

電子にも「重い」ものと「軽い」ものがある？

あらゆる元素は原子核と電子からできています。物質の種類によって、固体の中では、電子が自由に動き回ったり(遍歴)、原子核のクーロン力によって捕らえられていたり(局在)しています。

金属の電気伝導性が高いのは、遍歴する電子が電気を伝えているからです。絶縁体とは、簡単に考えれば、電子が局在しているため、多少の電圧をかけても電子が動けないことです。

電子はそれ自身がマイナスの電荷を持っているため、プラスの電荷を持つ原子核とクーロン力によって引き合うだけではなく、電子同士はクーロン力によって反発し合うという性質があります。固体の中で遍歴している電子が増えてくると、電子同士の反発し合う力(斥力)が強くなります。電子に影響する斥力が強くなると、電子は動きにくくなり「重い」電子になります。

電子自体の重さが変わるわけではないのに、斥力によって重さが変わるというのはイメージしにくい現象ができません。たとえば、砂浜の上を走る場合を考えてみてください。いつもより遅い速度でしか走れないと思います。砂に足が沈むなど、砂によって速度が削がれているだけですが、足下を映さない映像を見ている人にとっては、重い荷物を持っているために走るのが遅くなっている人と同じように見えるかもしれません。走る人の体重が変わったわけではない、周囲からの影響(相互作用)によって見かけ上、重くなったのと同じように見えるということがイメージできると思います。

不思議な挙動を見せる「重い」電子

「重い」電子が現れやすいのは、f軌道と呼ばれる軌道に電子を持つ物質やその化合物です。電子軌道には、s軌道、p軌道、d軌道、f軌道といった軌道があり、それぞれに1、3、5、7個の異なる軌道を持っています。1つの軌道には2つまでの電子が許容されるので、f軌道には7つの異なる軌道があり、14個まで電子が存在し

ADVICE

寄り道が最終的に役に立つことも

物理に限らず、化学・生物・地学なんでもいいのですが、自分で興味を持って、掘り下げて考えることが大切だと思います。物理の理論式ひとつ取ってみても、単に暗記して終わりではなく、色々な見方・切り口から考え、理解して、自在に活用できるように身につけてください。この線り直しによって物理的な世界の見方を鍛えることができます。受験勉強も大切ですが「なぜだろう?」「不思議だな」と思う習慣は決して忘れないでください。普通では気にしないことでも、独自に発見した人は、歩みは遅いけれども、その経験は必ず役に立つのです。勉強以外のことでも、そういう習慣を持ってさまざまな経験をした人の方が、長い目でみると多くのものを得ているものです。

第一原理計算によってコンピュータ上で実験予測を可能に

高校で習う電子とバンド理論は、どちらも整然とし過ぎていて、固体の中の電子はすっかり説明されているという印象を受けたかもしれません。しかし、実際の固体の電子はもっと複雑で多様な振る舞いを見せてくれます。軌道によっては電子がその「重さ」を変えたり、原子核に引き寄せられた電子がクーロン力を「遮蔽」したり、と賑やかに活躍します。固体でも電子の相対論的効果が大きくなり、バンド構造が大きく変化することもあります。多様な電子物性研究の基礎となる「第一原理計算」というバンド構造シミュレーションがご専門の山上浩志先生に「重い」電子とそのシミュレーションについて伺いました。

不思議な振舞いをする 重い電子をシミュレート

得るということになります。

周期表には2種類のf軌道があり、4f軌道、5f軌道の電子を持つランタノイド(4f)とアクチノイド(5f)と呼ばれる元素群が見られます。周期表の6周期目と7周期目にあり、一般的な周期表では欄外に別表として掲載されています。ランタノイドは「希土類」と呼ばれ、強力な磁性を持つていたり、磁気によって伸び縮みしたり、光信号を増幅させたりと、電子機器などへの応用範囲が広く、今や産業に欠かせない鉱物資源となっています。一方、アクチノイドは放射性元素でウラン(U)やプルトニウム(Pu)といった原子力発電に関連する元素が含まれています。また、ウランより重い元素は自然状態で見つかることが少ない謎の多い物質です。

4f軌道や5f軌道で見られる「重い」電子は、自由電子の1000倍もの「重さ」になることがあり、自由電子をモデルにして考えた場合は電子の振舞いが大きく異なってきます。遍歴するはずの電子が「重い」ためにほとんど動けず、

