

物理学実験II: マイクロ波分光

Ver. 2010 年 10 月 1 日

担当:

山本智 (理学部新 1 号館 511b 号室: 内線 24197)

yamamoto@phys.s.u-tokyo.ac.jp

坂井南美 (理学部新 1 号館 503 号室: 内線 24217)

nami@taurus.phys.s.u-tokyo.ac.jp

柴田大輝 (理学部新 1 号館 503 号室: 内線 24217)

shibata@taurus.phys.s.u-tokyo.ac.jp

実験室: 理学部新 1 号館 318 号室

1 イントロダクション

1.1 原子・分子分光学

分光学の始まりは古く 17 世紀の Isaac Newton (1642-1727) の実験 (1672) に遡る。しかし、物質と光との相互作用の測定手段としての分光学は、Joseph Fraunhofer (1787-1826) による太陽スペクトル中の暗線の精密測定 (1814) で始まったといつてよい。これらの暗線の正体はしばらく不明であったが、Robert Bunsen(1811-1899) と Gustav Kirchhoff (1824-1887) による火炎の分光実験によって、原子による吸収であることが明らかにされた (1859)。このようにして確立した原子スペクトルは黒体放射の理論とともに量子論成立の大きな原動力となった。また、同時に原子スペクトルは He をはじめ Cs、Rb などの新しい元素の発見をもたらした。

原子、分子を対象とする分光学 (原子・分子分光学) は、その後大きく発展した。可視光のみならず、電磁波の広い領域に爆発的に広がった。可視光-紫外線領域では、主に原子分子の電子状態間の遷移 (電子スペクトル) が観測される。それよりも波長の長い赤外線領域では分子を構成する核の相対運動 (振動) による遷移 (振動遷移) が観測される。さらにもっと波長の長い電波領域では分子の回転スペクトルや、核スピン、電子スピンの磁場中での反転に基づく遷移 (核磁気共鳴スペクトル、電子スピン共鳴スペクトル) が測定できる。一方、波長が短い方に目を移すと、真空紫外から X 線領域では原子の内核電子の励起に基づく遷移が現れる。さらにガンマ線領域になると、原子核の内部状態の変化による遷移が観測される。このように、スペクトルは対象とする原子・分子の構造や電子状態などについて、物質に関する豊富な情報を与えてくれるのである。

現代においては、分光学は様々な分野で日常的に応用されている。物質の研究においては、分光学はなくてはならない手段の一つである。そればかりではない。今や、分光学は分析、診断技術として産業界等でも広く利用されているほか、核磁気共鳴を応用した MRI は医療の現場で極めて有力な診断手段として広く使われている。

1.2 マイクロ波分光

本実験では、原子・分子スペクトルの中の「分子の回転スペクトル」を取り扱う。気相中の分子の回転エネルギーの変化がちょうどマイクロ波領域 (電波領域) にあたるので、マイクロ波スペクトル (マイクロ波分光) とも呼ぶ。マイクロ波スペクトルを解析することによって、分子の慣性モーメントが非常に精密にわかる。それをもとにして、分子構造や分子内運動を調べることができる。そのため、1950 年代から 1980 年代にかけて、分子構造の精密決定手段として、数多くの分子に適用された。また、マイクロ波分光はメーザー (MASER: Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation) の発見 (1954) を生み出し、レーザー (LASER: Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation) の発明 (1960) につながった歴史を持つ。マイクロ波はレーザー普及以前には貴重なコヒーレント光源として、量子光学成立に大きな役割を果たした。

マイクロ波スペクトルのもう一つの応用は、宇宙観測である。星と星との空間には、希薄であるがガスと塵からなる巨大な雲が存在している。星間分子雲と呼ばれるものである。星間分子雲は、温度が 10 - 数 10K と低いので、可視光で見えることはできない。しかし、星間分子雲に微量に含まれる様々な分子 (星間分子) の回転スペクトル放射を電波望遠鏡で観測することで直接捉えることができる。とくに一酸化炭素 (CO) 分子は星間分子雲に豊富に存在し、その回転スペクトル輝線の観測が頻繁に行われている。星間分子雲は新しい恒星と

惑星系の形成場所であり、その過程が CO 分子をはじめ種々の分子の回転スペクトル線の観測によって詳細に明らかにされつつある。図 1 におうし座分子雲 (TMC-1) で観測されたスペクトルを例として示す。

