付 録B　k空間

B.1　フーリエ変換とk空間

実空間（日常的に関知できる空間）のパターンのフーリエ変換を行うと、実空間のパターンに含まれている波の成分 (波数) が求められる。例えば、$f(x) = \sin kx$ をフーリエ変換した $g(s)$ は、図 B.1 に示すように $s = k$ にのみ値を持つ関数となる。実空間のパターンは、実際の寸法で表されるており、同じ次元を持つのは波数 k ではなく波長 λ なのだけれど、三角関数の引数は波長の逆数に比例するので、波長成分ではなく、波数（もしくは周波数）成分に分解することが行われている。

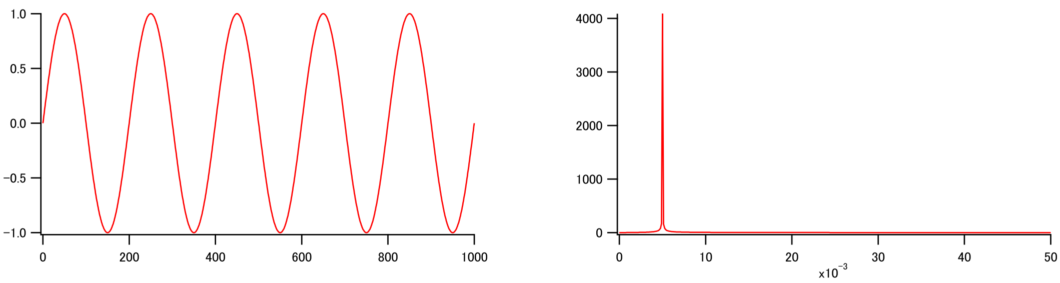

図 B.1: 周期 200 の正弦関数と、そのフーリエ変換。200 の逆数は 0.005 であり、フーリエ変換した逆空間 (k 空間) ではその値にのみ値をもつ状況になっている。右側の図の縦軸は、左側の実空間のパターンに含まれている周波数成分の相対的な強度を示すものになっている。

波の波長が 1/2 で周波数が 2 倍の $\sin 2kx$ という波をフーリエ変換すると変換後の関数は $s = 2k$ にのみ値を持つ関数となる。一方、 $\sin^2 kx$ のフーリエ変換を行うと、図 B.2 に示すように変換後には $s = 0, 2k$ に値を持つ結果が得られる。

この結果は、$\sin^2 kx = (1 - \cos 2kx)/2$ であり、正弦波の 2 乗は 2 倍周波数成分の他に、定数項を持っていることを反映したものである。

フーリエ変換した結果を横軸に s を取ってグラフ化したものを k 空間と呼んでいる。上の例では元の関数が 1 変数なので 1 次元の k 空間となっている。k 空間は実空間のパターンがどのような周波数成分で形成されているかを示すものである。k 空間の縦軸は、実空間の構造が含んでいる、その周波数成分の割合なので、どのような周期構造がら実空間の形状が形成されているかを直接的に見ることができる。例えば、図 B.3 は周期性を見つけるのが困難な波形であるが、それをフーリ

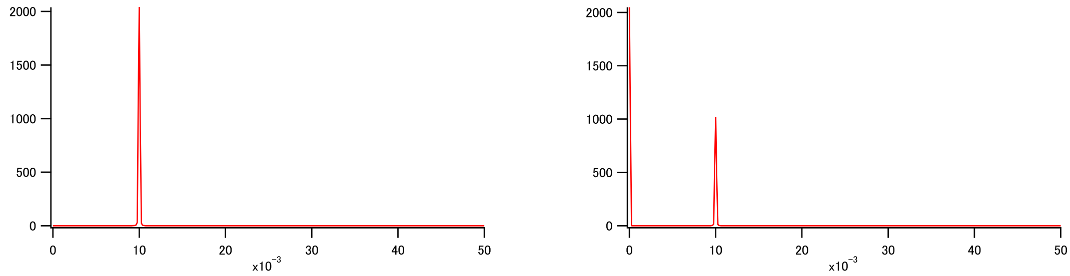

図 B.2: 周期 100 の正弦関数と、周期 200 の正弦関数を 2 乗した関数のフーリエ変換。両方とも周期性は 100 だが、2 乗した方のフーリエ変換では k=0 の成分も出現している。

