

物理学実験II: マイクロ波分光

Ver. 2014 年 10 月 1 日

担当:

山本智 (理学部 1 号館 511b 号室: 内線 24197)

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

坂井南美 (理学部 1 号館 503 号室: 内線 24217)

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

渡辺祥正 (理学部 1 号館 503 号室: 内線 24217)

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

吉田健人 (理学部 1 号館 503 号室: 内線 24217)

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

実験室: 理学部 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輻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 10 K 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。

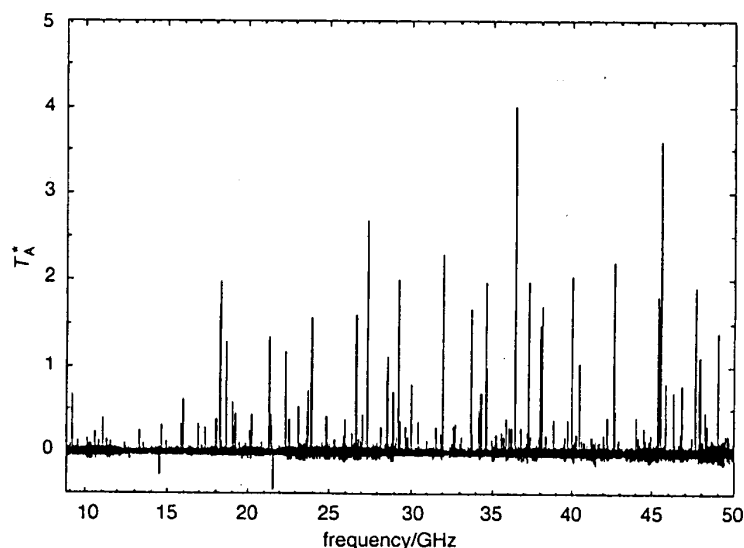


図 1 国立天文台 45 m 電波望遠鏡によるおうし座分子雲のマイクロ波スペクトル。等周波数間隔でスペクトル線が現れていることに注意。

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付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、マイクロ波の強度測定や導波管の特性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. マイクロ波の検出法と導波管の特性を学ぶ
2. 硫化カルボニル (OCS) の回転スペクトル線 ($J = 2 \leftarrow 1$) 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。

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 $H_{\text{rot}} = L^2/2I$ 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 $J = 0, 1, 2, \dots$ として $\hbar^2 J(J+1)$ であるから、回転運動のエネルギー固有値は

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

となる。ただし $B = h/8\pi^2 I$ 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、

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

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 2 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。

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

*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。

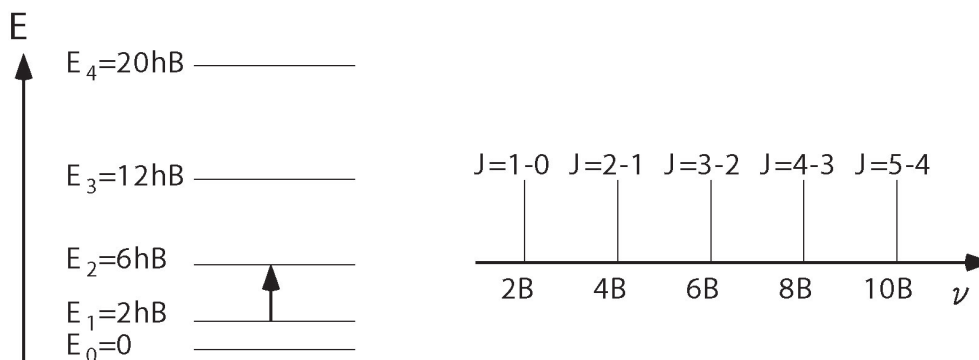


図2 直線分子の回転エネルギー準位と遷移周波数

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）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。