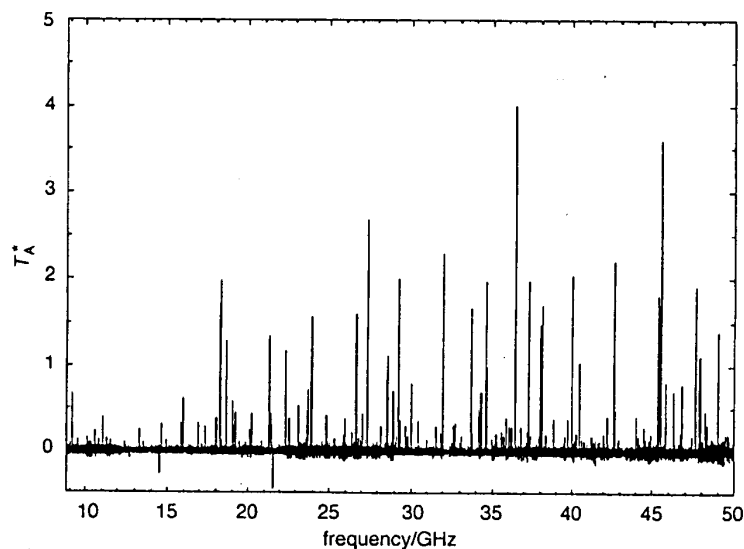


図 1 国立天文台 45 m 電波望遠鏡によるおうし座分子雲のマイクロ波スペクトル。等周波数間隔でスペクトル線が現れていることに注意。

1.3 本実験の目的

この実験では分子の回転スペクトルの測定を通して、量子力学についての理解を深めることを第一の目的とする。分子の回転は後で述べるように角運動量の問題である。直線分子の回転運動の固有関数である球面調和関数の性質や、外場 (電場) がかったときの固有状態の混合、その摂動による取り扱いなどについて、実験と実験データの解析を通して実感を伴う形で身に着けてもらうことを目指している。

第二の目的は、分子構造を精密に決定する手段と、求めた分子構造の意味を理解することである。実際に慣性モーメントから原子間距離を求め、分子のサイズを実感する。また、得られた原子間距離の誤差の導出を通して、実験における誤差の取り扱いに習熟してほしい。

これらに付随して、立体回路や周波数測定技術などのマイクロ波回路技術の基本を理解する。これらは、様々な実験や計測の立案に将来役立つことを期待したい。

2 実験内容

実験内容は以下のとおりである。

1. ガン発信機の発振周波数をヘテロダイニート法によって決定する方法を習得する。これは以下のスペクトル測定のために必須の技術である。
2. 硫化カルボニル (OCS) の回転スペクトル線 ($J = 2 - 1$: 24.326 GHz) をシュタルク変調型マイクロ波分光計によって測定する。
3. $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{32}\text{S}$, $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{34}\text{S}$ (天然存在比約 4 %) の 2 種類の同位体について測定をおこない、それぞれの

回転定数を決定する。これから、OCS の分子構造を精密に決定する。また時間があれば、 $^{16}\text{O}^{13}\text{C}^{32}\text{S}$ (天然存在比約 1%) の回転スペクトルを測定する。

4. シュタルク効果によるスペクトル線のシフトから、OCS の電気双極子モーメントを決定する。

3 実験の原理

3.1 分子の回転スペクトル

直線分子の場合、回転運動は慣性モーメント I によって特徴づけられる。古典的な回転エネルギー E は、角速度 ω 、あるいは角運動量 L を用いて次式で表わされる。

$$E = \frac{1}{2}I\omega^2 = \frac{L^2}{2I} \quad (1)$$

一方、量子力学では、この L^2 は以下の演算子で置き換えられる。

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \left(\frac{\partial}{\partial\theta} \right) \left[\sin\theta \left(\frac{\partial}{\partial\theta} \right) \right] + \frac{1}{\sin^2\theta} \left(\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right) \right] \quad (2)$$

これにより回転運動のハミルトニアンは $H_{\text{rot}} = \frac{L^2}{2I}$ と書け、以下のようにシュレディンガー方程式が立てられる。

$$\frac{L^2}{2I}\psi = E\psi \quad (3)$$

ここで、 L^2 の固有値 (角運動量演算子の 2 乗の固有値) は $\hbar^2 J(J+1)$ ($J = 0, 1, 2, \dots$) であるから、回転運動のエネルギー固有値は

$$E_J = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1) = \frac{h^2}{8\pi^2 I} J(J+1) \equiv hBJ(J+1) \quad (4)$$

となる。ただし $B = \frac{h}{8\pi^2 I}$ を回転定数として定義する。固有関数は球面調和関数 (spherical harmonics) で表わされ、

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{2J+1}{2} \frac{(J-|M|)!}{(J+|M|)!} \right]^{\frac{1}{2}} e^{iM\phi} P_J^{|M|}(\cos\theta) \quad (5)$$

