

クーロンポテンシャルのフーリエ変換

クロメル@物理のかぎプロジェクト

2011-06-14

結構、有名な積分だと思います。ときどき解法を忘れてしまうので、自分用にメモです。

問題の積分は、

$$\begin{aligned}
 I &= \int \frac{e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{|\mathbf{r}|} d\mathbf{r} \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-i(k_x x + k_y y + k_z z))}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} dx dy dz
 \end{aligned} \tag{1}$$

式 (1) の第二行を見るとなんと物騒な積分ですが、この積分は次の極座標を用いれば簡単になります。

$$\begin{aligned}
 x &= r \sin \theta \cos \phi \\
 y &= r \sin \theta \sin \phi \\
 z &= r \cos \theta
 \end{aligned}$$

ちなみに $|\mathbf{r}| = r$ です。一応初めての方もいらっしゃると思うので、この変換のヤコビアン (ヤコビの行列式: 積分の微小体積要素の変換式) は、お馴染み (?) の

$$\begin{aligned}
 dx dy dz &= \begin{vmatrix} \frac{dx}{dr} & \frac{dx}{d\theta} & \frac{dx}{d\phi} \\ \frac{dy}{dr} & \frac{dy}{d\theta} & \frac{dy}{d\phi} \\ \frac{dz}{dr} & \frac{dz}{d\theta} & \frac{dz}{d\phi} \end{vmatrix} dr d\theta d\phi \\
 &= \begin{vmatrix} \sin \theta \cos \phi & r \cos \theta \cos \phi & -r \sin \theta \sin \phi \\ \sin \theta \sin \phi & r \cos \theta \sin \phi & r \sin \theta \cos \phi \\ \cos \theta & -r \sin \theta & 0 \end{vmatrix} dr d\theta d\phi \\
 &= (r^2 \sin^3 \theta \cos^2 \phi + r^2 \cos^2 \theta \sin \theta \cos^2 \phi \\
 &+ r^2 \sin^3 \theta \sin^2 \phi + r^2 \cos^2 \theta \sin \theta \sin^2 \phi) dr d\theta d\phi \\
 &= (r^2 \sin^3 \theta + r^2 \cos^2 \theta \sin \theta) dr d\theta d\phi \\
 &= r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi
 \end{aligned} \tag{2}$$

です。よって、

$$\begin{aligned}
 I &= \int \frac{e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{|\mathbf{r}|} d\mathbf{r} \\
 &= \int_0^{\infty} dr \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \frac{e^{-ikr \cos \theta}}{r} r^2 \sin \theta
 \end{aligned} \tag{3}$$

ここで、 $\cos \theta = t$ 、 $-\sin \theta d\theta = dt$ と変数変換すると、

$$\begin{aligned}
 I &= \int \frac{e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{|\mathbf{r}|} d\mathbf{r} \\
 &= \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} d\phi \left(\int_{-1}^1 r e^{-ikrt} dt \right) \\
 &= \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} d\phi \left[r \frac{e^{-ikrt}}{-ikr} \right]_{-1}^1 \\
 &= \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} d\phi \left[\frac{e^{-ikrt}}{ik} \right]_{-1}^1 \\
 &= \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} d\phi \frac{1}{ik} (e^{ikr} - e^{-ikr}) \\
 &= \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} d\phi \frac{2}{k} \sin(kr) \tag{4}
 \end{aligned}$$

ここでいかにも物理 (not 数学的な意味で) らしい手法を用います。 $\lim_{\delta \rightarrow 0} e^{-\delta r} (= 1)$ を被積分関数に掛けるのです。すると、無限遠での値が収束し、

$$\begin{aligned}
 I &= \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} d\phi \frac{1}{ik} e^{-\delta r} (e^{ikr} - e^{-ikr}) \\
 &= \int_0^{2\pi} d\phi \frac{1}{ik} \lim_{\delta \rightarrow 0} \left[\frac{e^{(ik-\delta)r}}{ik-\delta} - \frac{e^{(-ik-\delta)r}}{-ik-\delta} \right]_0^\infty \\
 &= \int_0^{2\pi} d\phi \frac{1}{ik} \lim_{\delta \rightarrow 0} \left[\frac{0-1}{ik-\delta} + \frac{0-1}{ik+\delta} \right] \\
 &= \int_0^{2\pi} d\phi \frac{1}{ik} \left(\frac{-2}{ik} \right) \\
 &= \int_0^{2\pi} d\phi \frac{2}{k^2} \\
 &= \frac{4\pi}{k^2} \tag{5}
 \end{aligned}$$

となります。よって、

$$\int \frac{e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{|\mathbf{r}|} d\mathbf{r} = \frac{4\pi}{k^2} \tag{6}$$

が言えました。

それでは今日はこの辺で、お疲れ様でした。