物理実験学（１学期）
講義ノート

平成１８年度

青木保夫

安全に実験をする為に
事故例・インターロックとリレー回路
測定
測定すると言う事・ 基準となる物理量 (SI 単位系)・比較
　　測定器や測定装置の設置
代表的な測定器：長さ・重さ・時間・電位差と電流・磁場・圧力・温度
誤差
誤差とその分布・平均誤差と確率誤差・真の値の近似値 (最確値)・誤差の推定
平均値の誤差・誤差の異なる測定値・間接測定の誤差
ポアッソン分布
最小 2 乗法
簡単な例・線形問題の最小化と Householder 法・追加すべき注意事項
非線形最小 2 乗法・シンプレックス法・可変計量法・誤差に付いて
ブートストラップと誤差論
数値例
真空技術
基本概念
簡単な真空の実現：油回転ポンプ・排気速度・真空の圧力測定
高真空の実現：油拡散ポンプ・真空度の測定
　　軸流分子ポンプ・クライオポンプ・イオンポンプ
排気速度等：コンダクタンス・吸着とアウトガス・摩擦計数と真空
真空機器関連部品：フランジ・ベローズ・真空用ホース・リークポート
　　仕切り弁・運動の導入
洩れテスト：判断と手順・ 4 重極質量分析器
簡単な真空系の例：排気速度の概算・真空計の設置
真空系制御回路の実例
冷却水系

安全に実験をする為に

ある事故例： 狭い実験室で液体窒素がこぼれ、気化した窒素が部屋中に充満し、その部屋に居た実験者が窒息死した。
液体窒素の比重は０．８３だとする。室温が２０度 C だとすると、３４ cc の液体窒素が２４ ℓ の気体になる。約７００倍に体積が増える。こんな事実もある。液体窒素の沸騰点は，1 気圧で $-$ １９６度 C。一方、酸素の沸騰点 ($-$ １８３度 C) の方が少し高いので、窒素が蒸発する温度でも、空気中の酸素が液化する可能性がある。極端な事を言えば、液体窒素が全て蒸発し、液体酸素と置き換わる！
深い井戸や、密閉した空間に多量の有機物が長期間保存してあった様な場合、最初に立ち入る場合には、カナリア等の小鳥を同道すると、酸欠や異常ガスの検出に有効である。小鳥は体温が高く、循環系の時定数が短いためである。

ある法医学の講義ノートには、以下の記述があった。一回の呼吸量は約５００ ml(酸素１００ ml)、血液や組織内の酸素量は約８５０ ml であり、酸素消費量は ３００ ml/分 だから、酸素供給停止後、数分で体内の酸素は無くなる。
又、あるガス会社のアルゴンガスの安全性に関するデータシートには、以下の記述があった。
吸入... 毒性はないが、空気と置換することにより単純窒息性のガスとして作用する。酸素濃度１７ vol %が低濃度安全限界であり、酸素濃度１７ vol %で初期の酸欠症状が現われ、１６ ~ １２ vol %では、脈拍・呼吸数の増加、精神集中に努力がいる、細かい筋作業が困難、頭痛等の症状が起きる。 １０ ~ 6 vol %で意識不明、中枢神経障害、けいれんを起こし、昏睡状態となり、呼吸が停止し、６ ~ ８分後心臓が停止する。 6 vol %以下の極限的な低濃度では、その一回呼吸で一瞬のうちに失神、昏睡、呼吸停止、けいれんとなり６分で死亡する。 酸素濃度6 vol %以下の無酸素空気の一回呼吸の危険性については注意を要する。

大きな液体窒素の Dewer 瓶から金属の蛇管を経由して液体窒素を汲み出す場合、汲み出し開始後暫くすると蛇管の表面がが濡れてきて、液滴が垂れている場合がある。友人がこの液滴に点火したマッチを近つけると激しく燃え上がった。空気中の酸素が蛇管表面で液化したためだろう。
ある大学の半導体の実験室では、シラン (SiH_4) という硅素を含んだガスを使用していたが、シランが爆発して、大きな事故となった。この時死者が出たかどうかは記憶に無い。
シラン：外観 - 無色透明の気体。 臭気 - 臭気は濃度によって異なり、非常に希薄な状態では無臭、濃くなると胸を悪くするような不快臭となる。 シランは室温でも自然発火することが知られており、空気中および塩素中でも爆発的に燃焼する。
ある大学の院生がフライス盤で金属加工をしていた。フライス盤の運転中に切り粉を取り除こうとして、誤って手指を落してしまった。
この事故があってから、国立大学の student shop (学生が自由に金属加工をするための作業場所) への立ち入りが免許制になった。一時は僕も写真入りの免許証を持っていた。
放射線検出器の性能テストの為に使用していた放射性同位元素が行先不明となり、ゴミ焼却場のゴミためから発見された。
放射性同位元素の取り扱いには、充分な注意が必要な事は論を待たないだろう。普段は耐火性の金庫に保管し、使用者は保管中のどの放射線源を、誰が、何時、何処

へ持ち出し、何時返却したか等の必要事項を記録せねばならない。
放射線作業従事者は健康診断と年に一度の更新講習会を受けねばならない。
実験室の重量物運搬にクレーンを使用するが、この運転ミスで実験器具を壊した学生が居た。
クレーンの運転には、資格が必要である。クレーンには色々な種類があり、種類毎にクレーンの運転免許が必要である。
玉掛けという作業についても注意しておく必要がある。この ‘玉掛け’ という単語の意味を知らない学生がほとんどだろう。ロープの先端部分は解けない様に編んであるか、クレーンのフックに掛けやすい様に環に加工してある。この環の部分を玉と呼ぶ。因みに英語では eye である。この玉をクレーンの鉤に掛ける事で代表される作業を玉掛けと呼ぶ。この作業は非常に危険である。手元の操作床上式クレーン運転技能特例講習会終了証と玉掛技能講習終了証には、作業中は必ず携帯することと書いてある。クレーンを使用する作業には、クレーンの運転と玉掛けの二つの資格が必要である。無資格者は運転や作業をしてはいけないのだろう。ついでに言うと、直径 １０ mm のワイヤーロープの強度は４．９ トンであり, 安全係数は６倍とらねばならないので, 鉛直に一本のロープで吊れる荷重は約８００ kg である。

これらの事故は、後から考えると何でそんな単純なところで事故が起こったのだ！と言う声が聞こえてくるかも知れない。しかし事故が起こって居るのは事実である。後知恵という言葉がある。英語でも hind wisdom というのは辞書に載っているから日本だけの事ではない。事前に注意しても、注意しきれないという事だろう。

人類は、本を読む事により自分が経験していない事柄を、あたかも自分が経験したかのようにして行動出来る唯一の動物である。出来るだけ安全にも興味を持ち、本を読んで頭の片隅に残しておこう。

人間は、他の全ての動物と同じように自己保存の本能を持っていると思う。自己の全ての感覚を麻痺させるような事はしないでおこう。例えば、タバコは吸わない方が良い。自分が煙の臭いに鈍感になるばかりでなく他人の嗅覚も奪っている。勿論、引火性がある物質が近くにあるならば喫煙はとんでもない事である。放射線管理区域では、喫煙 (食事は当然であるが化粧も) そのものが禁止されている。

安全は、ハイテク機器に頼るものでは無い場合が多々ある。特に実験室ではそうである。

重大事故が起こって始めて、大きな安全装置の必要性が認識されるという事を繰り返している。これを墓石行政という。

物理屋の方が、化学屋よりも安全に鈍感であるのだろうか？物理関係の書庫では安全に関する教科書は少ない (ほとんど見掛けない)。

例えば、化学同人発行の「実験を安全に行うために」といった本は各自の責任で必ず読んでおこう。

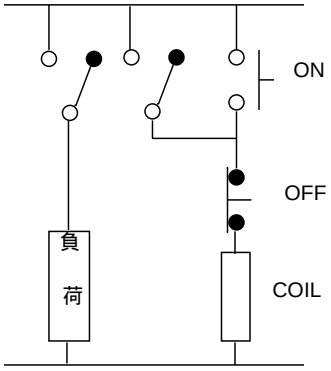
first aid 関係の本は、日本赤十字社から、発行されているのではないかと思う。個人的には、米国の沿岸警備隊が発行していた簡易本の日本語訳を読んだ事がある。

参考資料： 筑波大学発行。‘安全のための手引’ 。‘実験系廃棄物取扱の手引’

インターロックとリレー回路

実験装置を安全に運転するのに必要な要素として、リレーを取り上げる。論理回路の

実験を 1 年生で経験したかも知れない。リレーは電磁継電器と呼ばれる事もあるが、電磁石と複数の電気接点から構成された、かなり安価な電気部品である。この電磁石に通電すると、閉じる接点と開く電気接点がある。このリレーを用いた回路として、少なくとも自己保持回路だけは覚えておこう。



上下には 2 本の横線が走っているが、この 2 本の線が電源を表している。この線を母線と呼ぶ人もいる。ON と書いてある部分は横に突き出た部分を押すと、押している間だけ白丸の接点間が通電する。OFF と書いた部分では、押した時だけ黒丸の接点間が開き、電流を流さない。COIL と書いた四角の部分が、電磁石のコイル部分である。 1 個の黒丸と 2 個の白丸で構成された部分が電気接点であり、コイルに電流が流れていなければ、図示したように、白丸と黒丸の接点がつながっている。リレー回路では、必ずコイルに通電していない状態で接続されている場合を図示する。この黒丸接点を、normally close (JIS では b) 接点と呼ぶ。図の位置で、b 接点と継っている接点は、共通 (JIS では c) 接点と呼ぶ。コイルに通電した時には、白丸同志が接続される。通電時に接続される接点を normally open (JIS では a) 接点と呼ぶ。

次にこの回路の動作を説明しよう。ON スイッチを押すと、上の電源線からコイルを経由して下の電源線に電流が流れる。従って a 接点が閉じ、ON スイッチから指を離しても、コイルには電流が流れ続ける。電気接点が複数個あるならば、この図で示した様に接点を経由して負荷に通電する事が出来る。この状態で OFF スイッチを押すと、コイルに電流が流れなくなり、a と c 接点間の接続が切れる。OFF スイッチから指を離し、黒丸間の導通が回復してもリレーコイルは励磁されていない。次にコイルに通電中に停電した場合を考える。この時にも当然リレーの電磁石の励磁は終る。そしてリレーは切れた状態のままとなり、負荷に電流は流れない。

OFF スイッチを押すか、停電時にリレーが切れ、再度 ON スイッチを押すまでリレーは切れたままの状態となる。

自己保持回路のもう一つの大切な点は次の点にある。図の OFF スイッチとコイルの中間に別の (リレーの) 接点を挿入するという使用法がある。この追加接点は複数あっても構わない。この追加接点は、ある種の条件が満足される時にのみ閉じる様に設計されているならば、この設計条件を満足しない限り、いくら ON スイッチを押してもリレーは作動しない事になる。例えば、冷却水が流れていなければ絶対にスイッチが入らない油拡散ポンプを設計する事が出来る。この場合、冷却水が断水しても拡散ポンプの電源を切る事が出来る。旨く工夫するとかなり複雑な組合せの設計もでき、安全が確認できないと、装置が運転出来ない様にする事が可能である。逆に危険な状態になれば、自動的に装置を停止させる事も可能である。もっと複雑化すると、停止した時には必ず安全側にスイッチが倒れる様な設計にする事も可能である。装置間でお互いに安全を確認して

動作が開始、及び持続される様な設計思想をインターロックと呼び、何時も安全側に動作が選択される様な設計を fall safe と呼ぶ。

リレーでの制御が出来るようになると、PC(programable controller) や計算機での制御を考える様になるだろう。リレーの応答時間 (数１０ミリ秒程度) を無視して考えて良い程度の状況ではあまり問題にならないが、もっと早い応答時間での制御を考える時には、時間遅れという事を真剣に考えておかないといけない。この様な状態にも対応する制御系を設計しようとするならば、先ず自動制御の本を読み、ラプラス変換と伝達関数の勉強をしっかりする事を勧める。位相遅れという概念も頭に叩き込まねばならない。

計算機制御を考える前に、各種のセンサーの性能と信頼性を充分に検討する事、及び信号伝達系での雑音混入の可能性が極力排除出来る様な環境も作っておかねばならない。

電源系統の多重化は存外忘れやすい部分だと思う。現代的な機器は電気に頼りすぎているから、これも非常に大切な要素である。

計算機を使い始めた人間の陥りやすい誤解の一つに、計算機を主、被制御装置を従とする考えがある。計算機で使用するプログラムは可変要素であるが、被制御装置はその存在目的があってそこに置かれる訳だから、被制御装置こそが主であると考えねばいけない。被制御装置が複雑に錯綜するようになると、階層化も考えねばならないし、各種の信号の意味等を統一して、文書をしっかりと残す必要がある。

機械に安全を監視させる事は、非常に良い事であるが、いつでも程度問題であるという事も知っておこう。

名古屋空港に着陸体制に入った航空機の制御権をパイロットと計算機が取り合いを起こし沢山の乗客が亡くなった事件は覚えている人もいると思う。この後、航空機ではいつでも計算機からパイロットが制御を取り戻せる機構に改められた。２００２年にヨーロッパで航空機の空中衝突事故があり、その後やっぱり機械に任せた方が良いという意見が息を吹き返している。

新幹線が、西へ延びた時にも同じような事があった。計算機制御をやりすぎると、運転者は手持ち不沙汰になりすぎて、緊張を欠きかえって注意散慢となりすぎるという反省がなされた。

大阪での花博だったかな？ 無人運転のモノレールで事故があったが、対応が後手にまわり大きなトラブルとなった。機械を過信した為にどう対応したら良いのか、指揮や情報伝達系統の整備等が不十分だったのだろう。

機械を過信してもいけないが、逆に信用出来ない状態にあった為に事故を大きくした例として、スリーマイルアイランドの原子力発電所での冷却水洩れを引用しておこう。ここでは、制御系の維持・管理が充分に行われていなかったので、冷却水のバルブが開いているのに、多くの運転員がその表示を無視した。

安全監視装置を発想しはじめた素人が失敗しやすい点を一つ指摘しておこう。

安全監視装置は、事故が起こった (起こりそうになった) 場合に中央装置や監視者に事故を伝える様な設計を考えがちである。これは間違いである。安全監視装置が故障していた時には、絶対に事故報告をしてこないからである。安全監視装置は、定期的に安全である事を中央に連絡する様にシステムを設計するべきである。即ち、無事の知らせが無いのは異常の知らせであるという発想に立って安全監視系を設計するべきである。

測定

定性的に現象を記録する場合を観測、定量的な記録を残す場合を測定と呼んでおこう。定量的な測定とは、何か標準となる大きさが存在し、この大きさと対象の大きさを比較することである。従って大小を比較する事で、測定が開始される。大小の比較の次には、標準となる大きさの整数倍大きいという概念が登場し、１よりも絶対値が小さい物理量を記述

するために、有理数という概念が作られた。精度をあまり要求しなければ、有理数は便利な概念であるが、高精度を要求すると１０進小数を利用する方が便利である。別に１０に拘る理由は無いのだが、人間の両手の指の数が１０だったから１０進数を利用しているだけだと考えておこう。今でも、１２進数、２４進数、６０進数等が混用されている。

人類はその後、実数の稠密性という概念を発明し、今日の解析学を築くが、物理という概念からは抽象化が進みすぎている様に感ずる。

例えばカントルの公理を思い浮かべてみよ。あまりにも我々の日常生活から浮き上がっている事が分かるだろう。微分や積分無しには現在の物理の根底が覆るという主張もあるだろう。しかし、離散的な数値に対する関係式と微分方程式とは１対１に対応が付くとは限らない。戸田盛和著 波動と非線形問題３０講に登場する学習曲線の例を挙げておこう。

ソリトン研究に大きく貢献した数学者の広田良吾の著書 差分方程式講義 の記述も将来に向けて気になるところである。

定量的な測定には、標準とすべき大きさの定義が必要である。いろいろな物理量を定義する事が可能であろうが、国際的な混乱を防ぐ為に、出来るだけ SI に準拠した単位系と物理量を使用しよう。簡潔な解説が 理科年表 にあるから、もしも読んでいないならば、必ず読んでおこう。一方、基準は不変ではなく、時間と共に変化する事も知っておくべきである。２００１年 (だったと思う) に万有引力定数の測定精度が約１桁改良された。これを受けて、１ー２年後には数値の改定が行われるだろう。

２００５年３月末現在、やっと改定版が出版された。以下の論文を参照すると良い。Revies of Modern Physics. 77 巻 (２００５) １ページ。

参考資料： SI の総本山 (？) のホームページは、 www.bipm.org である。ここに置いてある、資料を漁るのが良いだろう。別のサイトとして、アメリカの NIST も引用しておこう。http://physics.nist.gov/constants

又、以下の本が参考になるだろう。(非常に分厚いよ。)

Proceedings of the International School of Physics “Enrico Fermi” Course CXLVI “Recent Advances in Metrology and Fundamental Constants”

http://physics.nist.gov/cuu/Constants/index.html は、物理定数を与えてくれる。

清水忠雄が科学 (２００１) ７１巻２１５ (岩波書店) に 基礎物理定数と物理標準 という解説を書いている。自分が毎日使用している物理定数 (日時を無視して生きている現代人はほとんどいないだろう) に付いての最近の話題だと思って読むとよい。

もう一つの参考文献：‘数理科学’２００２年３月号 に大苗敦、藤井賢一著 ” 基礎物理定数の改定” という文を見付けた。

アメリカ物理学会の会誌は毎年秋に、Buyers Guide という別冊を発行している。この Buyers Guide の先頭記事は 物理量の基準に付いて書いてある。日本物理学会ではこんな事はやっていない。

個人的に読んだ SI 関係の教科書は化学者が書いた本であった。

SI 単位系では、内部矛盾を出来るだけ排除して、一貫した定義を採用しようと努めている。７個の独立した物理量を定義し、平面角と立体角とを追加した９個を独立量としている。しかし、平面角や立体角は線分の長さや面積の比で定義される無名量であるという議論があったらしい。その後、 平面角と立体角は現在では、誘導単位 (derived unit) に移された。

SI では物理量の数値が大きくなりすぎたり、小さすぎる場合を想定し、桁表示の為の接頭語を用意している。

10^{-8} cm の事をオングストロームと呼んでいたが、nm (nano meter) や pm (pico meter) という表現で置き換わりつつある。

SI 以外の単位系の一つとして ヤード・ポンド法というのがある。ある時調べてみると、米国では 1 インチというのは ２５．４ mm の事であると定義されていた。ヤード・ポンド法はメートル法の亜流になったのかな？その昔、業者にインチで寸法を指定したところ、本当のインチですかそれとも２５．４ ミリの事ですかと問われた事があった。古い旋盤の gear box には１２０枚歯の隣に１２７枚歯の歯車がついている。１２０枚歯はメートル単位、１２７枚歯はインチ単位のネジを作るのに利用される。

科学論文の世界では SI を使用していないと受理されない場合があるが, 技術の世界では必ずしもそうではない。火星探査ロケットの設計図の単位をメートル法で書いたり、ヤード・ポンド法で書いたりした為に、大きな事故になった例 (１９９９年) を記憶している学生もいるだろう。

産業との連携という事もあるので、単位系を変更するという事はなかなかの大事業である。戦後１０年程度迄は、インチ系のネジが使用されていたが、現在では ISO ネジが主流である。しかし、自転車や各種パイプは、今でもインチが使用されている。

手元にボルトがあればその頭を見てみよう。小さな突起が意識的に付けてあれば、ISO ネジである。インチネジ (ウイットネジ) の頭には、直交した 2 本の線が刻印されているかもしれない。非常に注意深い人ならば、ネジ山の角度を調べると良い。ISO ネジは６０度であるが、インチネジは (ユニファイネジという例外もあるが) ５５度である。

基準とする物理量と対象とを比較する作業は、必ず誤差を伴う。誤差の原因は千差万別であり、特定出来る場合は少ないのが現実である。

比較

測定とは物理量を基準とする大きさと比較する事だと述べた。従って、最も基本となるのは直接比較である。基準となる量の有理数倍の量をあらかじめ作っておき、後は大小を比較すれば測定はおしまいである。昔の物理測定の教科書を見ると、目盛の１／１０迄読み取れと書いてある。目視には個人差があるから、１／１０迄というのは少しきつい気もする。

物理量は a よりも大きく b よりは小さいと結論する場合が多い。視力には限界があるから、この差 $b-a$ を拡大表示できるならば、測定精度を向上する事が可能である。差を拡大表示する一つの方法は、レンズを使用する事である。別のやりかたとして、副尺が発明された。

副尺の使用法は当然知っていると思う。主尺の n 目盛の区間を副尺では (n+1) 等分している。従って副尺の m 目盛目が主尺のある目盛線と一致するならば、副尺の零線は, 主尺の目盛の単位を単位として m/(n+1) 倍だけずれている事になる。n としては 9 とか１９が採用される場合が多い。

力学や光学的な梃による拡大や電気的な増幅器を利用する方法もある。

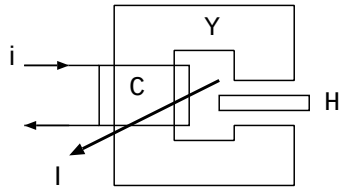
もしも、測定対象とする物理量と良く似た大きさを準備する事が出来るならば、この準備した大きさと測定対象との差を取り出し易いと考えられる。この時、有効数字という概念を用いるならば、まず有効数字の上の方の桁だけを取り出す作業をし、差の小さな部分を別途測定するという様に、２段階に測定を分離する事で測定精度が向上できると考えられる。このように、基準となる部分をまず差し引いて、残りの部分だけを精度良く測定するという考え方を、バーニヤ法と呼ぶ。

一方、基準となる大きさを連続的につくり出す事が可能な場合もあるだろう。その時は、基準と測定対象との差を可能な限り増幅し、差が 0 となる時の基準値を読み取れば良い。この様な測定法を零点法と呼ぶ。零点法が可能ならば、これが一番測定精度が高い

だろう。

測定すべき物理量を周波数に変換し、この周波数の波を基準となる波と干渉させ、ビートを数えるとか、ビートが 0 となる時の周波数を知ればかなり高精度の測定が可能である。

もうひとつの 零点法 (null method) の例として、直流の大電流を測定する手法としての DC-CT (direct current current transformer) を説明しよう。微小電流ならば、電路に大きさが既知の抵抗を挿入し、この抵抗での電圧降下を測定すれば電流は簡単に測定出来るが、大電流では抵抗での発熱を無視出来ないので、この方法は便利な方法ではない。



図で大文字 I と書いた部分は、バスバー (bus bar) を通じて大きな直流電流が流れているとする。この電路を透磁率が大きな材質で作った C 字型のクランプ Y で挟む。クランプにはコイル C が巻いてあり、ここに微小電流 i を流す。この結果、クランプのギャップには二つの直流電流 I と i に起因する磁場が発生する。この磁場を例えば 高感度のホール素子 H で測定する。電流 i を調整して、磁場が 0 となるようにする。この i は 大電流 I に比例するから、較正さえしておけば、電流 I が測定できる。この方法は零点法という特徴以外に、磁性材料の H-B 特性やその温度依存性に影響されにくいので、非常に安定度の高い測定が手軽に実現出来る。

測定器や測定装置の設置

実験室では、実験用の机の上に測定対象や測定器を置く場合が主だと思われる。この机が力学的に安定していなかったり、傾いていては信頼性のある測定結果を出すのに苦労する。先ず、机の力学的な強度が要求される。次に微小振動に対する安定性が要求される。ある程度の質量を持つ、たわみ難い机を 3 点支持するのが原則である。しかし作業性を考慮すると、 4 点支持の机が大半だろう。机を置く床の水平精度はあまり期待できないだろうから、机の足を調節する事になる。この時、水平を感度良く検出する道具として、水準器が利用できる。水準器は、大きな曲率半径を持つ透明なパイプに粘性の小さな液体と気泡を閉じ込め、力学的に変形しない様に固定し、全体が鉛直面内で傾けられる様に作られている。

信頼性のある直線や平面は、大きさを要求しなければ、購入するのは困難ではないだろう。しかし、入手した平面を、実験者が自分で水平に置く必要があるだろう。感度はあるが調整が狂っている水準器と平面を与えられて、 3 点支持されたこの平面を水平に置く方法を説明しよう。先ず、水準器を 2 本の机の足に垂直に置き、目盛の読みが a であったとしよう。次に、水準器を１８０度回転して目盛を読み、 b だったとしよう。差 $b-a$ の半分は水準器で、残りの半分は机の足の高さで調節する。次に、水準器を９０度回転し机の第 3 の足と水準器の調節に関し、先と同様の作業をする。この作業を、収束するまで行えば良い。

一度水準器を机の上に置き、気泡の位置を読みが a であったとする。次に水準器を１８０度回転し、気泡の位置をもう一度読み、 b とする。水準器を調節し、気泡の読みをこの状態で (a+b)/2 としておくと水準器はほぼ正しい状態になっていると期待して良いだろう。水準器を使用する前に確認すると良い。

測定器を置く部屋の温度や湿度を一定に保つ必要があるかもしれない。地下室に装置を設置し、太陽光が当たらない様にするのが、安直な方法だろう。恒温装置そのものがも

たらす温度差を気にしなければならない場合もある。例えば冷風の吹き出し口や、室内空気の循環に対する淀み点の存在等である。

問： 柱を鉛直に立てるにはどんな仕掛けを考えておけば良いだろう？カセトメータという道具を調べてみよ。

代表的な測定器

現在の日本では、測定器メーカーの技術力はかなり高いので、測定器に表示してある精度は信用しても間違いは無いだろう。古い測定器の場合には、国家標準と比較・検定を依頼出来る場合がある。信用できるメーカーと相談するのが良いだろう。

ディジタル表示をする測定器は読みとりが簡単であり、読み間違いの確率も小さい。ディジタル計器は便利な半面、取扱も安易になりがちである。精度保持の努力を怠らないようにしよう。

長さ

実験室規模では、物差し、ノギス、マイクロメータが代表的な測定器である。ノギスは、目盛の最小桁を副尺を用いて拡大表示して、読み取り易くしている。マイクロメータではネジを用いる事で、微小変位を拡大している。マイクロメータの較正には、ゲージブロックが使用される。ゲージブロックは、絶対値を与える長さの標準や、バーニヤ法の測定に援用できる。ゲージブロックよりも簡単な厚み基準としては、$\mathrm{thickness\ gauge}$ もある。

長さの差分を測定するには、ダイアルゲージもよく使用される。ダイアルゲージでは微小変位を梃で拡大表示している。

工業的な用途では限界ゲージというのも、有用な概念である。例えば、直径が $1\ \mathrm{cm}$、許容誤差が $20\ \mu m$ の製品を作る場合を想定する。直径が $9.98\ \mathrm{mm}$ と $10.02\ \mathrm{mm}$ の2個の穴を用意し, 一方より大きく他方より小さければ, それ以上の寸法精度は要求しないとする。

マイクロメータの零点の狂いを気にする人は多い。マニュアルを読めば、この零点の修正は簡単であり、通常はマイクロメータの箱に修正工具も入っている。他方、測定者の指 (体温) の影響による測定器の延びを気にせよと解説書には書いてあるが、これを気にする人はあまり見掛けない。

マイクロメータでは、力学的な変形を最小限にして、再現性を確保するために、ラチェットを組み込んでいる。学生実験でのマイクロメータの使用法を見ていると、ラチェットを慎重に操作していない学生がほとんどである。

重さ

天秤を使用する。そこそこの精度のものが市販されている。被測定物の空気による浮力補正や分銅の錆・汚れ・酸化等を気にする人は稀である。薬包紙の吸湿も案外見逃され易い。一方、指針の零点の狂いを気にする人はよく見掛ける。頭隠して、尻隠さずという格言を思い起こさせる。振動する指針の静止点を決めるのに、以下の方法が良く使用される。右に N 回、左に $(\mathrm{N}+1)$ 回連続して振れる時の、折り返し点の指示位置を記録する。右側だけの平均値と左側だけの平均値を計算し、両平均値の平均値を計算すると、これが静止点の良い近似になっている。

振幅が対数減衰すると仮定する。この時、折り返し点の座標は $x_0-(-1)^n A\exp(-n\lambda)$ と表せる。即ち、

左の読み	右の読み
$x_0 - A$	$x_0 + A\exp(-\lambda)$
$x_0 - A\exp(-2\lambda)$	$x_0 + A\exp(-3\lambda)$
$x_0 - A\exp(-4\lambda)$	
左の平均	右の平均
$x_0 - A(1 - 2\lambda + O(\lambda^2))$	$x_0 + A(1 - 2\lambda + O(\lambda^2))$
左右平均	$x_0 + O(\lambda^2)$

ここで、$\lambda(> 0)$ は１よりも充分小さいとして、指数関数を展開している。従って、$A\lambda^2$ は小さく設定しなければならない。振動させながら静止点を推定すれば、零点が狂っているかどうかは、問題にする必要が無い。

個人的には、薬包紙のかわりにマイラー箔を使用する場合がある。試薬の回収もこの方がスムースである様に思う。マイラー箔だと取扱中にマイラー箔が跳ねる様な事は無いが、たわみ易いという欠点もある。

時間

電子回路の発達と、信頼できる水晶発振子が簡単に入手可能となったので、簡単に高精度の時間測定が可能となった。周波数が既知で安定した発振回路、計数回路、時間の始点と終点を示すトリガー信号を作ればそれでおしまいである。即ち、始点と終点の間の時間だけ発振回路から出て来る信号の数を計数すればこの数字が時間を与える。日常的な実験では、全てと表現しても良い程度に、これでカバー出来よう。

時刻の測定も、国家標準に準拠した電波を受信出来るならば、困難は無い。かなり以前から、JJY と呼ばれる電波が時刻標準として利用されていた。短波の時刻標準は、非常に近い将来に廃止される (された) と聞いている。福島県から発信している、長波の電波が利用できる。佐賀県からも、この原稿を書いている時点で、試験電波が放送されているはずである。通信総合研究所の責任で発信していて、国家標準という意味で、ここが信用出来る。２４時間平均で、1×10^{-11} 程度の精度ゆらぎに押えられているとの事である。これだけの精度があると、送信元と受信地間の距離や受信回路内部での時間遅れが気になる。

地球規模の時刻としては、米国が打ち上げている人工衛星からの電波を GPS (global positioning system) 装置が利用している。

各種のデータを計算機で管理する必要があり、計算機の内蔵時計を標準時に追随させねばならない場合がある。この機構として ntp (network time protocol) がある事も、知っておいて損はないだろう。

一方、時刻は地球の自転と連動して定義されているので、閏秒という厄介な問題もある。１２月と１月の間、６月と７月の間に長さが１秒の閏秒が追加される場合がある。地球の自転が早まれば、１分が５９秒となる場合も考えられる。過去のどの時点で、閏秒の操作がなされたかは、理科年表に書かれている。

電位差と電流

簡単な場合は、電圧計や電流計を使用する。電流を力学的な針の振れに変換するのが通常の電流計である。工作精度や移動の制限があるので、０．５級程度の精度のものまでが, 実際に市販されている。０．５級と言う事は, 最大振れの時の表示の０．５％の精度という事である。保管場所から使用場所への移動時や、もっと一般には使用していない時には、電流計の入力端子は短絡しておく事。搬送時の揺れに伴う運動エネルギーを電気的なエ

ネルギーに変換して、熱にかえてしまうからである。これにより、針や針の保持機構の破損事故が押えられる。

0．2 級の電流計を東京から大阪へ運ぶのに、あるメーカーは新幹線を利用した。この時、電流計を運ぶ人間は立ったまま両手で、この電流計を支えていたという話を聞いた事がある。人間の両腕の筋肉をショックアブソーバとして利用したのである。1 台の電流計を運ぶのに二人の人間が必要である。

2．5 級や 5 級の物は取扱が簡単であるから, 多用される。表示盤の下の方に、精度や、動作原理、測定時の設置方法、交流用か直流用か等の記号が書いてある。水平に置いて使えと書いてある 0．5 級の電流計を立てて使用している猛者 (当然筑波大学の学生である) もいる。メータを立てて使用すると、針の自重に起因するトルクは、針を倒す向きに作用する。このトルクの大きさは振れ角に依存する。しかし、メータを水平に置いて使用する時には、針を倒すように働くトルクはメータの針の振れ角には依存しないと考えて良い。従って、高精度のメータは一般に水平に置いて使用する様に設計されたものが多い。電流計の近くに磁気に敏感な素材を使用した物質があるかどうかも気にかけてみよう。

ディジタル表示の測定器も多い。しかし計器を見ながら、電流や電圧の最大 (小) 値の位置を探す様な実験は結構多いので、アナログメータも捨てたものではない。

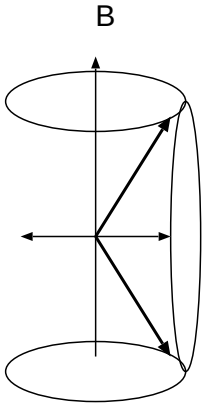
3 桁以上の有効数字を要求する場合は、ディジタル型を使用する場合が多いだろう。電流は電位差に変換してから、基準電圧と比較していると思われる。従って高精度の測定は、基準電圧の発生技術が非常に大切となる。この場合、回路内部で使用されている回路部品の信頼性保持に、測定器の保管時にも充分な注意を払っておく必要がある。高精度の測定器は、sampling rate も遅くなる傾向にある。高精度の測定に際しては、信号源の出力インピーダンスや測定器の入力インピーダンスの知識はもちろんであるが、使用する導体の熱起電力、接続部の接触電位差といった点にも注意を払う必要がある。導線の振動により、雑音が発生する事も知っておくべきである。主に、$\partial B/\partial t$ や、絶縁物の摩擦電気が原因である。この対策として、撚り線 (twisted pair) や low noise cable という電線も作られている。