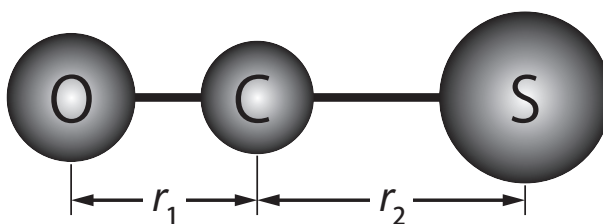


図3 硫化カルボニルの分子構造

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} の和となる。

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

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

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

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 4 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。従って、 $J=1 \leftarrow 0$ 遷移は $M=0$ の 1 つのスペクトル線が観測され、 $J=2 \leftarrow 1$ 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 4 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。

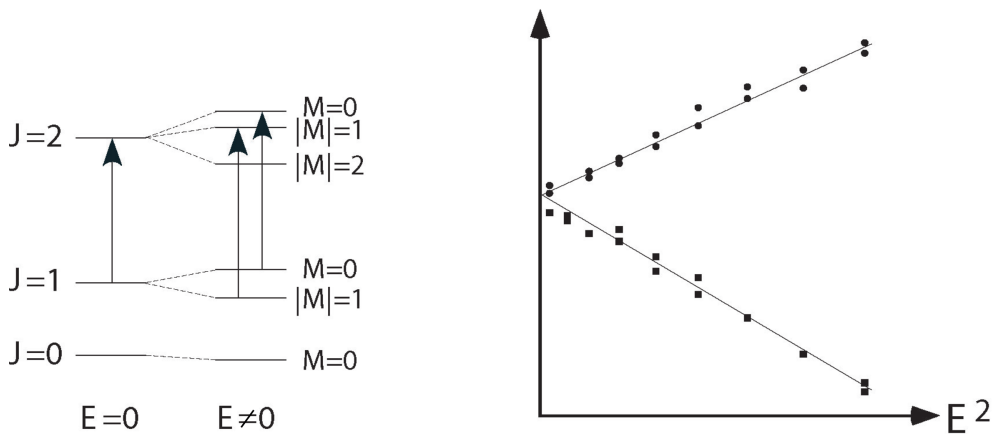


図 4 シュタルク効果による回転エネルギー準位の分裂（左）と、 $J=2 \leftarrow 1$ 遷移のシュタルク効果の測定（右）

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 $J = 2 \leftarrow 1$ 遷移の $M = 0, 1$ 成分および $J = 1 \leftarrow 0$ 遷移の $M = 0$ 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)。
- 高電圧電源 (図 6 の 2) 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マイクロ波シンセサイザーを用いる。周波数は PC から GPIB インターフェースを介して制御される。

マイクロ波信号は導波管セルを通して検波される。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、吸収がある場合には 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、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 PC からの制御で行われる。周波数を設定し、位相検波器からの出力を測定することを繰り返し、PC 上にスペクトルを図示する。測定データは PC に自動的に保存されるので、USB メモリなどに移して取り出して、解析に用いる。

