

## 原子の電子構造

物理の探求とは物理現象の中に規則性を見つけその規則性から法則を見つけ出すことにある。各元素のイオン化エネルギーの一覧を分類析し規則性を見つけ原子の電子構造を明らかにする。この電子構造はボーアの理論を拡張したものであり、量子条件を加える以外は古典論を受け継いでいる。明らかにされた原子の電子構造から、物質の透明と屈折率お起源、メンデレエフの周期律の発生、絶対零度の電子構造と物質の熱膨張、磁性元素の磁気発生の理由等新しい発見があった。左枠のイオン化エネルギー一覧をクリック

表 .1 ではイオン化エネルギーの単位は e V で、横軸は核に近いほうから第 1 電子、第 2 電子、第 3 電子、・・・とし、縦軸は原子番号にする。各電子のエネルギー値は原子番号の増加につれて大きくなっている。イオン化エネルギーであるので原子から電子を一つ づつ取り除くエネルギー値を示している。

第 1 電子について原子番号が 1 つ増す毎のエネルギー差を順次求め、さらにこの差についてまた原子番号が増す毎の差を求めると一定の同じ値となっている。第 2 電子、第 3 電子、・・・についても同様に処理し同じ結果を得ている。よってそれぞれのエネルギー値は数学的に等差数列の和で表せられる。

等差数列の等差 d について、各第 m 電子は幾つかの等差を同じくするグループが形成されていることが見て取れ、表.1 では幾つかの等差を同じくするグループが形成されている、且つ各グループの構成電子数は中心核に近いほうから第 1 グループは 2 個、第 2 グループは 8 個、第 3 グループは 18 個(前半は 8 個、後半 10 個は変則)、第 4 グループ 18 個、第 5 グループ 32 個は変則等差、のグループになっている。メンデレエフの周期律は 2、8、8、18、18、32、～であり第 4 グループまでは内部の電子も含めメンデレエフの周期律に一致する周期性が現れている。

また各グループの等差数列の等差値が微細構造定数 ( $\alpha$ ) と関連した規則性を示し、第 1 グループの等差値  $27.1(27.2) = m_e c^2 \alpha^2$ 、第 2 グループの等差値  $6.8 = 27.1/4 = m_e c^2 \alpha^2/4$ 、第 3 グループの等差値  $3.4 = 27.1/8 = m_e c^2 \alpha^2/8$ 、第 4 グループの等差値は変則であるが基本的に  $1.7 = 27.1/16 = m_e c^2 \alpha^2/16$ 、以降は変則な等差値となっている。イオン化エネルギーの等差の規則性は第 3 グループ第 18 電子まで乱れなく保たれ、

$$d = 27.1/2^j \quad (j \text{ は正数}) \cdots (1)$$

で表わされる。第 19 電子以降は変則な等差数列の組み合わせとなっている。

以下では主に等差の規則性が保たれている第 3 グループ,第 18 電子までと一部変則な 28 電子の電子について分析・検討する。

等差数列の数学の公式は、イオン化エネルギー E, 初期値 a、等差 d、項番 n、として

$$E = an + n(n-1)d/2 \quad \cdots (2)$$

と表せられる

初期値, a は n = 1 の時の値であり、(2)式は E = an = a、となる。

式(2)を書き換え

$$E = (d/2)n^2 - (d/2)n + an$$

上式を  $n$  で 2 回微分し、 $(E/dt)/dt = d$  等差,  $d$  が得られる。

等差が初項の 2 倍( $d=2a$ )の時、(2)式は簡単になり

$$an + n(n-1)2a/2 = an + an^2 - an = an^2 \dots (3)$$

第 1 電子がこれに当てはまり、ボーア理論の多電荷の原子核に 1 つの電子だけが結合した水素様原子のエネルギー値と一致する。

ボーア理論を円軌道に限定し以下に記述する。

先ず核と電子のクーロン力と遠心力が等しく

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2} \dots (4),$$

( $r$ : 軌道半径、 $m$ : 電子質量、 $v$ : 速度、 $e$ : 電荷、 $Z$ : 核電荷)