電気抵抗の標準となる標準抵抗はマンガニン線という銅を主成分とし、マンガンやニッケルを含む合金で作られていて、その抵抗は温度が摂氏 1 度変化すると、$2-5\times10^{-5}$ 程度変化する。一方回路部品のカタログを見ると、温度係数が 1×10^{-6} という抵抗も入手可能である。このような小さな温度係数の物質が標準抵抗の素材に使用されなかったのは、電気導線としての銅との接触電位差を考慮しての事であるという。

磁場

サーチコイルと弾道電流計を用いると言うと、何の事？と言う人が多いだろう。現在では、Hall 効果を利用するのが一般的だろう。Hall 効果を用いる場合には、絶対値を較正する必要がある。簡単な場合には、Helmholz コイルを利用すれば良いが、1 点では危険だと言う人もいるだろう。Hall 素子は半導体を利用するので、温度依存性が大きい。気になる時は、素子を選び、恒温装置に組み込んだり、素子の温度を同時に測定したりする。

絶対値を測定したい場合には、磁気共鳴を利用する。一様磁場に対してしか使用できないが、5 桁の精度を確保する事は簡単である。測定原理は次の通りである。陽子を利用すると仮定しよう。磁場中に置かれた陽子のスピンは磁場に対し、平行か反平行かの 2 状態のどちらかをとる。その 2 状態間のエネルギー差は、陽子の磁気能率を μ、磁束密度を B とすると、$2\mu B$ であり、占有確率は Boltzman 分布に従い、両者でいくばくかの差がある。



この状態に外部から、$\hbar\omega = 2\mu B$ できまる高周波の磁場を、B に垂直にかけると、スピンは共鳴的に高周波エネルギーを吸収する。このエネルギー吸収を検出すると、$B = \hbar\omega/2\mu$ により、磁場の絶対値が分ける。

もう少し丁寧に説明してみよう。磁気能率は $\mathbf{B}$ を回転軸とするラーマーの歳差運動をしている。ここに上に書いた共鳴条件を満足する外部磁場を $\mathbf{B}$ に直交してかける。この時、上に書いたラーマー周波数で回転する回転座標系で見ると、主磁場 $\mathbf{B}$ は完全に消えて無くなり、直交してかけた高周波磁場が静止して見える (磁気能率が感ずる)。従って磁気能率はこの (回転系では静止して見える) 高周波磁場を軸として回転運動をする。実験室系からみると、主磁場 $\mathbf{B}$ を回転軸として高速に回転しながら、高周波磁場を軸としてゆっくりと主磁場に平行になったり反平行になったりしている。即ち、高周波磁場とエネルギーをやりとりしている。従って、この状態だけでは平均としては高周波磁場からエネルギーを貰っていない。別の言葉で言えば信号は検出できない。図で磁気能率が上を向いている時はエネルギー的に高い状態だと仮定しよう。上にある時には、高周波磁場にエネルギーを与え、下を向いた時には高周波磁場からエネルギーを貰っている。

この状態で、磁気能率の近くに磁性を有する物質を置き、この磁気能率と相互作用させる。すると、エネルギー状態が高い時にはこの相互作用を通じ外界にもエネルギーを与え、エネルギーを貰う時には高周波から貰うという状態を実現出来る。これで、高周波磁場からエネルギーを貰う機構が実現出来た。

エネルギーを吸収したり吸収しなかったりという変化がある方が観測するには便利である。そこで $\mathbf{B}$ に平行に非常に小さな磁場を重ねて、これを時間的に変化させる。主磁場成分が共鳴条件を満足すると、エネルギーの吸収が起こる。

磁場を周波数に変換して、測定している事が分かる。陽子を用いる場合、1 T(テスラ) の磁場に対し、約 4 2 MHz の横磁場が必要である。磁気能率を有する原子核を適当に選べば、周波数の可変範囲を変える事が可能である。

圧力

1 気圧よりも高い圧力測定には、ブルドン管と呼ばれる圧力計が使用される。ブルドン管は大気圧との差によるセンサー管の力学的な変形を、梃を用いて拡大表示している。この場合大気圧が標準であるから、測定精度は高くない。ブルドン管の動作原理は、‘吹き戻し’ という玩具と同じである。

しかし、1 メートルの高さの差に対応する気圧差を検出する、ベローズ式の圧力センサーを見た覚えがある。即ち、精度は良くなくとも、感度はかなり高い測定器 (検出器) を作り得る。

力学的な変形を、電気抵抗の変化として出力する歪み計を圧力センサーとする圧力計もある。硅素で歪み計を作り、ついでに硅素基板上に測定回路も作り付けてしまうと非常に小さな測定器を作る事が出来る。

大気圧の測定には、水銀気圧計が使われていた。過去の気圧表示に１気圧を７６０ mmHg と表現していた事を覚えている人もまだいるだろう。水銀気圧計は、圧力の絶対値を測定するという意味で、大変に貴重な測定器であるが、水銀事故を嫌うあまり、引退させられた。水銀気圧計を使用する場合には、温度補正が必要である。

１気圧よりも低い圧力の測定は、真空技術との関連で取り扱われる。

温度

温度も精度良く測定する事が困難な物理量である。温度依存性が大きな物性値を利用するが、測定対象の温度管理が困難な場合が多い。常識的には、市販の温度計を用いる。例えば沸点上昇法や凝固点降下法を用いて分子量の測定をする場合に使用されるベックマン温度計の分解能は、常識的な温度範囲で、１／１００度程度である。

もう少し広い温度範囲に目を向けると、熱電対を使用する事になるだろう。熱起電力は、一般的に言って小さな電圧であるから、電圧測定に対する注意を思い起こす必要がある。高温測定には、パイロメータも使用できる。

誤差

測定に誤差はつきものである。最大の原因は測定者の知識や技能に関するものであろう。これは、訓練をすればある程度まで減らす事は可能だと考えられている。但し、現在の学生の技能のあり様を見ていると、この考えは甘すぎる気もする。良く考えて測定条件を設定し、測定器を使用する事が出来る人間は小数派ではないかと疑っている。当然、僕のこの批判は的外れであると主張する学生も存在する訳であり、そのような人間を想定して、誤差論は組み立てられている。

人間の判断力や技能ではいかんともしがたい範囲で、測定値がばらつく場合がある。以下の様な原因も、全て取り除かれていると仮定する。物差しの刻み幅が間違っている (scale error)。物差しの原点が狂っていたり、材質が一様でなく途中に歪みがある。(offset error, non-linear error) 星の位置を観測していて、上空の光量が一様でないために、明るい方へ測定値がずれる。視力が左右の目で異なるために、どちらかに偏った見方をしている場合もあるだろう。

我々の物理的世界を統べる力は、強い相互作用、電磁的相互作用、弱い相互作用及び重力の相互作用という４種の相互作用に集約されている。これに対し、何度か第５の力が提案された。その一つに、慣性質量と重力質量の比は物質に依存しない事を実験的に検証したエートベッシュの実験データを検討しなおして引用したものがあった。しかしこのエートベッシュの実験データは、実験室内の空気の対流を考慮すれば第５の力は不要であるという話題が後に提供された。

このような考え得る誤差原因を取り除いた後でも測定誤差はあり、その誤差の分布を考えようとする訳である。一瀬正巳著‘ 誤差論’ (培風館) を参考にしつつ考えてみよう。

非常に多数 (n と書こう) の誤差原因があり、それらの誤差原因は測定に一定の大きさ e の誤差を与えると仮定しよう。このような根源誤差 (elementary error) という概念は、光の３原色という概念を提示したヤングの発想らしい。ある測定の場合には、n 個の原因の内 p 個は負、(n−p) 個は正の誤差を与えるだろうから、誤差は $\xi = (n - 2\,p)\,e$ と書けるだろう。一方、誤差は真の値の周りに正・負対称に分布すると考えるのが妥当である。n を無限大に持っていくと、この分布関数は中心点に関して左右対称なガウス分布に移行する事が知られている。従って、誤差の分布をガウス分布 (正規分布とも呼ばれる) であ

ると仮定しよう。

誤差分布関数を $f(\xi)$ と書き、分布が $n \to \infty$ の極限で、ガウス分布に移行する事を見ておこう。n 個の事象の内、p 個が負であり残りが正である場合の数に $f(\xi)$ は比例するはずであるから、

$$f(\xi) \propto \frac{n!}{(n-p)!\,p!}, \qquad \xi = (n-2\,p)\,e$$

$p \to (p-1)$ とすると、

$$f(\xi + 2\,e) \propto \frac{n!}{(n-p+1)!(p-1)!}$$

これより、

$$\frac{2\,e\,\dfrac{df(\xi)}{d\xi}}{2f(\xi)} \simeq \frac{f(\xi+2\,e)-f(\xi)}{f(\xi+2\,e)+f(\xi)} \simeq -\frac{\xi}{n\,e}$$

式の展開は、中央の式を左右へ変形していくと得られる。ここで、$n >> 1$ と考えて、1 を落している。従って、$h^2 \equiv 1/(2n\,e^2)$ と置くと、以下の微分方程式を得る。

$$\frac{df}{f} = -2\,h^2\,\xi d\xi$$

この微分方程式の解は、

$$f(\xi) = \frac{h}{\sqrt{\pi}} \exp\{-(h\xi)^2\}$$

と書ける。ここで誤差分布を規格化するように積分定数は選んである。次の積分公式を参照すると良い。

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} \exp\{-(ax)^2\} dx = \frac{(2n-1)!!}{2^n\,a^{2n+1}}\sqrt{\pi}$$

このガウス関数は、任意の積分区間で積分が解析的に実行出来るわけではないので、必要ならば、数値積分を実行するか、数表を参照する必要がある。

この証明は、流体力学の実務家、Hagen に依るという。

以下にもう一つのガウス分布の証明を 安藤洋美著 '最小二乗法の歴史' (現代数学社) から紹介しておこう。William Fishburn Donkin の導き方との事である。真の値が x である物理量を独立に 2 回測定し、a, b という値を得た。両測定は対等であると仮定すると、その平均値を x の最確値として採用するのが妥当であると仮定する (相乗平均の方が妥当だという主張もありうるかもしれない)。測定値が a となる確率密度を $\phi(x-a)$ と書き、2 回の測定で平均値が $(a+b)/2$ となる確率密度を $\psi(x-(a+b)/2)$ だとすると、

$$C(a,b)\phi(x-a)\,\phi(x-b) = \psi(x-(a+b)/2)$$

ここで、2 回の測定の平均値は、a, b とは異なる組合せでも得られるので、規格化の定数 $C(a,b)$ が導入された。この式に $b=a$ を代入すると、

$$C(a,a)\phi(x-a)^2 = \psi(x-a)$$

更にこの式で a を $(a+b)/2$ とすると、

$$C(\frac{a+b}{2},\frac{a+b}{2})\phi(x-\frac{a+b}{2})^2 = \psi(x-\frac{a+b}{2}) = C(a,b)\phi(x-a)\phi(x-b)$$

真中の式を無視して両辺を比較して、$\phi(x)$ に関する関数方程式だと見做す。この関数方程式は、$f(x) \equiv \frac{d\phi}{dx}/\phi$ と置き換えると、

$$2f(x - \frac{a+b}{2}) = f(x-a) + f(x-b)$$

となる。ここで、もう一度 $b = -a$ と置き換えると、

$$2f(x) = f(x-a) + f(x+a)$$

を得る。この式から、$f(x)$ は x の 1 次式である事が導け、結果的に ϕ はガウス関数であると結論つけられる。

実は、複数の測定値の最確値は平均値であると仮定すると、ガウス分布が導け、誤差がガウス分布をすれば、平均値が最確値であると言える。即ち、循環定義に陥る。これはガウスが最初に導き、１０数年後にこの論理ではまずいと気がついている。

最初に述べたような厳しい条件が成立している様な測定は稀であろう。しかし、表現式の単純さと取り扱いの簡単さの故にこの正規分布は頻繁に使用 (仮定) される。工場で同一製品を大量生産する様な場合には、生産条件がかなり厳しく管理されているだろうから、製品の寸法精度のバラツキを調べて、製造過程に異常がないかを確認するには、この種の仮定は有効に働くだろう。3 シグマ法と呼ばれる場合がある。

正規分布を仮定し、良く使用される概念を紹介しよう。

1) 平均誤差

N 回の測定に対し、$\xi_i \ (i = 1, \cdots N)$ という誤差が与えられた時、その 2 乗平均の平方根を平均 2 乗誤差 (2 乗平均誤差) とも呼ぶ。

$$\sigma = \sqrt{(\sum_i \xi_i^2)/N}$$

正規分布に対し、

$$\sigma^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 f(\xi) d\xi = \frac{1}{2h^2}$$

という関係が成り立つ。σ を平均誤差とも呼ぶ。
σ を用いると、誤差分布は

$$f(\xi) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\left(\frac{\xi^2}{2\sigma^2}\right)\right\}$$

平均誤差は、指数関数の分母に $2\sigma^2$ の形で登場する。

2) 確率誤差

誤差の正規分布を仮定すると、ある値 ϵ よりも小さな絶対値の誤差が発生する確率は 1 / 2 であるという数値を h 又は σ を用いて表す事が出来る。即ち、

$$\int_{-\epsilon}^{\epsilon} f(\xi) d\xi = 1/2$$

を満足する ϵ を確率誤差と呼ぶ。数値積分をする事により、

$$\epsilon \ = 0.47694/h \ = 0.6745\sigma$$

と表現出来る。

因みに、$\int_{-a\,\sigma}^{a\,\sigma} f(\xi)\, d\xi = I(a)$ とおくと、以下の様になる。

a	1	2	3
I(a)	0.6826	0.9544	0.997

この $a = 3$ の場合が、3σ 法の根拠となっている数字である。

3) 真の値の近似値の算定

上に登場した定義式は、実験値を用いて表されていないので、定義以外の何者でもない。実用的には、実験値を用い、真の値を適当に近似して、この定義式と矛盾しないような関係式を作らねばならない。

真の値を Z_0、測定値を $z_i,\ (i = 1, \cdots, N)$ と書こう。

指導原理は、実験値が $z_i,\ (i = 1, \cdots, N)$ と得られたという事は、これらの数値を得る確率が一番大きいから、これらの数値が実験的に得られたと仮定する事である。この時、測定を確率的な意味で独立な事象であると仮定すると、これらの実験値の発生確率は $P(z_i,\ (i = 1, \cdots, N)) = \Pi_i f(z_i - Z_0)$ と積の形で書け、正規分布の仮定より、指数関数の中は $h^2 \sum_i (z_i - Z_0)^2$ と書き下せる。この部分が最小になると、発生確率は最大となる。従って、

$$\overline{z} = (\sum_{i=1}^{N} z_i)/N$$

を真の値と推定できる。つまり、測定精度 (今の場合 h が共通であった) が等しい場合には、単純に平均値 $\overline{z}$ を真の値の推定値 (最確値) とすれば良い。

4) 誤差の推定

先ず、各測定に対し残差 ρ を定義する。

$$\rho_i \equiv z_i - \overline{z},\ (i = 1, \cdots, N)$$

残差の和は当然 0 であるが、2 乗和は 0 でないので、測定値の散らばり具合を表現する数値として意味がある。残差と平均誤差 σ の関係を付けよう。

$$\xi_i = z_i - Z_0 = z_i - \overline{z} + (\overline{z} - Z_0) = \rho_i + (\overline{z} - Z_0)$$

と変形し、これを 2 乗し和を計算する。

$$\sum_i \xi_i^2 = \sum_i \rho_i^2 + N\,(\overline{z} - Z_0)^2 + 2(\overline{z} - Z_0) \sum_i \rho_i$$

左辺は誤差の 2 乗和だから、平均誤差 σ^2 の測定回 N 倍、$N\,\sigma^2$ に収束するだろう。右辺第 2 項は、定義に戻って表現すると、$N\{(\sum_i z_i)/N - Z_0\}^2 = \sigma^2$ である。右辺最後の項は定義から、0 である。

$$\left\{(\sum_i z_i)/N - Z_0\right\}^2 = \frac{\{\sum_i (z_i - Z_0)^2\}}{N^2} = \frac{\left\{\sum_i (z_i - Z_0)^2 + \sum_{i \neq j} (z_i - Z_0)(z_j - Z_0)\right\}^2}{N^2} = \frac{N\sigma^2}{N^2}$$

最確値 $\overline{z}$ と真の値との差は 測定回数を大きくしても σ 以下には小さくならない。

まとめると、

$$\sigma^2 = \frac{\sum_i \rho_i^2}{(N-1)}$$

これで、測定値から計算した残差と平均誤差の関係が付いた。ここで書いた σ は、N 回測定した時の、個別の測定値が平均として持つ誤差である。一方、平均値が持つであろう誤差についても考えねばならない。

5) 平均値の誤差

平均値の誤差を考えるには、平均値そのものが如何にばらつくかを考えねばならない。ある一連の測定での、ばらつきを δ と書く。

$$\delta \equiv \overline{z} - Z_0 = \frac{\sum_i (z_i - Z_0) - (z_i - \overline{z})}{N} = \frac{1}{N} \sum_i \xi_i$$

仮想的に、このような測定を M 回行い、それぞれのばらつきに 下付き足 j を付けて 2 乗して j で足す。これで、平均値 $\overline{z}$ の平均誤差が計算出来る。

$$\sum_{j=1}^{M} \delta_j^2 = \sum_{j=1}^{M} \frac{1}{N^2} \left\{ \sum_{i=1}^{N} \xi_{ij}^2 + \sum_{i \neq k=1}^{N} \xi_{ij}\, \xi_{kj} \right\} \rightarrow \frac{N\sigma^2}{N^2}$$

但し、右辺の第 2 項では、$i \neq k$ としている。この項は ξ の符号が一定しないので第 1 項に比べれば M を増やしても M に比例しては増えないから、無視しよう。第 1 項では、$\sum_{i=1}^{N} \xi_{ij}^2 \rightarrow N\sigma^2$ となる。M 回 の測定群の平均誤差の平均で平均値の平均誤差 σ_m^2 を定義すると、

$$\sigma_m^2 = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^{M} \delta_j^2 = \frac{\sigma^2}{N}$$

即ち、平均値の $(\text{平均誤差})^2$ は、$(\text{個別測定の誤差})^2$ /(測定回数) と表現される。さきに書いた、残差で表すと、

$$\sigma_m^2 = \sum_i \frac{(z_i - \overline{z})^2}{N\,(N-1)}$$

この式は、先に仮定した仮想的な回数 M に依存せず、全て既知の量で表現されているから、計算可能である。平均値の確率誤差 ϵ_m は、さらに 0.6745 を掛ければよいから、

$$\epsilon_m = 0.6745 \sigma_m .$$

誤差の定義に平均誤差と確率誤差が登場した。平均誤差は、誤差がガウス分布をすると仮定した時、$1/e$ となる幅であり、確率誤差は積分すると 1 / 2 となる幅である。どちらを使用するのが妥当だろうか？一つの見解を次の本の中に見る事が出来る。霜田光一著 '歴史をかえた物理実験' パリティーブックス p79。霜田は、標準偏差という表現を使用している。

学生時代に、大学院の進学試験に滑べったら行く所が無くなると言う噂がクラス中に広まり、国家公務員試験を滑べり止めに受けておけという事になった。この時の口答問題は精度と確度の違いを述べよというものであった。答えられるかな？

誤差 (不確かさ) を議論する場合の国際的な言葉として、以下の用語を使うそうである。意識的に用語の意味の欄は空白にしておこう。

英語	日本語	用語の意味
true value	真の値	測定値の正しい値
error	誤差	測定値 − 真の値
bias	かたより	
dispersion	ばらつき	
precision	精密さ *、精度 **	
trueness	真度 **	
accuracy	正確さ *、精確さ **	かたよりの小さい程度
uncertaity	不確かさ *	

注： *、と ** は、JIS Z ８１０３ー１９９０「計測用語」、JIS Z ８４０２ー１９９１「分析・試験の許容差通則」で定義されているという。

誤差を不確かさ という言葉で置き換えるという動きが国際的に広まるだろうと考えられる。現在のところ、この動きに関して妥当な教科書を知らない。以下の文献を引用しておく。

‘計測と制御’ 第３７巻 第５号 ３００ページ以降。ミニ特集 ‘計測における不確かさ’

誤差の異なる測定値

複数の測定者が共通の物理量を測定した時、その測定値や誤差は測定者により異なっているだろう。しかし物理量としては、一つしかないはずだから統一見解を出すために、ある種の荷重平均を採用しなければならない。この荷重選択の指導原理は以下の様に採られる。

N 人の測定者の測定値が、$z_i \pm \sigma_i \ (i = 1, \cdots, N)$ であったとする。同一の誤差の測定でも、測定回数の平方根に比例して誤差が小さくなっている事に注目する。全ての測定者は同一の誤差 (σ) の測定を異なる回数行い、その結果を報告したと仮想的に考える。即ち、測定者 i は誤差 σ の測定を $n_i = (\sigma/\sigma_i)^2$ 回行った後で結果を報告したとする。即ち、各測定者の測定回数に比例する量を持って来て相対荷重とすれば良い。

故に、各測定の相対荷重を次式で定義し、

$$p_i \equiv \frac{\sigma^2}{\sigma_i^2}$$

荷重の絶対値は、以下の様にすれば良いだろう。

$$w_i = \frac{p_i}{\sum_j p_j} = \frac{\dfrac{1}{\sigma_i^2}}{\sum_j \left(\dfrac{1}{\sigma_j^2}\right)}$$

従って最確値、$\overline{z}$ は次式とする。

$$\overline{z} = \frac{\sum z_i p_i}{\sum_i p_i} = \frac{\sum z_i/\sigma_i^2}{\sum 1/\sigma_i^2}$$

次に最確値の誤差を評価したい。利用できる数値は、$z_i,\ \sigma_i \ (i = 1, 2, \cdots, N)$ だけである。z_i のばらつきを利用する。荷重が 1 ならば以下の様にすれば良いだろう。

$$\sigma^2 = \frac{\sum_i \xi_i^2}{N} = \frac{\sum_i \rho_i^2}{N-1}$$

ここで、真の誤差を残差で置き換えた為に、分母を $N \to (N-1)$ とした。荷重が 1 でないならば、右辺の式を荷重平均で置き換える。

$$\bar{\sigma}^2 = \frac{\sum_i \rho_i^2 \, w_i}{N-1} = \frac{\sum_i (z_i - \overline{z})^2/\sigma_i^2}{(N-1)\sum_i 1/\sigma_i^2}$$

纏めると、$z_i \pm \sigma_i,\ (i = 1, 2, \cdots, N)$ で与えられる測定値の統一見解としては、上に与えた、$\overline{z} \pm \overline{\sigma}$ とする。

間接測定の誤差

物理量 z は直接測定出来ないが、直接測定出来る物理量 $y_i,\ (i = 1, \cdots, m)$ の関数として定義されているとしよう。

$$z = f(y_1, y_2, \cdots, y_m)$$

直接測定により測定された y_i の値とその誤差を $Y_i \pm \sigma_{y_i},\ (i = 1, \cdots, m)$ と与えられたとする。この時、物理量 z の値と誤差を問題にする。z の最確値 Z は、定義式に Y_i を全て代入して計算する。

$$Z = f(Y_1, Y_2, \cdots, Y_m)$$

一方、Z の誤差の方は定義式を独立変数 y_i で Tayler 展開し 1 次まで残すと、

$$Z + dZ = f(Y_1, .., Y_m) + \sum_i \frac{\partial f}{\partial y_i} dy_i$$

この式を 2 乗し交差項を落すと、

$$dZ^2 = \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial y_i} \right)^2 dy_i^2.$$

交差項は独立な二つの物理量 (y_i, y_j) の測定に関係しているから多数回の測定和をとれば, 2 乗項よりも有意に小さいから無視出来ると仮定する。即ち, 直接測定の誤差に起因する 物理量 z の増分は、左辺で与えられると考える。従って、Z の誤差は次式で与えられると考えれば良い。

$$\sigma_z^2 = \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial y_i} \right)^2 \times \sigma_{y_i}^2$$

ここで与えた議論は、誤差の伝播法則という名で呼ばれる。

この議論をする時、Tayler 展開の 1 次項と 2 次項を比較し、本当に 1 次項が 2 次項よりも有意に大きいという事は、確認しておいた方が安全である。

ポアッソン分布

確率的事象の分布として、ポアッソン分布も記憶しておかねばならない分布の一つである。放射性同位元素の崩壊 (壊変という単語も使用される) は以下の確率的法則に従う事が知られている。

$$\frac{dN}{dt} = -\lambda \, N$$

ここで、N は ある時刻に於ける崩壊前の母核の数であり、λ は崩壊定数と呼ばれる崩壊に付随してきまる定数である。時刻 $t = 0$ での母核の数を N_0 とすると、次の様に積分できる。

$$N(t) = N_0 \exp(-\lambda t)$$

従って、ある時刻から、時間 t の間に崩壊する確率は $1-\exp(-\lambda t)$ であり、崩壊しない確率は $\exp(-\lambda t)$ となる。N 個の母核の内、時間 t 内に n 個が崩壊し、$(N-n)$ 個が崩壊しない確率 $P(n)$ は次式で与えられる。

$$P(n)=\frac{N!}{n!\,(N-n)!}(1-e^{-\lambda t})^n(e^{-\lambda t})^{N-n}$$

この式で表される分布は、2 項分布として知られている。N が非常に大きく、λt が 1 に比較して小さい時には、この分布は次式で表現され、ポアッソン分布と呼ばれる。

$$P(n)=\frac{<n>^n}{n!}\,e^{-<n>}$$

ここで、$<n>$ は計数率の時間平均である。ポアッソン分布に対する偏差の 2 乗は、

$$\sigma^2=\sum_{n=0}^{\infty}(n-<n>)^2P(n)=<n>$$

となる事が知られて、σ を統計誤差と呼んでいる。ポアッソン分布で、計数率 $<n>$ が大きい場合は、ガウス分布となる事が知られている。

$$P(n)\to\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{(n-<n>)^2}{2\sigma^2}\right)$$

崩壊する確率 $1-e^{-\lambda t}=p$ と置く事にする。この時、次の 2 項展開が成立する。

$$1=(p+(1-p))^N=\sum_{n=0}^{N}P(n)$$

この式を p で微分すると、$<n>\equiv\sum nP(n)=p\,N$ と計算出来る。同様に、$\sum_n nP(n)=<n>=pN$ の両辺を p で微分すると、$<n^2>-<n>^2=<n>(1-p)$ という式が導ける。ここで、p を小さいとして無視すると分散の関係式が導ける。

二項分布がある条件でポアッソン分布へ移行する事は、以下の事実に気が付けば簡単に了解できるだろう。$N\to\infty$、一方 n は１０程度の小さな数とする。

$\frac{N!\,p^n}{(N-n)!}=(N\,p)^n(1-1/N)(1-2/N)\cdots(1-(n-1)/N)\to<n>^n\times1$

$(1-p)^{N-n}=\left\{(1-<n>/N)^{N/<n>}\right\}^{<n>}\times(1-p)^{-n}\to e^{-<n>}\times1$ を利用する。

$\lim_{x\to0}(1-x)^{1/x}\to e^{-1}$ は知っているだろう。

二項分布がある条件でガウス分布に移行する事を導くには、n も大きいと考えて、$\log P(n)$ を $n=<n>$ の回りにテイラー展開する。１階微分は、最大値をとるという条件から 0 となるので、２階微分まで使用する。２階微分が登場するから、最大値のまわりに左右対称なガウス分布が登場する。

最小 2 乗法

例えばバネ定数を測りたいとして、分銅の質量 M を変えながら、バネの伸び y を n 回測定したとしよう。これらの数値から、出来るだけ合理的なバネ定数を導き出すにはどのようにこれらの数値を処理するのが妥当か？ という問いを考える。

即ち、‘n 個の数値の組み $(M_i,\ y_i)$ を与え、$y=k\,Mg+y_0$ を満たす定数 k と y_0 を定めよ’ という問題を解きたい。ここで、無負荷の時のバネの長さも実際は測定しているだろうから、その時の誤差もあり得ると考えて、定数 y_0 を導入しておいた。但し、重力加速度 g は与えられているとする。以下の仮定を置く。用いた分銅の質量の相対精度は伸び測定の相対誤差よりも充分に小さく、各 y_i の誤差は共通である。

質量が M_i の分銅により、論理の仮定として Y_i 伸びているところを y_i と測定したと考える。従って、i 回目の測定の誤差は $\xi_i = Y_i - y_i$ と考えられる。各測定の誤差の起こる確率は、ガウス分布 (正規分布) すると仮定すると、現在の測定で得られたデータが得られる確率は $\exp\{-\sum_i (Y_i - y_i)^2/2\sigma^2\}$ に比例する。この確率が一番大きかったから、現在の測定結果が得られたと考えるのが最小 2 乗法である。確率最大の条件は、指数関数の肩に乗った部分の内の括弧で括られた部分を最小にすれば良い。

$$S \equiv \sum_i (Y_i - y_i)^2 = \sum_i \{(k\,g)M_i + y_0 - y_i\}^2 = \text{最小}$$

という条件を満足する二つのパラメータ $(k\,g)$, と y_0 を定めればよい。記号を簡単にするために、$a \equiv (k\,g),\ b \equiv y_0$ と書くと、

$$\frac{\partial S}{\partial a} = \frac{\partial S}{\partial b} = 0$$

という連立方程式を解くという問題に帰着した。

上で与えた S が最小という条件は以下の連立 1 次方程式を与える。

$$(\sum_i M_i^2)a + (\sum_i M_i)b = \sum_i M_i y_i, \quad (\sum_i M_i)a + (\sum_i 1)b = \sum_i y_i.$$

この連立 1 次方程式は、定義通りに解く事は可能であるが、大きな誤差を導入しやすい。例えば、M_i の最大値と最小値は 100 g と 1 g だとすると、最初の式の a の係数の計算では 10000 と 1 を加える事になるが、3 桁の精度しか無ければ、1 という数値は無意味となる危険性がある。今の場合には 2 乗の形で入って来ていたが、本当に問題を解きたい時にはもう少し大きな冪指数が登場する場合もあるから、数値計算では要注意である。

紙と鉛筆を用いて計算する場合もあるだろうが、今日では計算機を用いる方が多いだろうから、計算機を用いて最小 2 乗法の問題を解く場合を説明しよう。但し、紙と鉛筆を用いて計算する時の注意を一つだけ与えておこう。非常に計算しやすく、a に近い値 (A) を適当に仮定し、(当面 b=0 と仮定して良い)、$x_i \equiv y_i - A\,M_i$ で与えられる x_i に対して問題を解くと計算ミスが減る。一般的に言えば、移動平均という概念がある事を思い出そう。

線形最小化問題のと Householder 法

問題を少し一般化し、見やすい様に記号を変えておこう。m 回の測定で得られた物理量の組みをベクトル y、n 個の未知数の組みをベクトル $\mathbf{x}$ で表そう。当然、$m > n$ である。誤差が無いと仮定した時に予想される測定値のベクトルは $\mathbf{Y}$ と書くと、以下の関係式が成立する。

$$\mathbf{Y} = A\mathbf{x}$$

先の例で言えば、$x_1 = kg,\ x_2 = y_0$ であり、$A_{i,1} = M_i,\ A_{i,2} = 1$ である。この方程式は、未知数の数 n が独立な方程式の数 m よりも少ないので、(優決定 over determined) 原理的に、解く事が出来ない。

従って、最小二乗法の意味で解く。最小化すべき S は以下の様に書ける。

$$S \equiv (\mathbf{Y} - \mathbf{y}, \mathbf{Y} - \mathbf{y}) = (A\mathbf{x} - \mathbf{y}, A\mathbf{x} - \mathbf{y}) = (P(A\mathbf{x} - \mathbf{y}), P(A\mathbf{x} - \mathbf{y}))$$

上付の T は、転置 (transpose) を表し、二つのベクトルが丸括弧で括られているのは、ベクトルの内積 (スカラー積) を表す。最右辺では、直交行列 P ($P^T\,P = 1$) を導入した。ここで、上手に直交行列 P を選んで、行列 PA が、右上三角行列に変換出来たと仮定しよう。即ち、

$$PA = \begin{pmatrix} R_{1,1} & * & \\ 0 & \ddots & \\ 0 & \cdots & R_{n,n} \\ & 0 & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix}$$

ここで R は n 行 n 列の右上三角行列である。このような都合の良い直交行列が存在する事は、後で具体的に導く。この結果、

$$PA\mathbf{x} = \begin{pmatrix} \mathbf{p} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad P\mathbf{y} = \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{r} \end{pmatrix}$$

ここで、$\mathbf{p}$ と $\mathbf{q}$ とは n 元ベクトルであり、$\mathbf{0}$ と $\mathbf{r}$ とは (m−n) 元ベクトルである。この結果、S は

$$S = (\mathbf{p}-\mathbf{q},\ \mathbf{p}-\mathbf{q}) + (\mathbf{r},\mathbf{r}) \geq (\mathbf{r},\mathbf{r})$$

と書けるから、S の最小値は、$\mathbf{p}$=R$\mathbf{x}$=$\mathbf{q}$ の時であり、その最小値は ($\mathbf{r}$, $\mathbf{r}$) で与えられる事は、自明である。

