

# 原子と分子

## 1. 原子

なにもない空間を平坦な膜と考え、その上に重たい物体（原子核）を乗せると膜がへこみ、周りの電子を引きつけるというイメージで電場を考えることを以前に示した。その考え方で原子を考えてみよう。

原子核が存在することにより周りの空間がへこむ。そのへこんだ空間を回っているのを電子と考える。電子は特定の軌道しか回れない。（これは水素原子の項で詳細）

電子が存在するところを電子殻とよんでいる。内側よりK殻、L殻、M殻...である。

その状態を図に表したのが右図である。

横方向が原子核からの距離をあらわし、縦方向がエネルギーの高さを表している。

K殻がエネルギーの最も低い状態である。

横線が電子軌道をあらわしており、この横線上にのみ電子は存在できる。

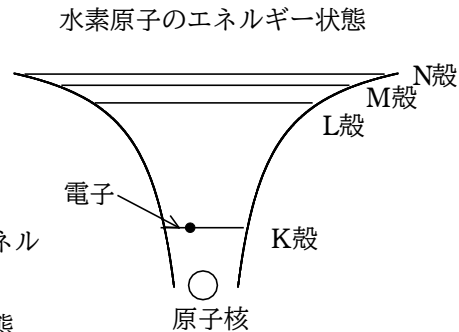
曲線が原子核の位置に対する電子の位置エネルギー状態を表している。

電子に限らず物体はエネルギーの低い状態

が最も安定であるので、電子は最もエネルギー

の低い状態であるK殻に存在する。この状態を

基底状態という。外部から光子などが進入しこの電子にエネルギーを与えた場合、電子が高い軌道に飛び移る。この状態を励起状態という。



### (2) 水素以外の原子

水素以外の原子は、複数の電子を持つために各電子殻に複数の電子が入ることになる。

そこで、各電子殻に入りうる電子数を検討してみよう。

ひとつの軌道を回ることのできる電子数はいくつであろうか。

電子どおしは共に負電荷であるので、反発をするのであるが、電子の自転を

考えた場合、必ずしもそうならない。

電子は負電荷を持った状態で自転

（スピンという）していると考えられるので、

一種の磁石となっている。そのため、互いに逆方向に自転している電子どおしはペアを作

ることができるのである。その結果、電子は2個づつペアになり化学結合に係ることにな

る。これが、化学でいうところの電子対である。よって、K殻には電子が2個入ることが

可能となる。

天体の周りを回っている衛星の軌道は円軌道だけでなく、楕円軌道もありうる。原子核



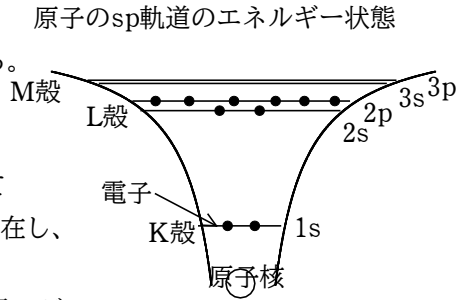
# 原子と分子

の周りを回っている電子の軌道も楕円軌道がありうるのである。電子殻は通常、円軌道・楕円軌道の複数の軌道が重なっているのである。

K殻は円軌道ひとつのみ存在する。この円軌道を1s軌道という。

L殻は円軌道だけでなく楕円軌道が存在している。この軌道をp軌道という。p軌道は3つ存在し、s軌道とあわせて4つの軌道があることになる。

各軌道に電子が2個ずつ入りうるので、L殻は電子が8つまで入ることになる。電子は、まずs軌道に入り、次にp軌道に入ることになる。L殻のs軌道（円軌道）を2s軌道といい、p軌道を2p軌道という。



原子番号10のネオンまでの各原子の電子配置は次のようになっている。

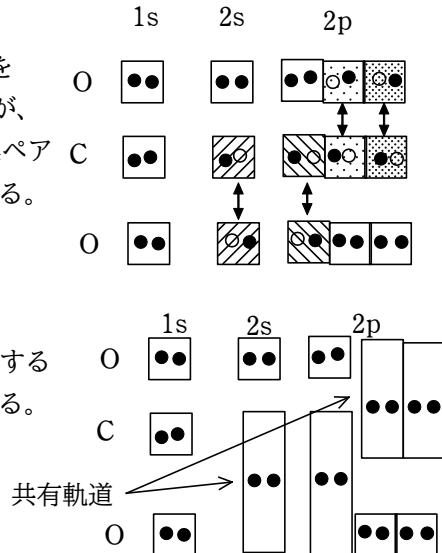
	1s	2s	2p		1s	2s	2p
H	●			C	●●	●●	● ●
He	●●			N	●●	●●	● ● ●
Li	●●	●		O	●●	●●	●● ●
Be	●●	●●		F	●●	●●	●● ●● ●
B	●●	●●	●	Ne	●●	●●	●● ●● ●●