測定装置のブロック図

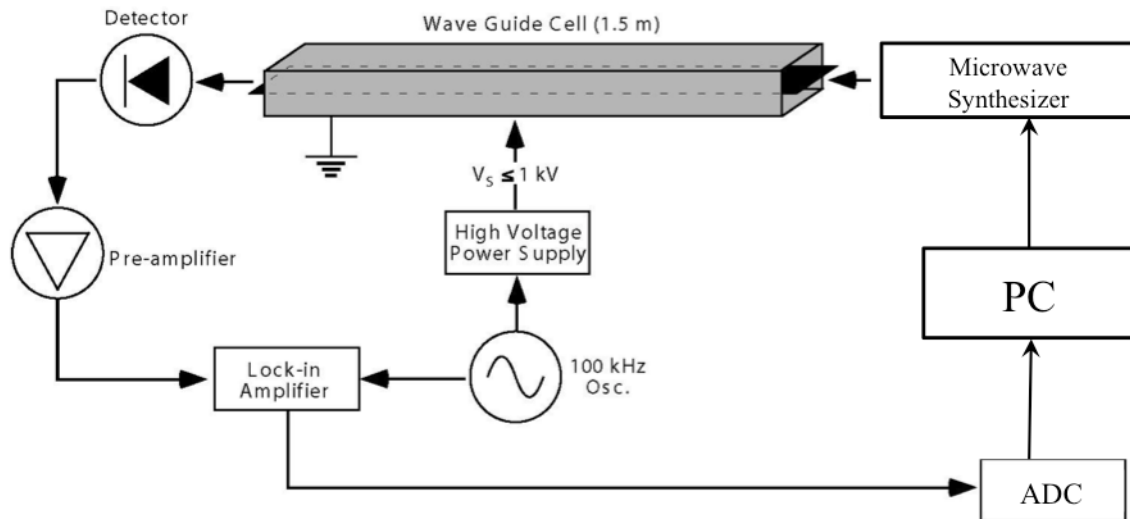


図 5 実験装置概念図

4.3 マイクロ波検出法と導波管の特性の実験

4.3.1 マイクロ波（電波）の検出法

マイクロ波は交流信号なので、ダイオードで検波して直流信号に変換して検出する。図 7 に半導体ダイオードの特性を模式的に示す。逆方向には電流は流れず、また、順方向も PN 接合の接触電位差分の電圧を超えるまで電流は流れない。しかし、その接触電位差を超えると急激に電流が流れる。その電流-電圧特性は $V > 0$ として次のように近似できる。

$$I \cong aV^2 \quad (14)$$

ダイオードに入力されるマイクロ波の電圧振幅を V_0 とすると、電力は V_0^2 に比例する。従って、ダイオードに流れる電流は近似的にマイクロ波の電力に比例する。この電流を抵抗に流して電圧に変換して測定すれば、マイクロ波の電力を測定できる。上記のダイオードの電流-電圧特性を利用して検出する方法を二乗検波と言う。この特性は電力が十分小さい時にだけ成り立つことに注意する必要がある。

マイクロ波シンセサイザーの出力を検波用ダイオードにつないで、その出力電圧をデジタルマルチメーターで読み取る。マイクロ波シンセサイザーの出力を変えながら、出力電圧を読み取り、両者が互いに比例することをグラフを書いて確かめよ（二乗検波の確認）。