ここまでのところでは、m 行 n 列の縦長の行列 A の左下全部を 0 とする m 行 m 列の直交行列 P を作り、PA と P$\mathbf{y}$ を計算しその上側の n 個の行だけを取り出して作った n 行 n 列の行列を R、 ベクトルを $\mathbf{q}$ とする時、次の連立方程式

$$R\mathbf{x} = \mathbf{q}$$

を満足するベクトル $\mathbf{x}$ が求める解であり、その時の残差は ($\mathbf{r}$, $\mathbf{r}$) により計算できる。

次に、連立 1 次方程式 $R\mathbf{x} = P\mathbf{y} = \mathbf{q}$ を解く。ここで行列 R は右上三角行列、即ち対角成分から下の部分は 0 であるという事を思い出すと、簡単に解ける。上で行列で書いた式を露わに書き下してみると、最期の式は、$R_{n,n}x_n = q_n$ となっているから、$x_n = q_n/R_{n,n}$ と書き下せる。下から 2 番目に式は $R_{n-1,n-1}\,x_{n-1} + R_{n,1,n}\,x_n \;=\; q_{n-1}$ であるが、既に x_n は計算済であるから、$x_{n-1} = (q_{n-1} \;-\; R_{n-1,n}\,x_n)/R_{n-1,n-1}$ と解ける。このようにして、下から順番に全ての x_i は計算可能である。このように下から順番に解いていく手法を、逆代入法 (backward substitution) と言う。

残された課題は、直交行列 P を具体的に作る事である。先ず、elementary orthogonal matrix の説明から始めよう。単位ベクトル $\mathbf{u}$ が与えられたとして、次の行列 O≡ $(1 - 2\mathbf{u}\mathbf{u}^T)$ は直交行列である。行列 O の成分で書くと、

$$O_{ij} = \delta_{i,j} - 2u_i\,u_j$$

この行列を用いて、行列 A の第 1 列だけを、期待する行列に変換する事を考える。即ち、$P_1 = (1 - 2\mathbf{u}\mathbf{u}^T)$ として、$\mathrm{P_1A}$ の第 1 列ベクトルが $\lambda\,\mathbf{e}_1$ と変換される事を要求してベクトル $\mathbf{u}$ を決定する。ここで $\mathbf{e}_1$ は第 1 成分だけが 1 で残りは 0 という基本単位ベクトル

である。ベクトル $\mathbf{u}$ と $\mathbf{a}$ の内積は $(\mathbf{u}, \mathbf{a})$ と書く。行列 A の第 1 列ベクトルを $\mathbf{a}$ と書くと、要求した条件は

$$P_1\mathbf{a} = \mathbf{a} - 2(\mathbf{u}, \mathbf{a})\mathbf{u} = \lambda\mathbf{e}_1$$

従って、ベクトル $\mathbf{u}$ は以下の様に表現できる。

$$\mathbf{u} = \frac{\mathbf{a} - \lambda\mathbf{e}_1}{2(\mathbf{u}, \mathbf{a})}$$

λ を決定する為に、P_1 が直交行列である事を使う。

$$(P_1\mathbf{a}, P_1\mathbf{a}) = (\mathbf{a}, \mathbf{a}) = \lambda^2$$

従って、λ は符号を除いて決定された。

ベクトル $\mathbf{u}$ の式の分母に登場した、内積 $(\mathbf{u}, \mathbf{a})$ は、$\mathbf{u}$ が単位ベクトルであるという条件から、決定できる。但し、$a_{=}(\mathbf{a}, \mathbf{e}_1)$ は、ベクトル $\mathbf{a}$ の第 1 成分である。

$$1 = (\mathbf{u}, \mathbf{u}) = \frac{\lambda(\lambda - a_1)}{2(\mathbf{u}, \mathbf{a})^2}$$

ここで、a_1 と書いたのはベクトル $\mathbf{a}$ の第 1 成分である。

内積 $(\mathbf{u}, \mathbf{a})$ の式を見ると、λ と a_1 とは差の形で登場するから、両者が異符号となるように λ の符号を決める。これで、P_1 は確定した。

この結果、$A_1 = P_1 A$ 及び $\mathbf{y}_1 = P_1\ \mathbf{y}$ が作られ、行列 A_1 の第 1 列目は、第 1 成分のみが $\lambda \neq 0$ となり、その下の成分はことごとく 0 となった。次にするべき事は、行列 A_1 の第 1 行と第 1 列を除いて作られる行列をこれまでの操作対象であった行列 A だと思い、$A_2 = P_2 A_1$ を作る。

このような操作を n 回繰り返すと、上に書いた行列 P は $P = \Pi_i P_i$ として確定する。

追加すべき注意事項

ここではばね定数を測定すべく、バネに荷重をかけ、無負荷の状態からの伸びを測定すると仮定した。しかし、このような測定方法が必ずしも良いとは言えない。バネ定数を利用する場合には、バネは伸びる時も、縮む時も同じバネ定数であると仮定しているから、伸びる状態の時と縮む状態の時を対称に測定する方が測定方法としては妥当だと考えられる。

データ整理も大切な事であるが、実験を設計することは更に大切である事が理解できるだろう。先に、大きな数と小さな数を対等に扱うと誤差が大きくなる、特に冪乗は入って来ると手に負えなくなる場合がある事を示唆した。その観点からすると、０から１００迄を扱うよりも、$-$ ５０から５０迄を扱うように、実験 (又はデータ整理の方法) を変更する方が頭が良いよと言っているとも理解できるだろう。

バネ定数を測定するのが目的ならば、バネを単振動させてその周期から推定するという方法も考えられる。この場合バネ自身の質量をどのように取り扱うかを考えると、かなり面倒ではあるが。。。。振幅を規定して、複数の分銅の組合せを替えて測定する？測定対象を如何に考えるかという意味で、別の視点を与えてくれると思う。

さてもっと一般に考えて、最も誤差の少ないバネ定数の決定をするには、如何なる M_i の組合せと個数が必要か？ という問題を考えてみるのも面白い。

最小 2 乗法を用いて、実験データを多項式フィットした場合を想定する。この時、残差を調べグラフに描いて、実験値と多項式展開の表現精度を比較したくなる。実験値と計

算値の差、即ち残差がどれくらい小さければ、又は残差がどのような振舞を見せていれば、計算が妥当だと判断出来るのだろうか？残差が、0 を中心として均等に分布しているというのは必要条件であって十分条件とは考えられない。

次の様な事実がある。区間 $[a,b]$ で定義された関数 $f(x)$ を n 次多項式 $F_n(x)$ で近似したとする。但し近似するとは、差の絶対値 $|f(x)-F_n(x)|$ の最大値が最小になるように展開係数を調節する事であるとする。このような指導原理による近似を $\mathrm{mini\text{-}max}$ 近似とか最良近似とよぶ。近似が完成した時、誤差 (の絶対値) は定義域の両端で最大値をとり、しかもこの最大値は両端を含めた区間で $(\mathrm{n}+1)$ 回現れる。例えば、$x=a$ で誤差は $\epsilon(>0)$ だとすると、x と共に誤差は減っていき、x のあるところで $-\epsilon$ となる。更に x を増すと、今度は増え始める。x と共に増えて行き、あるところで ϵ に迄たどり着くと、今度は逆に減り始める。この動作を何度も繰り返し、最後に $x=b$ では、$\pm\epsilon$ のどちらかの値にたどり着く。常識的に考えれば、妥当な結論だろう。最小 2 乗法では必ずしもこの通りとはならないかも知れないが、おおむね残差がこのような振舞をする事は期待しても良い。

線形最小 2 乗法に関する、発展的な話題を提供しておこう。

ここで紹介した線形最小 2 乗法では、伸びの測定誤差はどこでも一定であった。測定毎に誤差が異なるならば、測定値の生起確率の式を、

$$P(y_i)\propto\exp\left\{-\frac{1}{2}\sum\left(\frac{Y_i-y_i}{\sigma_i}\right)^2\right\},\qquad(i=1,\cdots,m)$$

と書き換えれば良い。当然、σ_i は、個別の測定誤差 δy_i に比例するから、

$$S=\sum_i^m\left(\frac{Y_i-y_i}{\delta y_i}\right)^2$$

を最小にする様に目的関数を書き換えなければならない。この場合も、次のようにすれば線形な最小 2 乗法に還元される。行列 A の行列要素を $A_{i,j}\to A_{i,j}/\delta y_i$ で置き換え、測定値 $y_i\to y_i/\delta y_i$ で置き換えれば良い。

誤差論では、非常に大きな誤差は実質的に生じないと仮定している。しかし現実的には、とび抜けて大きな誤差 (と思われる) 測定も混じって来る場合がある。仕方がないから、そのような測定は無視したくなる。ロバストと呼ばれる処方があるが、最小 2 乗法において、あまりにも理想曲線から離れすぎている場合に、その weight を小さくして、そのような実験値が全体に大きな影響を与えすぎない様にしている場合がある。

こんな事態は可能なかぎり避け、実験をやり直す事を真剣に考える方が良いと個人的には考えている。

実験値がある曲線を描き、その曲線を多項式で展開するといった局面を想定しよう。次数を上げる程、曲線をきれいに再現するならば、もっと次数を上げてみようかと考えるのは人情というものである。次数を上げると、個々の項は数値的にどんどん大きくなり、(従って展開係数も大きくなる) 展開式全体としては、それなりに (小さな) 実験値を与えている。微妙な曲線を表現するためには、(大きな数) ー (大きな数) = (小さな数) という作業を行っている訳である。

一方でこのような微妙な作業は人為的すぎるという批判が起こったとしても不自然ではない。どこかで自然な展開式と、不自然な展開式とを区別したい。

この様な批判的精神の結果として登場したのが、最小ノルムの最小 2 乗法という考えである。即ち、多項式の展開係数の 2 乗和を最小にする最小 2 乗法である。この考えからは、擬逆行列 (一般逆行列) や行列の固有値を一般化した特異値という概念が生み出された。以下の文献は擬逆行列を導入している。

参考文献 R.Penrose, Cambridge Philosophical Soc. Proc. (1955) **51** 406.

非線形最小 2 乗法

これまでは理論式が線形であったから、線形の最小 2 乗法に持ち込めた。もっと一般に測定できる変数 (これまでは行列 A で書けた) と測定量 y の関係が非線形であると、どのような処理が可能かを説明しておこう。

カイ (χ) 2 乗検定という言葉を使う場合がある。ある物理量 y を一群のパラメータ $\mathbf{p}$ の関数として測定したとする。この場合 y はある $\mathbf{p}$ の関数として、$y = f(\mathbf{p}, \mathbf{x})$ と書けたとしよう。勿論明示的に $f(\mathbf{p}, \mathbf{x})$ と書けないかも知れないが、測定条件 $\mathbf{p}$ を確定し、更に付随的なパラメータ $\mathbf{x}$ を与えると、y がある種の計算結果として与えられると解釈しておこう。例えばポテンシャルを与えて微分断面積を計算する事は可能であるが、断面積を与えてこれからポテンシャルを得る事は非常に難しい。この場合、y は微分断面積であり、$\mathbf{p}$ は各種の実験条件であり、$\mathbf{x}$ がポテンシャルという事になろう。

この種の問題を逆散乱問題という。ランダウとリフシッツの量子力学の教科書の脚注には、全てのエネルギーでの全ての部分波の位相のずれが与えられないと、ポテンシャルは計算出来ないと書いてあったと記憶している。

実験条件 $\mathbf{p}$ の値を各種変えながら、y の値を測定し、パラメータ群 $\mathbf{x}$ の値を出来るだけ合理的に決めたい。パラメータ $\mathbf{x}$ は m 個の成分を有する。測定値は n 組 $\mathbf{p}_i, y_i, \delta y_i \ (i = 1, \cdots n)$ ある。ここで、δy_i は y_i の誤差である。当然 n は m よりも大きい。この時、カイ 2 乗は以下の様に定義される。

$$\chi^2 \equiv \frac{1}{n-m} \sum_i \left(\frac{f(\mathbf{p}_i, \mathbf{x}) - y_i}{\delta y_i} \right)^2$$

もしも測定が正確に行われるならば、右辺の和の各項は 1 の大きさを与えるだろう。従って n 項の和は n という値を与えると考えられる。しかし、パラメータを旨く決めれば、個別の項を 0 とする事も可能である。m 個のパラメータを含むから、n 項の内 m 項が 0 となるように $\mathbf{x}$ を選ぶと残りの項は 1 の大きさを与えるから、和は $n-m$ になれば、正しく測定が行われていると考えられる。従って、右辺は $n-m$ で割っている。

先に n 回測定に対する測定値の誤差を思い起こそう。分母に $n-1$ が登場していた。この 1 はパラメータを一つ (最確値) 含んでいたせいだと思っておこう。

この χ^2 を最小にする様にパラメータ $\mathbf{x}$ を決めよという問題を解く事になる。これは数値計算の部門で、関数の最小化問題と呼ばれている問題そのものであり、計算機が使用され始めてからの歴史を有する。多くの変分法の問題も、この範疇に入る。一般論として言うと、最小化問題は解けない。関数形が不明である以上、これは仕方が無い。しかし $\mathbf{x}$ の初期値 $\mathbf{x}_0$ を与えると、その初期値付近の ‘極小値’ を求める事は、原理的に可能である。

極小値を求めるべき目的関数 χ^2 は非負であるから、極小が存在すると仮定するのは、妥当だと思える。しかし極小を与えるパラメータが物理的に妥当であると考える論理的な根拠は必ずしも明らかではない。

又、極小値は複数登場する場合もある。

核子 (陽子と陽子、陽子と中性子) の弾性散乱を記述するパラメータ (位相のずれ) を決める実験が精力的に行われた。その結果、確からしいパラメータの組が 3 組提案された。最終的に信用されている値は、エネルギーが低い時にはπ 中間子が 1 個だけやりとりされると仮定した時に理論的に予想される値と矛盾しないという条件で決められた。

一般的に言って、目的関数 $\chi^2(\mathbf{x})$ を、パラメータ $\mathbf{x}$ の関数だと考えた時、パラメータで χ^2 が微分出来るならば、適当な初期値 $\mathbf{x}_0$ から $-\nabla\chi^2$ の方向に沿って χ^2 の値を計算していけば、極小点に辿り着くと考えたくなる。この考え方の最も単純な場合は、$f(x) = 0$ という方程式を解く手法として知られている、ニュートン法である。しかし、数値計算の本を見るとニュートン法の失敗例が必ずといっていいくらい与えられている。関数の極小値を探す方面の研究者は、この失敗例を鳥篭に捕まえられる (cage in) と呼んでいる。別な表現では 悪名高い深い谷の問題 (notorious deep valley problem) として知られている。おしとやかなニュートン法として Marquart 法がある。

問題が線形化出来るならば Householder 法に依るのが良いが、非線形ならばどうしよう？というのがここでの問題設定である。実用的な意味で、$\dfrac{\partial\chi^2}{\partial x_i}$ が計算可能か不可能かで対処法が異なる。

この微分が不可能か実用上困難な場合には、simplex 法に依るのが良い。

微分が可能ならば、Marquart 法か variable metric method (可変計量法) が使える。可変計量法は、計量を変えてはいないから共役勾配法が正しいという意見もある。但し、巷に溢れている共役勾配法の本を漁っても、可変計量法の意味での関数の極小化を論じている訳ではないと思っておくのが妥当である。

ここでは 実用的な範囲でシンプレックス法を説明し、次に可変計量法の概観を与えよう。

シンプレックス法

m次元空間に独立な (m + 1) 個の点をとり、この点で作られる図形をシンプレックスと呼ぶ。先ず、概念的な説明をしよう。この (m + 1) 個の頂点の内で、最大値と最小値を与える点を取り出して最大値の点から最小値の点へ向けてシンプレックスを転がして行こう。うまくいくと、最大値はこれまでの値よりも小さくなるだろう。この操作を繰り返すとそのうちに、極小値はこのシンプレックスの内部に取り込まれるだろう。そうしたら、シンプレックスを小さくする。転がす事と小さくする事を繰り返すと、その内にシンプレックスは極小値のまわりに収縮するだろう。手法を改良するには、転がす時にシンプレックスを大きくしたり小さくしたり歪ませたりすると効率が改善されるだろう。

手法をコワーリック著山本と小山訳の非線形最適化問題 (培風館) から再現しておこう。

シンプレックスの頂点 $\vec{x}_i$ での関数値を f_i とし、次の記号を用いる。

最大値を $f_h = f(\vec{x}_h)$
第 2 番目の最大値 (2nd maximum) を $f_s = f(\vec{x}_s)$
最小値を $f_l = f(\vec{x}_l)$
シンプレックスの図心 $\vec{x}_0 = \sum_{i,i\neq h}^{m+1} \vec{x}_i/m$

次の 3 個の独立な操作を組み合せ $\vec{x}_h$ を動かし、失敗したら第 4 の操作をする。

鏡像。最大点 $\vec{x}_h$ から図心 $\vec{x}_0$ に向けたベクトル $\vec{x}_0 - \vec{x}_h$ を作り、この延長上に $\vec{x}_h$ を移す。

$$\vec{x}_r = \vec{x}_0 + \alpha(\vec{x}_0 - \vec{x}_h)$$

拡張。鏡像操作により f_r が小さくなったときには、もっと大きく同じ方向にシンプレックスを動かす事を考える。次の式で与える $\vec{x}_e$ を考える。

$$\vec{x}_e = \vec{x}_0 + \gamma(\vec{x}_r - \vec{x}_0)$$

収縮。鏡像操作が失敗したときには、次の点 $\vec{x}_c$ の値を評価する。

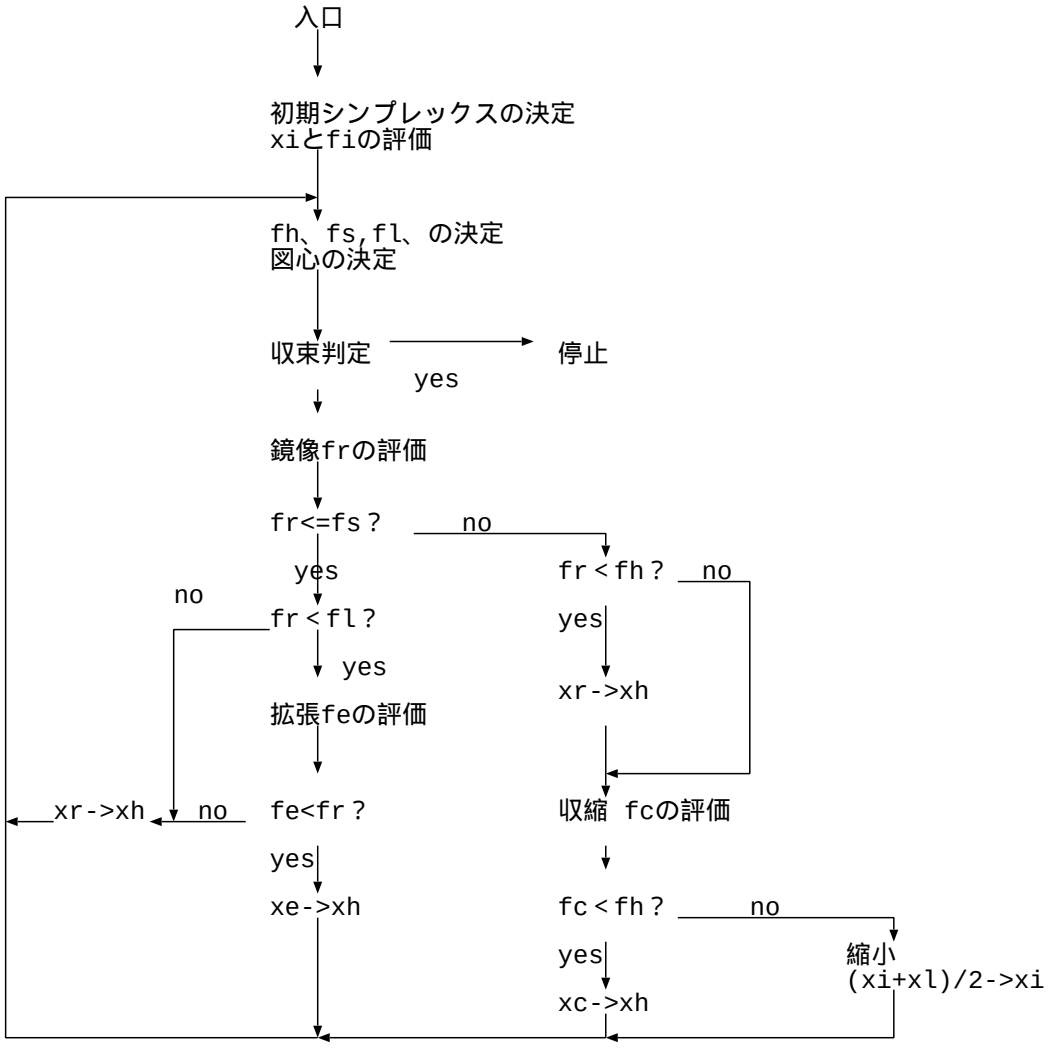
$$\vec{x}_c = \vec{x}_0 + \beta(\vec{x}_h - \vec{x}_0)$$

縮小。シンプレックスを最小点方向に向けて半分にする。全ての i について、

$$\text{新}\vec{x}_i = (\text{旧}\vec{x}_i + \vec{x}_l)/2$$

代表的な係数の値は $\alpha = 1, \beta = 1/2, \gamma = 2$ であろう。

以下に参考書のフロウチャートをそのまま引用しておく。



シンプレックス法の
流れ図

シンプレックス法は効率は悪いが非常に安定であり、プログラムを書くのも易しいので簡単な問題にはお勧めの手法である。微分の計算も必要無い。シンプレックス法はシンプレックスを大きくするのはどちらかと言うと不得手であるが、小さくする方向に働くときには威力を発揮する。最初はシンプレックスを大き目に取っておくと失敗が少ない。

可変計量法 (共役勾配法)

m 次元空間のある点 $\mathbf{x}_0$ から出発して、関数 χ^2 の極小値を探す訳だが、各点でこの関数の微分を計算出来るとする。説明の為に以下の線形方程式を解く問題を先ず引用する。

$$H\mathbf{x} + \mathbf{b} = 0$$

この空間内に m 個の独立なベクトル $\mathbf{d}_i \ \ (i = 1, \cdots m)$ をとり、これらのベクトルが $(\mathbf{d}_i, H\mathbf{d}_j) \propto \delta_{i,j}$ を満足するならば、これらのベクトル $\mathbf{d}_i$ はお互いに共役であるという。この共役ベクトルが与えられているならば、上の連立 1 次方程式は簡単に解ける。解を以下の様に展開して、

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 + \sum_i \lambda_i \mathbf{d}_i$$

連立方程式に代入し、左から $\mathbf{d}_i$ を掛ける。その結果、展開係数 λ_i は以下の様に確定する。

$$\lambda_i = -\frac{(\mathbf{d}_i, H\mathbf{x}_0 + \mathbf{b})}{(\mathbf{d}_i, H\mathbf{d}_i)}$$

これで、問題は解けた。この式は i 以外を含まないので、和をとる順番はどうでもよい。そのように、共役ベクトルが作ってある。問題は、共役なベクトルをどのようにして作るかにあり、世の中の共役勾配法による線形方程式の解法は、この点に努力を集中していると言って良いだろう。

上の $\mathbf{x}$ を展開する式で、$\mathbf{d}_i$ は独立でさえあれば、共役である必要は無いのでは？という疑問があるだろう。原理的にはそれでも良いが、この時には線形方程式を解くという問題は、全然簡単にならない。

行列 H の固有ベクトルは $\mathbf{u}_i$ は、ここで述べた共役性を満足する。従って固有ベクトルが確定出来るような行列には必ず共役なベクトルが存在する。

更に言えば、$\mathbf{d}_1$ を適当に与えた時、以下の漸化式により共役ベクトルを作る事が可能である。

$$\mathbf{d}_{i+1} = H\,\mathbf{d}_i - \frac{(\mathbf{d}_i, H^2\mathbf{d}_i)}{(\mathbf{d}_i, H\mathbf{d}_i)}\,\mathbf{d}_i - \frac{(\mathbf{d}_i, H\mathbf{d}_i)}{(\mathbf{d}_{i-1}, H\mathbf{d}_{i-1})}\,\mathbf{d}_{i-1}$$

但し、$i = 1$ の場合には、右辺第 3 項は不要である。

線形方程式を解く事は、以下で定義される 目的関数 (χ^2 になぞらえられる) $f(\mathbf{x})$ を最小化する事とは等価である。

$$f(\mathbf{x}) = a + (\mathbf{x}, \mathbf{b}) + 1/2(\mathbf{x}, H\mathbf{x})$$

微分して 0 とおくと、最初に述べた連立方程式に辿り着く。

任意のベクトル $\mathbf{x}_0$ から出発して、ベクトル $\mathbf{d}_1$ の方向に沿って、関数 $f(\mathbf{x})$ の極小値を与える点を探し $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 + \lambda_1\,\mathbf{d}_1$ にたどり着く。目的関数が上で与えた $f(\mathbf{x})$ の時、この λ_1 は上で与えた λ_1 と一致する。点 $\mathbf{x}_1$ から $\mathbf{d}_2$ 方向に沿って極小点を探す。この手続きを繰り返すと、$F(\mathbf{x})$ が 2 次形式ならば m 回で、極小点にたどり着く。$f(\mathbf{x})$ が非線形ならば、更に何回か ‘お鉢巡り’ を繰り返す必要があるだろう。

非線形の極小化過程は、方向ベクトル $\mathbf{d}_i$ の決定と、その方向に沿っての関数値が極小になる点を探すという二つの作業を納得がいくまで繰り返す事である。

Davidon の可変計量法では、最初の $\mathbf{d}_1$ としては $\nabla_{\mathbf{x}}\chi^2$ を採用し、この方向の線上に最小値を探し、この位置を $\mathbf{x}_1$ と置く。上に与えた行列 (の逆行列) をこの位置での微分 $\nabla\chi^2(\mathbf{x}_1)$ を用いて改良していく。もしも旨く 逆行列 H^{-1} が推定できれば、上に与えた連立 1 次方程式は簡単に解けてしまう。即ち、$\mathbf{x}$=$H^{-1}\mathbf{b}$ と与えられてしまう。

χ^2 極小化問題では、行列 H は与えられていないので、線形問題の場合の様に簡単ではない。

共役勾配法は Hestenes と Steifel のいわゆる世紀の大発見を Davidon が極小化に応用したものであるが、Davidon の論文は難しいので Fletcher の解説を皆が引用する様である。

参考文献: R. Fletcher, The Computer Journal 13(1970) 317

自分でかなり計算プログラムが書ける様になったという自信がついたら、挑戦してみよ。複雑な問題に取り組んでみると、素人考えではかなりの確率で失敗するだろう。初歩的な失敗例のほとんどが、微分の精度欠落に関係している様である。

関数の極小化において、パラメータ空間の谷に沿って極小値を探す事が大切である。効率を重視しすぎて、大胆な歩幅を採用すると、谷沿いに探さずに、岡や峰を越えて別の谷に乗り換えてしまう事がある。Fletcher の論文にある計算例のひとつは、この例になっていると思われる。専門家の論文にも見落としがあるのだと想像している。

誤差に付いて

次の様に考えるのが良いと個人的には思っている。χ^2 の極小値を与える $\mathbf{x}_{min}$ が決定されたとする。この時の χ^2 の値が 1 程度の大きさならば、測定やパラメータの決定が妥当であると考えられ、この判定をχ 2 乗判定と呼ぶ。

この極小値付近では χ^2 は以下の様に振舞うはずである。

$$\chi^2(\mathbf{x}_{min}+\delta\mathbf{x}) = \chi^2(\mathbf{x}_{min}) + \frac{(\delta\mathbf{x}, H\delta\mathbf{x})}{2} + O(\delta x^3)$$

Tayler 展開の内、 1 階微分の項は極小値の条件により 0 である。右辺第 2 項が、誤差情報を含んでいる。ここで、H は以下の様な 2 階微分を成分とする行列である。

$$H_{i\,j} = \frac{\partial^2\chi^2}{\partial x_i\,\partial x_j}$$

この行列 H を誤差行列と呼ぶ場合もある。誤差分布関数が ガウス関数で与えられると仮定すると、誤差 ξ が発生する確率は、$\exp\{-\xi^2/(2\sigma^2)\}$ と書けた事を思い出そう。従って、$(\delta\mathbf{x}, H\delta\mathbf{x})/2 = \sum_i \delta q_i^2/2\sigma_i^2$ と変形出来たとすると、σ_i が第 i パラメータの誤差を表現しているはずである。

この行列は一般に言って非対角要素を含む。即ち、決定されたパラメータの値はお互いに相関している。従って個別のパラメータの誤差を云々する前に考えておくべき事がある。そこでこの行列を対角化し、その固有値と固有ベクトルを考える。行列 H の固有値 λ_i を対角要素として持ち、他の要素は全て 0 である行列を Λ、対応する固有列ベクトル $\mathbf{u}_i$ を並べて作られた行列 U を持ってくる。

$$HU = U\Lambda, \quad \text{又は} \quad H = U\Lambda U^{\dagger}$$

この記号を使うと交差項が消える。

$$(\delta\mathbf{x}, H\delta\mathbf{x})(\delta\mathbf{x}, U\Lambda\, U^{\dagger}\,\delta\mathbf{x}) = \sum_i \lambda_i \delta q_i^2$$

一般的に言えば行列 H は非対角要素があるがこの表現では相関が無い、即ち完全に独立な誤差ベクトルを以下の様に定義出来る。$\delta\mathbf{q}_i = \delta q_i \mathbf{e}_i$ と定義する。当然ながら、$\mathbf{e}_i$ は第 i 成分のみが 1 、他は 0 という基本単位ベクトルである。この誤差ベクトルの大きさは、$\delta q_i = 1/\sqrt{\lambda_i}$ とする。現実のパラメータ空間での完全に独立な誤差ベクトル $\delta\mathbf{x}_i$ は、$\delta\mathbf{q}_i$ と、以下の関係にある。

$$\delta\mathbf{x}_i = U\delta\mathbf{q}_i = \delta q_i \mathbf{u}_i$$

この m 個の誤差ベクトルの第 j 成分が、パラメータ x_j の誤差を与える。各独立誤差ベクトルの j 成分の 2 乗和を計算する。

$$\delta x_j^2 = \sum_i \left(\delta q_i\, U_{ji}\right)^2 = (H^{-1})_{j,j}$$

最後の式は、次の様にして導く。

$$H^{-1}_{j,j} = (U\Lambda^{-1}U^{-1})_{j,j} = \sum_i \frac{1}{\lambda_i} U^2_{j,i}$$

即ち、パラメータ x_j の誤差は行列 H の逆行列の対角成分の平方根である。従って、実際問題として固有値や固有ベクトルの計算は不要である。行列 H を経由して誤差を評価したいならば、その固有値 λ_j を計算して逆数をとり、その平方根を計算すれば良い。

別の言い方をすると、固有ベクトルの方向にパラメータを増加させた時、固有値はパラメータ空間の曲率を与える。即ち曲率が大きい程その方向のパラメータは正確に決定されていると言える。

ここで登場した行列 H は、可変計量法で推定する行列 H^{-1} とは逆行列の関係にある。逆行列の固有値は、元の行列の固有値の逆数であり、固有ベクトルは両行列で共通であるから、誤差の推定という意味では、可変計量法は非常に有難い方法である。

ここでは、目的関数 χ^2 を極値付近で Tayler 展開し、最初の項から誤差を論じた。一般的な傾向としてはこの考え方は正しいと思うが、特殊な場合には正しくない。ある場合には 2 階微分も 0 となっているかもしれない。数値計算の場合には、計算量が膨大であるから、かなり特殊だと考えてそのような場合は無視して構わないと仮定するのは危険である。平野菅保が高次代数方程式を解く時の指針を戸川隼人がまとめた、次の言葉を引用しておこう。(マトリックスの数値計算、オーム社)

” 無視出来るくらい小さな項” は積極的に 0 とおき、” 特に支配的な項” を重視する。

” 特に支配的な項” は低次項であると考えられているが、実際の数値計算の経験では、もっと高次の項が支配的である場合が少なくない。このため高次、低次にかかわらず、実際の影響力をしらべて、最も支配的な項をえらぶ。

ブートストラップと誤差論

最小 2 乗法の面白い利用法を最後に紹介しておこう。計算機の能力が充分にあると仮定した、手抜きだが分かりやすい方法である。最小 2 乗法の計算プログラムは利用可能であるとする。これまでの最小 2 乗法の常識では、全ての実験値を使用して 1 回だけ最小 2 乗法の計算をしたが、この制限を取り除く。

実験点は N 個あり、これは最小 2 乗法で決めるべきパラメータ数 n よりもかなり多いと仮定しよう。N と n の間の数 m を一つ考える ($n < m \leq N$)。実験値の内から、任

意の m 個のデータの組み合わせを持って来て、最小 2 乗法の計算をする。この結果、パラメータの組 $\mathbf{x}_1$ がきまる。次に同じ m でも異なる実験値の組合せを持って来て、同様の最小 2 乗法の計算をし、先のパラメータとは少し異なる計算結果 $\mathbf{x}_2$ を得る。以下同様である。必要と考えるならば、m も可能な範囲で動かしても良い。こうすると、決定すべきパラメータの候補は沢山 (M と書こう) 得られる。そこで、この M 個のパラメータ群 $\mathbf{x}_i(i = 1, \cdots M)$ に対して統計的な考えを当てはめ、計算結果の分布を調べる。パラメータベクトルの第 1 成分だけを取り出すと、その分布はガウス分布をしているだろう。だから、この分布からパラメータの誤差を議論できるだろう。他の成分に付いても同じ考えが成立する。

更なる利用もあり得る。パラメータベクトルの第 ℓ 成分を x 軸に、第 k 成分 を y 軸にとって、全ての M 個の計算結果をプロットする。もしも 両パラメータに相関があれば直線状に点が分布するだろう。完全に独立ならば、中心点の回りに尾根の無い山が見られるだろうし、両パラメータに相関があれば、尾根を持つ山が見られるだろう。