ここで  $v = r\omega = 2\pi r\nu$  を考慮して ( $\omega$ : 角速度、 $\nu$ : 角振動数)

$$r^3\nu^2 = \frac{(Ze)e}{4\pi^2 m} \dots (5)$$

ボーアの量子化条件は、角運動量 ( $p$ ) の  $2\pi$  倍がプランク定数の整数倍であり

$$p = mr^2\omega = 2\pi mr^2\nu = jh/(2\pi) \dots (6)$$

(6) 式を変形して

$$r^2\nu = \frac{jh}{4\pi^2 m} \dots (7)$$

(5), (7) 式を組み合わせ、 $\nu$  を消去すると

$$r = \frac{j^2 h^2}{4\pi^2 m Z e^2} \dots (8)$$

一方ボーアの原子模型の電子の失ったエネルギーを  $E$  とすると

$$E = \frac{Ze^2}{2r} \dots (9)$$

と表される。以後エネルギー値については失ったエネルギー値として扱う。(9)式と(8)式

をあわせ、 $r$  を消去すると

$$E = \frac{Ze^2}{2r} = \frac{2\pi^2 m Z^2 e^4}{j^2 h^2} = \frac{1}{2} mc^2 \left(\frac{Z^2}{j^2}\right) \left(\frac{2\pi e^2}{ch}\right)^2 = \frac{1}{2} mc^2 \left(\frac{Z^2}{j^2}\right) \alpha^2 \dots (10)$$

ただし  $\alpha = \frac{2\pi e^2}{ch}$ : 微細構造定数

ここで  $\frac{1}{2} mc^2 \alpha^2 = 13.54[\text{eV}]$ 、は定数であり(9)式を書き換え

$$E = 13.54Z^2/j^2 \cdot \cdot \cdot (11)$$

となり、 $j=1$  の時(11)式は  $13.54=a$ 、 $n=Z$  として

$$E=an^2$$

となり、ボーア理論の(3)式と同じになる。

式(1)のイオン化エネルギーの  $n=1$  の時の値がボーアの理論の結果と一致することは、表(1)の第1電子のイオン化エネルギーが即ち多電荷原子核の水素様原子のエネルギー準位と同じことを示す。

しかしボーアの理論は水素原子のスペクトルは説明できるが他の元素については説明できなかった。何故なら水素原子と電子の相互作用は2体問題であり、他の元素については多体問題となるため数理的に解くことは現在まで出来ていない。それ故ボーアの理論が水素原子以外に適用できないとされてきた理由である。

第2電子以降の電子のエネルギー値は核電荷と複数の電子の多体問題となり現在のところ数理的に解くことは不可能と考えられているが、

しかし表(1)を観察すると、第 $m$ 電子の場合

$$n = Z - m + 1 \quad (\text{ただし } n > 0)$$

の関係があり、 $(m-1)$  個の正核電荷は消えている。また電荷保存則により  $(m-1)$  個の内部電子の負電荷も消えている。よって  $(m-1)$  個の内部電子は電氣的に存在しないことになる。それ故2体問題に帰することができボーアの理論が適用出来る。

しかしクーロン力を与える(4)式の電子に働く電荷量、 $Z$  は不明である。 $(m-1)$  個の核電荷と電子電荷が消えているので、エネルギーを与える(4)式は  $n$  について  $n^2$  の形になる筈であるが  $n$  について1次の項が含まれていて電界事情は多少ことなる。