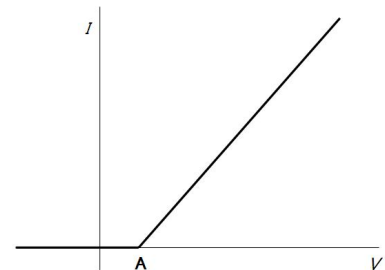


図 7 ダイオードの I-V 特性

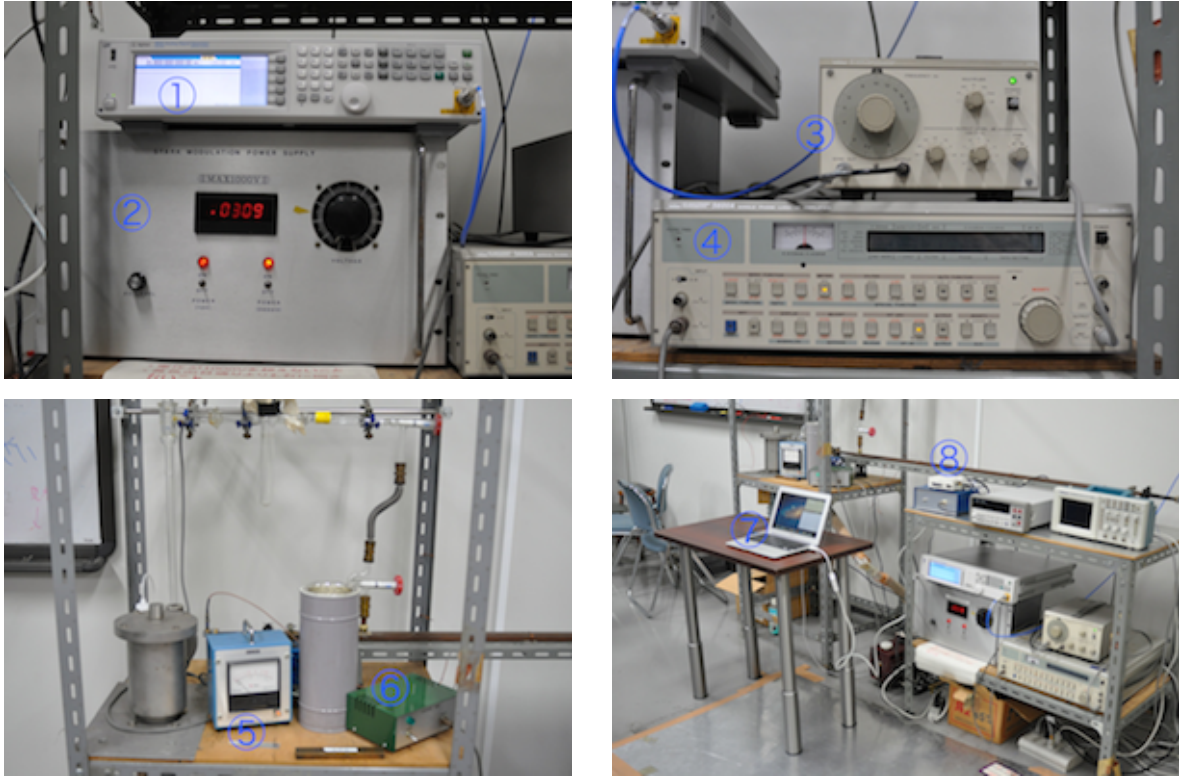


図6 実際の装置。1. マイクロ波シンセサイザー 2. 高電圧電源 3. 変調信号発振器 4. 位相検波器
5. 真空計 6. 100 kHz プリアンプ 7. PC 8. ADC

4.3.2 限られた空間を伝わる電磁波

図8に示すような完全導体でできた矩形導波管を考える。導波管の中は真空とする。Maxwell方程式から得られる波動方程式は次のようになる。

$$\Delta \mathbf{E} = \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \quad (15)$$

$$\Delta \mathbf{B} = \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} \quad (16)$$

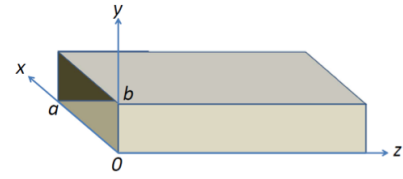


図8 矩形導波管

z 方向へ進む波を考えると、

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}'(x, y) \exp(i\gamma z - i\omega t) \quad (17)$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}'(x, y) \exp(i\gamma z - i\omega t) \quad (18)$$

と書けるので、これを波動方程式に代入すると、

$$\frac{\partial^2 \mathbf{E}'}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{E}'}{\partial y^2} + k^2 \mathbf{E}' = 0 \quad (19)$$

$$\frac{\partial^2 \mathbf{B}'}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{B}'}{\partial y^2} + k^2 \mathbf{B}' = 0 \quad (20)$$

を得る。ここで、

$$k^2 = -\gamma^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \quad (21)$$

である。この方程式を境界条件の下で解くことにより k が求まり、それをもとに γ が決まる。

そこで、Maxwell 方程式に戻って、 $\mathbf{E}'$ 、 $\mathbf{B}'$ の各成分の関係を整理する。

$$\text{rot} \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (22)$$

から、たとえば y 成分は

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} + \frac{\partial B_y}{\partial t} = 0 \quad (23)$$