となる。ここで $P_J^{|M|}(x)$ はルジャンドル (Legendre) 陪多項式である。

ひとつの回転量子数 J の状態には、方位量子数 $M (= -J, -J+1, \dots, J)$ の $(2J+1)$ 個の状態がエネルギー的に縮退している。回転エネルギー準位のダイアグラムは図 1 のようになる。

分子が電気双極子モーメントを持っていると、電磁波との相互作用により回転準位間の遷移がおこる。最低次の電気双極子遷移の選択律 (selection rule) は、 $\Delta J = \pm 1$ なので、図 2 のような遷移が可能である。例えば、図の $J = 2 \leftarrow 1$ の遷移では、 $\nu = 4B$ の周波数の電磁波を吸収する。

一般に、 $J+1 \leftarrow J$ 遷移の周波数は、

$$\nu = \frac{E_{J+1}}{h} - \frac{E_J}{h} = 2B(J+1) \quad (6)$$

となる。つまり吸収スペクトルは、周波数軸上で $2B$ の等間隔で現れる (図 2 右)。通常の分子では、回転定数 B の大きさはマイクロ波領域 (波長 $100\mu\text{m} \sim 1\text{m}$) の周波数になる。

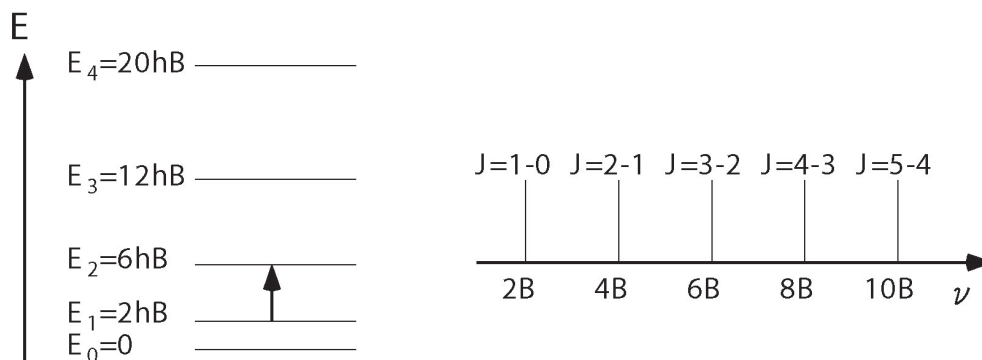


図2 直線分子の回転エネルギー準位と遷移周波数

また同種の分子でも、それを構成する原子の同位体^{*1}によって B の値が異なる。一方で、分子構造は電子軌道の配置によって決定されるので、異なる同位体でも分子構造はほとんど変化しないと考えることができる^{*2}。従って、少なくとも2種類の同位体分子の B 、すなわち慣性モーメント I が求まれば、その分子構造(核間距離 r_1, r_2) を決定することができる。

課題 1

硫化カルボニル OCS は直線分子である。C と O の核間距離を r_1 、C と S の核間距離を r_2 として、 $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{32}\text{S}$ と $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{34}\text{S}$ の慣性モーメントを計算せよ(慣性モーメントは質量中心から求めることに注意)。また、 $r_1 = 1.16 \text{ \AA}$ 、 $r_2 = 1.56 \text{ \AA}$ を仮定して、OCS の $J = 2 \leftarrow 1$ 回転遷移スペクトルの周波数を予想せよ(有効数字3桁)。

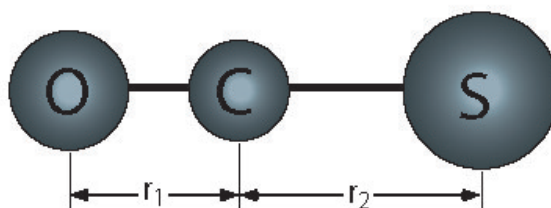


図3 硫化カルボニルの分子構造

3.2 回転準位のシュタルク効果

分子に電場をかけると、回転エネルギー準位は電場との相互作用によって分裂する。これをシュタルク(Stark)効果という。

電場 E の方向を z 軸にとり、分子の双極子モーメント μ の向きとなす角を θ とする。このとき、系のハミルトニアンは、回転運動を記述するハミルトニアン H_{rot} とシュタルク効果を記述するハミルトニアン H_{str} の

*1 原子番号 Z は同じで質量数 A の異なる原子を同位体という。

*2 これはあくまで近似であり、 10^{-5} \AA 程度の違いは存在する。その原因は分子振動にある。

和となる。

$$H = H_{\text{rot}} + H_{\text{str}} \quad (7)$$

$$H_{\text{str}} = -\mu E \cos \theta \quad (8)$$

このうち回転運動部分に関しては、厳密なエネルギー固有関数および固有値が求められている（前節参照）。ここで電場 E の大きさが極端に大きくなければ、 H_{str} を摂動ハミルトニアンとして、エネルギー固有値を近似的に求めることができる。