上の図で1sはK殻のs軌道で、2sはL殻のs軌道を表す。2pはL殻のp軌道を表す。L殻ではs軌道のエネルギーがp軌道のエネルギーに比べて少し低いためs軌道に先に入り、順次p軌道に電子が入っていく。しかし、L殻のs軌道とp軌道はエネルギーの差がごくわずかしかないので、s軌道の電子がp軌道に紛れ込むことができる。

共有結合の例  $\text{CO}_2$

二酸化炭素の共有結合を例にとって電子の配置を考えてみよう。C原子の2s軌道は電子が二つあるが、1個が2p軌道に移動すれば、電子と空席のペアが4ペアできる。図において黒丸が電子、白丸が空席である。O原子のほうも同じように電子を移動させると、電子と空席のペアが2ペアずつできる。CとOの

互いの軌道を共有することにより共有結合が生じる。この場合はCとOが互いに2ペアずつ共有するので、二重結合の共有結合が生じていることになる。



# 原子と分子

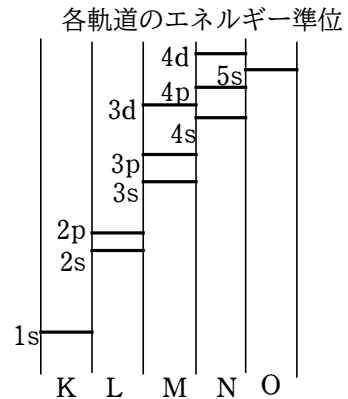
M殻は、さらに細長い楕円軌道が存在する。d軌道である。d軌道は軌道が5個ある。M殻はs軌道1、p軌道3、d軌道5の9軌道がある。各軌道において電子は2個ずつ入るので、M殻に電子は18個入ることになる。

N殻は、s,p,dの各軌道に加えさらに細長いf軌道が存在する。f軌道は7つある。N殻はs軌道1、p軌道3、d軌道5、f軌道7の合計16軌道が存在し、各軌道に電子が2個ずつあるために、電子は全部で32個まで入る。

s,p,d,f軌道はこの順番でエネルギーの高さが決まっており、s軌道が最も入りやすく、f軌道が最も入りにくい。K,L,M殻もこの順番で入りやすさが決まっており、一部に逆転が起こっている。各軌道を入りやすさの順番に並べ替えると、

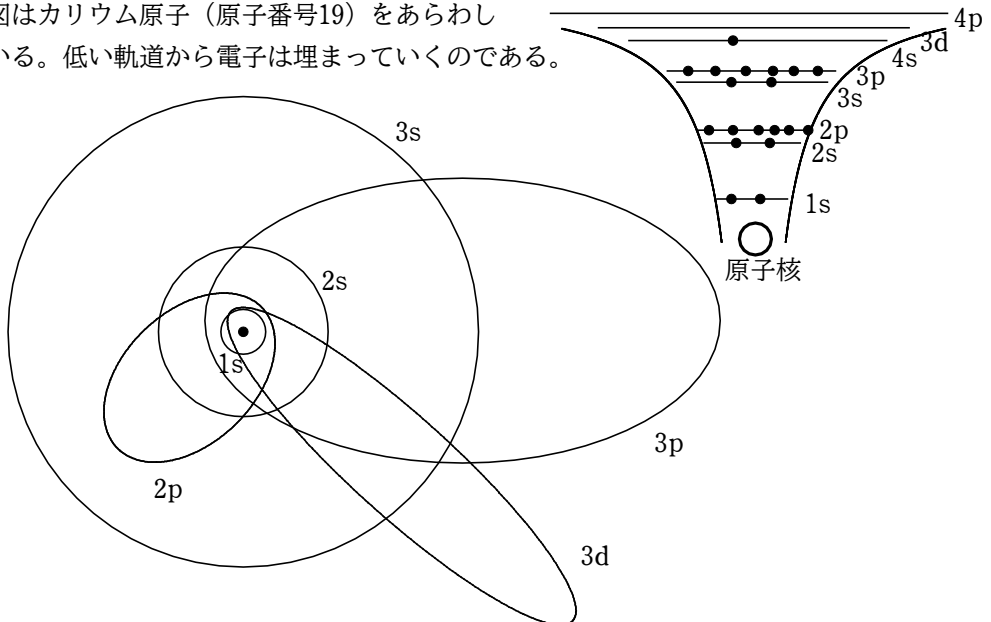
1s、2s、2p、3s、3p、4s、3d、4p、5s、4d、5p、6s、4f、5d、6p、.....