なので、

$$i\gamma E'_x - \frac{\partial E'_z}{\partial x} = i\omega B'_y \quad (24)$$

を得る。一方、

$$\text{rot} \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (25)$$

において、 x 成分に着目すると

$$\frac{\partial B_z}{\partial y} - \frac{\partial B_y}{\partial z} - \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial E_x}{\partial t} = 0 \quad (26)$$

となる。これより

$$\frac{\partial B'_z}{\partial y} - i\gamma B'_y = -i\omega \epsilon_0 \mu_0 E'_x \quad (27)$$

を得る。(24) と (27) から、

$$E'_x = \frac{i}{k^2} \left(\gamma \frac{\partial E'_z}{\partial x} + \omega \frac{\partial B'_z}{\partial y} \right) \quad (28)$$

という関係が得られる。同様にして、各成分を組み合わせて次の式が求まる。

$$E'_y = \frac{i}{k^2} \left(\gamma \frac{\partial E'_z}{\partial y} - \omega \frac{\partial B'_z}{\partial x} \right) \quad (29)$$

$$B'_x = \frac{i}{k^2} \left(-\omega \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial E'_z}{\partial y} + \gamma \frac{\partial B'_z}{\partial x} \right) \quad (30)$$

$$B'_y = \frac{i}{k^2} \left(\omega \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial E'_z}{\partial x} + \gamma \frac{\partial B'_z}{\partial y} \right) \quad (31)$$

この関係からわかるように、 E'_z 、 B'_z がわかれば、他の成分は全てわかることになる。従って、

$$\frac{\partial^2 E'_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E'_z}{\partial y^2} + k^2 E'_z = 0 \quad (32)$$

$$\frac{\partial^2 B'_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 B'_z}{\partial y^2} + k^2 B'_z = 0 \quad (33)$$

を解けばよい。ここで、 $E'_z = 0$ 、 $B'_z = 0$ は上の解だが、すべての成分が 0 になるので無意味となる。従って、導波管を伝わる電磁波では完全な横波は存在せず、電場もしくは磁場が進行方向に成分を持たなければならない。 $E'_z = 0$ のときを TE 波 (Transverse Electric wave)、 $B'_z = 0$ のときを TM 波 (Transverse Magnetic wave) と呼ぶ。

TE 波を考える。 $E'_z = 0$ なので、上記の (28)–(31) の関係式は簡略化され、

$$E'_x = \frac{i\omega}{k^2} \frac{\partial B'_z}{\partial y} \quad (34)$$

$$E'_y = -\frac{i\omega}{k^2} \frac{\partial B'_z}{\partial x} \quad (35)$$

$$B'_x = \frac{i\gamma}{k^2} \frac{\partial B'_z}{\partial x} \quad (36)$$

$$B'_y = \frac{i\gamma}{k^2} \frac{\partial B'_z}{\partial y} \quad (37)$$

となる。ここで境界条件として $y = 0, b$ で $E'_x = 0$ とすると、

$$\left(\frac{\partial B'_z}{\partial y} \right)_{y=0,b} = 0 \quad (38)$$

であり、 $x = 0, a$ で $E'_y = 0$ とすると、

$$\left(\frac{\partial B'_z}{\partial x} \right)_{x=0,a} = 0 \quad (39)$$

となる。この条件を満たす解は

$$B'_z = B_0 \cos \frac{m\pi x}{a} \cos \frac{n\pi y}{b} \quad (40)$$

このとき、

$$k^2 = \left(\frac{m\pi}{a} \right)^2 + \left(\frac{n\pi}{b} \right)^2 \quad (41)$$

となる。(ただし、 m, n は 0 または正の整数で、 $m = n = 0$ は除く。) この時のモードを TE_{mn} と表す。このようにして、境界条件から k を定めることができた。このとき、 γ は

$$\gamma^2 = \frac{\omega^2}{c^2} - \left[\left(\frac{m\pi}{a} \right)^2 + \left(\frac{n\pi}{b} \right)^2 \right] \quad (42)$$