$m$  番目の電子に実際に作用する電荷の量つまり(4)式の  $Z$  に対応する有効電荷になります。これは、実験式(2)、 $\{an + n(n-1)d/2\}$  に含まれることになる。この場合、クーロンの法則のエネルギー公式を考慮すると、有効電荷のエネルギーは(有効電荷)<sup>2</sup> の形式である必要があり、 $n$  の1次項を消す必要があります。ここで2番目以降の電子のエネルギー値を  $E_0$  とすると、(2)式

$$E_0 = an + n(n-1)d/2$$

から1次項を外す変形をすれば

$$E_0 = \{n + (a/d - 0.5)\}^2 d/2 - (a/d - 0.5)^2 d/2 \cdot \cdot \cdot (12)$$

上式の2番目の項、 $-(a/d - 0.5)^2 d/2$  は、 $n$  に依存しない一定量の負のエネルギーを示す。

それ故(12)式は内側電子の残余の負の電氣量(以後残余電氣量と呼ぶ)があることを示している。この残余の電界エネルギーの存在が第2電子以降の元素に出て(2)式の形にしている。

(12)式の最初の項の括弧内、 $n + (a/d - 0.5)$  は(4)式の  $Z$  に相当する第 $m$ 電子に作用する

核電荷と中和残りの内側電子電荷とで作られる有効電荷と考えられる。この有効電荷値を  $Z$  とすれば

$$Z = \{n + (a/d - 0.5)\} \dots (13)$$

として表され、この有効電荷をボーア理論の(4)式の  $Z$  として解けば、エネルギー解は(11)式から得られ

$$E = 13.54Z^2/j^2 = 13.54\{n + (a/d - 0.5)\}^2/j^2 \dots (14)$$

上式は(12)式右辺の第1項,  $\{n + (a/d - 0.5)\}^2 d/2$  に相当することになる。よって

$$E = 13.54\{n + (a/d - 0.5)\}^2/j^2 = \{n + (a/d - 0.5)\}^2 d/2 \dots (15)$$

$$\therefore 13.54/j^2 = d/2$$

$$\therefore j^2 = 27.1/d \dots (16)$$

上式はボーア理論の量子条件と(2)式の等差を結ぶ関係式である。しかし(16)式は(1)式,  $d = 27.1/2j^2$  と矛盾する。この場合量子条件として実験値の(1)式  $d = 27.1/2j^2$  を採用しなければならない。よって(11)式は

$$E = 13.54Z^2/2j^2 \dots (11')$$

と書き改められる。これは(1)式と一致する。

この(1)式の条件で(12)式が満たされ、

$$E = \{n + (a/d - 0.5)\}^2 d/2 = E_0 + (a/d - 0.5)^2 d/2$$

$$\therefore E_0 = \{n + (a/d - 0.5)\}^2 d/2 - (a/d - 0.5)^2 d/2$$

$$E_0 = an + n(n-1)d/2$$

結局、表(1)の第2電子以降の電子のエネルギー値はボーアの理論から導かれたことになる。

第2電子の場合、 $d = 27.1$  よって(1)式から  $j = 0$  よって(11)式は

$$E = 13.54Z^2/2^0 = 13.54\{n + (a/d - 0.5)\}^2 = \{n + (a/d - 0.5)\}^2 d/2 \quad (\because Z = a/d - 0.5)$$

$$\therefore \{n + (a/d - 0.5)\}^2 d/2 = E_0 + (a/d - 0.5)^2 d/2$$

$$\therefore E_0 = \{n + (a/d - 0.5)\}^2 d/2 - (a/d - 0.5)^2 d/2$$

$$E_0 = an + n(n-1)d/2$$

第3電子～第10電子の場合、表(1)より  $d = 6.8$  よって(1)式より  $j = 2$ 。

$$E = 13.54Z^2/2^2 = 13.54Z^2/4 = 3.4\{n + (a/d - 0.5)\}^2 = \{n + (a/d - 0.5)\}^2 d/2$$

$$\therefore \{n + (a/d - 0.5)\}^2 d/2 = E_0 + (a/d - 0.5)^2 d/2$$

$$\therefore E_0 = \{n + (a/d - 0.5)\}^2 d/2 - (a/d - 0.5)^2 d/2$$

$$E_0 = an + n(n-1)d/2$$

第11電子～第18電子の場合、表(1)より  $d = 3.4$  よって(1)式より  $j = 3$ 。

$$E = 13.54Z^2/2^3 = 13.54Z^2/8 = 1.7\{n + (a/d - 0.5)\}^2 = \{n + (a/d - 0.5)\}^2 d/2$$