となっている。エネルギーの高さを図に表すと右のようになっている。M殻のd軌道(4d)よりもN殻のs軌道(5s)のほうがエネルギーが低く、M殻が満タンになる前にN殻に電子が入ることになる。



原子番号18番Arは3p軌道まですべての軌道に電子が埋まった状態である。この次のカリウムKは3d軌道に電子が入らずN殻の4s軌道に電子が1個入る。そのために、カリウムはアルカリ金属になる。次のカルシウムも4s軌道に電子が入り原子番号21番スカンジウムから3d軌道に電子が入ることになる。これ以降3d軌道が埋まることになる。これ以降の元素を遷移元素という。

この状態を原子モデルで書くと右のようになる。右図はカリウム原子(原子番号19)をあらわしている。低い軌道から電子は埋まっていくのである。



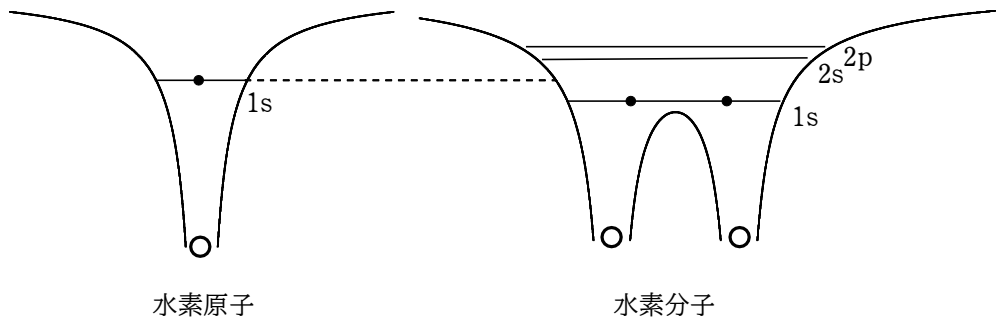
# 原子と分子

原子核の周りを回っている電子の軌道の形は上のようなイメージでよい。複雑になるので、p軌道、d軌道は一つずつしか示していない。p軌道、d軌道共に平均距離（半長径）はs軌道の半径と同じである。

## 2. 分子

分子になると、電子の軌道はどのようになるのであろうか。次に分子の周りの電子のエネルギー状態について考えてみよう。最も簡単な分子である水素分子では、二つの水素原子の軌道が重なり、下の図ようになる。

この図によると、二つの原子核によりエネルギーが重なる。水素分子の場合1s軌道が重なるために、電子は二つの原子核の周りを共通に回るようになる。これが共有結合である。

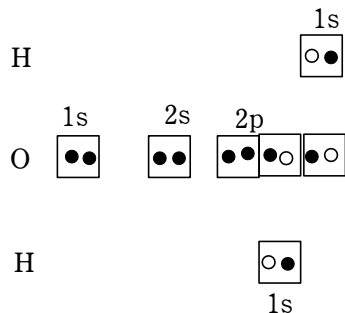


上の図を見て分かるように1s軌道のエネルギーは原子の状態よりも分子の状態になったほうが低い。よって水素は原子の状態で存在するよりも分子の状態になったほうが安定であるといえるのである。このときの電子のエネルギーの差が化学でいうところの結合エネルギーである。それぞれの状態をモデルで描いたのが下の図である。



### <水分子>

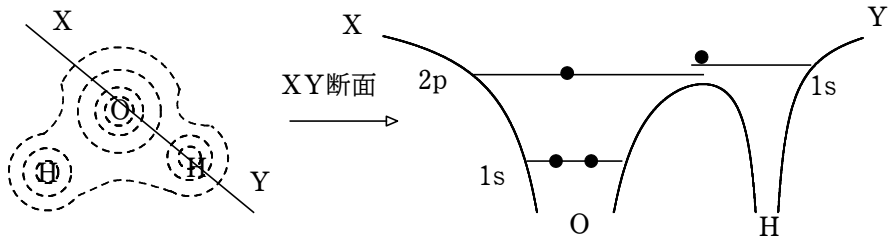
次に水分子を例にとって考えてみよう。水分子は $H_2O$ であり、原子が3つで構成されている。O原子とH原子の電子配置は下の図の様になっている。O原子は3つある2p軌道の二つの電子軌道が不対電子になっており、H原子の1s軌道の不対電子と共有結合を起こす。