である。右辺は正でないと z 方向へは伝播しないので、

$$\nu > c \sqrt{\left(\frac{m}{2a} \right)^2 + \left(\frac{n}{2b} \right)^2} \equiv \nu_c \quad (43)$$

でなければならない。即ち、 ν_c 以下の周波数は導波管を通ることができない。この ν_c を遮断周波数 (Cut-off Frequency) と言う。もし、 $a > b$ とすると、 $m = 1, n = 0$ の時 (TE_{10}) が最も低い遮断周波数を与え、その値は

$$\nu_c = \frac{c}{2a} \quad (44)$$

である。

導波管内での電磁波の波長 (λ_g) は真空中とは異なる。 $\omega_c = 2\pi\nu_c$ とすると、

$$\gamma^2 = \frac{\omega^2 - \omega_c^2}{c^2} \quad (45)$$

なので、

$$\lambda_g = \frac{c}{\sqrt{\nu^2 - \nu_c^2}} \quad (46)$$

となる。遮断周波数付近で管内波長は急激に長くなる。

課題 4 上に示した方法と同様にして、TM 波について E'_z の標識を求めよ。また、最も遮断周波数が低いモードと、その遮断周波数を求めよ。

4.3.3 電磁波の干渉

2つの単色波の干渉を考える。それらの電場ベクトルは同じ方向を向いているとし、その成分だけを考える。2つの単色波の電場を E_1 、 E_2 とすると、重ね合わせの電場強度は、

$$E = E_1 + E_2 \quad (47)$$

である。干渉強度は、

$$I = \langle EE^* \rangle = \langle E_1 E_1^* \rangle + \langle E_2 E_2^* \rangle + \langle E_1 E_2^* \rangle + \langle E_2 E_1^* \rangle \quad (48)$$

となる。ここで、 δ を位相差として、

$$E_1 = a_1 \exp(-i\omega t) \quad (49)$$

$$E_2 = a_2 \exp(-i\omega t + i\delta) \quad (50)$$

と表すと、

$$I = a_1^2 + a_2^2 + 2a_1 a_2 \cos\delta \quad (51)$$

となる。また、 $I_1 = a_1^2$ 、 $I_2 = a_2^2$ を使うと、

$$I = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos\delta \quad (52)$$

と書ける。なお、光路差が L のとき、

$$\delta = \frac{2\pi L}{\lambda} \quad (53)$$

である。

導波管でできた簡単な共振器で、上記の干渉を実験する。導波管の管内波長は (46) 式で与えられるので、これを考慮して遮断周波数付近で強めあう周波数を 4 か所程度予想せよ。それを実験と比較して考察せよ。

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、

$$F(\nu_0 + \delta\nu \sin \omega t) = F(\nu_0) + \left. \frac{dF}{d\nu} \right|_{\nu=\nu_0} \delta\nu \sin \omega t + \dots \quad (54)$$

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、

$$I = \frac{1}{T} \int_0^T \left. \frac{\partial F}{\partial \nu} \right|_{\nu=\nu_0} \delta\nu \sin \omega t \sin(\omega t + \varphi) dt \quad (55)$$

$$\propto \left. \frac{\partial F}{\partial \nu} \right|_{\nu=\nu_0} \cos \varphi \quad (56)$$

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。

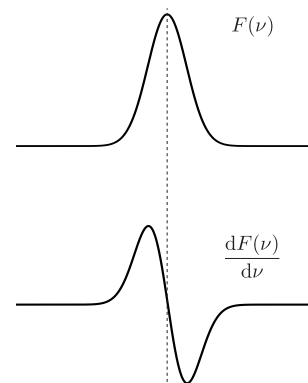


図9 吸収強度と微分形

*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

- 4.4 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。
- 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。

4.6 $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{32}\text{S}$ の $J = 1 \leftarrow 0$ スペクトルの測定

- 4.4 と同様にして $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{32}\text{S}$ の $J = 1 \leftarrow 0$ スペクトルを測定する。
- 様々な電場強度について測定し、 $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{32}\text{S}$ 分子の回転定数及び電気双極子モーメントを再度決定する。