$$\therefore \{n + (a/d - 0.5)\}^2 d/2 = E_o + (a/d - 0.5)^2 d/2$$

$$\therefore E_o = \{n + (a/d - 0.5)\}^2 d/2 - (a/d - 0.5)^2 d/2$$

$$E_o = an + n(n - 1)d/2$$

以上、第 1 電子から第 18 電子までの電子のイオン化エネルギーの値,  $E = an + n(n - 1)d/2$ , が 2 体問題としてボーアの理論より導かれ、最外電子の内側の全ての電子は電氣的に中性となり他の電子や電磁波と相互作用しなくなり、**原子全体としては中和空間と最外電子と残余電気量のみが電氣的に存在することになる。**

原子の大きさはエネルギーと半径の関係(9)式から得られ、最外電子の半径はエネルギー値から決定される。

$$(9)式 E = \frac{e^2}{2r} を変形し \quad r = \frac{e^2}{2E} \cdot \cdot \cdot (17)$$

(17)式より各元素の最外電子の第 1 イオン化エネルギーから半径を計算し**表.2** に示す。更に**表.2** には各元素の最外電子( $n=1$  の場合)について(12)式の有効電荷,  $\{1 + (a/d - 0.5)\}$ 、右辺第 1 項の有効電荷によるエネルギー,  $\{1 + (a/d - 0.5)\}^2 d/2$ 、第 2 項の中和残のエネルギー,  $(a/d - 0.5)^2 d/2$ 、を計算して示してある。ここでの  $d$  は列の最初の値を採用。

**表.2** から等差値を同じくするグループ内で、中和残のエネルギーは原子番号が増すにつれ大きくなり、さらに増し分も増えている。中和残のエネルギーはイオン化エネルギーから見れば負の値であり、第 1 イオン化エネルギーより大きくなれば残りの核の正電荷エネルギーを超え原子全体が負のイオンになりこれ以上他の電子は入れなくなる、グループ最後の元素がこの状態であり単原子分子の不活性ガス (He, Ar, Kr, Xe) ができる理由となる。次のグループの最初の元素の中和残エネルギーは急激に小さくなり、これをグループ毎に繰り返してメンデレエフの周期律が成立する。

**表.2** の最外電子の第 1 イオン化エネルギーの半径を元素ごとに**図.1** のグラフに示す。

原子容 (固体元素 1 モルあたりの体積) は原子の大きさを示すと考えられ、両者を比較するとイオン化エネルギーの半径のグラフと原子容のグラフ**図.2** とは大きく異なっている。特に各グループの前半、後半と分けると前半はおおよそ一致するが後半はイオン化エネルギーの半径は原子番号が増えるにつれて減少するが原子容は増大している。従って**イオン化エネルギーの電子半径は原子の大きさを示していないことになる。**

しかし、イオン化エネルギーは温度に依存せず、又固体物質の熱膨張は最外電子の熱による励起を受け軌道半径が大きくなることを考慮すれば、最外電子のイオン化エネルギーの値の半径は絶対零度の値になる。

励起エネルギーを示す(11')式,  $E = 13.54Z^2/2^j$  は(12)式右辺第 1 項に相当し、第 1 励起エネルギーを,  $E_1$  とすれば、励起は量子条件  $j$  を  $j+1$  に上げ(12)式の右辺第 1 項を  $1/2$  にし(18)式で表わされる。

$$E_1 = \{[n+(a/d-0.5)]^2 d/2\} / 2 - (a/d - 0.5)^2 d/2 \dots (18)$$

表.2 には式 (18) で計算した各元素の第 1 励起エネルギーを示す。

表.2 の中に第 1 励起エネルギーが元素により負の値を示し、第 1 励起エネルギーが正の値の場合核の正電荷に捕らわれた軌道上に最外電子が存在し、負の値の場合は励起された電子軌道にも中和残留電界があり、核の拘束を外れ中和残の電界に拘束された負のエネルギー状態の中でも励起軌道が存在することになる。