相関係数 ρ は、以下の様にして定義されている。x と y 軸に選んだデータ群を $\{(x_i, y_i), i = 1, \cdots N\}$ と書き、これらの平均値と標準偏差を $\overline{x}, \overline{y}, \ \sigma_x, \ \sigma_y$ と書いたとする。

$$\rho = \frac{1}{N\sigma_x \, \sigma_y} \sum_i (x_i - \overline{x})(y_i - \overline{y})$$

相関係数 ρ の絶対値は 1 以下の値をとる。

ブートストラップというのは靴の紐 (boot strap) という意味である。この意味するところは、ビュルガーのほらふき男爵の冒険という本を読まなければ分からない。Bootstrap は略して boot, boot-up 等という単語として使用される事もある。この単語のファンは多い。

誤差論の最後に付け加えたい事。

誤差論とは直接関係が無いと考える人もいるかも知れないが、原子力発電所で事故が起こる確率はどの程度だろうかと推定する研究が、１９７４年に統計的な手法を使用して行われた。責任者の名前をとり、Rusmussen 報告というが、約１０億年に１回という結論を出した。この Rusmussen 報告の手法は統計学者には、歓迎されたが、原子力反対という人達からは目の仇にされたきらいがある。その後のアメリカやソ連での原子力発電所での事故により、Rusmussen 報告事体の評価は下がった。

教訓は、(1) 事故を考える時、人的因子を無視してはいけない。(2) 事故は、その発生の初期に押え込む事をしないと、連鎖反応的に広がる場合がある事。

例 1 。平均値と誤差

例えば１０回の測定で、以下のデータを得たとしよう。(このデータは 1 以下の乱数を発生し、それを小数点以下 2 桁に丸め、１０に加えて作った)

i	x_i	$r_i = x_i - < x >$	r_i^2
1	10.65	0.098	9.60×10^{-3}
2	10.79	0.238	5.66×10^{-2}
3	10.94	0.388	1.51×10^{-1}
4	10.73	0.178	3.17×10^{-2}
5	10.50	-0.052	2.70×10^{-3}
6	10.84	0.288	8.29×10^{-2}
7	10.29	-0.262	6.86×10^{-2}
8	10.28	-0.272	7.40×10^{-2}
9	10.41	-0.142	2.02×10^{-2}
10	10.09	-0.462	2.13×10^{-1}
	$< x >= 10.552$		$\sum r_i^2 = 7.10 \times 10^{-1}$

測定値 (の平均値の) 誤差は $\sqrt{7.10 \times 10^{-1}/(9 \times 10)} = \pm 8.88 \times^{-2}$ としておけば良いだろう。即ち、$x = 10.552 \pm 0.009$ とする。

例 2 異なる誤差の平均値

物理量 x を 3 人が測定しそれぞれ、$x_i \pm \delta_i$、(i=1,2,3) を得た。個別の測定に既に誤差がつけられているから、これらを誤差の逆 2 乗を weight として荷重平均すれば良い。

i	x_i	δ_i	$1/\delta_i^2$	x_i/δ_i^2	$(x_i - < x >)^2$ $[10^{-4}]$
1	10.65	0.21	22.7	241.8	144
2	10.79	0.17	34.6	373.3	4
3	10.94	0.31	10.4	113.8	289
sum			67.7	728.9	

従って $< x >= 728.9/67.7 = 10.767$ としておこう。

誤差は $\sigma = \sqrt{6412.8 \times 10^{-4}/\{(3-1) \times 67.7\}} = 6.9 \times 10^{-2}$ となる。

ここで、6412.8×10^{-4} は、$\sum_i (x_i - < x >)^2/\delta_i^2$ の事である。

結局 $x = 10.767 \pm 0.069$ とする。

例 3 誤差の伝播

1 年生の時の物理実験 1 で Borda 振り子の実験から、重力加速度を測定した。この実験を思い出そう。振り子の周期 T、支点から重錘の重心までの距離 h、重錘の質量と慣性能率を M と I、重力加速度を g とすると、これらには次の関係式があるとする。

$$T = 2\pi\sqrt{\frac{I}{Mgh}}$$

ここで、I、 M、 h、T に誤差があり、この誤差が重力加速度の測定に誤差をもたらすと仮定する。この時、これらの物理量とその微小変化に対して次の関係式が成立する。

$$\frac{\delta g}{g} = \frac{\delta I}{I} - \frac{\delta M}{M} - \frac{\delta h}{h} - 2\frac{\delta T}{T}$$

ここに登場する物理量の誤差を以下の様に確定したと仮定する。$\frac{\delta I}{I} = 2 \times 10^{-3}$ 、

$\frac{\delta M}{M} = 1 \times 10^{-3}$、$\frac{\delta h}{h} = 0.8 \times 10^{-3}$、$\frac{\delta T}{T} = 0.4 \times 10^{-3}$。この時の g の相対誤差は、

$$\frac{\delta g}{g} = \sqrt{2^2 + 1^2 + 0.8^2 + 4 \times 0.4^2} \times 10^{-3} = 2.5 \times 10^{-3}$$

と評価する。従って、この例では慣性能率の誤差を減らす努力をしないとこれ以上の精度向上はあまり望めない。

この実験では基本的には周期を測定するが、周期測定と関係した話題を提供しておこう。振幅が大きくなった時には、運動方程式の解が三角関数にならずに楕円関数になるという議論をしている。これはこれで良いのだが、周期を決定した後で、この式から計算される振幅が 0 となる点を通過する時刻と、実験での時刻との差 (即ち 残差) をグラフに描いてみると面白い。学生実験 1 の実験装置で充分に検出可能であるが、残差は三角関数で表現出来るような振舞をしている場合が多い。

理論が悪いのか、実験が悪いのか？振り子が単周期の運動をするのではなく、 2 重周期運動をしているのだ！一番考えやすい 2 重周期運動の原因は、(1) 重錘の固有振動と、(2) 先端に重錘を取り付けた針金を吊下げている金具の固有振動 がいくらか異なる場合が多い様である。

一般的には、重錘は重心のまわりの回転運動をする事も可能である。針金が回転対称性をもっていないと (他にも原因は考えられるだろうが)、単振動と回転運動とが結合し、振り子運動の運動エネルギーの一部が回転運動の励起に使用される事もあり得る。

運動のモード間結合と呼んでおけば良いだろう。例えば、核融合を目指している人達はこの事を充分に認識していなかった為に非常な苦労を現在もしている。

例 4 最小 2 乗法

質量が m の重錘をバネにぶら下げて、その伸び y を測定し、次の結果を得た。伸び $y = (kg)m + y_0$ という関係式を仮定して、バネ定数に当たる kg と定数 y_0 を最小 2 乗法で決定しよう。ここで、実際に観測値を代入した関係式

$$y_i = a\, m_i + y_0, \quad (i = 1, \cdots, 10)$$

を観測方程式と呼ぶ。ただし、$kg = a$ と書いた。この観測方程式は、誤差を含む実験値が使用されているから、数学的な意味では成立しない。未知数が 2 個で、関係式が 1 0 個あるので、over determined と呼ばれる事もある。誤差は、一様であると仮定すると、目的関数 S は、次式で与えられる。

$$S = \sum_i \{y_i - a\, m_i - y_0\}^2$$

m_i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
y_i	2.22	3.23	4.28	5.22	6.22	7.29	8.24	9.24	10.28	11.25
$am_i + y_0$	2.232	3.235	4.238	5.241	6.244	7.247	8.250	9.253	10.258	11.259
Δ_i	10	5	-42	21	24	-43	10	13	-22	9

ここで、$\Delta_i = (y_i - am_i - y_0) \times 10^3$ と置いた。

S を a と y_0 で微分し 0 と置くと、次の連立方程式を得る。

$$\begin{pmatrix} \sum m_i^2 & \sum m_i \\ \sum m_i & \sum 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ y_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum m_i\, y_i \\ \sum y_i \end{pmatrix}$$

上に与えた数値を代入すると、

$$\sum m_i^2 = 385, \quad \sum m_i = 55, \quad \sum 1 = 10$$

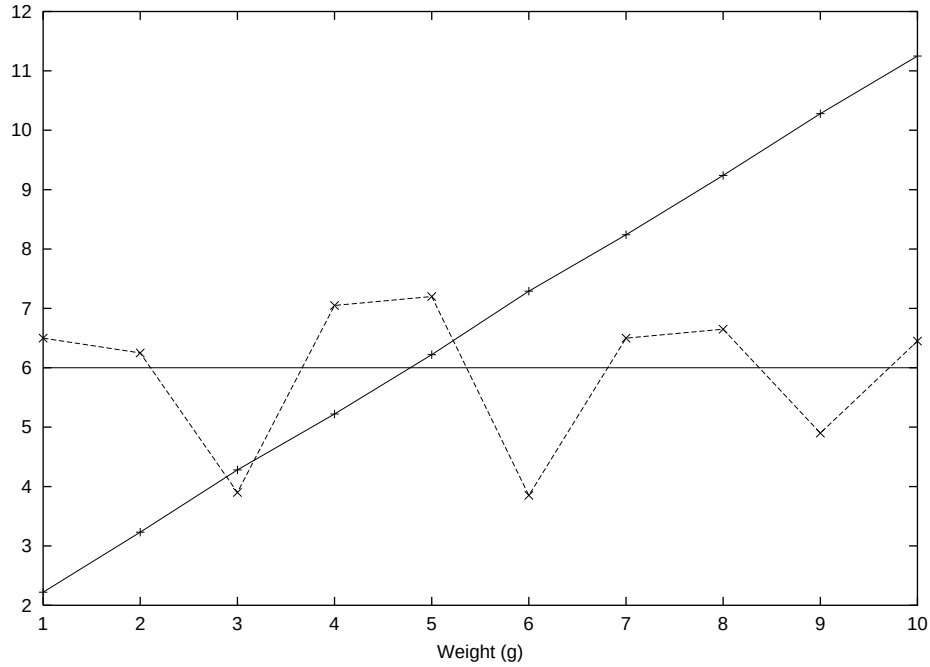
$$\sum m_i\, y_i = 453.86, \quad \sum y_i = 67.47$$

従って、

$$\begin{vmatrix} 385 & 55 \\ 55 & 10 \end{vmatrix} = 825, \quad a = \frac{1}{825}\begin{vmatrix} 453.86 & 55 \\ 67.47 & 10 \end{vmatrix} = 1.003, \quad y_0 = \frac{1}{825}\begin{vmatrix} 385 & 453.86 \\ 55 & 67.47 \end{vmatrix} = 1.229$$

この行列式を見ると、４ ~ 5 桁の数字が途中に登場している事に気付くだろう。勿論この程度の数値ならば、先に説明した Householder 法のプログラムを書かなくとも良いが、大きな行列になるとここでの注意が効いて来る。ここでは、y_0 に有限の値を持ち込んでおいたが、これがほとんど 0 だったらば頭から 3 桁以上の相殺が起こっている事が分かるだろう。

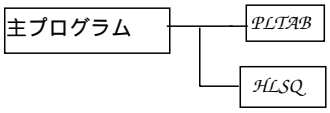
計算結果と測定値との比較を最期にしておこう。上の表の第 3 行が計算結果であり、第４行は計算と測定結果との差 (残差) を１０００倍したものである。グラフにすると以下の様になる。



図では、残差の数値は５０倍した後で 6 を加えて、原点がずらしてある。測定値は乱数を発生させて作ったが、y = 6 の線から下に位置する 3 点だけが大きな絶対値でずれている様に見える。

細かい数値処理には、計算機を利用するのが良いだろう。そこで、僕のホームページに数値計算入門という文を置いた。最後の章に、ある意味では日常的ではあるがあまり知られていないデータを取り上げて誤差を論じてみた。出来たら、目を通してもらいたい。

ここでは、最小 2 乗法の例として、角度依存のデータを作り上げ、このデータを ルジャンドル関数で展開するプログラムを示す。プログラムの構成



主プログラムの機能

1) テストデータを作る。角度は、 0 度から 1 8 0 度まで 5 度間隔とする。実験データ y_i は、ルジャンドル関数を用いて、以下の式で作る

$$y_i = \sum_{l=0}^{l=5} P_l(\theta_i)/(l+1) + (-1)^{l+1}\epsilon$$

ここで、$\epsilon = 0.01$ とした。

2) ルジャ y ンドル関数の関数表を用意する。

$$S = \sum_{m=1}^{m=37} \left(\sum_{l=0}^{l=5} P_l(\theta_i) \times x_i - y_i \right)^2$$

を最小にする係数 x_l を決定せよという問題である。

3) 講義で説明した、Householder 法による最小 2 乗法の処理をする。

4) 計算結果を出力する。確認の為に、$\sum_{l=0}^{l=5} P_l(\theta_i) \times x_i$ y_i $\sum_{l=0}^{l=5} P_l(\theta_i) \times x_i - y_i$ を評価する。

5) 上の計算から残差を計算し、最小 2 乗法副プログラムからの結果と比較する。

PLTAB 副プログラムの機能

角度の表を用いて、ルジャンドル関数の表を返す。ルジャンドル関数は、以下の漸化式を用いて計算する。

$$P_0(x) = 1,\ P_1(x) = x,\ P_{l+1}(x) = \frac{(2l+1)\,x\,P_l(x) - l\,P_{l-1}(x)}{l+1}$$

HLSQ 副プログラムの機能

Householder 法により、線形最小 2 乗法問題を解く。但し、次の様な注意を払っている。

問題を解く前に、桁合わせを行い、その後行列の列ノルムを計算し、枢軸選びをしている。1 ノルムを想定した条件数の推定値を計算している。条件数の常用対数は、その問題を解くのに、どの程度の桁数が桁落ちしたかを与えていると思えば良い。

```
C              Legendre exp. of Xsec
      PARAMETER (IR=40)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION  P(IR,10),Q(IR), IP(IR), W(IR,2),
     &           ANG(IR), Y(IR), PL(IR,10), R(IR)
C
C       mockup pseudo-data
      NANG=37
      NL=6
```

```
      DO 1 N=1,NL
    1 Y(N)=1.0D0/N
      DO 2 N=1,NANG
    2 ANG(N)=5.0*(N-1)
      CALL PLTAB(NANG, NL-1, IR, ANG, PL)
C          prepare matrix and vector for the least squares problem
      EPS=0.001D0
      DO 4 M=1,NANG
      S=0
      DO 3 N=1,NL
      S=S+PL(M,N)*Y(N)
    3 P(M,N)=PL(M,N)
      EPS=-EPS
      Q(M)=S+EPS
    4 R(M)=Q(M)
C       least squares fit
      CALL HLSQ(NANG, NL, IR, P, Q, IP, W)
C        check it
      WRITE(6,11)(N,Q(N),N=1,NL)
   11 FORMAT(('Q(',I2,')=',1PE15.7))
      RES=0
      DO 15 M=1,NANG
      S=0
      DO 12 N=1,NL
   12 S=S+PL(M,N)*Q(N)
      DIF=R(M)-S
      RES=RES+DIF**2
      WRITE(6,13)ANG(M),R(M),DIF
   13 FORMAT(F7.2,1PE15.7,1PE12.3)
   15 CONTINUE
      WRITE(6,16)W(1,1),W(2,1),RES
   16 FORMAT('Cnum=',1PE13.4,2X,'Res=',1P2E13.4)
      STOP
C        error messages
   90 WRITE(6,91)
   91 FORMAT('File xsec.dat open failure !')
      STOP
      END
      SUBROUTINE HLSQ(M, N, IR, P, Q, IP, W)
C linear least squares problem P*X=Q
C Input P(M, N), Q(M): define problem
C IR   : real size of the matrix P(IR,*)
Cworking area IP(N), W(N,2): pointer and norm of the col. vectors
C Output Q(1..N): solution vector
C        W(1,1): estimated cond. number. W(2,1): (residues)**2
```

```
C        P are destroied on output
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION P(IR, N), Q(M), IP(IR), W(IR,2)
      DATA EPS/1.0D-30/
C       check the size
      IF(IR.LT.M .OR. N.GT.M)GOTO 91
C       scaling the col. vectors
      DO 3 I=1,N
      IP(I)=I
      W(I,1)=1
      S=0
      DO 1 J=1,M
    1 S=S+P(J,I)**2
      IF(S.LE.EPS)GOTO 93
      S=1/SQRT(S)
      DO 2 J=1,M
    2 P(J,I)=P(J,I)*S
    3 W(I,2)=S
C      for each col. vector
      DO 20 I=1,N
      L=I+1
      IF(I.EQ.1)GOTO 13
C           select K, the pivot col(K)
      K=I
      A=W(I,1)
      DO 11 J=L,N
      IF(W(J,1).LE.A)GOTO 11
      A=W(J,1)
      K=J
   11 CONTINUE
      IF(K.EQ.I)GOTO 13
C       swap col(I)<->col(K)
      DO 12 J=1,M
      A=P(J,I)
      P(J,I)=P(J,K)
   12 P(J,K)=A
      J=IP(I)
      IP(I)=IP(K)
      IP(K)=J
      A=W(I,1)
      W(I,1)=W(K,1)
      W(K,1)=A
C      transform rest of the matrix
   13 A=SQRT(W(I,1))
      IF(A.LT.EPS)GOTO 95
```

```
      IF(P(I,I).GT.0.0D0)A=-A
      P(I,I)=P(I,I)-A
      B=1/(A*P(I,I))
      DO 15 J=L,N
      S=0
      DO 14 K=I,M
   14 S=S+P(K,J)*P(K,I)
      S=S*B
      DO 15 K=I,M
   15 P(K,J)=P(K,J)+S*P(K,I)
      S=0
      DO 16 K=I,M
   16 S=S+Q(K)*P(K,I)
      S=S*B
      DO 17 K=I,M
   17 Q(K)=Q(K)+S*P(K,I)
      P(I,I)=A
C        modify norms
      DO 18 J=L,N
   18 W(J,1)=W(J,1)-P(I,J)**2
   20 CONTINUE
C       backward substitution
      DO 22 I=N,1,-1
      S=Q(I)
      DO 21 J=I+1,N
   21 S=S-P(I,J)*Q(J)
   22 Q(I)=S/P(I,I)
C        estimated cond. numb.
      A=1/SQRT(W(N,1))
C        reorder the solution
      DO 23 I=1,N
      J=IP(I)
   23 W(J,1)=Q(I)*W(J,2)
      DO 24 I=1,N
   24 Q(I)=W(I,1)
      W(1,1)=A
      S=0
      DO 25 I=N+1,M
   25 S=S+Q(I)**2
      W(2,1)=S
      RETURN
C        error messages
   91 WRITE(6,92)IR,M,N
   92 FORMAT('HLSQ: your IR M N =',3I3,' array size inconsistent !')
      STOP
```

```
   93 WRITE(6,94)I,S
   94 FORMAT('HLSQ: col. ',I3,' norm**2=',1PE15.7,' too small !')
      STOP
   95 WRITE(6,96)I,A
   96 FORMAT('HLSQ: at I=',I3,' diag(P) = ',1PE14.5,' too small !')
      STOP
      END
      SUBROUTINE PLTAB(NANG, LMAX, IR, ANGTAB, PL)
C       returns table of Legendre functions
C Input NANG: number of angles
C       LMAX: max. order of Legendre function
C       ANGTAB(NANG): angle table in degree
C Output PL(NANG, 0:LMAX): table of Legendre functions
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION ANGTAB(NANG), PL(IR, 0:LMAX)
      RAD=3.14159265358979D0/180
      DO 1 N=1,NANG
      THETA=ANGTAB(N)*RAD
      X=COS(THETA)
      PL(N,0)=1
      PL(N,1)=X
      DO 1 L=2,LMAX
    1 PL(N,L)=((2*L-1)*X*PL(N,L-1)-(L-1)*PL(N,L-2))/L
      RETURN
      END
```

真空

ここで言う真空とは、大気圧よりも圧力が低い状態をいう。従って、水流ポンプ (アスピレータ) や掃除器で排気した状態も原理的には対象にしているが、実用上はもう少し圧力が低い状態を指す。圧力の下限は原理的な 0 気圧までとしておこう。実際的にはその時代の技術的な限界が下限である。

先ず、圧力の定義は容器内部のガス (又は液体) 原子や分子が容器内面の単位面積当たりに及ぼす力だとしておこう。理想気体が容器内部にある場合を例に取り、イメージ作りから開始しよう。理想気体とは、質量はあるが、大きさが無く、お互いに相互作用しない原子の集団だと考えておこう。大きさがないから、内部構造や内部エネルギーという概念はなく、ただ重心運動のエネルギーのみを取り得る。この気体の絶対温度を T だとする。質量が m、速度が v の原子 1 個の運動エネルギー K は、$K = m\,v^2/2 = 3kT/2$ と表せるから、室温付近での原子の速度はほぼ音速の 4 ー 5 割増し程度と計算できる。

例えば、原子量が 2 8 だと仮定すると、３００度での速度は

$$v = \sqrt{\frac{3kT}{m}} = \sqrt{\frac{3 \times 1.38 \times 10^{-23} \times 300}{28 \times 1.66 \times 10^{-27}}} = 517\ m/s$$

３００度での数密度 n は、1 cc 当たりに換算すると、

$$n\ =\ 6.022 \times 10^{23} \times (273/300)/(22.4 \times 1000) = 2.45 \times 10^{19}/cm^3$$

1 秒間に壁に衝突する原子数は、$n \times\ v\ = 2.45 \times 10^{19} \times 5.17 \times 10^{4}\ = 1.31 \times 10^{24}$個$/(cm^2 \cdot s)$ 個程度である。この計算は向きを無視している。もしも原子の半径を $2.5 \times 10^{-8}cm$ 従って、原子の断面積を $2 \times 10^{-15}\ \mathrm{cm}^2$ と仮定すると、１５ナノ秒程度で壁の全ての面が叩かれる計算になる。

1 モル中の原子数をアボガドロ数と呼び、1 cm^3 中の気体の中の原子 (分子) 数をロシュミット数と呼んで区別する人もいる。ここでアボガドロ数と言った数をロシュミット数だという人もいる。ロシュミットという人は、日本ではあまり知られていないが、彼の講義録 (？) を見ると、例えばケクレよりも先にベンゼン環をイメージしていた様である。

この密度の内、1 / 6 だけが例えば x 軸に垂直な面に衝突すると考えると、1 秒間に壁に衝突する粒子数は単位面積当たり、$N = n\,v/6$ である。これだけの原子が壁に衝突し、同じだけの速度で跳ね返されるとすると壁に与える 1 秒当たり運動量は、単位面積当たり $P = 2m\,v \times n\,v/6$ と与えられる。上の数値例の場合だと、

$$P = \frac{2mv^2n}{6} = 1.00 \times 10^5 N/m^2$$

当然の事ながら、これは大体 1 気圧 $(1.00 \times 10^5 Pa)$ である。

完全気体の原子は、それぞれが勝手な方向に走っており、壁にぶつかるとその速度の壁に垂直な成分が、平均的には符号を変える。もしも壁の原子と相互作用する事を認めると、(認めなければ、反射される理由を見付ける事が出来ない ！) 壁原子とエネルギーのやりとりをする事になる。従って壁の温度と気体原子との温度はその内に平衡状態になる。この時の気体分子の速度分布を問題にしてみよう。気体原子の識別可能性を仮定すると、Boltzman 分布で与えられる事が簡単な微分方程式を解く事により分かる。

x 軸方向の分布は $g(v_x) = C \exp\left(-m\,v_x^2/2kT\right)$ である。y , z 軸方向に対しても同じ関数形の式が成立する。C は規格化定数であり、ガウス積分を知っていれば、簡単に書き

下せる。

x 軸方向の速度分布関数を $P_x(v_x)$ と書く。空間の対称性を仮定すると、v_x の符号に P_x は依存しないから、v_x の偶関数でなければならない。従って、$P_x(v_x) = f(v_x^2)$ と書ける。y、z 軸方向に関しても同様の議論が成立する。一方、速度の大きさを $v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$ として、原子の速度が v である確率は、$P(v)$ は、以下の様に書ける。

$$P(v) = P_x(v_x)\, P_y(v_y)\, P_z(v_z) = f(v_x^2)\, f(v_y^2)\, f(v_z^2) = F(v^2)$$

これから、次の関係式を得る。

$$\frac{1}{f(x)}\frac{df(x)}{dx} = \frac{1}{F(t)}\frac{dF(t)}{d\,t} = const.$$

この関数方程式を積分すると、上に書いたガウス分布の式を得る。積分定数は規格化と速度の期待値を用いて決定される。

この議論では、原子の個性が全然使用されていないから、かなり一般的に使用可能な分布関数である事が理解出来るだろう。但し、この ‘証明 ’ に満足せず M.G. Mayer の統計物理の教科書や、伏見康治著 量子統計力学 (共立出版) pp 2 7 参照せよ。

Boltzman 分布をする原子の集合に対し、分布がピークを持つ速度、速度の平均値、速度の分散、平均値の倍以上の速度を持つ確率等を常温の空気に対して、各自計算しておく事。

原子が理想気体であるという仮定を捨てるとどうなるだろうか？先ず、原子には大きさがある事を認めなければならない。原子間にも相互作用がある事を認めねばならない。

原子に大きさがあるという事と相互作用があるという事を提示したが、この内で本当に大切なのは相互作用が存在するという事である。大きさがあるという事を確認するには、何らかの相互作用を用いて調べなければならない事を認識すべきである。

良く知られている様に、ミクロな系では万有引力は無視しても良い大きさしか持たない。従って、電磁的相互作用を考える事になる。核力や弱い相互作用は、相互作用の到達距離が短かすぎるので、当然登場しないと考えて良い。

相互作用を経由して、大きさが定義されるという事は、現象を異なる相互作用を経由して観測すると、同じ対象も異なる大きさを有するという事である。

又、原子同志が衝突するという事は、原子同志がある種の相互作用を通じてエネルギー、運動量や角運動量等の量子数を交換する事である。

現実気体の状態方程式としては、次に示した van der Waals の状態方程式がよく引用される。n はモル数である。

$$(P + a\,n^2/V^2)(V - n\,b) = nRT$$

ここで導入された定数 a は、原子間の相互作用の効果を取り入れたものである。原子間の相互作用は、全体として見れば、原子の衝突確率に比例すると考えるのが妥当だろう。衝突確率は単位体積当たりの原子数の 2 乗 (どの原子と、どの原子とが衝突するかという組合せの数) に比例すると考えると体積の 2 乗が分母に登場するのは自然である。相互作用に依り圧力が修正を受けると考えるのも妥当だろう。

一方、定数 b の意味は、原子を有限の半径 r_0 を持つ球だとすると、衝突による原子間の最近接距離は $2r_0$ 程度だから、この大きさを半径とする球内には 2 つの原子しか入れ

ない。衝突は 2 個の原子が関与しているから、この相互排除体積の半分、従って原子 1 個の体積の 4 倍、程度が一個の原子の支配空間として割り当てられる事に対応する。

酸素に対して、$a = 1.38 \times 10^{-1} kG\, m^5/s^2(mol)^2$、$b = 3.2 \times 10^{-5}\, m^3/mol$ という数字を見た事がある。b は壁と気体粒子との相互作用の結果であるという説もあるようだ。

そこで、原子間の相互作用やこの相互作用により誘起される原子間の構造や分子に付いて少し復習しよう。パラメータや図はレッドヘッド他著、富永・辻 訳「超高真空の物理」(裳華房) を引用しておこう。

先ずは、原子間の引力の話である。水素分子の原子間力は、陽子や電子間に働くクーロン力が原因である。二つの電子のスピンが 0 (singlet) か 1 (triplet) に依存して、引力になったり、斥力になったりする。図中の Σ という記号は、分子内の二つの原子核を繋ぐ軸への角運動量の射影が 0 $(\hbar)$ である事を意味する。

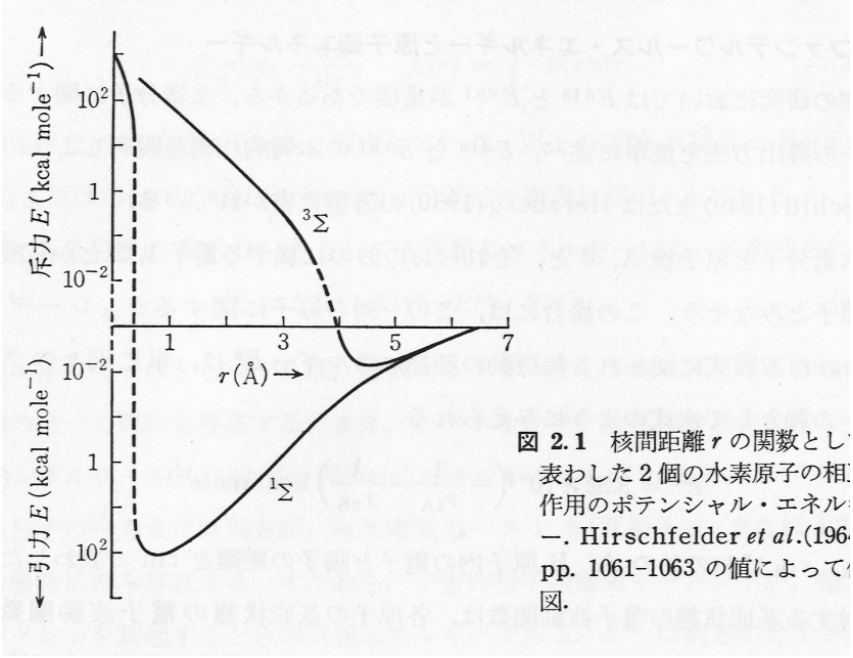


図 2.1 核間距離 r の関数とし
表わした 2 個の水素原子の相
作用のポテンシャル・エネル
ー. Hirschfelder *et al.*(196
pp. 1061–1063 の値によって
図.

こう書くと直接的なスピン依存力が電子間に働いている様に感じる学生がいるかも知れないが、直接的なスピン依存力ではなく、パウリ原理を考慮すると生ずる 2 電子の波動関数の対称性に起因する現象である。

この図ではポテンシャルエネルギーという単語が使用されているが、我々物理屋が言うポテンシャルエネルギーではない。好村・井上訳のランダウ リフシッツの量子力学の教科書では「電子項」と訳されてい

る。化学屋のいう第１イオン化ポテンシャルも、物理屋のセンスではポテンシャルではない。

$^3\Sigma$ 状態は、０．５ nm 付近に浅い引力の谷があるが, これでは束縛状態を作るには不足している。一方、$^1\Sigma$ 状態は束縛状態を作り得る。これが通常の意味での水素分子である。

このような原子間の結合エネルギーの代表的数値の表を、次に 引用する。

一般的な２原子分子の解離エネルギーと核間距離

気体	解離エネルギー		核間距離
	(eV)	(kcal mole^{-1}	(A°)
H_2	4.476	103.2	0.7416
D_2	4.553	105.0	0.7416
CO	11.108	256.2	1.1281
N_2	7.373	170.0	1.094
NO	5.29	122.0	1.1508
O_2	5.080	117.1	1.20739
F_2	<2.75	63.4	1.435
Cl_2	2.475	57.07	1.988
Br_2	1.971	45.45	2.283
I_2	1.5417	35.55	2.666

Herzberg (1950), Table 39

２原子分子の例ばかりであるが、分子の結合エネルギーは数電子ボルトと覚えておけば良いだろう。室温での熱エネルギーは約１/４０ eV であるから、化学結合のエネルギーは熱エネルギーよりも充分大きいと言える。

次は、分子間の引力である。モースポテンシャルや、レナード・ジョーンズポテンシャルが良く用いられる。ここで引用したのは、Lennard-Jones potential と呼ばれ、次式で定義される。

$$V(r) = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r} \right)^{6} \right\}$$

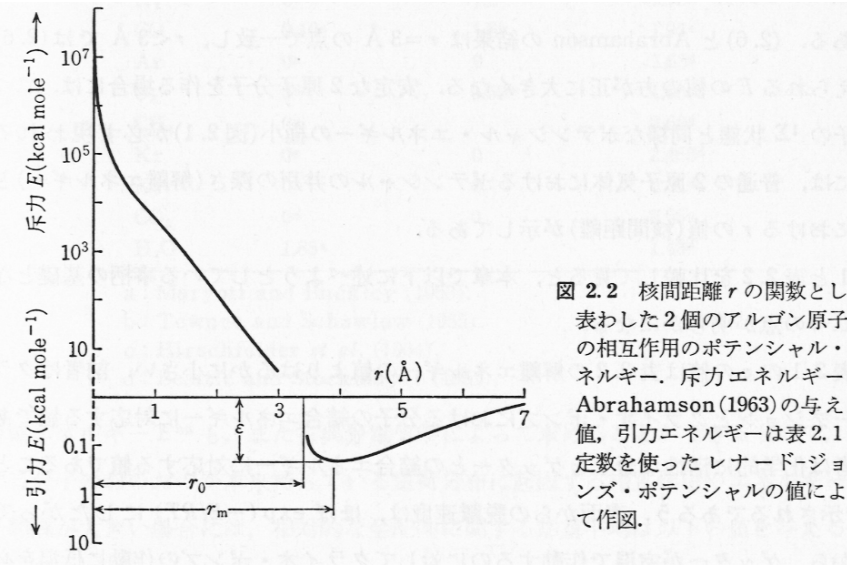


図 2.2 核間距離 r の関数とし表わした２個のアルゴン原子の相互作用のポテンシャル・ネルギー. 斥力エネルギー Abrahamson (1963) の与え値, 引力エネルギーは表 2.1 定数を使った レナード-ジョンズ・ポテンシャルの値によて作図.