1次摂動は0になるため、2次摂動の計算をおこなうと

$$E_{\text{str}} = \begin{cases} \frac{\mu^2 E^2}{2hB} \frac{J(J+1) - 3M^2}{J(J+1)(2J-1)(2J+3)} & (J \neq 0) \\ -\frac{\mu^2 E^2}{6hB} & (J = 0) \end{cases} \quad (9)$$

となる。

電場がゼロのときは $(2J+1)$ 重に縮退していた方位量子数 M の異なる準位が、シュタルク効果によって一部分裂することがわかる。シュタルク効果による $J=2, 1$ の準位の分裂を模式的に書くと図3のようになる。

マイクロ波の偏光の向き（電場ベクトルの向き）を外部電場の向きと平行にとると、 $J+1 \leftarrow J$ 回転遷移の M に関する選択律は $\Delta M = 0$ になる。故に $J=2 \leftarrow 1$ 遷移は $M=0, M=1$ の2つのスペクトル線に分裂して観測される。

分裂した各々の成分の周波数は電場の2乗に比例してシフトする。即ち、

$$\nu = \nu_0 + k\mu^2 E^2 \quad (10)$$

と書ける。ここで k は遷移の種類で決まる比例定数。

そこで電場強度を変化させて、それぞれで吸収線の中心周波数を測定し、それを E^2 に対してプロットすると図3右のように2本の直線になる。それらの直線が ν 軸 ($E=0$) と交わる点での周波数が ν_0 であり、傾きから電気双極子モーメント μ を求めることができる。

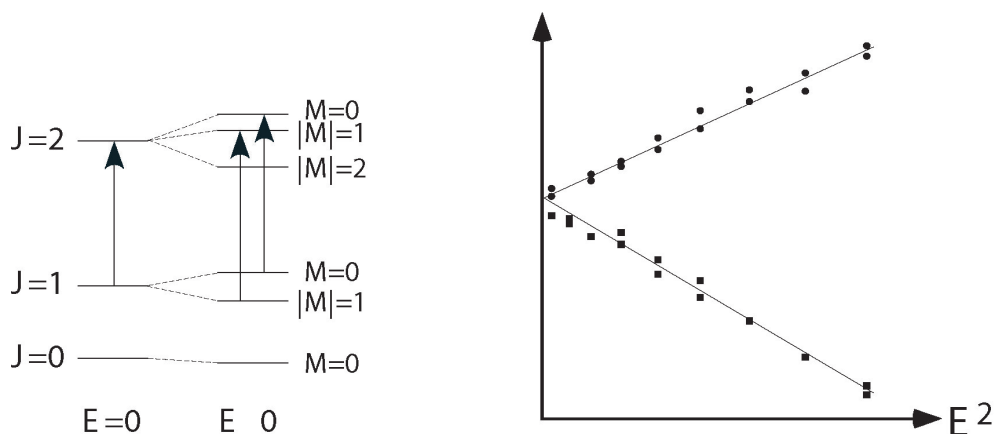


図4 シュタルク効果による回転エネルギー準位の分裂

課題 2 式 (9) を導け。エネルギー固有値の摂動展開が有効であることを確認せよ。

ヒント

2 次の摂動のエネルギーは次式で与えられる。

$$E_{JM}^{(2)} = \sum_{J'} \frac{\langle \phi_{JM} | H_{\text{str}} | \phi_{J'M'} \rangle^2}{E_J - E_{J'}} \quad (11)$$

この $\langle \phi_{JM} | H_{\text{str}} | \phi_{J'M'} \rangle$ の計算には式 (5), (8) を用いる。さらに Legendre 陪多項式の漸化式を使う。

$$(2J+1)xP_J^{(M)}(x) = (J-|M|+1)P_{J+1}^{(M)}(x) + (J+|M|)P_{J-1}^{(M)}(x) \quad (12)$$

$$\langle P_{J'}^{(M)} | P_J^{(M)} \rangle = \begin{cases} \frac{2}{2J+1} \frac{(J+|M|)!}{(J-|M|)!} & (J=J') \\ 0 & (J \neq J') \end{cases} \quad (13)$$

課題 3 $J=1 \rightarrow 2$ 遷移の $M=0, 1$ 成分について、シュタルク効果による遷移周波数のシフト量を電場 E の関数として表わせ。これを解析に使用する。

4 実験の概略

4.1 注意事項

- ガスの取扱いは TA とともに行うこと (危険)。
- ガン発振器 (図 6 の 3) のマイクロメーターの目盛は 0.61-1.2 の範囲以外には絶対回さないこと (装置が壊れる)。
- 高電圧電源 (図 6 の 6) の電圧は 1000V を超えないこと。また、黄色の目盛りも右に回さないこと (装置が壊れる)。