次にこの状態をエネルギーの高さで考えてみよう。左下の図は $H_2O$ 分子の周りのエネ

# 原子と分子

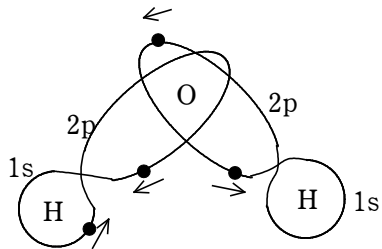
ルギーの高さを等高線で表したものであり、原子核周辺はエネルギーが低くなっている。この図におけるXY断面図が右下の図である。この図のO原子は1s軌道と3つある2p軌道のうちのひとつを描いており、そのほかの軌道は省略している。ひとつの2p軌道であるので電子は二つである。



これを見て分かるようにO原子の2p軌道とH原子の1s軌道が近い状態にあり、双方の軌道を電子は移動できる。そのためにこれも共有軌道となりうるのである。これをモデルで描くと下のようになる。

この図ではO原子の1s、2s軌道と2p軌道のひとつを省略している。

この場合Oの2p軌道の方がHの1s軌道より若干低い位置にあるので、電子はO原子の2p軌道の方に存在する確率が高くなる。

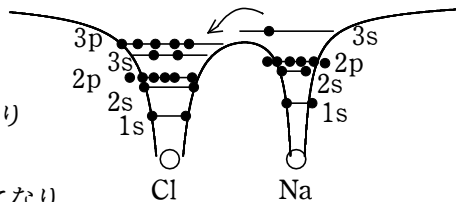


そのために水分子はOの方がマイナスになる極性を持つことになる。

## 3. イオン結合

次にイオン結合を考えてみよう

Na原子とCl原子が近づいた場合、Na原子の3s軌道よりCl原子の3p軌道のほうが低く、しかもその落差が大きいのである。この場合、Naの3s軌道にある電子はClの3p軌道に飛び移り飛び移った電子はNaに戻ることができない。



このためにCl原子は電子1個余分に持つことになり

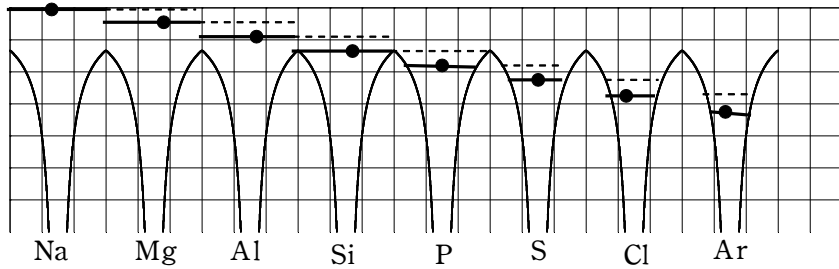
Cl<sup>-</sup>イオンとなる。また、Na原子は電子1個を失いNa<sup>+</sup>イオンになる。Na原子とCl原子は互いの静電気力で結合する。これをイオン結合という。

# 原子と分子

## 4. 第三周期の元素

各原子は原子核の陽子数が異なるために、軌道の高さ及びエネルギーの壁の高さが異なる。

下の図は第三周期の各原子の3s、3p軌道の高さと原子のエネルギーの壁の高さを相対的に示したものである。図の実線が3s軌道で破線が3p軌道であると考えてほしい。図ではエネルギーの壁を同じ高さとしてあるが、実際は原子番号が大きいほど低くなる。

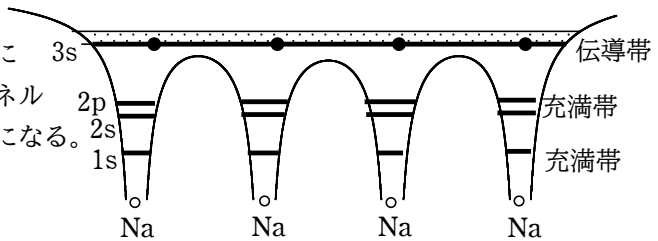


Al原子までは3s軌道の方が壁より高いために、3s軌道にある電子は原子の外に出られる。それに対して右側の原子はエネルギーの壁の方が高いので、電子は外に出られない。