図では ０．３ nm、付近で切れているが, r の小さいは正確を期する為に, Thomas-Fermi の近似で電荷分布を評価した計算値であるとの事だ。分子間力の原因は, 今の Lennard-

Jones potential の場合は, r の大きなところでは, 双極子-双極子相互作用に起因し, r の小さな部分は電子間や原子核間の斥力によるのだろう。

電気的に中性な分子は, 電気的双極子能率を持っても良い。球対称に電荷が分布していれば、電気的双極子能率は当然 0 である。しかし、球対称な電荷分布を持つ分子同志が近付いて来ると、先ず最初に影響を及ぼし合うのは、分子の外周部に分布している電子であろう。両分子間の電子の内、一方では電子が相手から逃げ、もう一方では相手の原子に近付く様な分布を取れば、両方の分子には符号の異なる電気的双極子が誘起された事になる。符号の異なる電気的双極子能率は、引力を及ぼし合うので、分子間には見掛け上、引力が作用する。別の見方をすれば、遠くに離れて存在すれば分子の電子状態のエネルギーは縮退していたのだが、近くに来ると電子エネルギーレベル が分岐しエネルギーの高い状態と低い状態が生ずる。その内、低い方の状態が優先的に実現されるので、分子間には引力が作用したように観測される。この様な分子間力は、van der Waals 力と呼ばれる。

ある種の分子は、分子そのものが永久的な電気的双極子能率を持つ。化学者はこのような分子を (有) 極性分子と呼んでいる。代表的な有極性分子は水である。OH 結合では、電気的に球対称な酸素や水素原子が共有結合する時に、両原子核を繋ぐ線上に電子の分布が密 (従って、そこの電荷密度が負) になる。逆に言えば、原子核付近では正の電荷密度の状態が実現する。このように、分子全体としては電気的に中性であるが、化学結合の為に局所的に電荷分布に偏りが出来ると、有極性の分子となる。有極性の分子は、一般的に言って van der Waals 結合よりも大きな束縛エネルギーを与える傾向にある。このような永久双極子能率を有する分子に別の分子が取り囲まれて見掛け上大きな質量の分子の様に振舞う現象を水和と呼ぶ。

具体的な分子間に働く、 Lennard-Jones potential のパラメータを次に引用しておく。

気体分子間のレナード-ジョーンズ ポテンシャル定数

気体分子	ϵ (eV)	ϵ ($\mathrm{kcal\,mole^{-1}}$)	r_e (A°)	$r_m = 1.22 r_e$	1atm 沸点 (K)
He-He	0.00088	0.0203	2.556	2.863	4.2
H_2-H_2	0.0031	0.0735	2.928	3.279	20.4
Ne-Ne	0.00307	0.0709	2.789	3.124	27.3
N_2-N_2	0.00789	0.182	3.681	4.123	77.4
CO-CO	0.00950	0.219	3.590	4.021	81.9
Ar-Ar	0.0107	0.246	3.418	3.828	87.4
O_2-O_2	0.00976	0.225	3.433	3.845	90.2
CH_4-CH_4	0.0118	0.272	3.822	4.281	111.7
Kr-Kr	0.0163	0.377	3.61	4.043	120.3
Xe-Xe	0.0197	0.455	4.055	4.542	165.1
CO_2-CO_2	0.0163	0.377	3.996	4.476	194.7

Hirschfelder et al.(1964) p.1110

この表を見ると、分子間力の大きさは、絶対温度で３００度の場合の熱エネルギーと比較出来る程度の大きさである事がわかる。従って、冷却すると分子同志をくっつける事ができる。

大体において、２原子分子の大きさは数オングストローム (0 . ? nm) というところである。勿論、分子量が大きくなるとどんどん分子の大きさも大きくなる。

Lennard Jones ポテンシャルによる粒子の散乱軌道の図が都筑卓司著 'なっとくする統計力学 ' (講談社) １５７ー１５８ページ記載されている。クーロン散乱の軌道を見慣れた人間には、かなり複雑な軌道である。

このような分子が高速で走っている最中に衝突して、進行方向を変えるとか、運動エネルギーの一部を内部励起のエネルギーに変換する様な現象も起こっているかもしれない。一度衝突してから、次に衝突する迄の走行距離の平均値を、平均自由行程 (mean free path) と呼ぼう。一つの分子だけが運動していて、他の分子は静止していると仮定しよう。弾性散乱に限定し、この弾性散乱の断面積を σ 、分子の数密度 (単位体積当たりの分子数) を n とすると、 1 個の分子が距離 x 走る間に弾性散乱されない確率は、$\exp(-\sigma\, n\, x)$ と書ける。従って、平均自由行程 λ は、

$$\lambda = \frac{\int dx\, x\, \exp\{-(\sigma\, n\, x)\}}{\int dx \exp\{-(n\sigma\, x)\}} = \frac{1}{n\sigma}$$

従って、平均自由行程は、数密度と断面積に反比例する。

断面積を如何に推定するかが問題になる。これは原理的には量子力学的な問題である。

問 簡単の為に Lennard-Jones potential の極小値を与える半径を用いて、室温の空気 (窒素で近似？) に対して断面積や平均自由行程を近似してみよ。

実際問題としては、一つの分子だけが動いていて、他の分子は静止しているというのは近似としてはおかしい。 2 体運動は、重心の運動と相対運動に分解して考える事が出来る。相対速度を計算すると、相対速度の大きさは $\sqrt{2}v$ となる。この結果平均自由行程の式で、分母に $\sqrt{2}$ という因子が登場する。

質量が同じ二つの分子の運動を、相対運動と重心運動に分解してみよう。 2 粒子系の運動エネルギーは、$(m\, v_1^2 + m\, v_2^2)/2 = m\, V_g^2 + m\, v_{rel}^2/4$ と書ける。即ち 2 体系の全エネルギーの内、衝突により変化しない重心運動のエネルギーは、$V_g = v_{rel}$ と仮定すると、相対運動のエネルギーよりも 4 倍大きい。 1 粒子が運動している時の平均的なエネルギーの多くの部分は、衝突により変化しない。変化するのは小さな部分である、相対運動のエネルギーに関与した部分だけである。従って相対運動空間は、 1 個の粒子だけが自由に動いていると考えた空間よりも幾らか狭くなっている。即ち上の仮定で計算した平均自由行程よりも短い。

常識的な意味では、大気中を無数の原子や分子が飛び交っている。これらの原子や分子をある領域から、有意に減らす作業を排気と呼び、排気の結果実現された状態を真空と呼んでいる。この真空は、理論物理の意味の真空でもなければ、宗教的な意味での真空でもない。まだまだ空気中の原子や分子が無数に残っている。排気に使用する主要な装置は真空ポンプであり、実現した真空の程度を測定する装置は真空計と呼ばれる。排気作業を補助する目的の各種部品や、排気の為の補助的な作業について以下に解説する。

最後に、真空ポンプに直接関係する話題として、壁を叩く分子数に付いて触れておこう。

壁を x 軸に垂直にとり、この壁に微小面積 dS を考え、この壁面に垂線を立て、これを極軸と考える。この点から v だけ離れた位置に、$d\Omega \times d\, v$ の微小体積を考える。この微小体積にある気体の内、$d\Omega\, /4\pi$ の部分が壁の dS 部分を向いて運動している。この分子のうち、$v_x = v\cos\theta$ で与えられる x 成分を有する部分が、 1 秒後に壁に到着する。これを 全立体角の半分と、全ての v に付いて積分すれば良い。

$$\frac{n}{4\pi}\frac{\int_0^\infty dv\, v^2 \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi/2} d\theta \sin\theta\, v\cos\theta \exp(-mv^2/2kT)}{\int_0^\infty dv\, v^2 \exp(-mv^2/2kT)} = n < v > /4$$

ここで、$< v >$ は、分子の早さの平均値である。

ここで計算された分子数に真空ポンプの口径できまる面積を掛けたものが、 1 秒間にポンプに実際に到達する分子数である。こうしてポンプに到達した分子の内の一部が、実際に排気される。壁に到達した分子数と、排気される分子数の比を ホー (Ho) 係数と呼ぶ。

真空ポンプの排気速度は、ポンプ口径を単位時間に叩く分子数に比例する。分子が速く走っていればこの口径を沢山の分子が叩く。逆に言えば、非常に低温の気体を排気する時には、分子速度が非常に遅くなるので排気速度もこれに準じて遅くなる。気が向いたら、絶対温度が 1 度と室温での分子速度を比較しておこう。

真空ポンプ

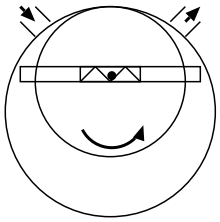
排気されるべき空間を真空槽と呼び、この真空槽には 1 気圧の空気が詰まっていると仮定して話を始める。

空気を構成している分子の事を、当面空気分子と呼ぶ。当然 Ar 等の不活性原子をも含む呼称である。 1 気圧の空気では、平均自由行程が短いので分子間の粘性が効いて来る様な流れが実現される。この粘性流領域は、分子の平均自由行程が真空装置の代表的な部品の内法に較べて充分に短い圧力の領域と定義しておく。即ち、粘性流領域では分子同志の衝突は頻繁に起こるが、壁との衝突はほとんど起こらない領域である。もしも、圧力が低くなり平均自由行程が長くなると、空気分子は真空槽内で空気分子との衝突よりも、壁との衝突頻度が増えて来る。この様に、壁との衝突を主に考えねばならない圧力領域を分子流領域と呼ぶ。粘性流領域と、分子流領域の間には、遷移領域がある。

空気分子間の距離が、先に述べた van der Waals 力の様な分子間力の到達距離よりも小さくなると、お互いの相互作用の為に両者の持つエネルギー、運動量、角運動量等の物理量がやりとりされる。大局的にみると、このやりとりの結果大きなエネルギーを持つ分子のエネルギーの一部が小さなエネルギーの分子に移行するだろう。

この結果、全体が平均的な物理量を持つ状態に落ち着く。この平衡化の過程として粘性を考える。

粘性流領域では、液体をポンプでかきだすのと同じような要領で排気を実現出来る。この種のポンプの代表例として、油回転ポンプ (rotary pump、RP) がある。



動作原理を上図で説明しよう。外側の大きな円は固定されていて、内部の小さな円は大きな円の中心から外れた点を回転軸として回転する。小円の幾何学的中心を通って、 2 枚の可動弁があり、この弁は内蔵したバネによりいつも大円に接している。排気に関与する部屋の体積を、力学的に増減する事が動作の基本原理である。体積を増加させる場合には、排気すべき真空槽の方に繋いでおき、この体積を減少 (圧縮) する過程では、排気 (一般的には大気圧) 側に繋ぎかえる。

真空槽の体積を V_0、吸気過程の前の圧力を P_0、ポンプ側の最大排気体積を V_1 とし、吸気過程では両者の圧力が等しくなるまで空気が吸い込まれたとすると、この時の圧力は $P_1 = V_0\,P_0/(V_0 + V_1)$ となる。圧縮過程では V_1 であった体積が V_2 にまで小さくなり、従って圧力は $P_2 = V_1\,P_1/V_2$ に上昇する。P_2 が 1 気圧よりも大きいならば、 1 気圧の排気側へ放出される。理想的に動作するならば、この V_2 の体積部分の空気が 1 サイクルで排気される。排気機構の隙間から、空気が逆流するのを防ぎ、無効体積を減らす為に、全体を蒸気圧が低く適度の粘性の油に浸してある。ここに、油回転ポンプの名前の由来がある。油は潤滑以外に排気に寄与しない空間を埋める役目もしている。理想的には、

1サイクル毎に、体積比 $V_0/(V_0+V_1)$ できまる指数関数的な排気が実現される。

サイクルを早く回せば排気速度が上がるので、ポンプはモータに直結する場合がある。直結型以外には、ベルト (主に V belt が使用される) を使用するものがある。直結型は起動時のショックが、ベルト駆動型に比較して、大きい。

動作の限界は、主に以下の様な原因で決定されている。

1) 使用する油の蒸気圧。このポンプは常時回転させている為に、温度が上がる。特に回転数が高い直結型のポンプでは手で触れない程度にまで温度が上昇する。この温度での油の蒸気が、真空槽と繋いだ時に、真空槽側へ逆流する。従ってこの蒸気圧が一つの上限を決める因子である。

2) 体積が V_2 に迄圧縮された空気は大気圧側へ排出される機構になっている。しかし V_2 が粟粒の様に小さくなると、油に懸濁したり、空気が油に溶け込んだりする。油の蒸気圧が実質的に上がった事になる。勿論、油の酸化、化学的分解等の劣化で蒸気圧が上がる事もある。

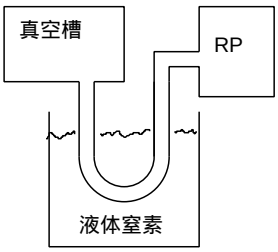
3) これは実用的な原因であるが、排気すべき真空槽の内部には有機溶媒や水分の蒸気が含まれている。この蒸気も油に溶け込んでいるだろう。

3年生の学生実験をやっていて、教師の許可を得て、夏休みに油回転ポンプの分解掃除をやった事がある。ロータ室には、水銀の微粒子が沢山溜っていた。当時は不慣れな学生や僕の様な不器用な学生が水銀柱気圧計 (mercury manometer) や マクレオードゲージ (Mcleod gauge) を使用してせいだろう。

これらの性能制限因子に対する対策として、以下の様な手を打っている。排気側の圧力を下げると、' 小さな泡粒' となる到達圧力が下げられる。即ち、2段式の油回転ポンプを作れば良い。油回転ポンプは、内部のロータ又は弁が偏芯して回転している為に、振動が激しくなるが、1段目の排気時点は、2段目の吸気時点となるので、1段目と2段目を対称に設計すれば、かなり振動を抑制して、静かで高性能化が出来る。2段式のものが通常は使用される。

水分や有機溶媒ガスの吸収に対しては、ある程度空気を吸収し、空気と一緒にこれらのガスを排出することを考える。この目的で、圧縮過程で外気を取り込むために小さく開くような弁 (ガスバラストバルブ) を取り付ける。この弁の機能は、人為的に操作出来るようにする。

ポンプの油蒸気が真空槽に逆流するのを嫌う時、簡単な対処法として、油回転ポンプと、真空槽の間に U 字管を挿入し、この U 字管を液体窒素で冷却する。



一度使用した、U 字管には水分等が底に溜っているだろうから、使用後は取り外して、(温度を上げて) 乾燥させておくべきである。より積極的には、低温部に分子篩 (molecular sieves) や活性炭を置き、これらに逆流する油蒸気 (分子) を吸着させる場合もある。

油回転ポンプの起動時には、大量の空気が排気されるが、同時に油の微粒子も実験室に放出される。この油微粒子を吸入するのは健康に悪いだろうし、室内に置いてある他

の機器に結局は付着して、表面を汚す。真空機器メーカーは、真空槽の蓋が空いている状態で置いてある実験室内での、油回転ポンプの運転を嫌う。排気孔には、オイルミストトラップ (oli mist trap) を取り付けるか、排気孔にパイプを接続して、室外へ排気を導く。油回転ポンプの起動時には、真空槽内部では、かなりの強さの風が起こっている。風の影響で、真空槽内部の実験装置が飛ばされないように固定するなり、排気速度を制御する事も考えておくべきだろう。

運転停止後、真空槽と油回転ポンプが真空的に接続されていると、油分子が真空槽内に迄飛んでいくから、必ず仕切り弁で仕切る必要がある。又、吸気孔側が真空のままで、排気孔側が 1 気圧の状態にしておくと、大気圧に油が押されて、その内に真空側の空間を満たしてしまう。即ち、油で満たされているべき、ポンプの回転部が油切れの状態になる。これは、ポンプの短寿命化につながる。一方、真空装置として見ると、真空的にきれいであるべき部分が油で汚れる事を意味する。運転停止後は、然るべき時間内に仕切り弁で真空槽と油回転ポンプを仕切り、この弁の下流側、即ち油回転ポンプの吸気側、を排気側と同じ圧力にしておこう。通常は、この部分を大気圧にする。仕切り弁の下流に空気導入孔、リーク弁 (leak port) を設置するか、この仕切り弁と空気導入弁の機能を兼ね備えた部品を取り付ける。

油回転ポンプは、電動機を用いて運転する場合が多い。電動機は回転しているが、油回転ポンプは回っていないという場合も経験される。主な原因はベルトが切れている。

油回転ポンプの油の量や質も時には点検しておこう。

モータが回転しているという情報で、正常運転と誤認してはいけない。あるメーカの油回転ポンプは、内部にホール素子 (磁気を感じるセンサー) を内蔵して、回転を確認していた。自動運転や無人運転を想定した装置では、必要な注意である。

油の分子が真空槽内に侵入する事を嫌う場合には、軸流分子ポンプ (turbo molecular pump , TMP) を使用する場合もある。この原稿を書いている時点で、大気圧から起動できる TMP も市販されている。

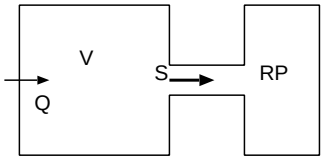
排気速度

ポンプの性能を記述する指標の一つに排気速度がある。排気速度は、単位時間に排気出来る体積で定義される。圧力を問うていないので、排気する気体の物質量では無い事に注意！実用単位は、ℓ/ 分、や m^3/ 時間 が油回転ポンプには使用される。実験室的な規模での油回転ポンプの排気速度は、数１００ ℓ/ 分 程度である。真空ポンプのもう一つの機能指標は到達真空度であり、２段式の油回転ポンプでは、10^{-3} Torr(mm Hg) 程度である。SI で言うと、1 mmHg が １３３ Pa であるから、０. １ Pa となる。この値は、かなりきれいな状態でしかも、ポンプのすぐ上流で仕切った時の値であるから、実用的にはもう 1 桁悪い真空と思っておくのが妥当だろう。

真空装置の内面に使用した材料や、装置内部に設置した実験装置の表面には、大気に含まれたガス分子が吸着されている。これらの表面を真空に曝すと、この表面から吸着されたガス分子が飛び出して来る。この現象を脱ガス (out gas, degassing) と呼ぶ。脱ガスの時定数は、非常に長いものである。従って、ポンプの排気速度と真空槽内面からの脱ガス速度が平衡した状態が到達真空度を決定する。

壁から出て来る物質量の記述として、圧力と体積の積を採用する。壁から放出される物質種は一定ではないので、細かな物質の定数は利用できない。単位面積、単位時間当たりの放出量という意味では、(圧力)×(体積)/(面積)×(時間) と考える。又は、真空槽内壁全面だとすると、(圧力)×(体積)/(時間) という物理量も利用される。ここでは、ガスが

壁から放出されると考えたが、実験装置に欠陥があり (真空槽に非常に小さな穴があいている) 空気が洩れ込んでいる場合にも同じ概念が使用される。従って、壁からの吸着ガスの放出と洩れとは概念的には等価であるので、吸着はなく外部からのガスの洩れ込があると考えても良い。



真空槽の排気すべき体積を $\mathrm{V}(\ell)$、 洩れ量を $\mathrm{Q}(\ell Torr/s)$ 排気速度を $\mathrm{S}(\ell/s)$、ある時刻での真空槽の圧力を $\mathrm{P}(\mathrm{Torr})$ とすると、次の関係式が近似的に成立する。

$$V\frac{d\,P}{dt} = Q - P\,S$$

この微分方程式の解は、時刻 t = 0 での圧力を P_0 とおくと、

$$P(t) = (P_0 - \frac{Q}{S})\exp(-\frac{S\,t}{V}) + \frac{Q}{S}$$

で表せる。即ち、圧力は時定数が V/S で指数関数的に減少する部分と、洩れ量と排気速度がバランスする部分との和で書かれる。

注。上の図では、真空槽の排気孔での排気速度を S としている。図にも示したが、下流にある油回転ポンプと真空槽の間には、接続パイプがある。このパイプは排気抵抗として作用するので、S はポンプの排気速度よりは小さくなっている。分子流領域ならば、このパイプの両端の圧力差と流量は比例する。比例係数はコンダクタンスと呼ばれる。大きなコンダクタンスを実現する為には、太く短いパイプを用い、曲がった部分を減らせば良い。

ここでは排気速度は一定と仮定したが、実際には高真空時の排気速度はかなり落ちる。

大きな真空槽を使用する場合には、キニーポンプと呼ばれる大型のポンプやルーツポンプ等も使用される。

真空の圧力測定

圧力は、歴史を反映して各種のものが混用されている。

１気圧は、常識的な大気圧の事であり、水銀柱の高さにして７６ cm の圧力である。atm と略記される場合もある。

水銀柱という単位も使用される。地上での重力加速度と水銀の比重を既知として、圧力差を鉛直に立てた水銀柱の長さで表現している。トール (Torr) という単位は 1 mm Hg の事であり、真空を発見した Torricelli に因んで使用された (されている)。

バールという単位も、気圧を表現するのに使用された事がある。１気圧は約１０１３ mb である。正確な定義は、1 bar=10^5 N/m^2 であるから、完全に MKS 単位系に準拠している。但し、10^5 という起源が分からない。

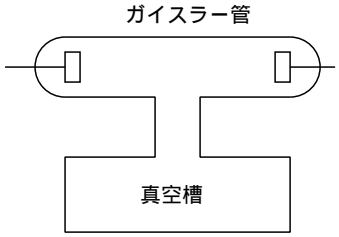
SI での圧力単位は、N/m^2 であり、パスカル (Pa) である。パスカルの原理でも、名を残している。

日本では使用される事は少ないが、psi (Pound per Squre Inch) というのも、米国からの輸入品には使用される場合があるだろう。約１４．７ psi が１気圧に相当する。

これらの単位は時と場合で使い分けたり、混用したりされる。一方で、圧力の絶対値が高精度に必要とされる場合は非常に稀である。

真空の圧力という事を細かく言うと、残留ガスの種類を考える必要があるが、当面はこれを無視する。この場合には、力学的な意味での圧力 (全圧力) を問題にすれば良い。絶対値を測定する測定器としては、水銀柱を直接利用場合がある。しかしこれでは、低い圧力差は検出しにくい。一つの方法は、水銀よりも密度の低い流体 (例えば油回転ポンプや、後述する油拡散ポンプの油) を使用することである。もっと低い圧力の絶対値を測定するには、残留ガスを圧縮し、圧縮されたガスの圧力を測定する。この手法を利用した実用的な圧力計としてマクレオード真空計があるが、水銀を使用するので、今では他の真空計の較正用としての意味しか無い。通常の実験で水銀を使用する機会は減っているので詳しく説明はしないが、どうしても水銀を使用する時には、手元に鉛を置いておく事を勧める。鉛を水銀に接触させると、鉛が水銀を吸い取る様にして、アマルガムを作る。

単純な真空観測の手段としてガイスラー管を先ず取り上げよう。ガラス管の両端に電極を用意し、その電極間に $10\ \mathrm{kV}$ 程度の高い電圧をかける。



電極間の真空が適当であり、宇宙線や壁に含まれる放射性物質その他が原因となって作られた自由電子の運動エネルギーが残留ガスの第 1 イオン化ポテンシャル程度になると、残留ガスをイオン化する。この時作られた電子・イオン対により雪崩的に電極間に電流が流れる様になる。電極付近を見ると、最初の平均自由行程程度から、明るい光が見え始める。実用的には数 mm 程度のイオン化に対する平均自由行程から、１０ cm 程度迄が考えられるが、ガイスラー管よりも平均自由行程が長くなると、電子で衝撃されたガラスそのものが薄い黄 (緑) 色に光るので、１０ $^{-3}$ mmHg 程度迄使用できる。但し、紐状の放電はこれらよりもずっと高い圧力から始まっている。

放電の色も観測の対象になる。例えば、空気が洩れ込んで真空が良くならない状態の時には、窒素分子の振動と回転に対応したうす赤い色に見え、有機溶媒や、水分子が発光している時には白っぽい色である。

電極にかける電圧は、交流でも直流でも良いが、入手が簡単だから交流が多用される。例えば、ネオントランスや、テスラーコイルで高電圧を発生させる。出力インピーダンスの小さな電源を使用するのは危険である。

ピラニーゲージ

ラジオメータという科学玩具を知っているだろうか？かなり良く排気した球形ガラス管内に、４枚の薄いアルミ製の羽根を持った回転子の中央を、縫い針で支持したものである。アルミ面の一方は地肌のままであるが、他方は黒く塗られている。全面に強い光が当たると、黒い面が全体を押す方向に羽根が回転を始める。暗い部屋では回転しない。逆に液体窒素で冷却した冷気をかけると、光った面が押すような回転方向に回転する。

この玩具は、光の圧力を示す装置であると言う誤解があるが、冷気を当てると逆方向に回転するから、この説明は嘘である。光の反射が駆動力を発生させているならば、どちら向きに回転するか考えてみよ。光源のかわりに、ヘアードライアーを使うと更にはっきりする。

ガラス内の残留ガスは、羽根の両面に均等に衝突していると考えられる。衝突後は、暫くアルミ面に留まった後で、面から飛び出す分子もあるだろう。この現象が吸着である。黒いアルミ面と地金の色の面とでは光の吸収率が異なるから、表面温度も異なっているに違いない。温度が高い面から飛び出す分子の運動量は、低い温度の面から飛び出す分子よりも沢山の運動量を持っている。従って、飛び出す分子から受ける反跳運動量は、高温面 (黒い面) の方が大きい。両面で受ける反跳運動量に差があるから、羽根は回転する。

ラジオメータの原理が理解できるならば、高温物質を真空内部に置いて、残留ガスによる冷却能力を測定して、真空を測定する可能性を考える事が出来る。気体分子が粘性流であるときには、熱源の冷却は圧力に依らないが、分子流になると冷却能力は衝突する分子数に比例するはずだから、圧力の測定に使える。この原理を使用する真空計に、ピラニゲージ (Pirani gauge) と熱電対真空計 (thermo-couple gauge) がある。

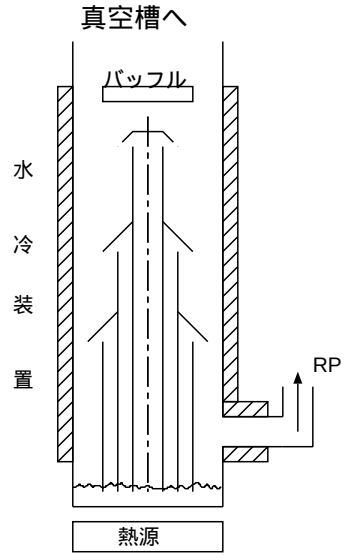
真空中に細い電線 (フィラメント) を入れ、これに電流を流して温める。一定の電圧をかけたり、一定の電流を流したり、温度が一定になるように回路を工夫したりする。これらにより、各種の測定方法があり得る。この熱線を、ホイートストーンブリッジの測定辺に入れたり、発振器と併用して振動数の変化として検出する方法もある。メーカーにより一定していない。

熱線の温度を熱電対で読み取り、これを真空に換算して表示するものもある。１ー数１００ Pa 程度の測定範囲である。

油回転ポンプに対応する真空測定は、この程度と考えておいて良いだろう。

高真空の実現

油回転ポンプよりも高い真空度 (０. １ー１０ $^{-7}$ Torr, 10-10^{-5} Pa) の実現には, 油拡散ポンプが使用される場合が今でも (？) 多い。水銀拡散ポンプも使用されたが、過去のものとなったと言える。



油拡散ポンプの動作圧力範囲の上限は、分子流になったと思われる領域であろう。図を見ながら、動作原理を説明する。右下の矢印から油回転ポンプを用いて排気し、それなりの圧力に到達したと考える。例えば 10^{-2} Torr, 1 Pa 程度だとしておこう。排気すべき真空槽もこれと同じ程度に排気されていると仮定しておく。

ポンプの底には、蒸気圧が低く沸騰点が高い油が少し入っている。この状態で底部の熱源を作動させ、油を沸騰させる。沸騰して気化した油分子は、今の場合３重になった煙

突状のパイプに沿って上へ上がっていき、パイプの最上部の蓋の部分で方向転換し、下に向かって吹き出す。吹き出す時に、真空槽から洩れだして来た分子を巻き込んで、ポンプの下部へ運んでゆく。下へ来たり、壁に衝突した油分子は凝結して液体に戻る。油拡散ポンプの油溜は、一般に分留作用を持つような構造になっているので、蒸発温度が高い油分子が中心の煙突部を走り、蒸発温度が低い油は外側の煙突を走る。

拡散ポンプは、図で示したように、側面を冷却水で常時冷却している。下で温めて、上で冷やしているから、温度差を圧力差に変換する装置であると言う事も出来る。

動作状態では、ポンプの煙突状の外では、下向きの分子流が走っている。使用する油の分子量は約３００であり、摂氏３００度で加熱されたとすると、空気分子の速度の１/５程度になっている。この油分子の運動量の一部を空気分子に与えて、空気を下部へ運んでいる。排気速度は、１０００ ℓ/秒程度が常識的な値である。先に登場した油回転ポンプの排気速度は、ℓ/分の単位で表示された事を思い出そう。油拡散ポンプの排気速度は油回転ポンプよりもかなり大きい。図を見ると、拡散ポンプの吸気側の直径の方が、排気側の直径よりもかなり大きく書かれていると感ずるだろう。排気速度は、排気される気体の物質量でなく、その圧力での体積である事を思い出そう。吸気側では１秒間に１０００ ℓ も吸い込んでいるのに、排気側では、１分間に数１００ ℓ だけポンプから排出すれば (充分すぎる程) バランスが取れているのである。

油分子が下へ吹き出すように煙突に傘をつけている訳だが、下から飛んで来た油分子が全部下へ走っていく訳ではない。他の分子との衝突や傘の構造等で上に行く分子もあるだろう。この現象は逆拡散と呼ばれている。この逆拡散分子を阻止するために、ポンプの上部に邪魔板 (buffle) を置き、これを水や液体窒素で冷却する場合もある。

使用上の注意点を幾らか書いておこう。
必ず真空槽の圧力や背圧 (排気側の圧力) が動作圧に迄下がって居る事を確認し、熱源 (多分、商用交流) に点火しよう。

点火時は、同時に冷却水も流す事。冷却水の流量も確認せねばならない。特に長期間使用しなかった場合には、水垢等による冷却水のパイプ詰まりの可能性を考慮しておこう。冷却パイプにストレーナー (strayner) が取り付けられている場合がある。定期的に掃除する事が望まれる。

加熱開始後３０分程度で排気動作を開始するだろう。しかし、真空槽に真空洩れ (実際は空気が洩れ込むのであるが、真空が洩れるという表現をしている) がないか確認せねばならない。空気が洩れ込んだまま長時間加熱していると、油が酸化して性能が著しく劣化する事が考えられる。

運転中の事故により、真空が劣化する場合も想定される。圧力計で常時真空を監視し、異常発生時にすぐに利用者に異常を知らせる装置 (安全監視装置) を作動させておく事。

充分に真空が上がれば、必要ならば、邪魔板部又は吸気孔側に設置された液体窒素トラップに液体窒素を供給する。長時間運転し、ポンプ運転中に液体窒素が蒸発して無くなると、悔しい事態が生じる事も念頭に置き、自動補給装置を考えて置く事。

ポンプ使用後、この液体窒素は完全に蒸発させておく事。トラップの掃除もした方が後の為である。

排気装置の使用終了時には、真空槽とポンプの間の仕切り弁を閉じ、加熱を止める。加熱停止と同時に油回転ポンプと拡散ポンプの間の仕切り弁は閉じた方が良いという意見と、拡散ポンプの本体が冷えるまで油回転ポンプで排気するという二つの意見がある。前

者の意見の根拠は、高温時に吸気側も排気側も閉じてしまうと、冷却時には拡散ポンプの本体内部は高真空を保持出来るから次に動作させる時に脱ガスが少ないというものである。この意見では拡散ポンプには洩れが無い事を仮定している。後者の意見では、少しくらいの洩れはいつでもあるかも知れないと仮定している。仕切り弁の閉め方等に不安があるならば、後者の意見に従っておこう。液体窒素トラップやバッフルを使用し、これらが仕切り弁に挟まれている場合も、後者の意見に従った方が無難だと思う。

化学的に活発なガスを排気すると、油がすぐに変質してしまう可能性がある。

動作油を長い間空気に曝していると、それなりの量の空気を吸着しているはずである。長い間空気に曝した油を使用する時には、脱ガス操作をしておくのが賢明だろう。この注意は、後から登場するターボ分子ポンプにも当てはまる。

真空測定

油拡散ポンプを利用する様な真空を実現する場合の圧力測定は、ピラニーゲージや熱電対真空計では対応出来ない。実用的には、1) 冷陰極放電真空計と 2) 電離真空計 の二つの可能性がある。

これらの真空計では、残留ガスをイオン化し、そのイオン電流強度を真空の目安として表示する。観点をかえると、残留ガスをイオン化する事により真空槽から残留ガスを取り除いているから、真空ポンプと考える事も出来る。後述する、イオンポンプがこの考えを発展させたものである。

1) 冷陰極放電真空計

Philips gauge とか、Penning gauge と呼ばれる事が多い。二つの電極間に直流の高電圧をかけておく。しかし、常識的な電極間距離では平均自由行程よりも短いので、放電は実用的強度では起こらない。そこで、電子の電極間飛程を顕著に伸ばす工夫として、電極面に垂直に磁場をかける。簡単の為に平行平板電極、その電位差を 2 kV だとしておこう。極端な場合として、2 keV の電子の 0.1 テスラでの曲率半径は 1 mm 程度だから、電子の軌跡は何回も螺旋軌道を回転しないと対向電極に辿りつけない。この電子が残留ガスをイオン化すると、イオン電流が電極間に流れる。このイオン電流 (+ 電子電流) を計測する事で、真空を推定する。この様なイオン化を用いた真空の計測法では、イオン化の断面積が残留ガスや電子エネルギーの関数であるから、力学の意味での圧力 (全圧と呼ばれる) に換算するには、もう一つの壁を乗り越えねばならない。第 1 イオン化ポテンシャルの小さなガスと大きなガスの混入割合や、分子励起といった非弾性散乱の確率等を考慮すると、かなり困難な作業となる。従って、特殊な残留ガスに対しては、圧力測定の精度があるとは考えない方がよいだろう。電子が原子をイオン化する断面積は、第 1 イオン化ポテンシャルを越えたエネルギー領域では、電子運動エネルギーのイオン化ポテンシャルを越えた部分を x とすると、大体 $x\log(x)$ に比例する事が知られている。実際の断面積は、プラズマ研究に関連して精力的に調べられている。