4.2 装置の概要

装置の概要を図 5 に示す。また、それぞれの写真を図 6 に示す。

マイクロ波のソースとしてはガン発振器を用いる。その出力は 2 つに分けられ、一方が吸収スペクトルの測定、他方が周波数の測定に用いられる。

周波数の測定は、4.3.2 で説明するヘテロダインビート法によって行う。UHF 発振器 (UHF OSC) の信号を混合し、ビートを短波受信機 (HF Receiver) で受信して測定する。UHF 発振器の周波数は周波数カウンタで測定する。

マイクロ波信号は導波管セルを通過して検波される。導波管セルの中には電場をかけられるように電極が入っている。試料ガスによるマイクロ波の吸収は 10^{-5} 程度と小さいので、検波出力をそのまま見たのでは吸収を検出することは難しい。

そこで、電極に直流成分と 100 kHz の交流成分をあわせた電圧を加えて、エネルギー準位を 100 kHz の周期で変動させる (吸収位置が 100 kHz で変わることになる)。これをシュタルク変調と呼ぶ。すると、吸収がある場合、100 kHz で吸収量の変動するので、雑音信号の中からこの成分を取り出すことにより感度よく検出

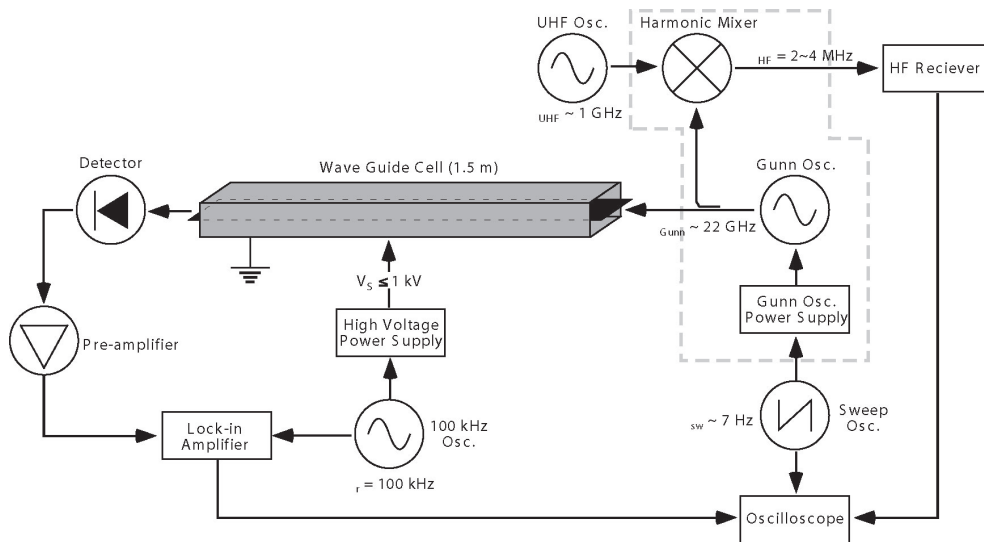
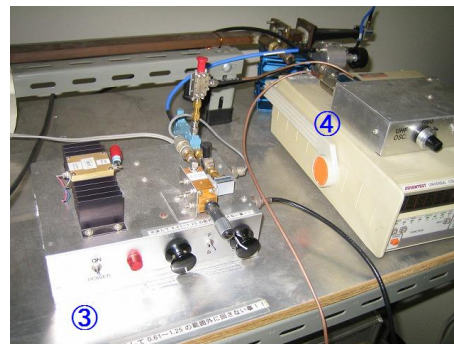
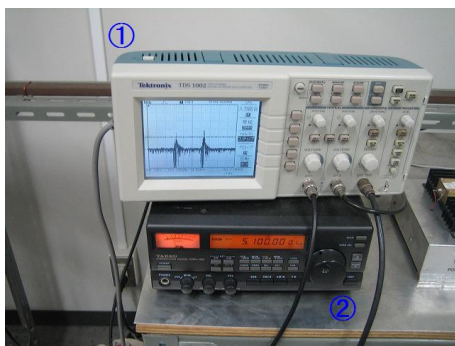


図5 実験装置概念図



することができる。このために、検波信号はまず 100 kHz の狭帯域の増幅器で 100 kHz を抽出した後に位相検波器 (Lock-in Amplifier) で吸収信号を取り出す。スペクトル線は、その結果微分形で現れる (4.4.2 参照)。

マイクロ波の周波数スキャンはのこぎり波電圧をガン発振器のバラクターダイオードに加えて行っている。これにより周波数が時間とともに周期的に変わるので、オシロスコープ上では横軸が周波数として表示される。