## 5. 導体

金属ナトリウムは結晶となったとき、下の図のように1s、2s、2p軌道までは各原子の周辺の固定された領域内に収まっている。これに対して3s軌道は各原子の軌道が重なり共通軌道となる。

このとき、電子のエネルギー状態は電子の運動エネルギーによって変化するので、軌道のエネルギーがある範囲で幅を持つようになる。この軌道をエネルギーバンド(エネルギー帯)という。



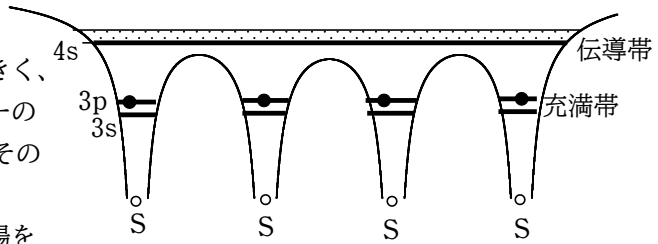
また、共通軌道になっていない

1s、2s、2p軌道は電子が満席状態になっているので、充満帯という。3s軌道は共通軌道になっており、このエネルギー帯を伝導帯という。電子が伝導帯にあるとき、この電子は特定の原子に束縛されることなく自由に原子間を移動できるのでこの電子を自由電子という。このような物質を電流が流れるので、**導体**という。そして、このような結合を金属結合という。伝導帯に電子がない場合、自由電子が存在せず、電荷の移動はない。このような物質を不導体という。

# 原子と分子

## 6. 不導体

硫黄 (S) 原子は、3P軌道まで電子が入っている。その上の4s軌道まではエネルギー差が大きく、その間に各原子ごとのエネルギーの壁があるために3P軌道の電子はその原子から移動できない。

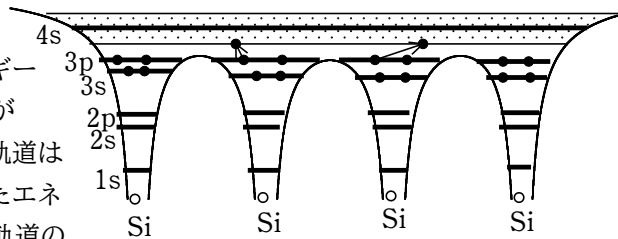


このような状態にあると、電場をかけても電子の移動は起きない。このような物質を不導体という。

## 7. 半導体

半導体は通常の状態では自由電子が存在せず、不導体であるが、温度が上がるなどした場合、自由電子が発生して導体になるような物質である。

Si原子を例として半導体の構造を考えてみよう。原子間のエネルギーの山の高さと3p軌道のエネルギーが大変近い状態にある。その上の4s軌道は共通軌道になったために幅を持ったエネルギー帯になるために、3p軌道と4s軌道の



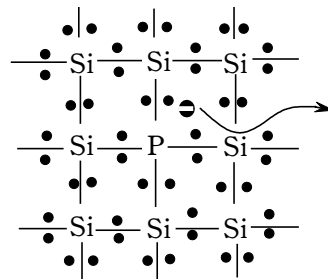
エネルギーの差は小さくなっている。この状態で外部から熱エネルギー（光子のエネルギー）が加わったときに3p軌道上の電子が簡単に4s軌道の伝導帯に飛び移り自由電子が発生するのである。このように再外殻電子軌道と原子間のエネルギーの山が近い原子は、その上のエネルギーとの差が小さくなり、温度が上がると導体となる。

この図において、3p軌道と4s軌道のエネルギーの差が大きければ3pから4sへの電子の移動がおきにくく、この場合は不導体となる。

## 8. 不純物半導体

### (1) N型半導体

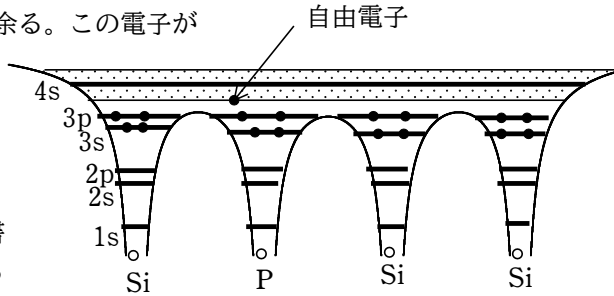
4価の半導体Si、Geなどに5価の半導体を少し混ぜると、右の図のようにSiの電子はSiどおし、あるいはPと共有結合して、自由電子にならない。しかし、Pの価電子は5個あり、Siと結合できるのは4個である。



