【問題】　3 次元空間の座標 (x, y, z) と原点との距離を r とするとき, 関数 $f(x, y, z) = \dfrac{1}{r}e^{-\lambda r}$ の 3 次元 Fourier 変換

$$F(k_1, k_2, k_3) = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\lambda r}}{r} e^{-i(k_1x_1+k_2x_2+k_3x_3)}dx_1dx_2dx_3$$

を求めよ，ただし k_1, k_2, k_3 は実数，λ は正の実数，i を虚数単位とする．

(R5 東京工業大学物質理工学院材料系)

【解答】　$\boldsymbol{k} = \begin{bmatrix} k_1 \\ k_2 \\ k_3 \end{bmatrix}$ とする．$\boldsymbol{k}$ に対し $\mathbb{R}^3$ の右手系である正規直交基底 $(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3)$ $\left(\boldsymbol{e}_3 = \dfrac{1}{\|\boldsymbol{k}\|}\boldsymbol{k}\right)$ をとり，$\boldsymbol{e}_j = \begin{bmatrix} g_{1j} \\ g_{2j} \\ g_{3j} \end{bmatrix}$, $g = [g_{ij}]$ と置けば g は行列式が 1 となる直交行列になる．更に $y_j = g_{1j}x_1 + g_{2j}x_2 + g_{3j}x_3$ $(j = 1, 2, 3)$ と置く．このとき $x_i = g_{i1}y_1 + g_{i2}y_2 + g_{i3}y_3$ $(i = 1, 2, 3)$ であり，

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x} =& k_1(g_{11}y_1 + g_{12}y_2 + g_{13}y_3) + k_2(g_{21}y_1 + g_{22}y_2 + g_{23}y_3) + k_3(g_{31}y_1 + g_{32}y_2 + g_{33}y_3) \\
=& (k_1g_{11} + k_2g_{21} + k_3g_{31})y_1 + (k_1g_{12} + k_2g_{22} + k_3g_{32})y_2 + (k_1g_{13} + k_2g_{23} + k_3g_{33})y_3 \\
=& (\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}_1)y_1 + (\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}_2)y_2 + (\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}_3)y_3 = \|\boldsymbol{k}\|y_3.
\end{aligned}$$

また $dy_1dy_2dy_3 = \det(g)dx_1dx_2dx_3 = dx_1dx_2dx_3$ だから

$$F(k_1, k_2, k_3) = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\lambda r}}{r} e^{-i\|\boldsymbol{k}\|y_3}dy_1dy_2dy_3$$

ここで球面極座標 $y_1 = r\sin\theta\cos\phi,\ y_2 = r\sin\theta\sin\phi,\ y_3 = r\cos\theta$ $(0 \leq r < \infty,\ 0 \leq \theta \leq \pi,\ 0 \leq \phi \leq 2\pi)$ に変換すれば

$$\begin{aligned}
F(k_1, k_2, k_3) =& \int_0^{\infty}\left(\int_0^{\pi}\left(\int_0^{2\pi} \frac{e^{-\lambda r}}{r} e^{-i\|\boldsymbol{k}\|r\cos\theta} r^2\sin\theta d\phi\right)d\theta\right)dr \\
=& 2\pi\int_0^{\infty} re^{-\lambda r}\left(\int_0^{\pi} e^{-i\|\boldsymbol{k}\|r\cos\theta}\sin\theta d\theta\right)dr \\
=& 2\pi\int_0^{\infty} re^{-\lambda r}\left[\frac{1}{i\|\boldsymbol{k}\|r}e^{-i\|\boldsymbol{k}\|r\cos\theta}\right]_0^{\pi}dr \\
=& \frac{2\pi}{i\|\boldsymbol{k}\|}\int_0^{\infty}(e^{-(\lambda-i\|\boldsymbol{k}\|)r} - e^{-(\lambda+i\|\boldsymbol{k}\|)r})dr \\
=& \frac{2\pi}{i\|\boldsymbol{k}\|}\left[\frac{e^{-(\lambda-i\|\boldsymbol{k}\|)r}}{-(\lambda-i\|\boldsymbol{k}\|)} - \frac{e^{-(\lambda+i\|\boldsymbol{k}\|)r}}{-(\lambda+i\|\boldsymbol{k}\|)}\right]_0^{\infty} \\
=& \frac{2\pi}{i\|\boldsymbol{k}\|}\left[-\frac{(\lambda+i\|\boldsymbol{k}\|)e^{-(\lambda-i\|\boldsymbol{k}\|)r}}{\lambda^2+\|\boldsymbol{k}\|^2} + \frac{(\lambda-i\|\boldsymbol{k}\|)e^{-(\lambda+i\|\boldsymbol{k}\|)r}}{\lambda^2+\|\boldsymbol{k}\|^2}\right]_0^{\infty} \\
=& \frac{2\pi}{i\|\boldsymbol{k}\|}\left[\frac{(\lambda-i\|\boldsymbol{k}\|)e^{-(\lambda+i\|\boldsymbol{k}\|)r} - (\lambda+i\|\boldsymbol{k}\|)e^{-(\lambda-i\|\boldsymbol{k}\|)r}}{\lambda^2+\|\boldsymbol{k}\|^2}\right]_0^{\infty}
\end{aligned}$$

λ は正の定数だから $|e^{-(\lambda\pm i\|\boldsymbol{k}\|)r}| = e^{-\lambda r} \to 0$ $(r \to \infty)$.

$$\therefore \qquad F(k_1, k_2, k_3) = \frac{2\pi}{i\|\boldsymbol{k}\|}\frac{-(\lambda-i\|\boldsymbol{k}\|)+(\lambda+i\|\boldsymbol{k}\|)}{\lambda^2+\|\boldsymbol{k}\|^2} = \frac{4\pi}{\lambda^2+\|\boldsymbol{k}\|^2}$$

□