4.3 発信周波数の測定

4.3.1 手順

- ガン発振器の周波数 (数 MHz 幅で掃引されている) を知るために、ガン発振器からのマイクロ波の一部と UHF oscillator ($\nu_{\text{UHF}} \sim 1\text{ GHz}$) の信号をハーモニックミクサーにおいて混合し、その出力をラジオ受信器 (HF receiver) で受信する。その出力をオシロスコープで表示し、これを画面上での周波数基準 (マーカ) とする。
- ガン発振器のマイクロメータを動かし、その値と発振周波数の関係を調べて図にプロットする。この図を使用して OCS 分子の $J = 1 \rightarrow 2$ 回転遷移の周波数 (課題 1 で求めた値を使う) に対応する値にマイ

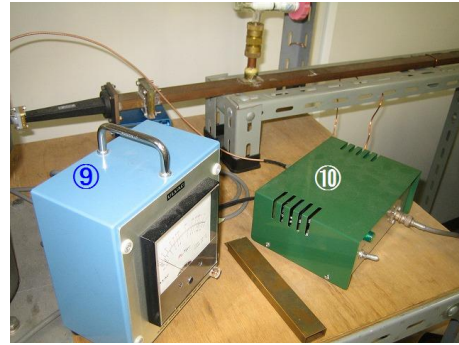


図6 実際の装置。1. オシロスコープ 2. 短波受信機 3. ガン発振器 4. UHF 発振器と周波数カウンタ 5. 変調信号発振器 6. 高電圧電源 7. 矩形波発振器 8. ロックインアンプ 9. 真空計 10. 100 kHz プリアンプ

クロメータを設定し、ガン発振器からのマイクロ波を導波管に入射する。

4.3.2 周波数混合による周波数測定の実理

ダイオードの電圧曲線は図7のようになる。A点付近ではIはVに対して非線型で

$$I = a_0 + a_1V + a_2V^2 + \dots \quad (14)$$

のように書くと、 a_2V^2 よりも高次の項が存在する。もし入力電圧として $\omega_0 = (2\pi f_0)$ 、 $\omega_1 (= 2\pi f)$ の2種類の周波数の信号が同時に入ったとすると、

$$V = V_0 \sin \omega_0 t + V_1 \sin \omega_1 t \quad (15)$$

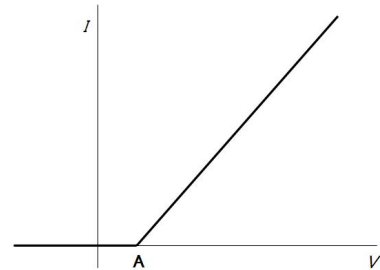


図7 ダイオードのI-V特性

なので、(14)式の a_2V^2 の項からは、 $a_2(V_0 \sin \omega_0 t + V_1 \sin \omega_1 t)^2$ の項が出る。したがって、流れる電流には $|\omega_0 \pm \omega_1|$ の成分が発生する。同様に、(14)式の $a_{n+1}V^{n+1}$ の項からは、 $|n\omega_0 \pm \omega_1|$ などの成分が発生する。

今、 ω_1 を測定したい周波数、 ω_0 を既知の周波数とする。もし ω_1 が ω_0 の n 倍に近い周波数であれば、 $|n\omega_0 - \omega_1|$ は短波ラジオで受信できるほど低い周波数になる(ビート信号)。これを受信できるような ω_0 を探せば、 ω_0 の値から ω_1 を求めることができる。ここで、 n は通倍数と呼ぶ。

それでは、どのようにして n を決めたらよいだろうか？ もし、 ω_1 が ω_0 の n 倍に近いとすると、 $\omega_1 \sim n\omega_0$ である。この n が正しければ ω_1 は正しい。そのとき、 ω_1 を $n \pm 1$ で割った $\omega_1/(n \pm 1)$ を ω'_0 とすると、 ω'_0 でもやはり $\omega_1 \sim (n \pm 1)\omega'_0$ となるのでビート信号が発生しなければならない。これが確認できれば n は正しいことになる。もし n が間違っていれば上記の ω'_0 ではビートが見えない。このことから n 、周波数 ω_1 を決めることができる。

4.4 $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{32}\text{S}$ のスペクトルの測定