局在している状態に近い特有な物性を現すといったことが起こります。

電子の相対論的効果が無視できなくなる

原子番号が大きな重元素であるランタノイドやアクチノイドでは、電子のバンド構造を予測するときに相対論的効果が強く影響を及ぼすようになります。

ウラン(U)は原子番号92ですから、原子核

図1 アクチノイド系列の外殻電子のエネルギー準位

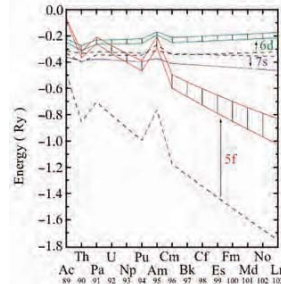


図2 ウラン原子の外殻電子の動経分布

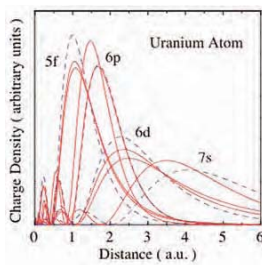
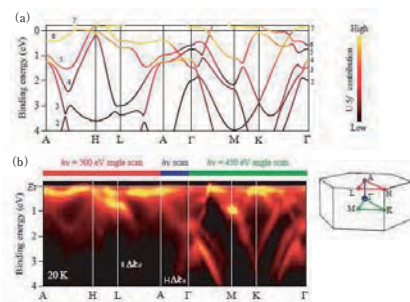


図3 UB₂のバンド構造の(a)計算結果と(b)軟X線実験



線が相対論を考慮しない場合、実験が考慮に入れた場合)。5f電子に対する相対論的効果の大きさが見て取れると思います。

シミュレーションの結果が 実験結果とピタリ一致

実験結果に依らないで物理法則だけを使って行うシミュレーションのことを「第一原理計算」と言います。私は、相対論的効果を含めたバンド理論を提案し、第一原理計算を行えるプログラムを開発しました。これは、世界中どこにもないオリジナルの計算手法です。

ウラン化合物UB₂のバンド構造(電子の運動量とエネルギーの関係)をシミュレーションしたものが図3(a)です。これは、SPRING-8に設置された日本原子力研究開発機構(JAEA)の専用ビームラインで軟X線角度分解光電子分光実験^{※コラム参照}によって得られたUB₂のバンド構造のスペクトル(図3(b))ときれいに一致しました。

5f軌道の電子は観測強度を大きくし、固体本来のバンド構造を観測するために、エネルギーの高い軟X線を用いなければなりません。SPRING-8には世界最高クラスの高いエネルギーを出せるX線装置があるだけではなく、ウランのような放射

性物質の電子構造測定ができる世界唯一の実験施設を備えています。

安全な放射性元素実験の実現へ

ウランやプルトニウムといったアクチノイドやその化合物の研究は、これからのエネルギー問題を考える際に避けては通れないものです。太陽光パネルの性能が向上しているといっても、日本が必要とするエネルギーを作り出すには日本全土にパネルを敷き詰めてもまだ足りないからです。化石燃料に頼り続けられないことは明白ですから、原子力を危険だと行って忌避するのではなく、研究を重ねて、物質の特性を理解することが重要なのです。

放射性元素であるアクチノイドは、管理を厳密にする必要があり、実験も専用の設備で行います。そのために手軽に実験が行えません。シミュレーションの精度を高めることで、最終的には実物を使わずともコンピュータ上で実験ができる環境を作りたいと考えています。現実には実験困難な、超高温下や危険な状況下、あるいは架空の物質のシミュレーションなどもコンピュータ上でならば安全に実現されるのです。

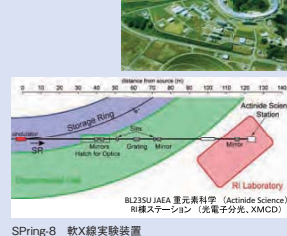
SPRING-8での軟X線角度分解光電子分光

光電子分光法とは、物質内の電子のエネルギー分布を直接調べる実験方法です。調べたい物質に光を当てて、光電効果によって物質の中から飛び出してきた電子の個数とエネルギーを分析するという方法です。角度分解を行うことによって、光電子の角度の分布が計測され、固体内の電子の運動量が分かるため、物質のバンド構造やフェルミ面を観測することができます。

標的とする電子の軌道によって、電子が飛び出してくる光の波長は異なります。5f軌道の電子を調べる場合は軟X線が用いられます。また、物質の本来のバンド構造をより正確に調べるためには、エネルギーの高い電磁波を当て、物質より深くまで光を届ける必要があります。

兵庫県播磨科学公園都市にあるSPRING-8は、世界最高クラスの高いエネルギーの放射光を生み出すことができる実験施設です。放射光とは、電子を光の速度近くまで加速し、磁石によって進行方向を曲

げた時に発生する、細く強力な電磁波のことです。私たち、日本原子力研究開発機構の電子構造研究グループは、SPRING-8の強力な軟X線により、ウラン化合物などの電子構造とフェルミ面の研究を推進しています。



理学部 物理科学科 山上 浩志 教授

PROFILE

2008年、SPRING-8での軟X線角度分解光電子分光実験により、ウラン化合物の電子構造とフェルミ面の観測に成功した。独自に開発した相対論的効果を含めたバンド計算は、この実験結果を予測し精度の高さを証明。2005年より放射光先端物質電子構造研究グループのリーダーを務める。新潟県立新潟高校OB。