エ変換して k 空間にプロットすると、たった三つの波の重ね合わせでできていることが明らかになる。

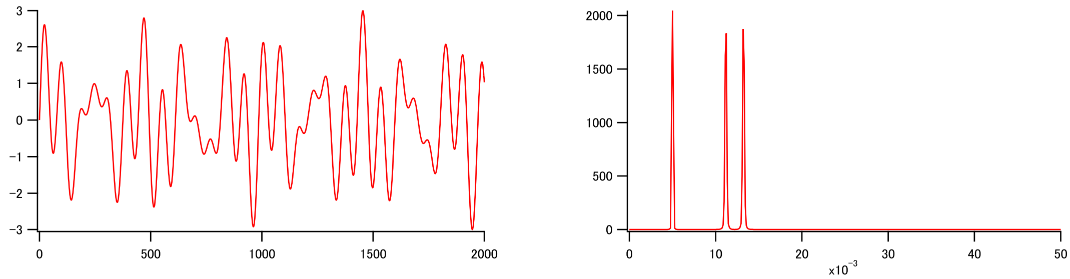

図 B.3: ある振動パターン（右）とそのフーリエ変換（左）。周期性のない振動パターンに見えるが、フーリエ変換すると 3 つの三角関数の和で作られていることが明らかになる。

続いて、ガウス関数とそのフーリエ変換像を示す（図 B.4)。

実空間では x=4000 付近に極大を持つ構造だが、フーリエ変換すると、いずれも k=0 に極大を持つ構造となっている。実は極大の位置を変えても、フーリエ変換は常に k=0 に極大を持つ構造となってしまう。これは、右のグラフでプロットされているのが、フーリエ変換の波数成分の大きさのみだからである。実空間の構造がどの場所で極大を持つかまでを示すためには、それぞれの波数成分の位相もきちんと考えてやる必要がある。たとえば、x=4000 でピークを持つ構造を作り出すためには、余弦関数をつかって、x=4000 で全ての位相が 0 もしくは 2π の整数倍になっているようにすればよい。x=0 で極大なら、もちろん、全ての余弦関数の位相が同じならよい。このため、実際にフーリエ変換をきちんとやれば、それぞれの波数毎の位相に関する情報を含んだもう一つのグラフが必要になる。ここでは、位相の成分は省いて、それぞれの波数の大きさのみのグラフを示している。

ガウス関数と周期的な関数が重畳したものでは、フーリエ変換後に重畳した周期関数の周期に極大をもつ分布となる。図 B.5 はガウス型関数×三角関数と、それをフーリエ変換したものである。

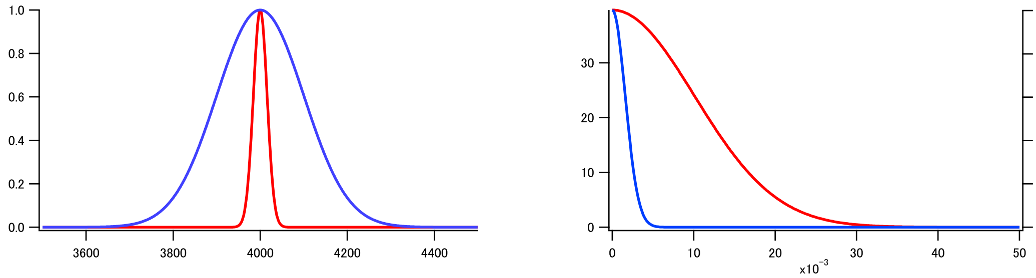

図 B.4: ガウス型関数とそのフーリエパターン。ガウス関数は非周期関数なので、そのフーリエ変換の波数成分は連続する要素を含む物になっている。実空間で幅が広い状態のフーリエ変換は含む波数の範囲が狭く、逆に実空間で幅が狭い場合には k 空間はより幅の広い分布になる。いずれの分布も **k=0** で最大になっていることに注意。