4.4.1 手順

- 導波管 (wave guide cell) 内を 20 mTorr 程度の真空状態にした後、硫化カルボニル (OCS) 分子*3を 70 mTorr 程度まで注入する。
- 導波管内を通過してきたマイクロ波を検波器 (detector) で直流電圧に変換した後に、前置増幅器 (pre-amplifier) で増幅する。このマイクロ波は、OCS 分子による吸収を受けている。
- 導波管内の OCS 分子の回転エネルギー準位は、1 kV/cm の電場 (E_{DC}) によってシュタルク (Stark) 効果による分裂を起こしている。この電場には、100 kHz で振幅変調された微小な交流成分 (E_{AC}) が加えられている。
- 前置増幅器からの信号と 100 kHz 変調の参照信号をロックインアンプ (lock-in amplifier) に入力し、位相敏感検波 (PSD) により 100 kHz 変調に同期する成分だけを取り出してオシロスコープ (oscilloscope) に表示する。
- 上記の測定を様々な電場強度について行うことにより、OCS 分子の回転定数および電気双極子モーメントを決定する。

4.4.2 シュタルク変調によるスペクトル測定の原理

スペクトルのプロファイル関数が $F(\nu)$ であるとする。このプロファイル関数は交流成分 (E_{AC}) のために 100 kHz の周期で微小に左右 (周波数軸) に振動している。いま ν_0 の周波数で測定しているとする、 $F(\nu)$ は $F(\nu_0 + \delta\nu \sin \omega t)$ の形で変動する。ここに、 $\delta\nu$ は交流成分による吸収位置の振れ幅 (周波数軸) を表す。

これを ν_0 の近傍で展開すると、

$$F(\nu_0 + \delta\nu \sin \omega t) = F(\nu_0) + \left. \frac{dF}{d\nu} \right|_{\nu=\nu_0} \delta\nu \sin \omega t + \dots \quad (16)$$

となる。 ω の周波数成分だけを通すプリアンプを介することで、この信号から $\sin \omega t$ に比例する項だけが取り出される。

位相検波はこの信号に参照信号 $\sin(\omega t + \varphi)$ をかけ、時間平均をとることに相当する。位相検波出力 I は、

$$I = \frac{1}{T} \int_0^T \left. \frac{\partial F}{\partial \nu} \right|_{\nu=\nu_0} \delta\nu \sin \omega t \sin(\omega t + \varphi) dt \quad (17)$$

$$\propto \left. \frac{\partial F}{\partial \nu} \right|_{\nu=\nu_0} \cos \varphi \quad (18)$$

となるので、参照信号と吸収信号の位相差をなくしてやる ($\varphi = 0$) ことで、強度は最大となる。 ν_0 を少しずつ変えることでスペクトルを掃引すると、 F の微分形として測定される。

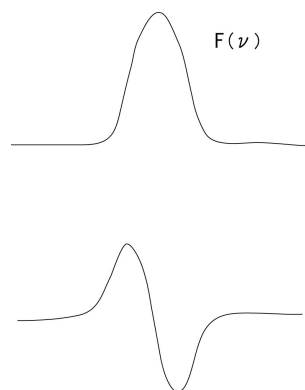


図 8 吸収強度と微分形

*3 硫化カルボニルは有毒であるが、使用する量が微量のため、危険度は問題のないレベルである。

4.5 $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{34}\text{S}$ のスペクトルの測定

- 4.2 と同様にして $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{34}\text{S}$ のスペクトルを測定する。強度が弱くなるので、オシロスコープの精度機能などを利用して測定する。
- 様々な電場強度について測定し、 $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{34}\text{S}$ 分子の回転定数及び電気双極子モーメントを決定する。

5 レポート

1. 課題 1～3 を解く。
2. 実験値を使って OCS の電気双極子モーメントを求め、分子構造を決定する。求めた双極子モーメント、原子間距離には必ず誤差を付すこと。
3. レポートには実験に対する感想をつける。改善すべき点や興味を持ったことなどを自由に。

6 参考文献

- マイクロ波分光の参考書としては次の本が有名である。著者の Townes はレーザー・レーザの発見の業績により 1964 年にノーベル賞を受賞している。
Townes, C. H. & Schawlow, A. L. ” Microwave spectroscopy” , 1975, Dover
- マイクロ波の技術に関しては
阿部英太郎、「マイクロ波技術」、1979 年、東大出版
- マイクロ波分光の宇宙物理への応用例としては
赤羽賢司・海部宣男・田原博人、「宇宙電波天文学」、1988 年、共立出版
- 電子計測および信号処理の原理と方法については
桜井捷海・霜田光一、「応用エレクトロニクス」、1984 年、裳華房