アルゴンガスの電子によるイオン化に関して、もう少し詳しい説明を学生実験 3 の指導書に書いておいたのでそちらも参照してもらいたい。

イオン化断面積の大きさに注意というコメントを書いたが、現実には、イオン化ポテンシャルの大きさと、電子温度分布にも注意するべきである。例えば、2 種類の分子が残留ガス中にあり、それらのイオン化ポテンシャルとイオン化断面積を $U_i,\ \sigma_i\ (i=1\ or\ 2)$ と書き、$U_1 > U_2,\ \sigma_1 > \sigma_2$ でありその差は有意であると仮定してみよう。電子温度が充分に高ければ、断面積の大きな $i=1$ の種類のイオンが沢山作られるだろう。しかし、電子が充分加速される前に、分子に衝突するような場合には、イオン化ポテンシャルの

小さな $i=2$ の分子が優先的にイオン化される場合もあり得る。

3年生の学生実験で、比例係数管の実験をする。PR ガスと Q ガスでのガス増幅率の関係を、印加電圧の関数として調べるだろう。その時に、このコメントを思いだしてもらいたい。

実用的な注意。

電極間に自由電子が作られている確率は大きくはない。換言すれば、放電開始に時間がかかる場合がある。従って、スイッチを入れてもすぐに真空計として作動する訳ではない。

残留ガスの密度に (ほぼ) 比例して、イオン電流が流れる。即ち、かなり ダイナミックレンジ (dynamic range) の広い増幅器が必要である。逆に言うと、レンジ切替えを測定の途中にしなければいけない。自動運転の場合に、現在の増幅器のレンジまで読み出せる様になっていないと使い物にならない。入力電流を対数変換するタイプの出力ならばこの必要はないが、測定精度が一般的に悪くなる傾向にある。

ガス放電の電流を読み取っているわけだが、電極にはこのイオンが中性化・解離して作られたゴミがこびり付いている。原理的には電気集塵器である。時々電極を掃除しないと、暗電流が増えて正しい値を示さない。

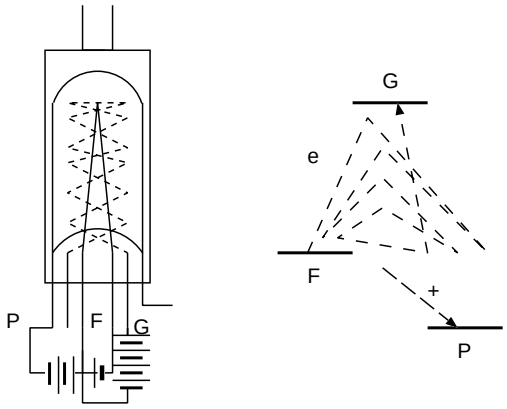
電極と磁場を使用しているだけだから、掃除さえ怠らなければ非常に寿命の長い測定器である。全体を金属とセラミックスで作ると、少々乱暴に扱っても、壊れる心配はない。

電子で残留ガスをイオン化しているという事は、付近に高エネルギー (室温で決まるエネルギーよりも充分に大きな運動エネルギーを持つ) 電子をばらまいている事なので、近くで電子検出をする様な測定では、大きな雑音源となる。

残留ガスがイオン化され、近くに充分の電子が存在するから、内部では (薄く？) 光っている。

2) 電離真空計

図の様にフィラメント、グリッド、プレート (板電極) という3極真空管と同じ構成である。



フィラメント F には (直流) 電流を流して、熱電子電流を 1 mA (10 mA) つくる。グリッド G は フィラメント F に対して正の電位にしておく (例えば 150 V)。従って、熱電子は F から G に向かって流れ、途中にある残留ガスをイオン化する。これだけでは電子の飛程が短いので、熱電子が直接グリッドにぶつかる確率は小さい方が良い。即ち、グリッドの網目は非常に粗い。プレート P は、フィラメントに対して負の電位としておく (例えば $-$ 20 V)。グリッドを通過した電子は、このプレート電位で追い返される。何度も フィラメントとプレートの間を行きつ、戻りつした後でグリッドに辿り付く。こ

の電子に依りイオン化された陽イオンは、プレートで検出される。

このイオン電流を真空の圧力に換算している。イオン電流の強度は電離真空計の構造に依存している。この依存性を減らすために、構造やかける電圧や電子電流の強度はほとんどメーカに依存しない。

超高真空では、イオン電流も非常に少なくなる。一方、グリッド電位で加速された熱電子の一部はグリッドに最大１５０ eV で衝突し、１５０ eV 迄の紫外線を放出する。この紫外線 (軟 X 線) は残留ガスのイオン化に寄与するし、大きな立体角を有するプレートから、光電効果により、電子を叩き出す。従って、見掛け上悪い真空を示す様になる。プレート電極の面積を減らすと、有害な紫外線が電子を叩き出す確率は減る。BA ゲージ (Beard-Alpert type) と呼ばれるイオンゲージでは、フィラメントをグリッド の外に置き、中心部に針の様に細いプレート (もはや板とは言えないが) 電極を置く。

実用上の注意。

フィラメントを点灯しているので、悪い真空で使用すると著しく寿命を短くする。通常は、10^{-3} Torr、10^{-1}Pa 以下になった事を別途確認してから使用すること。フィラメントの事故を想定して、２本のフィラメントを組み込んだセンサーが売られている。

フィラメントからは、かなり明るい光りが発せられる。従って、光を検出する様な実験には不向きである。

外部がガラス製のものが市販品には多いが、全体がむき出しになったセンサーもヌードゲージと言う名前で売られている。真空機器に直接組み込む訳だが、ヌードゲージのフィラメントの状態は外部から見えないという使用上の不安がある。

フィラメントやグリッドは有限の寿命を持つ。

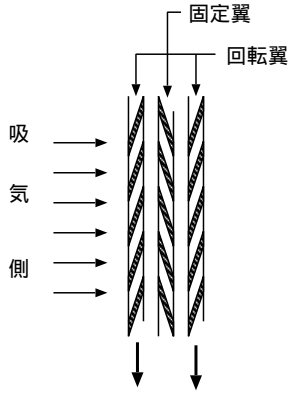
電極に吸着したガスを焼き出す事が出来る場合がある。ベーキングと測定回路に記載されているだろう。真空が 10^{-6} Torr、10^{-4}Pa 程度に下がったら、使用してみよう。

真空洩れの検出用に、増幅器部分に差動増幅の機能が付いていると便利である。即ち a という真空値を表示しているが、洩れている可能性があるとしよう。この時、入力のイオン電流から a に非常に近い電流分を差引き、差の部分だけを増幅する。即ち、感度だけを大きくすると、小さな洩れを検出する事が容易になる。バーニヤ法による測定を覚えていれば、その応用である事が分かるだろう。

軸流分子ポンプ

油拡散ポンプは強力であるが、油分子の真空槽への逆拡散を嫌う場合には使用できない。きれいな真空の実現という要求に対する一つの解をもたらすのが、軸流分子ポンプである。軸流という意味は、回転軸に平行な流れという様な意味であるから、通常の扇風機は、ターボ扇風機と言える。

油拡散ポンプでは、油分子の熱運動で下向きの高速分子運動を実現し、飛び込んで来た空気分子をこの運動に巻き込んだ。軸流分子ポンプ (Turbo Moleculra Pump, TMP) では、羽根の力学的な回転運動で空気分子を叩き、軸流を発生させる。



図で原理を説明しよう。軸流分子ポンプの内部には、固定翼と回転翼が複数段 (例えば１０段) 積み重ねられている。図の黒く塗った部分は羽根であり、白抜きの部分には何も無い。図では、左側が吸気 (高真空) 側である。回転翼は非常に高速で回転している。ある種の軸流分子ポンプでは、回転翼の先端部で音速を越える程度である。高真空側を飛び交っていた空気分子の一部は、図の左から TMP に紛れ込んで来て、回転翼に叩かれ、右側への速度を貰い、固定翼空間に入り込む。右側の固定翼は回転翼とは捻りが逆になっているから、固定翼空間に入り込んだ分子は、左へ移行する確率よりも右へ動く確率の方が高い。従って、全体としては右へ流れる分子流が形成される。即ち、分子は排気される。

直観的に理解できる事だが、翼の捻り角と回転速度の旨い組合せが排気速度を決める因子である。分子の速度はその質量数の平方根に反比例するので、どの分子に対して (どの程度の速度の分子に対して) 排気速度を大きくするかは設計の問題であるとも言える。一般的に言って、最も軽い分子である水素の排気速度が最も小さくなる。排気速度は、圧縮比という言葉で語られる事も多い。

先に説明した油拡散ポンプと比較し、翼の先端速度を上げられるので排気速度も、油拡散ポンプよりも大きくなると想像されるだろう。

回転翼の軸を低真空側で固定するならば、油拡散ポンプの様に高真空側には蒸気圧の高い物質を置く必要が無いから、‘きれいな真空’ を実現出来る。

高速回転を保証する為には、軸受け部の潤滑は非常に大切である。現在では、磁気浮上型の軸受けを採用しているメーカーが多数ある。

使用上の注意。

非常に高速回転する回転翼を有するが、運転中に事故により大気が突入する場合もあるだろう。この際、回転翼の個別の羽根にはかなりの力がかかる。空気分子を右に押すという事は、羽根は左に反作用を受けているという事である。この反作用によるトルクの為に、羽根の先端部はかなりの力を受け、翼形が変形する。運転中に回転翼が変形して固定翼と接触すると大きな事故となる。大気突入に耐えるという軸流分子ポンプも入手可能である。羽根の焼き出し (baking) をするために、冷却系を止めて軸流分子ポンプを運転せよというメーカもある。排気すべき分子と回転翼の摩擦で回転翼は、充分に温度が上がるという訳である。

小さなポンプでは、取り付け方向が自由に選べるものもある。

高速回転を実現する為に、１０００ Hz 程度の強力な発振器を必要とする。この駆動部の電源設計が乱暴なメーカーがある。音の意味でも、電気的な雑音の意味でも、首をかしげたくなる製品もある。

軸受け部の発熱を、実験室に直接放熱するものと、特別の冷却系を用いて吸収するものがある。導入時に冷却方法を確認する必要がある。

機械的軸受け型のものは、非常にコンパクトな設計が可能であるが、磁気浮上方式のものは、ポンプを買っているのか軸受けを買っているのか分からない様な製品が出回っている。磁気浮上型はハイテクを目指す意味で競って生産されているが、図体が大きくなり重くもあるので、個人的には、本当に必要な場所だけに使用を制限する方が良いと考えている。

羽根の慣性能率が大きなポンプでは、起動と停止に時間がかかる。停止時に電磁ブレーキをかける様に提案したが、採用したメーカーはあるのだろうか？僕が言っても駄目で、外国でやられないと日本のメーカーはやらないだろうな。

きれいな真空と関連した話題も挙げておこう。

軸受けや、背圧を実現するポンプ (fore pump) 部分から、油分子が蒸発して来ている。この分子を高真空側に潜り込ませてはいけない。従って、軸流分子ポンプは残留ガスの平均自由行程が排気系の代表的な部品の寸法よりも有意に短い時から運転を開始し、絶対にポンプの高真空側に低真空側の分子が入り込まない様にしなければならない。即ち、軸流分子ポンプと油回転ポンプが繋がれた系では、油回転ポンプだけを背圧を監視する事無く運転し続ける事は禁物である。換言すれば TMP と RP がつながれた状態で、平均自由行程が 1 cm もあるような状態で RP だけを運転するような事はしてはならないという事である。

運転を停止する場合に、真空槽と軸流分子ポンプの間の仕切り弁を閉じた後、ポンプの電源を落すと、軸流分子ポンプの回転速度が低下しはじめる。この状態では、油回転ポンプは作動中である。軸流分子ポンプの回転が落ちて来てポンプ作用が小さくなると、問題が発生し得る。真空槽の仕切り弁から油回転ポンプまでが一つの真空系となり、油回転ポンプの蒸気が仕切り弁から下流の空間を満たす恐れがある！！まじめに考えるならば、軸流分子ポンプの上流側からきれいなガス (空気) を流し込んで回転に制動をかける必要がある。この流し込んだガスは当然油回転ポンプで排気される。このような動作をさせるとして、この装置が作動中に停電したらどうなるだろうか？実験装置を設計する時には、考えておかねばならない、要注意点の一つである。

真空ポンプは真空槽内の残留ガスを真空槽外に運び去る事を目的とする。しかし発想を少し変えて、真空槽内の残留ガスを、真空槽やポンプの壁面に固体化すれば、実質的には真空を実現した事になる。この種のポンプとして、古くから液体窒素トラップ、分子篩 (molecular sieves)、ゲッター (getter) 等が使用された。それらの発展した形態として、クライオポンプとイオンポンプを取り上げよう。

クライオポンプ

分子間には、引力 (van der Waals 力) が働いている。この引力のする仕事が、残留ガスの温度できまるエネルギーよりも大きければ、衝突した分子は結合状態になりうる。もしも、壁と残留ガス又は壁に積もった残留ガス (の固体) と気体の残留ガスが衝突して固体になるならば、ポンプ作用があった事になる。van der Waals 力の下での束縛状態のエネルギーを、温度換算した値は、１０ K- ２００ K となっているから、真空槽やポンプ壁を室温より低くすると残留ガスの一部は壁に ‘凍り付く’ と考えて良い。壁の表面積を出来るだけ大きくし、壁の温度を出来るだけ下げるならば、その壁面は真空ポンプである

と言って良い。ヘリウム４ (通常のヘリウム) を冷媒として、Joule-Thomson 効果を利用するとかなり低い温度まで実現できる。例えば絶対温度で１０度。頑張ればもっと低い温度にすることも可能である。Joule-Thomson 効果を用いた冷凍機では、冷媒を圧縮する時に出る熱を外部に持ち出す必要がある。冷凍能力の大きな冷凍機では、この熱を運び去るために冷却水を必要とする。圧縮機を用いて冷媒を圧縮するから、騒音を発するものもある。冷却面 (cryo-pannel) には残留ガスがこびり付くが、この面の熱慣流係数が実質的に小さくなると、表面が冷えなくなりポンプ作用が落ちて来る。従って、過去に排気した排気量により性能が制限される。勿論、こびり付く物質の熱伝導度にも大きく性能が依存する。即ち、クライオポンプを作動させる前に、充分な補助排気をしておく必要がある。しかし逆に言えば、１気圧からでも強制排気に使用してはいけないというきまりも無い。

真空ポンプは、ポンプの排気孔までたまたまやって来た分子の内の一部だけを排気している。従って排気口径を大きくする事は大きな排気速度を実現する為の必要条件である。極端な話として、真空槽の壁を全部 cryo-pannel とする事も可能だろうから、クライオポンプは非常に大きな排気速度を実現する可能性のあるポンプである。

特徴の一つに、軽い元素や軽い分子でも排気出来る事を挙げておこう。例えば、水はなかなか排気出来ない分子と考えられるが、凝固点が摂氏０度とかなり高いので、クライオポンプでは簡単に排気出来る。真空槽をきれいにするのに有機溶媒を使用する場合があるが、有機溶媒も当然排気は簡単である。

水素やアルゴンの凝固点は２０ K、 ８８ K であるから、１０ K 迄下げる事が出来れば、排気する事が出来る。

注意すべき事の一つに、運転を停止すると温度が上がるという単純な事実がある。温度上昇と共に、冷却面に凍り付いていた物質が融け出し、気化する。極端な場合には、真空槽内の圧力が１気圧よりも高くなる。電動式のクライオポンプ (ほとんど全ての場合がそうだろうが) では停電や、圧縮機の冷却水の断水には要注意である。無人運転をする場合には、それなりの設計をしておこう。

圧縮機にはピストンが使用されているだろうから、こちらからの運転継続時間に対する制限もある。圧縮器が必要である為に、一般的にサイズが大きくなり、質量も大きくなる。従って、それなりの設置場所を確保する必要がある。

ひょっとするとこの原稿を書いている時点で、世界の何処かで熱音響効果を利用したクライオポンプを開発しているかも知れない。これが完成すると、冷凍器 (コンプレッサー) 部分は大きな変更を受ける。

絶対温度が T の黒体は、単位面積当たり σT^4 の輻射を放出するという Stefan-Boltzmann の法則というのがある。σT^4 は $T = 10\ \ (300)$ K ならば、5.77×10^{-8} (4.67×10^{-2}) W/cm^2 である。クライオパネルの面積を広げるのは良いが、室温面を見ないような設計にしておかないと、輻射は無視出来ない。

イオンポンプ

このタイプの真空ポンプには二つの原理が考えられ、実際に組み込まれている。一つは、ゲッターという概念である。これは、残留ガスとゲッター材とを化学反応させて、固体化して真空槽やポンプの壁に取り込んでしまう。化学反応であるから、残留ガスとゲッ

ター材との結合エネルギ-は van der Waals 力とは比較にならないほど大きい。従って、一度ゲッターと反応した残留ガス分子が解離してくる心配は必要無い。逆に、ゲッター材と化学反応しない物質を排気する事は不可能である。ゲッター材を壁に塗り付けておくだけでは、化学反応は起こり難いから、ゲッター材を加熱して、蒸気にして化学反応を促進させる。昔の電子回路には真空管が活躍したが、この真空管の排気と長時間の真空維持の目的で、ゲッタ-は多用された。真空管内面の一部やブラウン管の首の部分が鏡の様に光っている。この光っている部分が、飛ばされたゲッター材が付着して出来た鏡面である。

もう一つの原理は、残留ガスをイオン化しこのイオンをポンプ壁面に叩き込んでしまう事である。壁面にゲッター材を塗っておいて、ここで化学反応を起こさせても良い。この様な動作原理は、電離真空計の内部で起こっている事は、古くから知られていた。ポンプ内部での残留ガスのイオン化効率を上げる為には、多くの電子を放出し、この電子が残留ガスと衝突するまで、真空中を走らせる様な構造にしておくのが効率が良い。従って、イオンポンプは強力な永久磁石を使用して、電子のポンプ内部での走行距離を稼ぐ方法を取っている。

この電子と衝突してイオン化された残留ガスイオンを壁にめり込ませる為に、高い電圧を掛ける。

積極的に、ゲッター材を加熱蒸発させるタイプのイオンポンプ (getter-ion-pump) もある。

イオンポンプの長所は、残留ガスを選ばないという事を挙げておこう。電子の飛程さえ長く設計出来るならば、かなりの高真空の排気に使用できる。即ち、きれいな真空の実現にも有効である。

イオンポンプは、起動後は補助排気系を必要としないし、可動部がないので、一般的には長寿命となる。 1 年間の連続稼働も可能である。

イオン電流を読める様に設計しておくと、このイオン電流から真空槽の (本当はポンプ内部の) 真空を測定する事が出来る。

欠点の一つは、動作中は内部温度が上がっている事に関係する。起動や停止には、それなりの時定数がつきまとう。又、運転中にミスをして空気を吸い込むと、ゲッターが燃えてしまうし、高電圧がかけられていると、最悪の場合には放電により電極が融けたり絶縁物が割れたりする。

クライオポンプやイオンポンプの起動前には、系を充分に排気し、更に焼き出しをしておこう。即ち、真空槽全体を加熱し、真空槽の壁に吸着されているガスを追い出し、これらの追い出したガスは充分に排気した後で、ポンプを起動すると良いだろう。

コンダクタンス

実用的には、真空ポンプは真空槽とパイプで繋いで使用される。このパイプは、太さ (内径) や長さを持つ。パイプの両端に圧力差があれば、パイプの入り口と出口を叩く単位面積あたりの分子数は異なる事はすぐに分かるだろう。この事は、ポンプの頭にパイプを繋ぐだけで、排気速度が低下する事を意味する。流体力学を学んだならば、円形断面のパイプを液体が層流をなして流れる時には、流量は圧力勾配とパイプ内径の 4 乗の積に比例するという Hagen-Poiseulle の法則を覚えているだろう。即ち、長さに比例して排気速

度に悪い影響を与える。

Hagen-Poiseulle の法則をそのまま信用すると、内径が１０、１３、２０ mm の水道管の流量は、１：２．８６：１６ となる。乱流となる場合が多いからこの通りにはならないと思うが、直径が２倍になると１６倍も流量が増える事は注意すべきである。パイプ内壁から遠い中央部程、流速が大きくなるからこのような事になっている。高級なホテルでは、直径の太い水道管を使用している。洗面所で手を洗う時、カランを捻ってからの水の出方を観察してみると良い。細い水道管では、ほとばしり出るという表現であろうが、太い水道管では (流量の割りに水圧を感じないから) あまり流れるのを感じない。しかし、手で受けて掌への水のたまり具合を比較してみると、その違いが良く分かる。

東北地方のある町で大火があり多くの家屋が焼け落ちた。その焼け跡に類焼を免れた家が１軒あった。焼けなかった原因は、その家だけ水道管の直径が２０ mm であったからという事を、新聞で読んだ事がある。職業柄、その家を建てた人は流量に対する知識があった為だとの事であった。危機管理とは、普段の知識と少しの思慮深さの積み重ねだと思う。

パイプの両端に圧力差を与えた時、このパイプを通る流量 Q を (圧力)×(体積)/(時間) で考える。この流量は、両端の圧力差に比例すると仮定し、オームの法則と同形の以下の関係式でコンダクタンス C を定義する。

$$Q = C(p_1 - p_2)$$

上で引用した Hagen-Poiseulle の法則 の場合には、コンダクタンスは

$$C = \frac{\pi}{8\eta}\frac{\overline{p}}{L}a^4、 \qquad \text{粘性流でしかも層流の場合}$$

で与えられる。ここに登場した記号は、以下の意味を持つ。η は流体の粘性係数、$\overline{p}$ は平均圧力、a は断面が円形のパイプの半径、L はパイプの長さである。粘性流の場合の気体では、コンダクタンスは平均圧力に依存する。

Hagen-Poiseulle の法則に登場する流体の体積を流量として採用している教科書が時々ある。圧縮性の流体では体積と圧力の積を流量とするから、体積に圧力を掛けて、流路に沿って圧力勾配を積分したものを、ここでは流量としている。

真空技術に登場する多くの場合、排気の初期には乱流となっていて、この式を導くのに仮定した層流とは様子が異なるので、コンダクタンスはこの場合よりも小さい。一方で、真空技術的には、この乱流 (粘性流) 領域の経過時間は短いのでこの場合の議論はあまり重要視されていない。

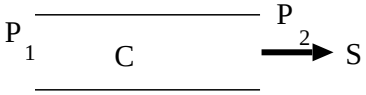
残留ガスの平均自由行程が真空槽の構成部品の内法寸法と較べられる様な場合には、分子流と呼ばれる。分子流の場合のコンダクタンスとしては、熊谷と富永著の ‘真空の物理と応用’ (裳華房) から、次の式を 引用しておこう。

$$C = \frac{4}{3}\alpha\,\overline{v}\,\frac{A^2}{H\,\ell}、 \qquad \text{分子流の場合}$$

記号の意味は、$\overline{v}$ は分子の平均速度、A は断面積, H は断面の周長, ℓ はパイプの長さである. α はほぼ１の大きさを有しパイプの断面形状できまる因子であり、円ならば１、正方形ならば１．１程度である。分子流領域では, 平均分子速度とパイプの形状にのみ依存する定数である。即ち、コンダクタンスは、分子流を想定して作られた概念である。コンダクタンスは、パイプの面積の２乗に比例し、長さに反比例しているので、真空槽とポンプとは出来るだけ太くて短いパイプで繋ぐのが原則である。可能ならば、パイプは曲げない方が良い事も自明だろう。勿論、トラップや仕切り弁は、途中につけねばならないだ

ろう。

次に、コンダクタンスと排気速度の劣化の関係を考えよう。



コンダクタンスが C のパイプの左側は、圧力が p_1 である真空槽に繋がれていて、右側の圧力は p_2 であり、そこには排気速度が S のポンプが直結されていると仮定する。パイプを流れる気体の流量は、$Q = C(p_1 - p_2)$ で与えられるが、ポンプはこの物質量を全て排気していると仮定すると、この流量は $p_2 \times S$ で与えられる。従って、

$$Q = C(p_1 - p_2) = p_2 S、又は \quad Q = \frac{CS}{C+S} p_1$$

と書ける。右辺の式は、パイプ左端でのポンプの排気速度が実効的に $\frac{C}{C+S} < 1$ 倍に小さくなったと解釈出来る。

上に、パイプとポンプを接続する、等価排気速度の式を与えた。この式の有効利用として、S が無限大の極限を考えると、排気速度は C となる事に注目しよう。例えば、アウトガス量の絶対値が欲しい場合があるとしよう。この場合は、排気速度の絶対値が必要になる。S が C よりも二桁以上大きい事が確認出来ているならば、C の絶対値がそのまま、有効数字二桁の範囲で排気速度の絶対値を与える。C の絶対値が計算出来るならば、これを信用すればよい。

吸着とアウトガス

真空槽の壁面には、無数の残留ガス分子が衝突している。忘れていたら、壁を叩く分子数を計算しなおしてみよ。1×10^{-6} mmHg の圧力だとすると、壁面を覆い尽くすのに要する時間は単純計算では 2 秒弱である。

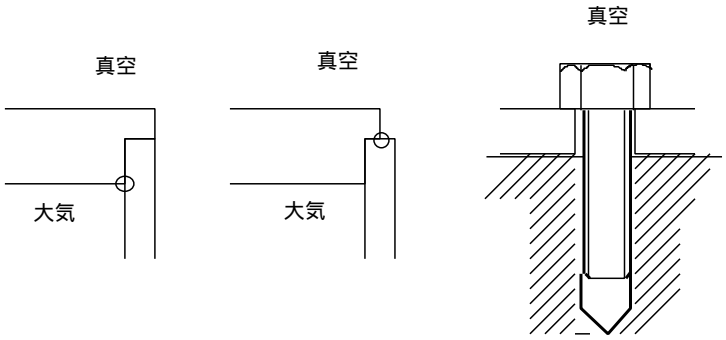
かなり極端な高真空でないかぎり、壁面はすぐに残留ガス分子で一面が覆われてしまう。残留ガス分子が壁面に衝突すると、壁面分子の振動状態の励起等の状態変化を通じて、運動エネルギーの一部を壁とやりとりするだろう。従って、平均的には壁に衝突した残留ガス分子は暫くは壁面に滞留すると考えられる。代表的な滞留時間は 10^{-13} 秒の程度だと考えられている。この衝突分子の一部は、ずっと長い時間壁に滞留する事が知られていて、この現象を吸着 (adsorpton、adhesion と sorption をくっつけた合成語かな？) と呼ぶ。現実の真空槽壁面には、複数の分子層が壁面材料の上に積もった状態だと考えられる。この積み上がられた分子層からは、残留ガス分子が飛び出して来て、付着する分子と平衡状態になっていると考えよう。真空槽を真空に排気すると、分子層の表面からは吸着されていた分子がゆっくりと飛び出して、新しい平衡状態が実現する。

真空槽や内蔵物の表面から、吸着された分子がゆっくりと放出される過程や放出されたガスはアウトガスと呼ばれ、真空の到達度を最終的に決定する非常に重要な因子となっている。アウトガス過程の速度は、その物質が過去のどれくらいの時間、空気その他のガスに曝されたかといった経歴に大きく依存する。真空装置の接続部に詰め物 (packing) 材として使用される合成ゴム類では 10^{-5} から 10^{-6} Torr $\ell/(s\,cm^2)$ 程度であり、その他の非常に硬い有機物 (ポリ塩化ビニール、エポキシ系の接着材、テフロン 等) では、もう一桁小さくなり、金属では更にもう一桁程度小さくなる。放出ガス量の少なさから、真空槽の材料としてオーステナイト系のステンレス (SUS ３０４、３１６) が使用される場合が多い。

金属材料を作る場合、あるかたちに整形する為にローラーに挟んで圧延する場合と、材料を後ろから押して、押し出し整形する場合があるとしよう。押し出し整形で作られた素材には、一般的傾向として ‘す’ が入っている場合がある。この ‘す’ からのガス放出があると、排気速度は極端に落ちる。圧延で製造された材料を使用するべきである。鍛造された材料ならば、先ず大丈夫だろう。真空冶金ならば安心だろう。

アウトガスを出来るだけ少なくする事は、到達真空度を上げる為には絶対的な必要条件である。思い付くままに、対策を考えてみよう。

設計時に、エアーポケット (air pocket) を絶対に作らない。



図の左二つの例では、丸印のところでフランジとパイプを溶接しているとしよう。左の図では、大気側で溶接しているために真空側に加工隙間が作られている。この隙間は一般に掃除が行き届いているとは限らないし、一度入ったゴミを取り除く事は、不可能と考えられる。中央の図の様に、真空内部で溶接しておけばポケットの心配は無い。右の図の例では、真空中で二つの物体をボルトで固定している。ボルトの先端部が行き止まりとなっている。このようなネジ穴は、可能ならば下の板を貫通しておけば、掃除も出来るしポケットにもならない。これが不可能な場合には、ネジの中央に穴をあけて、パイプ状に加工しておくと良い。中心軸に穴をあけたパイプ状のネジは、数年前からは既製品として、市場で入手 可能である。

壁面を可能な限り、真空の意味で清浄にする。有機溶媒で洗浄する場合が多い。別の考え方として、表面をめくってしまうというアイデアもある。サンドブラスト (sand blast) とか、GBB (glass beads blast) と呼ばれる手法である。非常に小さな砂粒やガラスビーズを壁面に高圧空気で吹き付けて、表面をはがし取ってしまう。高圧空気の発生時に、コンプレッサーのピストンオイル・断熱膨張に伴う水分の発生にも注意しておこう。

真空槽には、有機物は持ち込まない。又、真空部品としても有機物は使用しない。これはかなり厳しい設計条件である。真空槽の内部での電気信号の取り回しを考えてみよ。通常の導線は、有機物で絶縁されている！
無機物の絶縁材は、一般的に機械加工が困難である。ガラス粉末を焼結し、機械加工出来るものも市販されている。小物の設計に便利である。
蒸気圧が高い金属も使用しない方が良い。半田付けは避けて、圧着としよう。

多孔質の物質も持ち込み禁止である。
吸着された分子を壁面から追い出すために、真空槽全体の温度を一時的に上げ、冷

却後超高真空を実現するポンプを起動する。ポンプ自身も加熱して、ガス出しをすると良い。
この操作をベーキング (baking) と呼ぶが、ベーキングを行う為には装置の設計前に、ベーキング温度を決めておかねばならない。即ち、設定温度で軟化・劣化するような物質は最初から使用できない。

ベーキングの一形態として、内部での放電クリーニングがある。即ち、真空装置の内部に電極を挿入し、低圧ガス放電を電極と真空槽の間で実現する。放電ガスは、真空槽と反応してはいけないし、スパッタリング (sputtering) を起こさないような軽い気体である必要がある。 例えば、ヘリウムが良いだろう。放電クリーニングを行う前に、熱歪みに耐えられるかも検討しておこう。

普通の金属では融けてしまうような高温で使用する電極として、炭素を使用した事がある。真空中に据え付ける前に、炭素電極に加工した後で赤熱し、直後に純水中に漬け込んで急冷した。これにより、材料中に最初から存在した無数の穴を連結されたのだと想像される。

ある種の真空機器は、真空排気後、真空ポンプから切り離して使用する。例えばブラウン管。真空容器の表面からのアウトガスがあると、内蔵した実験装置の性能を極端に劣化させる場合がある。ロケットに X 線検出用の比例係数管を積む場合を想定すると、このアウトガス対策の重要性が理解出来るだろう。

摩擦係数と真空

吸着と非常に関係が深い話題として、真空槽内での摩擦係数を取り上げよう。例えばステンレス製のボルトとナットを非常に硬く締めた状態を考えてみる。この場合、ボルトとナットのネジ面は密着している。非常に強い力で押しつけられた同一材質の 2 面を考える事になる。実際は、鉄を主成分としクロームとニッケルの合金であるが、平均してステンレス原子で出来ていると考えよう。ボルトのステンレス原子とナットのステンレス原子の間隔が、ボルトやナット内部のステンレス原子の間隔と同程度にまで押しつけられたら、もはや個別のステンレス原子は本来どちらに属していたかという事は識別できなくなるだろう。このような状態を長く持続させたあとでは、ボルトとナットは部分的に固着状態となるだろう。無理矢理にネジを回してこれをはずすと、ネジ面が毛羽だった様に見える。この状態を、金属の「かじり」と呼んでいる。かじり対策としては、あらかじめ、二硫化モリブデンの粉を塗っておく場合がある。

通常の状態では、明らかにボルトとナットとがくっついたりはしない。この理由の一つとして、主に吸着により、物質の表面には本体とは異なる物質がくっついていると考える事である。この表面にくっついた物質が、物質の摩擦係数を大きく支配する場合がある。この表面物質を何らかの手段で剥ぎ取るならば、物質の摩擦係数は大きな影響を受けるだろう。高真空環境に物質を長時間置くと、吸着された物質が離脱し、摩擦係数が非常に大きくなる場合が知られている。真空中で、大きな荷重を支えるような設計になっている場合には接触する部分の材質は、異種金属とするのが良い。例えば、ステンレスを支える時には ベリリウムと銅の合金が強度が充分だから良いだろう。特に、真空内部で物体を駆動する時には、ネジやギアー (gear) を使用する機会も多いだろう。要注意である。