P原子とSi原子が共有結合をするのは3s、3p軌道である。この軌道は共有されるために電子

# 原子と分子

8個で満席となる。しかし、PとSiの価電子は合計9個であるため、1個の価電子が余る。この電子が4s軌道に移ることになる。4s軌道は伝導帯になっているので、この電子は自由電子となる。右図の3p軌道電子は3つある軌道のうちひとつしか書いていないため2個で満席となっている。

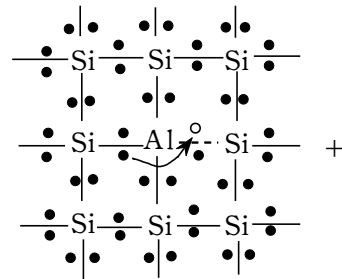


また、図における3p軌道は隣の原子と共有の形になってはいない様に見えるが、隣の原子のみと共有軌道になっていることに注意（図が複雑になるために図示していない）。これに対して伝導帯は全原子に対して共有になっている。

この図の場合原子9個に対し、自由電子1個になり、原子数に対する自由電子の割合が以上に小さい半導体ができる。これをN型半導体という。コンピューターなど多量の情報を扱う場合、大きな電流を流すと多量の熱が発生するがこの半導体を使えば電流はきわめて小さくなる。

## (2) P型半導体

4価の半導体に3価の半導体を混ぜると、Siどうしの価電子、及び、Alの価電子と共有結合をするが、Siの価電子が4個に対し、Alの価電子が3個しかないので、電子がひとつ不足である。その部分を正孔という。この物質に右側が正の電圧がかかると、図の矢印のように同じような結合にかかわっている左側の共有結合電子が右の正孔に移動して、正孔の位置が左に動いている。正孔を埋めるように共有結合の位置が左に動いている。正孔を埋めるように共有結合電子が動くことで、正孔が+の電子のように負極の方に動く。このような半導体をP型半導体という。N型半導体同様ごくわずかの電流を流す。



この状態をエネルギー図で表すと下の図のようになる。N型半導体の図と同じく3p軌道は隣の原子との間のみ共有軌道である。また、Alの3s3p軌道は計4つありSiの3s3p電子と4つの共有軌道を作っている。これに対して2つの原子の価電子の合計は7つであるため、4つの共有軌道のうちひとつは電子が1個しかないことになる。下の図において左側のAlの3p軌道は価電子がひとつの場合をあらわし、右側の3p軌道は価電子が2つある場合を示し



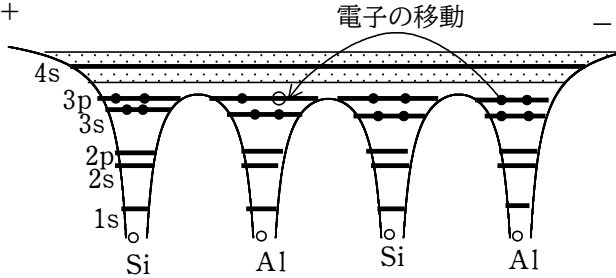
# 原子と分子

ている。

右図において、図の左側を正極、右側を負極とすると、電子は左方向にクーロン力を受ける。

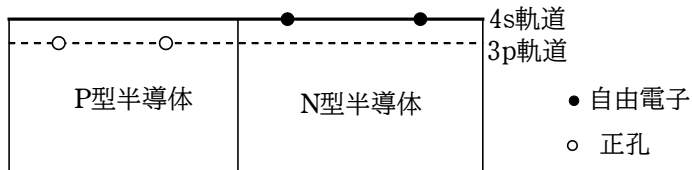
4s伝導帯と3p軌道のエネルギー差が小さいため、右側のAlの3p電子1個が伝導帯の4s軌道に入り込み、伝導帯を

通って、左側のAlの3p電子の空席に入り込む。右側のAlの3p軌道は電子が1個不足するので、さらに右側から電子を受け取ることになる。このようにして、電子が移動するのがP型半導体である。