等差値を同じくするグループ内で第 1 励起エネルギー値が正と負の値がグループの中間の原子番号の元素を境に分かれて、後半の元素は励起エネルギーが負の値を示す。軌道半径を決定する(17)式は負のエネルギー値に対しては成立しないので負のエネルギー値に関しては (17) 式に替わるものが必要であるがここでは議論しない。

第 1 励起状態のエネルギー値が正の元素と負の元素では電氣的に逆な状況になり互いに引き合い易くなる。これは化学上の親和力に相当する。

リチウムの光電効果の仕事関数はイオン化エネルギーの約半分であり、第 1 励起エネルギーに近い仕事関数を持つ元素がある。仕事関数と励起エネルギーを以下に例示する。Pd を除いてよく一致する。

Li 2.4(2.4)、Na 2.1(0.9)、K 1.9(2.0)、Cs 1.0(0.7)、Pd -2.3(5.0)、

ただし ( ) 内が仕事関数、出典は原子物理学 (EV シュポルスキー著)

第 1 励起エネルギーが負の値を示し且つ仕事関数を持つ元素もあるが、仕事関数はこの励起状態から原子外に電子を取り出すエネルギーであるので矛盾はない。また外部からの電磁波は最外電子のみに作用しそのエネルギーを与える事を示している。

仕事関数のエネルギーを超えて熱エネルギーを電子が受け取った場合熱電子が発生する。空いた位置には再び電子が落ち込み、任意のエネルギー値の電磁波 (輻射) を放出する。

最外電子内の中和空間は水素吸収元素のこの空間に水素原子を取り込める大きさである。またこの空間を電磁波は電子の電荷が消えているため自由に直進でき最外の電子が電磁波の影響が出ない場合は透明になる。透明な物質は存在し屈折率が物質の陽子密度の増大に比例して屈折率が大きくなる。中和された電荷量の密度の増加は物質の陽子密度の増大と同じになる。(参照:媒質中の光速)、この中和空間が電磁気学的に変質していることを示す。

18 番目の元素までの内部の (n-1) 個の電子は中和されるが、第 4 グループの第 19 電子から第 28 電子の変則等差数列になる理由として、(n-2)個の内部電子は中和され、最外電子の熱運動を担う電子が 1 つ増え 2 つになるとすれば、元素と温度によってはその内 1 つは安定軌道を周回し回転電流となって磁気を発生させ、第 4 グループに、Fe, Co, Ni,等の磁性金属が存在する理由になる。一定温度以上になると回転軌道から外れ熱運動に変わって磁性が消える。この温度がキュリー温度になる。キュリー温度以下である強度以上の磁界を与えると電子は熱運動から回転電流に変化し熱エネルギーを放出し原子は磁気を帯び得る。逆に磁気を失う時には熱エネルギーを吸収する、これは磁気加熱・冷却効果を可能にする。

量子力学では磁気のは元は電子の自転から出てくるとしているが、量子力学以前には物質磁気と電子の自転を関係を示す現象は一切なく、またその量子力学の根拠は不明である。

以上の全て結果は量子力学の原子の電子構造とは全く異なり量子力学の信憑性は大きく崩れた。

### **考察**

イオン化エネルギーの一覧から垣間見るようにして元素の電子構造を解明したが、至って部分的であり更に検討の余地が多く残されている。第 19 電子以降の電子構造、原子の大きさに結びつく原子半径より関連した物質の比重、一般の元素のスペクトルの解明、熱エネルギーとの関連、etc。

量子力学はその不確定性原理により実証不可能を暗示し放棄して未だに実証出来ない。

[戻る](#)