(1) 家庭用のスプーンやフォークに多用される１８ー８ステンレスは、クロームが１８%、ニッケルが８%、残りは鉄が主成分である。工業的には、SUS 304 という呼び名で呼ばれている。原子炉のシュラウド

として、SUS 304 が使用されていたが、ヒビが入るというトラブルの為に、SUS 316 に置き換えられつつある。SUS 316 は、１８ー８ ステンレスに Mo が添加されている。

(2) 真空中で摩擦係数が非常に大きくなるから要注意という事を大学院生に教えた事があった。その話をした１週間後 (?) に日本のロケットが墜落した (墜落原因が判明した) 事があった。原因は、燃料供給部のバルブの固着にあった。バルブは、地上試験では動いたが、大気圏外では (環境としては真空だから) 摩擦が大きくなりすぎて制御不能となったとの事であった。当事者は真剣だろうが、こちらは笑ってしまう出来事であった。

(3) BeCu 合金は、非磁性という特徴を有する。従って、強い磁場の近くでも使用可能である。若いころ、サイクロトロンにスパナを取られ、自力では取り返せなかったので、サイクロトロンの運転を止めて取り返した事がある。BeCu の工具ならば、取られる心配は無い。鉄製の工具同志を打ち付けた時、火花が飛ぶ場合が経験される。従ってガス工事等では爆発を誘起しかねない。一方 BeCu 製の工具ではその危険が少ない。BeCu の工具は、安全工具・防爆工具として市販されている場合がある。

(4) オネジをメネジに締め込む時、不必要に長いオネジを使う人がいる。両者のネジ山が相互に有効な応力を及ぼしているのは、大体ネジの直径程度の部分だけと考えておけば良い。アルミの様な軟らかい材質では直径の１．２倍程度、SUS だと０．８倍で良いだろう。その積もりになってボルトの厚みをもう一度見直してみよ。

真空機器関連部品

フランジ

実際の真空装置を製作し、使用する為には、いくらかの部品の知識が必要である。先ず、パイプの両端には、他の装置と結合するためにフランジと呼ばれる板が取り付けられる。フランジ同志を繋ぐためには、一般的なボルトとナットが使用される場合が多いが、取り外しと取り付けの操作を簡単に行う目的で、真空用クランプフランジ (quick coupling) と呼ばれる部品が使用される場合もある。小さな直径のパイプ用しか入手は困難だが、便利である。個人的な使用経験では、クランプフランジの最大直径は公称４インチであった。４インチと言うのは使用しているパイプの外径を指している。

手元にある、ある真空機器メーカーの規格では、パイプ外径という規格項目があり、インチ径では４インチであるが、ミリ径では４．５インチを指定している。ミリ径の規格では内径が４インチ程度となる。

JIS でも真空用フランジを規定しているし、メーカーの独自規格もある。例えば、UFC とか ICF と呼ばれる (conflat flange と呼ばれる) 物が有名である。

フランジの金属面だけでは、真空的な接続は一般的に困難である。そこで、フランジ間には合成ゴムや軟らかい金属で出来た詰め物を挟み込み、その変形で大気圧と真空とを区切る。通常は、蒸気圧が低い合成ゴムを使用する。その断面形状から、角パッキングとか O リングと呼ばれる。内径、太さ、素材等が規格されている。ゴム紐を現場で繋いで使う事もある。１５０度程度にベーキング出来るものもある。シリコンゴムを用いて、室温よりも低い温度で使用可能な場合もあるが、低温実験と呼ばれるほどの低温で使用できる訳ではない。低温では、金線やインジウムを挟み込む場合が多いと思う。

既成の O リングとしては、真空用を唱った、V シリーズ (JIS B2401-V) があるが、これは種類が少ないので、設計に対し強い制限を与えすぎる。他の規格として、P シリーズ (JIS B 2401-P) と G シリーズ (JIS B 2401-G) がある。真空用の O リングだけでは、設計する時の自由度が不足するので、他目的 (例えば航空機用や MIL 規格 等) の O リングも視野に入れておく必要がある。直径１メートル程度が最大規格である。

長方形のフランジを使用する時には、ゴム紐を使用する場合もあるだろう。ゴム紐を

垂直に切って、突き合わせるだけで真空を止める事は出来るが、古くなると、角の部分が盛り上がってそこから破損しやすい。パッキング溝を井桁に切った時には顕著である。対策としては、井桁を止めるのが良いが、それは後の祭である。一つの対策は、一枚の必要な厚さのゴム板から井桁を切り出す事である。自然な厚さの２０ー２５％程度の圧縮を想定して、溝の深さを決定する。O リングの当たり面は平滑に仕上げておかねばならない。S 5ー S 6 程度で充分であろう。

真空用のグリースをゴムの表面に塗る場合もある。シリコングリースやアピエゾンが良く使われる。

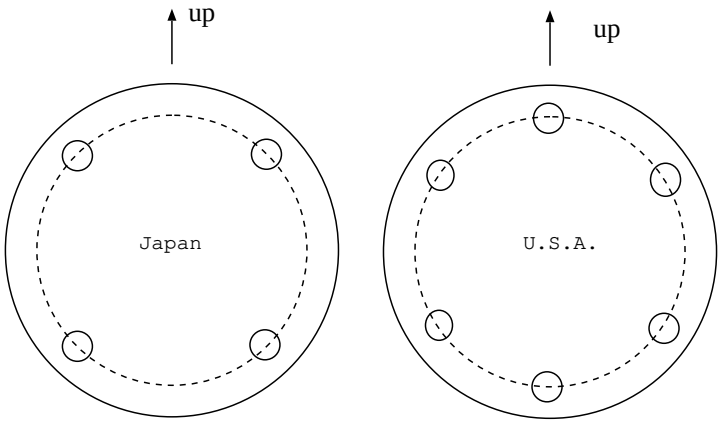
パッキングが取り付け時にずれたり、排気時に吸い込まれたりしないように、フランジには工夫がなされる。例えば O リングを使用する場合には、一方のフランジに溝をつける。しかし、溝ありと溝無しのフランジが対になるように設計をしなければならにのは厄介である。JIS 真空フランジ呼び名の最期は、溝の有無を示す。例えば、JIS B2290 (今でもこの番号が有効か否かは定かでないが) では、VF と VG で識別している。F は flat, G は groove 溝付きという意味である。フランジの側面にあらかじめ、F や G という文字をポンチで打っておかないと使用中のフランジでは F/G の区別がつかない。古い JIS では、ポンプで排気する時、溝付きフランジが下流に来るように規定していたと思うが、大きな装置を 2 台のポンプで排気すると、中間付近では困ってしまう。このルールは知っている物理屋の方が少ないだろう (従って守られていないと思う)。

クランプフランジでは O-ring Retainer を取り付ける。

ICF や UFC と呼ばれる フランジでは無酸素銅の薄い (厚さが約 2 mm) ドーナツ型の板を使用する場合が多い。金属の パッキングを使用する際、ネジを均等に締めなければならない。一方だけを締めすぎると、他方が持ち上がってしまうからである。通常は、ボルトを対称に締めて行くが、締め加減を正しく設定するためにトルク・レンチ (torque wrench) を用いる。トルク・レンチでは設定値以上のトルクでネジを締めようとすると、ラチェット機構が作動する。例えば、コンフラット フランジと呼ばれるフランジの初期締めつけトルクは１５０ kg 重 cm と言われている。実際には、締めつけトルク管理をしていない場合も見られる。

他には、インコネルや銀メッキをした板や、断面が C 字型の packing を使用する場合もある。古い記憶を辿ると、テフロンで O リングを作って貰って使用した覚えもある。テフロンは誘電体損失が少ないからである。

２枚のフランジはボルトで固定する事が多い。パイプの相対的な位置決めが、JIS フランジでは正確に出来ない怨みがある。一工夫欲しいところである。さて、JIS 規格ではフランジの大きさに合わせて、ボルト数を 4 の倍数で規定している。アメリカでは、フランジのボルト穴は 6 を基数にしているようである。実際に使用する場合には、穴の位相という概念もある事を忘れてはいけない。ボルト穴の位相は、日本での習慣として、図の様に真上には来ないようしている。



ボルト穴の指定は、図では破線で表した円の直径 (pitch circle diameter の頭文字を取り、PCD が１００ mm という様に表現する) と穴の数で規定する。JIS では取り付けるパイプの公称でフランジを呼んでいる。

しかし、アメリカでは真上に来るのを標準にしている様である。実用的な相違はこれだけでは不明であるが、これに枝分かれ管を真上に付けてみれば両者の相違が分かって来る。ボルトと枝管の位置の取り合いは、日本型の様に振り分けにしている方が使い易い。

パイプの両側にフランジを取り付けたとして、両フランジの穴の位相がきっちりと合っていないと、ボルトがボルト穴を通らないという事態が生ずる。特に、複数のパイプを次々につなぐ時に問題となる。一方のフランジは自由に回転出来る様になっていると、都合が良い。このような規格は、UFC や ICF と呼ばれるフランジには存在するが JIS フランジには存在しない。

ベローズ、 bellows

設計時にはパイプの長さは自由に選べるが、一度作ってしまうと、伸縮の自由度は無い。自由に曲げたり、伸縮する部品があると、組み立て時の自由度が増える。真空ポンプの振動を嫌うような実験装置の除震対策としても使用できる部品として、ベローズと呼ばれる、金属製の蛇腹がある。両端にフランジを溶接して使用する。

特に軟らかい (バネ定数が小さい) ベローズとして、ドーナツ状に整形した薄い金属板を順番に内側同志、外側同志と溶接して作った溶接ベローズも入手可能である。

ベローズは伸縮性が大きいが、このことは大気圧に対して、伸びや縮みに対する抵抗力が無い事を意味する。真空に引いた途端に、ベローズが縮んでしまってどうし様もなくなる。取りつけると、排気するまえに、支持具で固定しておこう。

ベローズは伸縮性や可撓性はあるが、捻性は無い。これを利用すると微妙に中心がずれている二つの回転軸を繋ぐ補助具として有用である。この様な用途のベローズは bellows joint、bellows coupling と呼ばれ、市販されている。伝達トルクの小さな場合には有用な小物である。

真空用ホース

ゴム製の物と、ベローズ製の物が主に使用される。油回転ポンプを用いた粗引き系に使用される場合が多い。肉厚ゴムや軟らかいプラスチックで出来た真空用ホースは、小さな曲率半径で曲げると、排気時に大気圧で潰れて、ペシャンコになる場合がある。対策として、丈夫な針金製のバネを外部に巻いたり、内部に挿入したりしておくと良い。

細い金属製のパイプを使用する場合もある。パイプの接続には、食い込み型 (bite type)

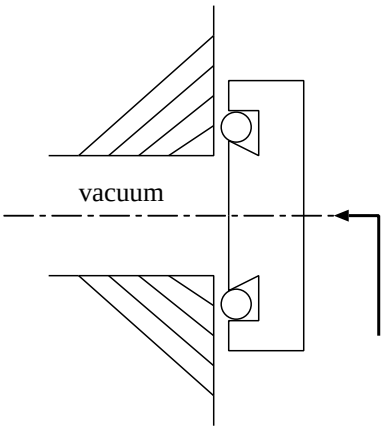
と呼ばれるパイプ継ぎ手が便利である。ニップルを溶接して使用する場合もあるだろう。管用テーパーネジ (PT、pipe thread の略) を使用するならば、テフロンテープを巻くだけで、それなりの真空まで使用できる。粗引き用ならば充分である。テフロンテープのかわりに、グリプタールを塗っておいても良い。

リークポート

排気された真空槽を大気圧に戻すには、外部から空気や乾燥窒素等を導入する。ゴミが吸い込まれないようにする必要がある。特に空気を直接流し込む時には、断熱膨張による結露にも気を付けよう。流入する空気が、内部にある実験装置を直撃すると困る場合もある。緩やかに空気を流し込む工夫の一つに、細かい金属粉を焼結したフィルターを用いる事が出来る。このフィルターはリーク弁の大気側の取りつけよう。

仕切り弁、バルブ

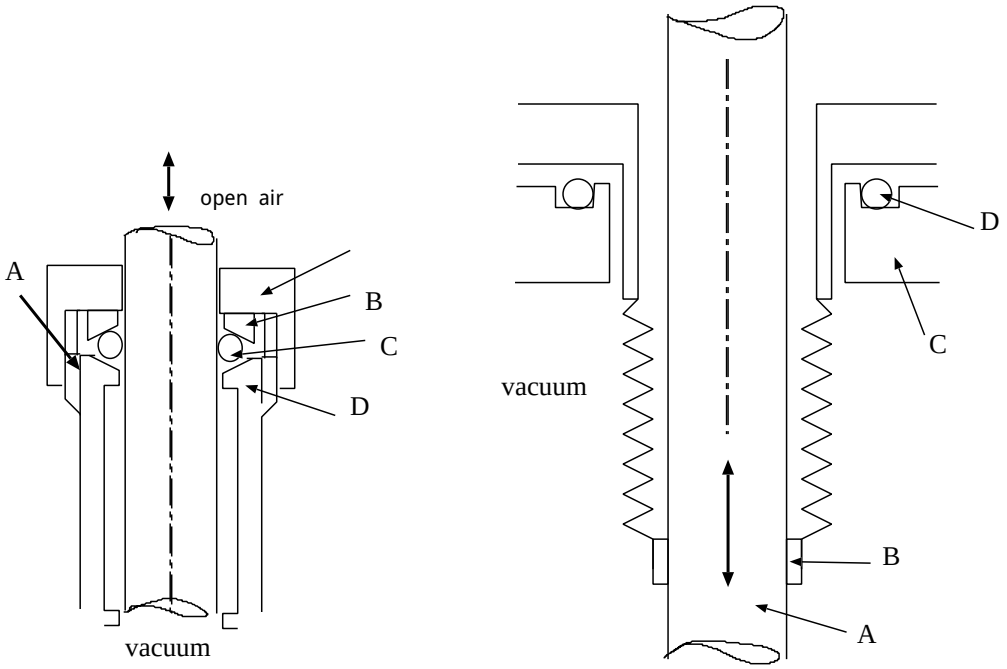
主には、図の様な構造であろう。



Vacuum と書かれた方が高真空側であり、上下の小さな丸が ゴムで作られたドーナツ状の O リングを表す。この O リングを固定された部分が 弁であり、右に書かれた太い矢印の様な動きをする。真空を止める時には、(この図では) 弁が下から上がって来て、最後にゴムの部分を弁座に押しつける。L 型バルブと呼ばれるものでは、図の右から直接押し付ける。動力は簡単な物では手動であるが、停電対策を施した物では、圧縮空気を用いる場合が多い。即ち、停電になった後で動く様なエネルギー源をあらかじめ用意していないといけない。

ゴムが使用されていると、ベーキング温度は制限される。この真空封じ部にアルミニウムを用いたものも市販されている。この場合には、弁座もナイフエッジ (knife edge) と呼ばれる。この場合には、弁と弁座の当たり具合の再現性が要求されるから、工作精度を上げねばならない。

弁の駆動機構にも注意が必要である。簡単なばあいには、丸棒を O リングで左図の様に咯 (くわえる？) と良い。

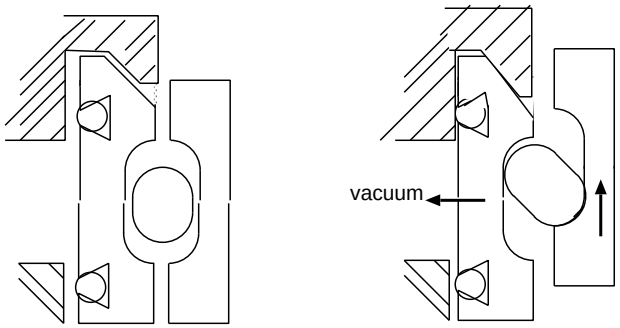


想像できると思うが、中心にある丸い棒が上下に動く。左図では外側の A の部分がネジになっていて、押し込むと、B の部分を押し下げる。O リング C は B と D に挟まれて、丸棒を圧迫する。これにより、丸棒を上下に動かしても真空は洩れにくい構造になっている。ここには記していないが、このままの構造では、排気時に丸棒が真空槽に吸い込まれてしまう危険性がある。

しかし、丸棒の大気側の表面には空気中の各種ガスが吸着されているので、ここからのアウトガスは免れない。

そこで、右の図の様に真空中に出入りする部分をベローズで覆ってしまう事を考える (bellows valve)。右側の図を参照しよう。丸棒 A はベローズ B の先端部で溶接されている。部材 C には O リング D が取り付けてあり、これはボルトで上から押えつけられているとする。A を図で上下に動かすと、ベローズが伸縮するが、大気に触れた部分が真空の内部に侵入する事はないので、高真空でも動作する。このような機構は色々と応用範囲が広いと思われる。

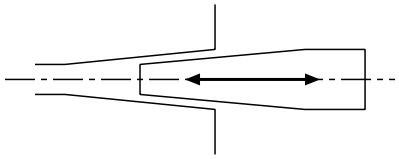
弁の話に戻る。丸棒の先に取り付けられた弁が上下に動く事は、了解されたとして、このままでは運動の最後の時期に前後に動くとは思われない。何かもう一工夫必要である。例えば下の様な機構は正しく働く事が確認されている。



図では、弁は上下の矢印で示された部分とする。斜線部は、固定されている。両者の中間部は図の様に細長くクリ抜かれていてそこに、断面が長円形の部材が填め込まれてい

る。この長円形部材は特に固定されている訳ではないので、弁が動くとつられて上下に動くが、固定金具にぶつかると、それ以上には動けないので幾らか回転する。この回転の動きが弁を左に押しやる。ここで断面が楕円の棒は、真空中でかじりを起こさない様に、弁や固定金具は SUS であるが、楕円棒は BS (真鍮) という具合に、異なる金属を用いる。但し、この図では真鍮棒が弁の中心を押していないが、実際には中心を左に押すように設計する。

上で述べたのは、開くか閉じるかの 2 状態しか取り得ない弁であった。ある種の実験では、微妙に開いた状態、従って非常に小さなコンダクタンスを制御するバルブが必要となるかもしれない。このようなバルブとして、ニードルバルブ (needle valve, metering valve) と呼ばれる機構がある。上の場合には、弁座が大きく開いていたが、この部分をテーパー (taper) 加工し、針状の弁がこのテーパー弁座の中に入って行く様になっている。



図の矢印の部分が出入りして、流量を調節する。針の部分の出し入れは、マイクロメータを読み取りながら操作するものもある。かなり高精度のものが利用できる。真空度が 10^{-6} mmHg のところへ微妙なガスの導入も可能である。背圧を制御すれば、もっと微妙な制御も可能である。

needle valve は 全閉バルブ (shutoff valve) を兼用出来ない場合がある。

運動の導入

最も簡単な事例は、既に挙げたバルブの開閉機構そのもので、直線運動を外部から導入する事は可能である。手動にするか、他の動力を利用するかは、必要な力やトルクに関係する。油圧駆動にすればかなり強力な駆動系を実現出来る。強力すぎて、ベローズを破壊するのも簡単そうだ。。。

O リングでのシール機構を利用して良いならば、遅い回転も導入可能である。ベローズを用いた面白い機構の、回転導入端子も市販されている。但し、大きな伝達トルクは期待できない。

磁性流体を用いた、回転導入端子も市販されている。

もう一つのやり方は、真空槽内にモーターを導入してしまう方法である。真空モーターは日本の複数のメーカーから販売されているはずだ。焼きだし (ベーキング) 可能な真空モーターも見た事があるが、使用経験がないから確実な事は言えない。真空槽内での運動に対して、その位置を制御する必要がある。この目的には、パルスモーターを使用するのが妥当だろう。パルスモータを使用する時には、インチングのステップ幅以外に制動・駆動トルクの大きさにも注意しておこう。更に移動距離が長い場合には移動体の慣性にも注意を払っておかないと行きすぎる場合がある。この時、必然的に電気エネルギーを持ち込まねばならない。この電気的な導入端子 (feed through) としては、アルミナ系の絶縁物を金属と接合した型のものを使用するのが妥当だろう。各種の電流導入端子が市販されている。信号の導入もこれらの変形種をしようすれば困難は無い。

真空内部での配線の電気絶縁に有機物が使えない場合もあるだろう。ガラスビーズや

管玉を使用するのが良いだろう。

洩れテスト

大きな排気速度のポンプを用い、コンダクタンスとアウトガス量の計算さえ適当ならば、希望する真空の実現はそんなに困難は無い。しかし、何らかの理由で希望する真空が得られない場合には、真空洩れがあると考えて、その洩れ箇所を見出さねばならない。

先ず、排気速度、コンダクタンス、アウトガス量の推定値を用いて、到達圧力を推定しておかねばならない。基本になるのは、以下の微分方程式である。

$$V\frac{dp}{dt} = -p\,S + Q$$

コンダクタンスを考慮して排気速度を修正しておけば、接続パイプの影響は事前に消し去る事が可能である。この式に登場する記号の意味は、以下の通りである。V は真空槽の体積、p はその圧力、S はコンダクタンスを考慮して補正した後の、真空槽の排気孔での真空ポンプの排気速度、そして Q はアウトガス量である。圧力の時間変化や到達真空度が、この式から推定できるよりも有意に悪いならば洩れを疑わねばならない。

大きな真空系を組み上げてから、全体を一気にテストするのは良くない。大きな真空系は全体を組み立てる前に、個別の部品に対して厳しいテストを実施しておく事は、結局は効率的な洩れ探しに継る。分割して統治する (divide and conquer) という指導原理を忘れない様に！

信頼できる油回転ポンプを用いても真空が上がらないならば、加圧テストをしてみるのも良いだろう。閉じられるところを全て閉じて、内圧を上げて暫く放置する。すぐに圧力が下がるだろうから、接続部分を先ず疑ってみる。怪しそうな場所に石鹸液を塗ってみると、泡が観察できるだろう。パッキングが正しく装着されていないといった単純なミスの場合が多いだろう。石鹸液は作業終了後、きれいに拭き取らねばならないが、適当な時間で蒸発してしまう発泡性の液体も洩れ検出液として市販されている。明るい場所で目を凝らしてみれば、油回転ポンプの領域での洩れは簡単に見い出せると思う。この圧力領域ならば、歪み計を利用した非常に感度の高い圧力計を利用すると洩れの有無は簡単に検出出来る。小さな装置だと、全体を石鹸液に浸しての加圧テストも可能である。

油拡散ポンプや軸流分子ポンプの真空領域での洩れが分かった時に、洩れの場所を見つけ出すのが次の仕事である。

常識的には、これらのポンプや真空計が正しく働いている事を仮定して次の議論を進める。

冷陰極放電型の真空計は、放電分解物により電極間の絶縁抵抗が低下して、見掛け上大きなイオン電流 (正しくは絶縁面のリーク電流) が流れてこれを洩れと誤判断する場合がある。

この圧力領域で使用されている真空計は、全圧計ではない。洩れ込むガスの種類によりイオン化の断面積が異なる事を思い出そう。現在洩れ込んでいるのとは異種ガスを送り込むと、イオン化断面積が異なるために、イオン電流が大きく変化すると期待される。zero offset 機能が付いているならば、真空計の増幅率を上げると洩れ探しは容易になる。

例えば、真空槽全体をポリエチレンの袋で包み、袋の内部をブタン (火気厳禁) やヘリウムガスで満たす。ブタンは行楽用の簡易ボンベが便利である。袋で包まれた部分に洩れがあれば、真空計は悪い真空を指すだろう。この真空の変化が掴めれば、袋に包まれた部分 (または袋からのガスの洩れ口付近) に洩れがある事が分かる。

ヘリウムは原子の大きさが非常に小さく、第 1 イオン化ポテンシャルは大きい。サイズが小さくイオン化しにくいと考えられるガスが残留ガスと置き換わるとイオンゲージの振れは小さくなって真空が良くなると勘違いしてはいけない。例えば、T.A. Delchar 著 石川訳 '真空技術とその物理 ' (丸善) p 133 に、空気分子、水素分子、ヘリウム原子と電子が衝突する時のイオン化断面積がグラフで、もう少し詳しいデータはレッドヘッド、ホブソン、コーネルセン 著 富永・辻訳 「超高真空の物理」(岩波書店)pp 118 示されている。確かに、ヘリウム原子のイオン化断面積は空気分子と比較して有意に小さい。しかし上に書いたように、ヘリウムガスが残留ガスに混入すると見掛け上の真空は悪くなる。

このような事は、比例計数管の増幅率にも見られる。学生実験 3 で測定した、Q ガスと PR ガス での増幅率の印加電圧依存性を思いおこしてみよ。

興味があればこの原因を考えてみよ。

プローベガスのかわりに、アルコール等の液体を使用する場合がある。アルコールが漏れ部を直撃すると、真空計の指示は大きく変化する。高感度という意味では良いのだが、なかなか蒸発しないので、時定数が非常に長いという意味で、後始末が大変である。ヘアードライヤーで全体を暖めるという作業が待っている。

次に、袋のガスを全て追い出し、真空計の表示が回復するのを待つ (扇風機を使用して吹き飛ばしてしまえば待つ時間を短縮できる)。洩れがありそうな部分は全てテープを貼って、直接にはガスがかからないようにする。注射針の先からプローベガスを吹き出すように用意し、この注射針を個別のテープを貼った部分に突き刺し、この部分からの洩れが無いか一つずつ丹念に調べて行く。接続部分, フィードスルー、溶接部分等を調べれば良い。大体はこの作業で見付かると思う。

ヘリウムガスが実験室に充満すると、room back ground が増えて洩れテストの感度が下がる事が考えられる。実験室の換気にも留意しよう。

真空計を人間が監視するのは、疲れると見落としの危険がある。もしも真空計に記録計用の出力端子があり、XY レコーダーが利用できるならば、時間を X 軸に、Y 軸に圧力を入力して走らせておくと良い。耳で聴きながら洩れ探しをする為に、音量に変換して出力する場合もある。

大きな真空装置が洩れだした時にも、分割して考えるのは非常に有効であるが、あたりを付けるために、直前に改造したり取り付けたりした装置を先ず疑ってみるのが賢明である。

大きな装置では、複数の真空計を配置しそれらの相関を調べたり、時間依存性にも注意を払うと、あたりをつけやすい。

洩れテストの為の特別な装置として、ヘリウムリークディテクター (He leak detector) や 4 重極質量分析器 (quadrupole mass filter) が利用出来る場合もあるだろう。これらの補助装置は、上で説明した方針での作業を助ける目的で使用する訳だが、感度が良い (場合がある) 真空計だと思っておけば大きな間違いは無い。即ち、それ以上の働きをする事は無いと理解しておけということである。

洩れ箇所が発見されたならば、対策をたてねばならない。簡単に修理出来る場合もあるが、簡単には正統的な対策が浮かばない場合もあるだろう。このような時の逃げとして、真空用の接着材を洩れ箇所に塗るという手段も覚えておくと良いだろう。洩れ箇所を、ハンマーと鏨 (たがね) で潰してしまった人もいる。

He leak detector は、Manhattan 計画の中で、U の拡散分離装置の洩れテストの必要性から、Nier により発明されたそうである。

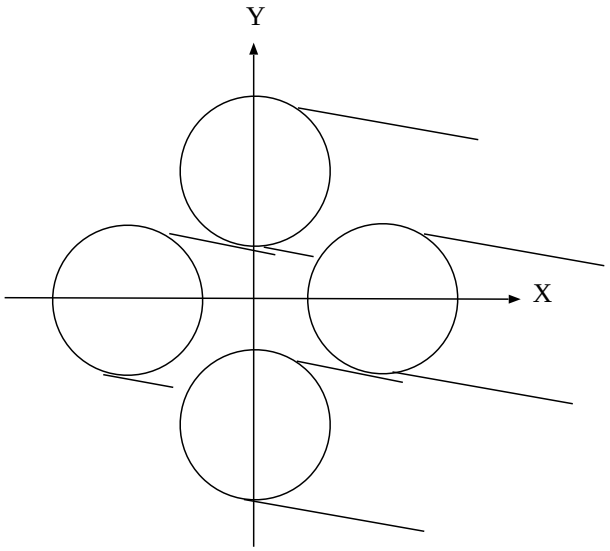
４重極質量分析器

真空が良くなると、真空の質 (残留ガスの成分) を調べる必要がある。残留ガスの成分を調べて、何が到達真空度の制限要因かを割出す様な用途と思えば良い。調べるべき項目は、残留ガスの質量、種類、部分ガス圧 (残留ガス種ごとの圧力) 等である。この目的には、残留ガスをイオン化し、質量分析するのが正攻法であろう。ヘリウムリークディテクターは、内部に小さなヘリウム専用の質量分析器を備えている。これでは性能不足で、もう一段性能の高い質量分析器を用意する必要がある場合の可能性として４重極質量分析器がある。

４重極質量分析器の主な構成要素は、１) 残留ガスをイオン化する部分、２) イオンの質量 (本当は電荷と質量の比) を分析する部分 及び３) イオン強度を測定する部分に分ける事が出来る。

イオン生成部では、電子ビームを用いて残留ガスを照射するしか方法は無い。電子の飛行距離を出来るだけ伸ばすしか方法は思い付かない。

何とかして作られたイオンの質量分析をする手段として、４重極電場を利用する。



４重極電場とは、$(r,\,\theta,\,z)$ で表される円筒座標で、$r^2\cos 2\theta$ に比例するポテンシャルで表せる電場の事であり、z 軸を４回対称軸として、$x\,y=$ 一定で表される直角双曲線を近似する４本の円柱を電極として実現する。図で相隣る電極には符号のみが異なる電位が与えられているとする。この時の電場は、xy 面内では E_x, E_y は $(x,\,-y)$ に比例している。従って、z 軸にほぼ平行に走るイオンの内、xz 面内にあるものは、収束力をうけ、yz 面内にあるならば、発散力をうける (電荷の符号に依存しこの逆の場合もある)。ここで、ポテンシャルには時間的に一定な直流成分と交流成分とを重ね合わせる。このときには、z 軸付近を走るイオンは収束力と発散力を交互に受けながら運動する。実際には、次の運動方程式を数値的に解かねばならない。

$$m\frac{d^2}{dt^2}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = q\,V(1+\alpha\cos\omega\,t)\begin{pmatrix} x \\ -y \end{pmatrix}$$

この微分方程式は、マシュウ (Mathieu) 関数に持ち込む事が出来、$\sqrt{qV/m}=\Omega$ と ω の関係次第で安定解 (振幅が発散しない) や不安定解となる。α は定数であり、不安定解

に非常に近い安定解を実現するために、０．１６７８ 程度に選ばれる。安定解は周期的であり、z 軸上の一点から出たイオンはもう一度 z 軸に戻って来る。この戻って来る位置にイオン検出器を置く。一方不安定解では、振幅は無制限に大きくなる。従って不安定解に対応するイオン軌道は電極や真空容器にぶつかって、検出器に到達しない。安定解となるイオン質量は、V (従って Ω) を変化させると変化する。横軸に V、縦軸にイオン電流を取ってグラフを描く。横軸は質量に換算される。

本格的な質量分析器やここで述べた Quadrupole mass filter を使用して残留ガスの質量分布を測定する事が出来る。油拡散ポンプを使用していたり、油回転ポンプだけを使用して不必要に長時間排気したような真空槽では、質量数が１２の整数倍付近に沢山の残留ガスが残っているのに気が付くだろう。CH 結合の分子の片割れである。

質量スペクトルに空気の主成分が登場する様では、真空槽に洩れがあると言える。

半導体工業では、油分子が残っている事が非常に嫌われ、軸流分子ポンプの開発が促進された。

マシュウ関数は、物理数学でもあまり登場しない特殊関数であるが、楕円座標での 2 次元ラプラシアンを書き下すと、この方程式 (の親戚) に行き付く。$\alpha = 0$ という特殊な場合には、単純な調和振動子を与えるから、周期的な解が存在する事は誰にでも理解できる。$\alpha \neq 0$ ならば、調和振動子に周期的な外力が作用していると了解できる。$\omega = 2\Omega$ という条件を満足するならば、ブランコを思えば良い。ブランコは、外力の周期の半分の周期で運動する。従って、安定解が存在し得る。この方程式の安定解で記述される別の現象として、１次元の周期的なポテンシャル (結晶場と思えば良い) の中を運動する電子の波動関数を思い浮かべれば良いだろう。Bloch の定理が思い出せたかな？方位角に依存する様な周期的な磁場配置をした加速器 (例えば AVF サイクロトロンやシンクロトロン)、RFQ と呼ばれる直線加速器や真空中に１個の原子を拘束する Paul trap や Penning trap でもマシュウ関数は活躍する。これらの例を見ると、古くて新しい関数である。

与えられた電磁場の下でのイオンの軌跡を研究し、イオンの収集効率を上げたり運動量分散を考慮したりという分野があり、イオン光学と呼ばれる。質量分析器、電子顕微鏡や加速器等が主な対象分野である。適当な参考書が少ないので、イオン光学に興味のある学生は僕のホームページでも見てもらいたい。

“http://www.tac.tsukuba.ac.jp/∼yaoki” イオン光学の講義ノート

真空中で結晶を成長させるが、製品の表面を研磨した後で化学薬品 (例えばフッサン) でその結晶を溶かしてみる。結晶の不整合箇所から溶け始めるので、ほんの少しだけ溶けた段階で顕微鏡で表面を観察する。結晶表面の単位面積当たりの、溶けて出来た窪み (etch pit) を数える。真空の”質”を比較する為の実用的な手法である。

簡単な例

体積が ９０ ℓ の真空槽を 1×10^{-6} mm Hg にまで排気してみよう。使用する真空ポンプは、軸流分子ポンプ (TMP) と油回転ポンプ (RP) としよう。

