot \frac{1}{n^2} \text{ eV} \quad (9)$$

となる。ここで、 ϵ_s は比誘電率、 m_0 は真空中の電子の質量である。

(2) 原子から放出されるエネルギー

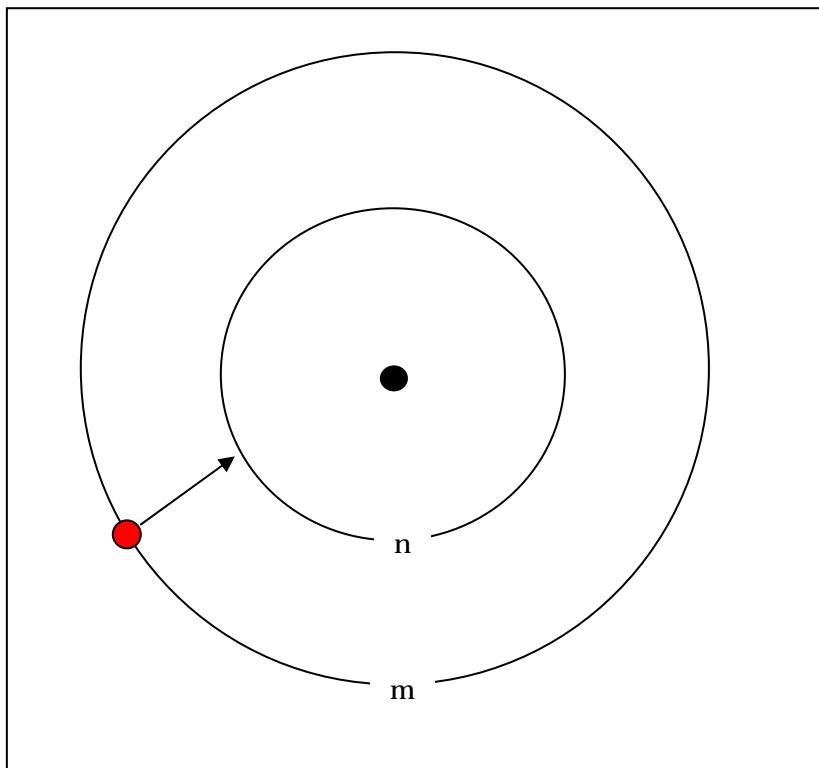


図2 エネルギーの高い軌道にいる電子が、低い軌道へ移動した場合

高いエネルギーの電子が低いエネルギーに移るとき、余ったエネルギーを光として放出する。

放出された光のエネルギー ($h\nu$) は、電子が飛び飛びのエネルギーしか持ち得ないことから、

$$E_m - E_n = h\nu \quad (10)$$

と飛び飛びのエネルギーを持つ。ここで、 $m > n$ (m と n は 1 以上の整数) である。