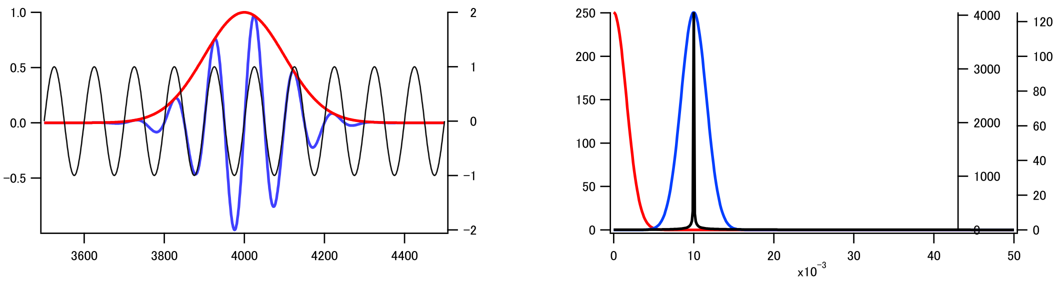

図 B.5: 単純なガウス関数のフーリエ変換は **k=0** に極大を持つ。単純な三角関数のフーリエ変換はある **k** の値に鋭いピークを持つ。両者掛け合わせた波打つガウス関数をフーリエ変換すると、三角関数の **k** 値の回りに分布をもつ結果となる。

B.2 回折とフーリエ変換

ここまでは、ほぼ数学的な話としてフーリエ変換を紹介してきたが、フーリエ変換が目に見られる物理的な実験がある。それは、波の回折である。

一つの例として回折格子（の断面）に対応するような周期構造を考える。図**??**の左側は割ととがった周期構造であるが、これは、正弦関数の 128 乗をプロットした物である[1]。それをフーリエ変換したのが右側である。右側をみると、k=0 のあとで周期的にピークが出ている。実は、このピークの構造は左側で示される回折格子に光を入れた場合の回折ピークに対応している。

こういう書き方をすると、1 次元回折格子の回折角は $D\sin\theta = n\lambda$ で与えられるので、n が 2 以上の高次の回折がでるのは当たり前と言われそうだけれども決してそんなことはなく、 図 B.2 にあるような三角関数の 2 乗になる回折格子があったなら、0 次の回折光（回折しないで直進する光）の他は、$n = \pm 1$ に相当する回折光のみ出現して、それより大きな絶対値の高次の回折光は存在しない。

スメクチック液晶と呼ばれる物質の X 線回折実験をすると、そのような実例に出会うことができる。スメクチック液晶の分子間隔は光の波長の 1/100 程度なので、普通の光は回折しないが、分子間距離程度の波長を持つ X 線を使うと、回折格子と同じように X 線の回折が起こる。その回折角度から物質中の粒子間距離を決められるのだけれど、スメクチック A やスメクチック C と呼ばれる液晶の X 線回折では層構造の層間隔に対応する 1 次の回折スポットは観察されるけれど、2 次以上の回折は観測されない。このことから、スメクチック A、C 相では層構造には揺らぎがあり、密度が三角関数的に変化していると理解されている。スメクチック液晶でも、より低温側に出現する固い相では高次の反射が現れるようになり、密度が矩形波的になっていくことが実験的に確かめられている。

[1]128 に意味は無い。この程度の大きさの偶数なら何でも良かった。奇数にすると、マイナスにも値が出てしまって、ちょっと面倒なことになる