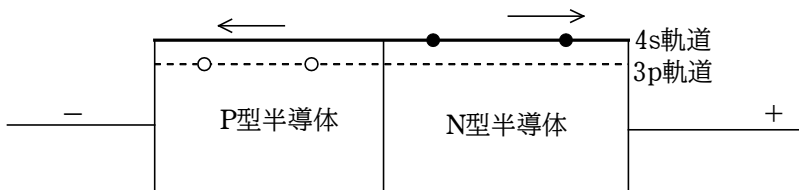


### (3) ダイオード

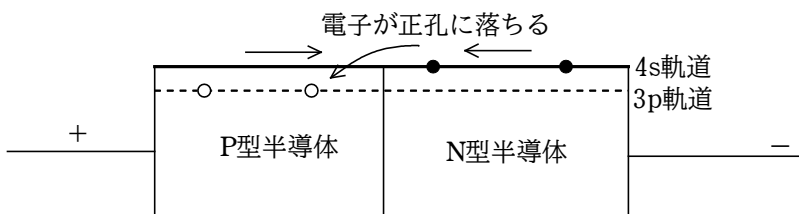
N型半導体とP型半導体を貼り付けたものをダイオードという。N型半導体は4s軌道に自由電子が存在し、P型半導体は3p軌道に正孔がある。



この装置のN型半導体の方に正極、P型半導体の方に負極をつなぐと自由電子、正孔ともに逆方向に移動し、その後共に補充されないために電流は流れなくなる。

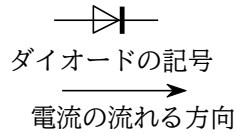


逆に、P型半導体の方を正、N型半導体の方を負極に繋ぐと自由電子、正孔共に近づく方向に移動し、その境界線上で自由電子は正孔に落ちて消滅する。正極は正孔の塊であり、負極は自由電子の塊であるので、自由電子、正孔共に次々と補充されて電流は継続して流れることができる。

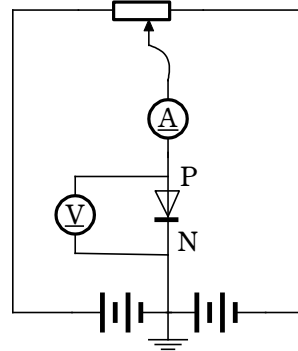


# 原子と分子

このようにダイオードは電流を一方通行にする装置である。記号で描くと下の図のようになる。

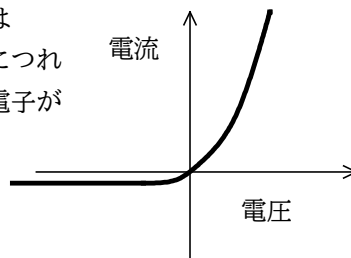


ダイオードの特性（電圧と電流の関係）を調べるために右のような回路を作った。ダイオードのN型半導体側は常に電位0に保たれるようにアースをし、可変抵抗器の抵抗を変えることによりダイオードのP型半導体側を正から負に電圧を自由に変えられるようになっている。この回路にダイオードを流れる電流と、ダイオードにかかる電圧が測定できるように電流計と電圧計を接続した。ダイオードのP型半導体側の電位が高いときを正とし、可変抵抗器の抵抗値をいろいろと変化させることにより電圧計の読みと電流計の読みを測定してグラフにした。それが下のグラフである。



このグラフを見て分かるように、ダイオードはP型半導体側を負極にしたときはわずかの電流が流れる（抵抗が大きい）。それに対してP型半導体側を正極にしたときは、大きな電流が流れる。

このようなグラフをダイオードの特性曲線という。この特性曲線の電圧が正の場合も電流と電圧は比例関係にはない。これは、電圧が高くなるにつれ多くの電流が流れるために、半導体から自由電子が出てきて、抵抗が小さくなるためである。

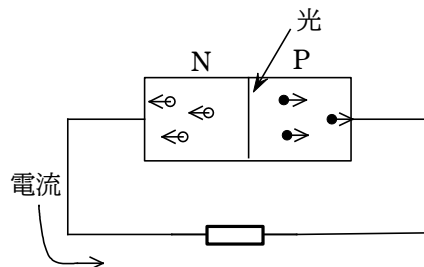


## (4) LED

ダイオードで、N型半導体とP型半導体の境界線で正孔に自由電子が落ち込むとき、自由電子の持っていた運動エネルギーとクーロンの位置エネルギーが余り、このエネルギーが光として放出される。これが発光ダイオード（LED）である。LEDは特定の波長の光が出て熱が出ないので、電力の割りに明るい。