付録 A 最小二乗法による直線フィット

データ $(x_1, y_1^0) \cdots (x_i, y_i^0) \cdots (x_N, y_N^0)$ に対して、最小二乗法で $y_i = ax_i + b$ と近似する。つまり、

$$S = \sum_i (y_i^0 - y_i)^2 \quad (19)$$

が最小になるようにフィットするということである。

$$\frac{\partial S}{\partial a} = - \sum_i 2x_i(y_i^0 - ax_i - b) = 0 \quad (20)$$

$$\frac{\partial S}{\partial b} = - \sum_i 2(y_i^0 - ax_i - b) = 0 \quad (21)$$

より

$$a \sum_i x_i^2 + b \sum_i x_i = \sum_i x_i y_i^0 \quad (22)$$

$$a \sum_i x_i + bN = \sum_i y_i^0 \quad (23)$$

なので

$$a = \frac{N \sum_i x_i y_i^0 - (\sum_i x_i)(\sum_i y_i^0)}{N \sum_i x_i^2 - (\sum_i x_i)^2} \quad (24)$$

$$b = \frac{(\sum_i x_i^2)(\sum_i y_i^0) - (\sum_i x_i)(\sum_i x_i y_i^0)}{N \sum_i x_i^2 - (\sum_i x_i)^2} \quad (25)$$

となり、

$$\frac{\partial a}{\partial y_i^0} = \frac{Nx_i - \sum_j x_j}{N \sum_j x_j^2 - (\sum_j x_j)^2} \quad (26)$$

$$\frac{\partial b}{\partial y_i^0} = \frac{\sum_j x_j^2 - x_i \sum_j x_j}{N \sum_j x_j^2 - (\sum_j x_j)^2} \quad (27)$$

ここから、 a と b の誤差は

$$\begin{aligned} (\delta a)^2 &= \sigma^2 \sum_i \left(\frac{\partial a}{\partial y_i^0} \right)^2 \\ &= \sigma^2 \sum_i \left(\frac{Nx_i - \sum_j x_j}{N \sum_j x_j^2 - (\sum_j x_j)^2} \right)^2 \\ &= \frac{\sigma^2}{\left\{ N \sum_j x_j^2 - (\sum_j x_j)^2 \right\}^2} \left\{ N^2 \sum_i x_i^2 - 2N \left(\sum_i x_i \right)^2 + N \left(\sum_i x_i \right)^2 \right\} \\ &= \frac{N\sigma^2}{N \sum_i x_i^2 - (\sum_i x_i)^2} \end{aligned} \quad (28)$$

$$\begin{aligned}
(\delta b)^2 &= \sigma^2 \sum_i \left(\frac{\partial b}{\partial y_i^0} \right)^2 \\
&= \sigma^2 \sum_i \left(\frac{\sum_j x_j^2 - x_i \sum_j x_j}{N(\sum_j x_j^2 - (\sum_j x_j)^2)} \right)^2 \\
&= \frac{\sigma^2}{\{N \sum_j x_j^2 - (\sum_j x_j)^2\}^2} \sum_i \left\{ \sum_j x_j^2 - x_i \sum_j x_j \right\}^2 \\
&= \frac{\sigma^2 \{N(\sum_i x_i^2)^2 - 2(\sum_i x_i)^2(\sum_i x_i^2) + (\sum_i x_i)^2(\sum_i x_i^2)\}}{\{N \sum_i x_i^2 - (\sum_i x_i)^2\}^2} \\
&= \frac{\sigma^2 \sum_i x_i^2}{N \sum_i x_i^2 - (\sum_i x_i)^2} \tag{29}
\end{aligned}$$

となる。ここに、 σ は測定誤差である。

付録 B 用語集

シュタルク効果

Stark, Johannes が 1913 年に水素原子で発見した現象で、縮退しているエネルギー準位が電場により複数の準位に分岐する現象。対して、ゼーマン効果 (Zeeman effect) は磁気量子数に関する縮退が磁場と磁気モーメントによる相互作用で解け、エネルギー準位が分岐する現象。

デシベル

電力の減衰や利得を表わすためにもちいられる単位。入力電力 P_1 、出力電力 P_2 のときの減衰または増幅を $N\text{dB} = 10 \log_{10} \left(\frac{P_2}{P_1} \right)$ と定義する。

レーザー

Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation の略称。誘導放出を利用したマイクロ波の増幅器または発振器。宇宙でも H_2O 、 SiO 、 OH などの分子からのレーザー現象が観測されている。レーザー (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation) のマイクロ波での現象である。

ロックインアンプ

信号を変調する事によって、そのスペクトルを雑音スペクトルの主成分から離れた周波数帯域に移し、位相敏感検波により、よい S/N で検出する方法をロックイン検出 (lock-in detection) という。これを用いる増幅器をロックインアンプ (lock-in amplifier) という。

位相敏感 (弁別) 検波 (Phase Sensitive Detection)

雑音と変調された信号 $s(t) \sin \omega t$ を含む入力信号から、包絡線信号 $s(t)$ だけを検波する方法。一般に PSD の回路は、掛算回路とそれに続くローパスフィルターの積分回路から構成される。掛算回路では、入力信号と変調信号 $\sin \omega t$ に同期した参照信号との積演算が行われ、これがローパスフィルターにより積分される。