真空槽は、内法が ５０ cm × ６０ cm × ３０ cm としよう。内面の面積は、$(50 \times 60 + 60 \times 30 + 30 \times 50) \times 2 = 1.26\, m^2$ である。表面からのアウトガス量は、$10^{-7} Torr\, \ell / sec\, cm^2$ 程度だと仮定すると、$1.26 \times 10^4 \times 10^{-7} / 1 \times 10^{-6} = 1.26 \times 10^3\ \ell / sec$ の排気量が必要である。排気していれば、アウトガスの割合はもう少し減るだろうから、１０００ ℓ / sec 程度の排気速度で充分だろう。焼き出しをすれば、もう少し小さな排気量のポンプでも充分だとも思う。この程度の排気速度のポンプだとすると、真空槽とポンプとの接続口径は２０ cm 程度必要だろう。真空槽と TMP の接続パイプは出来るだけ短くするとしよ

う。勿論、TMP と真空槽の間にはバルブも必要だろうから、ここでのコンダクタンスを考慮すると、実質的な排気速度は少しは低下する。

TMP は多分上部に吸気孔があり、横に排気孔があるだろう。真空槽の底板に直接 TMP を取り付ける事も可能である。この時、真空槽内での実験準備作業中に、ネジ等の小物を TMP 内部に落す可能性がある。この小物が TMP 故障の原因とならない対策をたてておく必要がある。例えば、吸気孔に目の細かい網をかぶせておく。

真空槽の横に TMP を置く事も考えられる。横に置くと、真空槽に近付き難い場所が出来るが、逆にポンプの点検や修理は楽に出来る。直径が２０ cm だと、長さが１ m のパイプでもコンダクタンスは約 $10^4\ \ell/sec$ あるので、排気速度の低下はあまり気にする必要は無い。

真空槽と TMP との間に、バルブを付けるとしよう。可能性としては、gate (sluice) valve か butterfly valve となるだろう。L 型バルブを取り付ける人もいる？

ゲートバルブと L 型バルブは、動作の為のゆとりを必要としないが、バタフライバルブを使うならば、短管を取り付けておかないと、バルブの開閉ができない恐れがある。

TMP の背圧を 5×10^{-2} mm Hg と仮定して TMP の背圧を排気するポンプを考えよう。(少し圧力が高い気もするが... 。圧力が $1\times10^{-6}\ Torr$ の時に $1000\ \ell/sec$ あった排気量は、$5\times10^{-2}\ Torr$ の時には、$1.2\ \ell/min$ に対応する。非常に小さな 排気速度の油回転ポンプで対応できる。

TMP の起動初期には、TMP の排気量が RP の排気量を上回る時期がある。インターロックを設計する時には、気をつけておこう。

しかし、真空槽を大気圧から TMP が作動するまでの圧力にまで補助排気するのにもこの油回転ポンプを使用するだろうから、この時定数も評価しておくべきだろう。排気の微分方程式を $Vdp/dt=-pS$ だと近似すると、時定数は $V/S=100/1.2$ 分となる。根気の良い人でも待ちくたびれるだろうから、初期排気の時定数を短くするという条件から、油回転ポンプの排気速度を決めよう。例えば、１００ ℓ/min というポンプを選べば良いだろう。僕ならば、気が短いから２５０ー３００ ℓ/min とするだろう。

油回転ポンプのすぐ上流には、自動リーク付のバルブを付けておくのが良いだろう。即ち、油回転ポンプが動作を開始するとポンプとその上流を繋ぎ、ポンプが停止するとバルブは閉まり、その後、バルブの油回転ポンプ側を自動的に大気圧に戻す。真空槽内の初期排気に際し、大気を急に排気すると大きな風が真空槽内に発生し、実験装置を壊す可能性を心配する人もいるだろう。初期排気を穏やかに行うために、粗引き経路にコンダクタンスを制御できる装置 (人間が油回転ポンプの排気音を聴きながら、又はブルドン管の表示をみながら手動バルブをゆっくりと開けてもよい) を組み込む事もある。

油回転ポンプを、真空槽の粗引きと、TMP の背圧確保の二つの目的に使用するならば、二つの排気経路の選択があり得る。一つは、停止中の TMP を経由して粗引きする方法であり、もう一方は別途粗引き経路を取り付ける方法である。それぞれに、長所もあり、短所もあるだろう。前者では構造が簡単になるが、粗引きにも TMP 内部が使用されるので、汚れてしまう。

真空計の設置

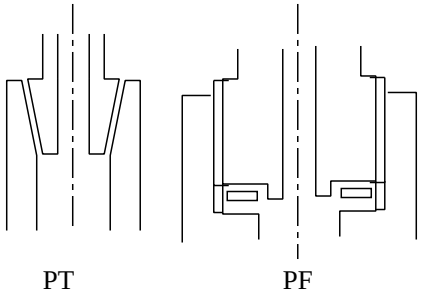
真空排気系の動作確認の為に圧力の測定器を各所に取り付ける。

０) 油回転ポンプの上流に、ブルドン管を取り付ける場合がある。取り付けるならば, 負圧から １．５ 気圧程度を測定出来る物がよいだろう。特に必要と言う訳では無いが、油回転ポンプの動作や、初期の排気速度の目安になる。通常のガス屋さんが 0 気圧という

時に、我々物理屋は１気圧と言う。従ってガス屋さんには -1 気圧から測定すると言わねばならない。通常の真空計では、１気圧からの減圧過程を追える様な機能を持つ物は少ない。１/４ インチ (PF １/４) 程度のメネジを RP と TMP の間に用意しておくと良い。ネジの規格は PT(管用テーパーネジ) と PF(管用平行ネジ) が登場する場合が多い。

PT、PF という呼び方は古いらしい。詳しくは JIS B0202, B0203 を参照。

PT ならば、テフロンテープを巻き付けるか、グリプタールをネジ部に塗って螺込むだけで良い。PF ならば、ネジの先端部にパッキングが必要である。



１/４ インチと書いたが、１/４インチ (約６．３ mm の外径) のパイプを使用する事を想定したネジという事で、外見は１/４インチよりもずっと大きい。パイプは、内径を指す場合もあるようだ。

１) もう少し真空が上がって来た時の目安を与える物として、ガイスラー管、ピラニーゲージ、熱電対真空計のどれかを、油回転ポンプと TMP の間に設置する。

１ー１) ガイスラー管は、ガスの種類の識別がある程度出来るのが長所である。ガイスラー管の動作領域の圧力で洩れがあったとする。洩れ箇所にアルコールをかけると、空気の放電色 (薄い赤) が青白い色に変色する。少しうるさいし、高電圧を使用するのであまり勧められない。

１ー２) ピラニーゲージ。 感度を切替えて、10^{-3} mmHg 程度まで測定できる場合がある。センサー部分がガラス製の場合と、金属の管で作った物を見た覚えがある。ゲージポートと呼ばれる取り付け口を用意しておけばよい。直線運動の導入のところで、O リングでパイプをくわえるという例を出したが、あれがゲージポートと同じである。取り付け部の直径が、１５ mm と１８ mm の二つの規格がある。JIS 規格は１５ mm である。このゲージポートには、ガイスラー管を取り付ける事も出来る。

複数のセンサーを管理する測定回路も入手可能である。

１ー３) 熱電対真空計。 Thermocouple gauge(TCG) ピラニーゲージとほぼ同じ動作領域である。取り付け方式として、PT を用いる物が入手可能である。センサー部分が金属製/ガラス製の場合があり得るだろうが金属製の方が安心感がある。取り付け方はネジ式の方が、ゲージポート方式よりも安定している。

油回転ポンプを運転すると、近くの機器もつられて振動する。真空計のセンサーやメータは振動に強いとは限らない。運転後数日で、振動が原因で故障しないとも限らない。油回転ポンプの振動は極力排除しておこう。

２) 油回転ポンプの動作領域に入り、暫くしたら TMP の動作が可能になる。先にも書いたが、粘性流から分子流に移行する真空領域となる。油回転ポンプの油蒸気が TMP へ逆流する事を恐れるならば、粘性流領域で TMP を起動するのが良い。TMP が動作を開始すると、真空は更に良くなる。この時の真空計としては、電離真空計か冷陰極ゲージ (Phillips gauge, Penning gauge) を使用する。この真空計は、TMP よりも上流に取

り付ける。

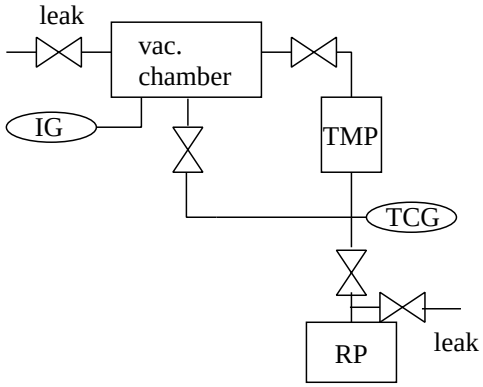
２ー１) 電離真空計。(Ionization gauge, IG) イオンを収集する部分がパイプ状になったものと、針状の物 (BA gauge) とが入手できる。針状の物はかなり高真空まで測定できる。取り付け方法は、旧来のものは ゲージポート方式が主流である。しかし、ミニコンフラットフランジと呼ばれる ICF 型のフランジに取り付けたものや、これより少し大きな ICF ７０ と呼ばれる大きさの規格のフランジに取り付けた nude gauge の入手も可能である。ここで ７０ というのはフランジの外径である。

２ー２) 冷陰極真空計。沢山の呼び名があるが、同一の真空計である。Phillips という会社の Penning という人が発明したと聴いている。永久磁石と高電圧を使用する。NW ４０ 程度のクランプ継ぎ手を使用するものの使用経験がある。放電開始が遅れる場合がある。この真空計は、超高真空の時と、非常に悪い真空の時には放電しないので両者の区別がつかない。

電離真空計は、１０の倍数で測定範囲を切替える場合と、対数変換後の出力を読み取れる様になった回路を使用する場合がある。一方、冷陰極真空計は、測定範囲を切替える領域が測定器メーカーによって一定していないきらいがある。測定範囲を切替えるタイプでは、安全の為のインターロック機構の設計に困難を来す場合がある。

その他の注意事項

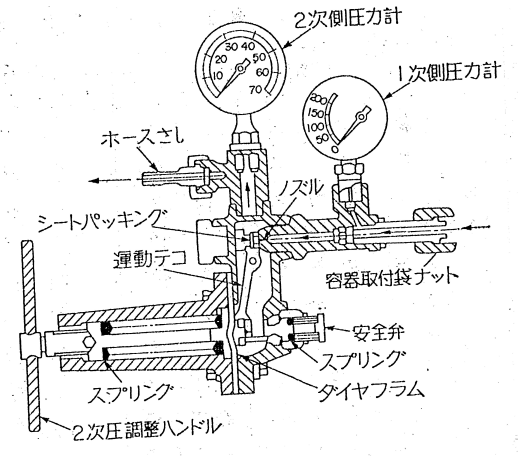
これまでのところを図示すると、概ねこの図の様になるだろう。



未だ説明していないのは、リークポートだけだろう。新規に実験装置を真空槽内に組み込む為には、真空槽を先ず１気圧にしなければならない。使用していない時には真空槽は、排気して内面がガスを吸着しないような状態で保存してあるかもしれない。そこで、リークポートから空気、乾燥空気 (これは市販されている)、窒素ガス等を流し込む必要がある。

乾燥空気や窒素ガスは通常は１５０気圧のボンベで入手できるだろう。このボンベを直接リークポートに繋いで、ガスを流し込むと (多くの場合失敗するだろうから) 真空槽内の圧力は１気圧以上となり、ゲージポートに差し込んであった電離真空計のセンサーがふっ飛んでしまうかもしれない。(この程度の事故で済めば幸いと言うべきか？) 圧力調整弁を取り付けて、充分に減圧したガスを用いなければならない。しかしそうすると、１気圧になるまでに時間がかかりすぎて、見張りをしているのが嫌になり、結局のところ真空槽内の圧力が上がってしまう場合もあり得る。内圧が１気圧以上になると、蓋が開くような工夫を真空槽にしておくと良い。簡単にこれを実現するには、真空槽に付いているフランジの１枚に対して、１本だけを緩めて他のボルトを完全に自由にした状態をリーク開始前に設定しておくと良い。

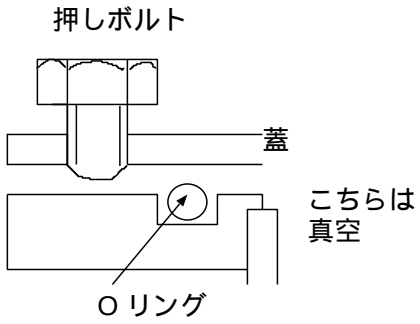
図は、化学同人発行の”実験を安全に行うために”から引用したダイアフラム型圧力調整器の構造図である。二次圧調整ハンドルを螺込む方向に回すと、設定 (吐出) 圧力が上がる事に注意しよう。



更に実用的な、生活の知恵を追加しておこう。

実験装置を組み込む為には、真空槽の蓋を開けねばならない。今の場合、５０ cm x ６０ cm の蓋にかかる大気圧を知っておかねばならない。大気圧は １平方センチメートル当たり、1 kg 重だとすると、３０００ kg 重の力が排気した状態でかかっている。これだけの圧力でも、歪みが少ない設計になっていないといけない。多分 1 cm の厚さのステンレスの蓋だと 約 1 cm 程度中心付近でたわむだろう。蓋の厚さを 2 cm とすると１/１６ cm となり先ずは無視できる程度のたわみと考えられる。即ち、蓋は充分に重いのだ。実際は、リブを井桁に取り付けて軽量化を図るだろう。井桁を溶接すると、溶接熱で蓋が歪む事もある。

次の作業は、実際に蓋を開ける訳である。手で蓋を持ち上げる事は、不可能に近いだろう。counter balance を用いるか、クレーンを使用する事となろう。蓋を持ち上げるつもりで、クレーンで蓋を吊上げると、ひょっとして真空槽が持ち上がって来るかも知れない。ちゃんと１気圧にリークしていなかったり、真空用のゴムパッキングがくっついてしまっている場合も考えられる。この様な場合の工夫として、押しボルトを用意しておこう。



この図の様に、上側の蓋にネジ穴を事前に開けておき、蓋を開けたい時に、この位置にボルトを押し込む。このボルトが蓋を持ち上げてくれるので、蓋は簡単に開けられる。くっついた蓋が外れたら、押しボルトは充分に緩めておくか、外しておかないと次に排気する時に悔しい思いをするだろう。

クレーンで蓋を開閉する様になると、更に注意すべき点がある。クレーンの操作が下手だと、蓋が傾いてしまい、きれいに開閉できない場合があるかもしれない。蓋を精度良く置く工夫も欲しくなるだろう。

蓋が真空槽から外れる時や、蓋を閉める場合の最後の瞬間に真空槽の内部の圧力が大きく変動する事も考えられる。大きな蓋の開閉時には、小さなフランジを先に外して、充分な空気の通路を確保しておくと、このようなトラブルは防ぐ事が出来る。蓋を閉める時には、この逆の操作を行い、最後に小さなフランジを閉じる。

最後に、真空装置の維持に関して一言、経験談を提供しておこう。何度も話題に登場したが、油回転ポンプの油蒸気が、真空槽に逆拡散するという話を聴いて、真空槽とポンプの接続孔の部分に液体窒素で冷却された邪魔板を置いて、この油蒸気が真空槽の内部に

入って来るのを防ごうとした事があった。そんな無駄な努力をする暇があったら、真空作業前に良く手を洗い、手袋を使えと僕が言っているのに！

結果は液体窒素で冷やした邪魔板のポンプ側でなく、真空槽側が汚れていた！！

注意深く設計され、維持されている真空機器の最大の敵は、知識の無い利用者である。

真空系制御回路の実例

実際に使用されている、制御回路の例を最後のページに提示しよう。これは、油回転ポンプと国内メーカーが作った軸流分子ポンプを組み合わせた排気系の起動・停止を行うものであり、真空が悪い時には、バルブを開けられないような仕組みも組み込まれている。大まかな説明をしよう。

全体を囲む太い線で枠が書かれている。この枠上にある番号付の小さな四角が、電気的な接続を行う端子であり、左から右へと見て行く。左上の POWER 部から交流１００ V が来ていて、０．５ A の ヒューズを通って, 受電スイッチ (S1) に行く。この POWER スイッチを投入すると、赤ランプ L １が点灯し、操作可能となる。S ２ の RUN と書いてあるスイッチを押すと (すぐに離しても良い) K １と書いてあるリレーが働く。K １と書いてあるコイルの上下に書いてある数字、１３と１４はこのリレーの接点にメーカーがつけた端子番号である。

K １ が励磁されると、K １ー１ に継っているランプは電源投入時に点灯していた STOP という緑ランプ (L ３) が消えて、RUN という赤ランプが灯る。更に、K １ー２ (K １ というリレーの２番目の接点) を経由して、MC １ という大きなリレーが導通する。この結果油回転ポンプ (ロータリーと書いてある) が稼働を開始する。MC １ のすぐ下流には SR １ というサーマルリレー接点があり、ここに過電流が流れると、SR １ から破線で継っている接点 (図では ９５ー９６) の接続が切れる。この時、対応する９７ー９８接点が継り、 ROTARY TRIP という赤ランプ (L ５) が点灯する。K １ー３接点は、K ２ という遅延リレーを励磁し、１０分後に K ２ー１が導通し、ROTARY READY という緑ランプが点灯する。但し、K １ー３の電源は、太線枠上の１、２と書かれた端子を経由している。ここにはピラニーゲージと書かれている。即ち、ピラニーゲージで観測した真空度が設定圧力以下にならないと、K １ー３の接点には１００ V の電源がつながら無いようになっている。従って、油回転ポンプが回転してから、１０分以上経過し、かつピラニーゲージで観測した真空度が設定された値よりも下がらないと、ROTARY READY という緑ランプ (L ４) は点灯しない。ここまでで、真空槽の粗引きが完了した。

次に軸流分子ポンプ (TMP と略する) の起動を開始する。先ず K ３ というリレーに着目する。K ３ リレーのコイルは、太線枠の３、４という４角で囲まれた端子 (冷却水と書いてある) を経由して電源を供給されている。即ち、TMP 用の冷却水が流れていないと次へ進めない。冷却水を流すと、K ３ は自動的に励磁され、WATER FLOW と書かれた緑ランプ (L ６) が点灯する。K ２ の油回転ポンプの真空度に関する確認 (K ２ー２) と 冷却水が流れている事の確認 (K ３ー２) が OK ならばリレー K ４ が励磁され、TMP 運転可という情報が K ４ー１が作動したという情報として、TMP の電源回路に伝えられる。図の中央上部、太線枠上に１ー８の小さな枠で表現された端子が TMP の電源に継れていて、この端子を経由して TMP の電源と制御回路とが信号をやりとりしている。即ち、電源回路は接点１ー２が短絡すると、運転準備完了と解釈する。逆に言えば、TMP 運転中にこの接点が開くと、緊急事態が発生したと考えて、TMP を止めてし

まう。

準備が整ったところで、スイッチ S 4 を押してリレー MC 2 を励磁する。MC 2 は、K 4 ー 2 が ON であり、TMP が停止していなければ、スイッチが入らない。MC 2、SR 2 と赤ランプ (L １０) の関係は、油回転ポンプの場合と同じである。TMP を停止したければ、S 5 の押しボタンを押せば良い。TMP は、高速で回転する羽根で空気中の分子を真空槽から叩き出す装置であるが、羽根の加速にそれなりの時間が必要である。設計速度にまで回転数が上昇すると、７ー８に対応する電源回路内の接点が閉じて、リレー K 5 を励磁し、TMP NORMAL という緑ランプ (L 9) が点灯する。

真空ポンプが正常に働いている事は必要条件であるが、期待した真空が得られたかどうかは別問題である。そこで、真空の程度を監視する必要がある。もしも停電や何かの事故で真空が悪化するならば、相応の対策を施さねばならない。太線枠の上部に書かれた INTERLOCK 部に対応する ５ー１０の端子がこの機能に関係している。真空計の真空度が設定値よりも良ければ、５と６の端子は導通となり、リレー K 6 が励磁され、真空正常というリレーの接点情報として外部に知らせる。逆に何かの原因で真空が悪化すれば、接点９と１０が導通となる。従って、この接点を通じてブザーをならす様に設計する事も簡単に出来る。K 7 よりも右側の回路は、真空槽が更に別の真空槽と接続されていて、その両真空槽のあいだに設置されたバルブを開閉する時に、こちらの真空状態により、操作を制限したり、無条件に閉じたりする為の回路である。

ここで紹介した回路は、特に複雑な事はやっていないので、理解は困難ではないと思うが、外部に取り付けられたセンサーで重要と思われる、冷却水が流れているかどうかという部分に付いて説明を加えておこう。

冷却水を特定するパラメータとしては、水質・水温・流量といった概念が考えられる。それぞれを議論していたらそれなりに、大変な量となりそうである。先ず、水質は水道水程度という場合と、抵抗率が 1 $M\Omega\,cm$ 以上と指定する場合があるとしておこう。後者は、純水と呼ばれる事もあるし、イオン交換水と呼ばれる場合もある。被冷却系が水垢で詰まり、冷却効率が低下するのを嫌う場合に使用する。抵抗率が下がると、イオン電流による電蝕が問題となるので、1 $M\Omega\,cm$ よりも下がると問題とする場合が多い。もう一つ注意しておく事は、炭酸塩例えば炭酸カルシュウムの冷却水中濃度である。水温が上がると炭酸塩の溶解度は下がると言う、一般の物質とは温度依存性が逆であるので、冷却水中に含まれる炭酸塩は冷却すべき場所で析出する。この析出物は魚の鱗と同じくスケール (scale) と呼れ、熱伝導度が非常に低い。

ある種の炭酸塩では温度が上がると溶解度が下がるというのは事実であるが、だからすぐにスケールが付くと言うのは嘘だという説もある。各種の溶存イオンの影響があり、時には１０倍以上も溶解度が増える場合もあるという。

温度が高い部分を狙い打ちにして、冷却効率 (熱慣流係数と専門家は呼ぶ) と水流量を低下させる。珪酸塩にも注意が必要だと言う。

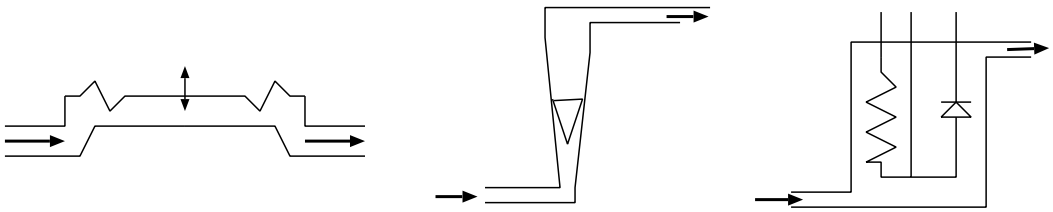
例えばカルシュウムイオンは、水の量を限定すればそこには有限の量しか含まないが、次々と新しい水を追加していくと、いくらでも補給される。従って、ある程度の水質を保証したい時には、水質を確認した水を循環使用するのが有利である。出来るだけ閉じ込めて、蒸発量を少なくし、外部からもゴミが入り込まない様な容器を使用するのが良いだろう。大きな水の循環系では、パイプ設置時のゴミが冷却水系に混入している可能性も

あるから、例えばサイクロン方式の様なゴミ排除系も考えておくのが良いだろう。大雑把なゴミ取りには ストレーナを使用すればよいが、流量が少なければ、目の細かいフィルターを使うのが良い。

次は流量の監視を考えよう。冷却水量は、被冷却系を通過した後の、即ち帰りの流量を(水温とともに) 個別の装置毎に監視すべきである。

従って、非常に多量の流量を一度に計測するのでなく、多量の計測値の和として流量を監視する事になる。

流量のセンサーが大切である。例えば次の様な工夫がありうる。



図では、太い矢印の方向に水が流れるとする。左の図は、細い線で矢印を付けた部分が、上下に運動できる膜で出来ている。水が流れると、この膜を上に押し上げるとすると、この膜の運動をを検出すると流量が確認出来そうである。使用経験から言うと、この方式は信頼性は低い。左側の圧力だけが上がり、右側では詰まっていたりバルブが閉じられていても膜は上へ上がってしまう。

中央の図のものは、下からの水の流れにより、三角形をした浮きが押し上げられる。この押し上げられた高さを読み取れば、流量が分かる仕掛けである。これはそれなりに信頼性がある。浮きの部分を目視出来る様にしてあると、本当に水が流れている事を確認出来るという安心感がある。この浮きの部分に磁石を仕込んでおき、外部に磁気に感ずるセンサーを置けば電子回路での検出も可能である。浮きの動きを静電容量の変化で検出しても良い。一方、以下の様な失敗も経験している。ある時、冷却水の温度が上がりすぎた。その結果、冷却水系で一番強度が不足しているこの流量計の透明部分が破壊された。

右側の装置の原理は少し変わっている。発熱体 (図では抵抗で示してある) と温度センサー (図では整流素子で示した) を組み込んである。もしも水量が不足するならば、水温が上がり、温度計で検出出来る。ひょっとすると、発熱体と温度計の部分を一つの部品で共用出来るかも知れない。この装置は、可動部分が一つも無いので、非常に長寿命に設計できる。２０年以上使用していても、故障の経験がない。一方、温度上昇の時定数が問題となる場合がある。即ち、使い始めには水温はいつも低いから、運転当初は水が流れていなくとも水が流れているという誤った判断を下す可能性がある。運転後１０分以上経過してから、何かがおかしいよと報告されると、このような性質の流量計で冷却水の状態を監視しているとの知識が無ければ、判断に迷ってしまう場合もあるだろう。

水道の流量計では、流路に羽根車が置かれていて、この羽根車の回転数を歯車式の計数器で読み取って表示している。この歯車の回転速度を、発光ダイオードとフォトトランジスタで計数する方式の流量計を使用した事がある。この方式はうまく働いていたが、ある時急にサイクロトロンが停止してしまった。回転速度を検出するフォトトランジスタの部分に、ブラインドの破れた部分を透過した夕日が射し込んだのが原因で、流量不足という情報が安全監視回路に送り込まれた為であった。

次は、冷却水を冷やす話をしなければならない。実験装置を冷やして来た冷却水はそ

のままでは、次の冷却水として環流させる訳にはいかない。

フレオン等の冷媒をコンプレッサーで圧縮し、この時の発熱を何らかの方法で別の媒体に転嫁する。例えば家庭用のエアコン装置では、放熱フィンに導き、風で放熱している。もっと大きな装置では、この部分を水で冷やし、その水は cooling tower で空気と混ぜて、一部の水を蒸発させその気化熱で残りの水を冷やしている。結局何らかの方法で、環境に熱を放散している。

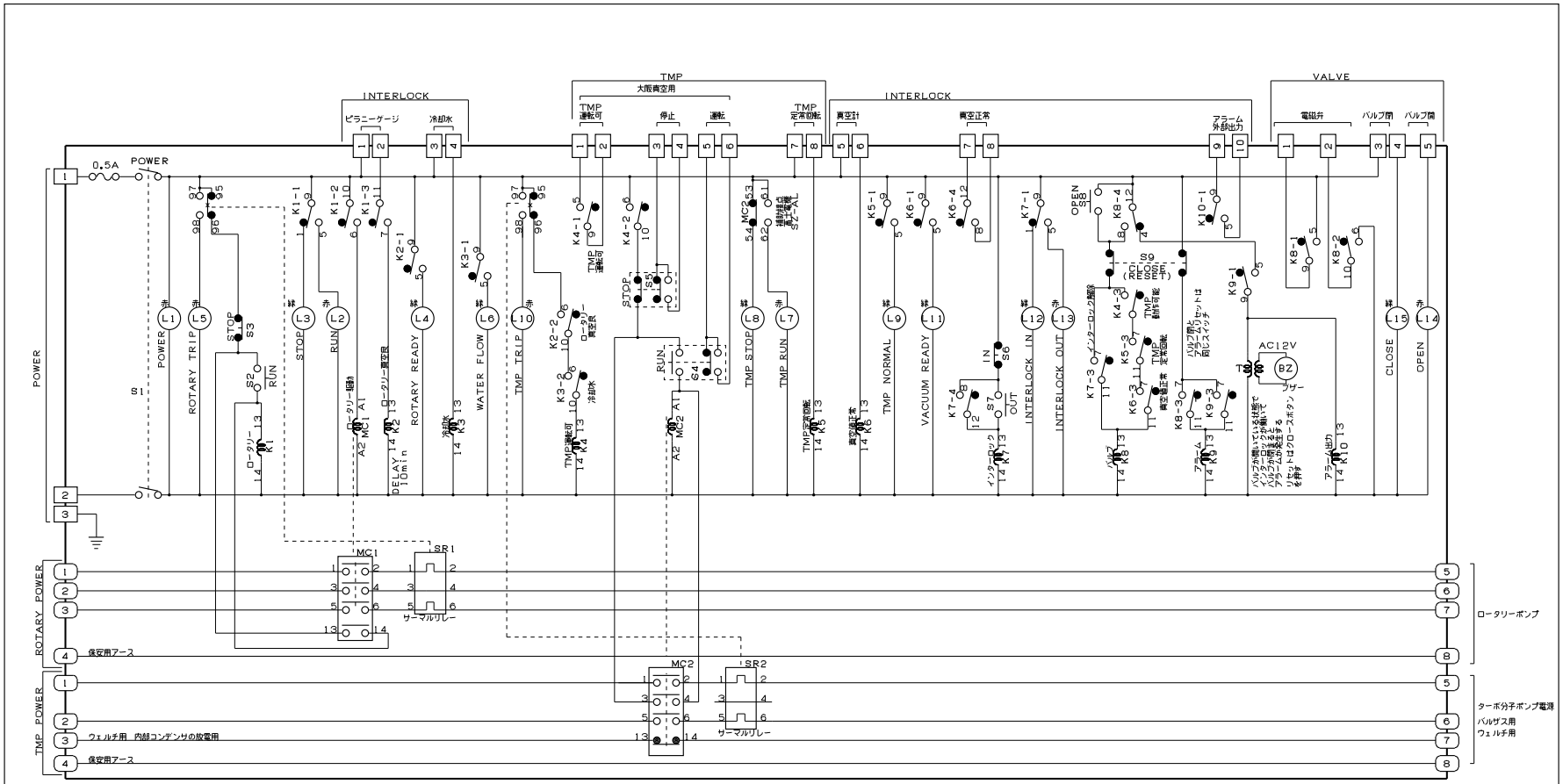
高圧のガスを細いノズルから気化又は膨張させてこの時の吸熱を冷却に利用する。この時、冷却水が冷やされる。口で言えば非常に簡単なシステムである。

このような冷却系での冷却能力の評価で見落とし勝ちなのが、冷却水を循環する為に使用するポンプの発熱である。冷却水を循環すると言う事は水に運動エネルギーを与えているという事であるから、このポンプによる発熱も、冷却能力の一部として勘定しておかねばならない。勿論、冷却水の配管の断熱や保温も考慮しなければならないが...。

小さな冷却系では、水道水を垂れ流す場合もあるだろう。ある時学生に、夜は水道の水圧が上がり気味になるから帰宅前には、流量を絞り気味にするように言っておいた。ところがこの学生は逆に少し流量を増やし加減にして帰宅した。次の日には何をせねばならなかったか、想像がつくだろう。雑布、モップとバケツの世話になった訳である。

水関係の話で、最期の御説教！

水・ガス・電気には、仮配線 (配管) は絶対にやってはいけない！



BZ	ブザー	オムロン	M2BJ-BH24D
T	トランス	豊浄電源機器	HT-1203
L4 L6 L9 L11	緑表示灯	オムロン	M2GJ-90A1-H1EG
L5 L10	赤表示灯	オムロン	M2GJ-90A1-H1ER
S1~S9	スイッチカバー	オムロン	A3BJ-5050
S6-L12 S9-L15 S3-L3 S5-L8	表示灯付スイッチ	オムロン	A3GJ-90C1-H1EG
S7-L13 S8-L14 S2-L2 S4-L7	表示灯付スイッチ	オムロン	A3GJ-90C1-H1ER
S1-L1	表示灯付スイッチ	オムロン	A3GJ-90D1-H1ER
	35mm支持レール		
	補助接点	富士電機	SZ-AL
MC2	電磁開閉器	富士電機	SC-03 AC100V 1b
MC1	電磁開閉器	富士電機	SC-03 AC100V 1a
SR1~SR2	サーマルリレー	富士電機	TR-0NH/A
	リレーソケット	オムロン	リレーソケット
K2	リレー	オムロン	H3Y-4 30min AC100V
K1 K3~K10	リレー	オムロン	MY4 AC100V

K1 ロータリーポンプ起動
K2 ロータリー正常動作 ピラニーゲージ接点信号より真空度良
K3 冷却水正常
K4 ターボ分子ポンプ運転可能 ロータリが正常運転し、かつ、冷却水が流れている
K5 ターボ分子ポンプ定常回転
K6 真空度良
K7 インターロック 作動/解除
K8 バルブ 開/閉
K9 アラーム用 バルブが開状態のときに自己ホールド その状態で、インターロックが働きバルブが閉まるとアラーム発生 CLOSEボタンで解除
K10 アラーム外部出力
MC1 ロータリーポンプ用電磁接触器
MC2 ターボ分子ポンプ用電磁接触器

		定格電流	抵抗負荷	誘導負荷
リレー	MY4 AC100V	12mA	250V 3A	250V 0.8A
電磁接触器	SC-03	突入95VA 保持 9VA	200V 20A	2.2kW
表示灯	M2GJ-90A1-H1ER	1.5mA		

12mAX10+95mAX2+1.5mAX9=323.5

筑波大学 加速器センター	作図		尺度
日付	1996年11月22日	ファイル名	VC1_0002
図面名称	排気系制御装置		