## (5) 太陽電池

LEDの逆でダイオードの境界部に光を当てると、電子が飛び出す。飛び出した電子の跡に正孔ができる。次々に発生するため、互いに逆方向に動き、電流が流れる。これが太陽電池である。



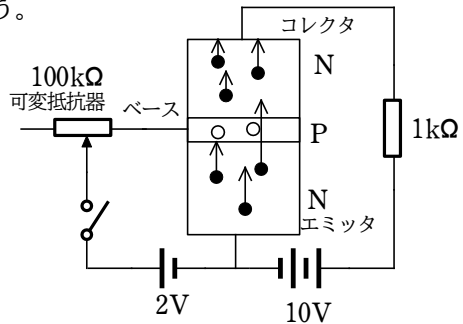
# 原子と分子

## 9. トランジスタ

右図のように薄いP型半導体を2つのN型半導体ではさんだものをトランジスタ（NPN型）という。

N型半導体をP型半導体ではさんだもの（PNP型）もある。

このトランジスタを右図のようは回路に組み込んだ。トランジスタの負極側をエミッタ（E）、正極側をコレクタ（C）、間のP型半導体の部分をベース（B）という。



### (1) スイッチを切っている場合

この回路においてスイッチを切った状態では、トランジスタはどうなるであろうか。エミッタ側から出発した自由電子の大半は薄いP型半導体を突き抜けてコレクタ側に流れる。しかし、ごく一部の自由電子はP型半導体の正孔に取り込まれる。ベース側のスイッチが切れているわけであるから、この電子はP型半導体内に蓄積される。その結果P型半導体は自由電子で満たされることになり、エミッタ側から流れてくる自由電子がP型半導体の電子の負電荷に邪魔をされるようになり、エミッタからコレクタに自由電子が流れることができなくなる。よって、コレクタを流れる電流は0となる。

### (2) スイッチを入れ、可変抵抗の抵抗を0にする。

可変抵抗の抵抗値を小さくした状態で、スイッチを入れると、P型半導体にたまって電子を排除することができる。この電子が排除されると、エミッタからコレクタに自由電子は流れることができる。この場合のコレクタに流れる電流はトランジスタ自体の抵抗を無視すると、 $\frac{10}{1000} = 0.01\text{A} = 10\text{mA}$ となる。この場合トランジスタはほとんどフリーに電流を流すのである。

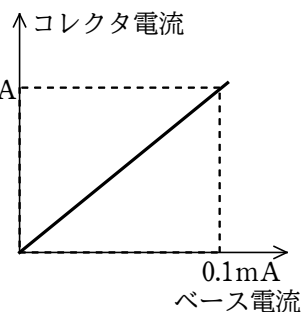
電流がP型半導体を通過するとき、仮に通過電流の1%がP型半導体の正孔につかまるとすると、ベース電流は $0.01 \times 0.01 = 1.0 \times 10^{-4}\text{A} = 0.1\text{mA}$ の電流が流れることになる。

### (3) 可変抵抗器の抵抗値を可変させたとき

次に可変抵抗の抵抗を徐々に大きくしていく（ベース電流を変化させる）とどうなるであろうか。この抵抗が大きくなると、P型半導体にたまった電子が十分に排除されずに、コレクタに流れる電流が大きく変化する。(2)の例でベース電流とコレクタ電流との関係は大体下のグラフのようになる。

このグラフを見て分かるようにベース電流を0~0.1mAまで変化させると、コレクタ電流は10mA~10mAまで変化することになる。その変化の大きさは100倍である。

ベース電流のごくわずかな変化がコレクタ電流の大きな変化を引き起こすことになるのである。このことは、コレクタ・ベース間に



# 原子と分子

微弱信号を送ることにより、エミッタ・コレクタ間から大きな信号を引き出すことができることを意味している。このように微弱信号を大きな信号に変えることを増幅作用という。

## (4) 増幅回路

上の回路の可変抵抗器の部分に信号を入力させると、右側の抵抗の部分に振幅が大きくなった信号を取り出すことができる。このような回路を増幅回路という。

このような回路に右のグラフの入力信号  
のような振幅0.01mA程度の入力信号  
を入力すると、振幅が  
100倍の1mA程度の出力信号と  
なって出力される。

このように増幅回路を通した  
信号はその振幅が大きくなるのである。