5 レポート

1. 課題 1 ～ 4 を解け。
2. 二乗検波の実験及び導波管特性の実験についてまとめ、考察せよ。
3. 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、回転定数、原子間距離には必ず誤差を付すこと。文献値と比較し、考察せよ。
4. 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 はメーザー・レーザー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、

$$S = \sum_i (y_i^0 - y_i)^2 \quad (57)$$

が最小になるようにフィットするということである。

$$\frac{\partial S}{\partial a} = - \sum_i 2x_i(y_i^0 - ax_i - b) = 0 \quad (58)$$

$$\frac{\partial S}{\partial b} = - \sum_i 2(y_i^0 - ax_i - b) = 0 \quad (59)$$

より

$$a \sum_i x_i^2 + b \sum_i x_i = \sum_i x_i y_i^0 \quad (60)$$

$$a \sum_i x_i + bN = \sum_i y_i^0 \quad (61)$$

なので

$$a = \frac{N \sum_i x_i y_i^0 - (\sum_i x_i)(\sum_i y_i^0)}{N \sum_i x_i^2 - (\sum_i x_i)^2} \quad (62)$$

$$b = \frac{(\sum_i x_i^2)(\sum_i y_i^0) - (\sum_i x_i)(\sum_i x_i y_i^0)}{N \sum_i x_i^2 - (\sum_i x_i)^2} \quad (63)$$

となり、

$$\frac{\partial a}{\partial y_i^0} = \frac{Nx_i - \sum_j x_j}{N \sum_j x_j^2 - (\sum_j x_j)^2} \quad (64)$$

$$\frac{\partial b}{\partial y_i^0} = \frac{\sum_j x_j^2 - x_i \sum_j x_j}{N \sum_j x_j^2 - (\sum_j x_j)^2} \quad (65)$$

ここから、 a と b の誤差は

$$\begin{aligned} (\delta a)^2 &= \sigma^2 \sum_i \left(\frac{\partial a}{\partial y_i^0} \right)^2 \\ &= \sigma^2 \sum_i \left(\frac{Nx_i - \sum_j x_j}{N \sum_j x_j^2 - (\sum_j x_j)^2} \right)^2 \\ &= \frac{\sigma^2}{\left\{ N \sum_j x_j^2 - (\sum_j x_j)^2 \right\}^2} \left\{ N^2 \sum_i x_i^2 - 2N \left(\sum_i x_i \right)^2 + N \left(\sum_i x_i \right)^2 \right\} \\ &= \frac{N\sigma^2}{N \sum_i x_i^2 - (\sum_i x_i)^2} \end{aligned} \quad (66)$$

$$\begin{aligned}
(\delta b)^2 &= \sigma^2 \sum_i \left(\frac{\partial b}{\partial y_i^0} \right)^2 \\
&= \sigma^2 \sum_i \left(\frac{\sum_j x_j^2 - x_i \sum_j x_j}{N \sum_j x_j^2 - (\sum_j x_j)^2} \right)^2 \\
&= \frac{\sigma^2}{\left\{ N \sum_j x_j^2 - (\sum_j x_j)^2 \right\}^2} \sum_i \left\{ \sum_j x_j^2 - x_i \sum_j x_j \right\}^2 \\
&= \frac{\sigma^2 \{ N(\sum_i x_i^2)^2 - 2(\sum_i x_i)^2(\sum_i x_i^2) + (\sum_i x_i)^2(\sum_i x_i^2) \}}{\{ N \sum_i x_i^2 - (\sum_i x_i)^2 \}^2} \\
&= \frac{\sigma^2 \sum_i x_i^2}{N \sum_i x_i^2 - (\sum_i x_i)^2} \tag{67}
\end{aligned}$$

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 (dB) = $10 \log_{10} (P_2/P_1)$ 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。