フーリエ変換

金谷一朗

2006 年 10 月 20 日

1　ベクトル

ベクトル空間 $\mathbb{V}$ があるとする．ベクトル空間の元，すなわちベクトルを $\boldsymbol{a} \in \mathbb{V}$ と書くことにする．

空でない集合 $\mathbb{V}$ が次の性質を持つとき，これをベクトル空間（複素ベクトル空間，複素線形空間）と呼ぶ．

- 任意の $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \in \mathbb{V}$ に対して和 $\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b} \in \mathbb{V}$ がただ一つ存在し，次の性質を満たす．
  1. 任意の $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \in \mathbb{V}$ に対して $\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b} = \boldsymbol{b} + \boldsymbol{a}$
  2. 任意の $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{c} \in \mathbb{V}$ に対して $\boldsymbol{a} + (\boldsymbol{b} + \boldsymbol{c}) = (\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b}) + \boldsymbol{c}$
  3. 任意の $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \in \mathbb{V}$ に対して $\boldsymbol{a} + \boldsymbol{c} = \boldsymbol{b}$ となる元 $\boldsymbol{c} \in \mathbb{V}$ が存在する
- 任意の元 $\boldsymbol{a} \in \mathbb{V}$ と任意の複素数 $\alpha \in \mathbb{C}$ に対して元 $\alpha\boldsymbol{a} \in \mathbb{V}$ がただ一つ存在し，次の性質を満たす．
  1. 任意の $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \in \mathbb{V}$ と任意の複素数 $\alpha \in \mathbb{C}$ に対して $\alpha(\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b}) = \alpha\boldsymbol{a} + \alpha\boldsymbol{b}$
  2. 任意の $\boldsymbol{a} \in \mathbb{V}$ と任意の複素数 $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ に対して $(\alpha + \beta)\boldsymbol{a} = \alpha\boldsymbol{a} + \beta\boldsymbol{a}$
  3. 任意の $\boldsymbol{a} \in \mathbb{V}$ と任意の複素数 $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ に対して $(\alpha\beta)\boldsymbol{a} = \alpha(\beta\boldsymbol{a})$
  4. 任意の $\boldsymbol{a} \in \mathbb{V}$ に対して $1\boldsymbol{a} = \boldsymbol{a}$

$\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ をベクトル，α, β をスカラと呼ぶ．

2　ブラ・ケット

ベクトルには常にふたつの「表情」がある．ひとつめをブラと呼び，ふたつめをケットと呼ぶ．ふだんはブラとケットを区別しないことが多いが，これからはブラとケットを区別する．まず，ベクトル $\boldsymbol{a} \in \mathbb{V}$ があったとき，対応するブラを $\langle a|$ と書き，対応するケットを $|a\rangle$ と書くことにする．ブラとケットは常に対として存在する．ベクトルという用語は，ブラとケットを区別しなくてよい文脈か，ブラかケットのどちらであるかが自明である文脈で用いられる．

ベクトル空間 $\mathbb{V}$ の次元を $N \in \mathbb{N}$（$\mathbb{N}$ は自然数）とする．ベクトル空間 $\mathbb{V}$ の任意の基底ケット（要するに基底ベクトル）を $|1\rangle, |2\rangle, \ldots, |N\rangle$ とする．任意のケット $|a\rangle \in \mathbb{V}$ は

$$|a\rangle = \sum_{i=1}^{N} a_i |i\rangle,\ a_i \in \mathbb{C} \tag{1}$$

で一義に決まる n 個の複素量 a_i を持つ．量 a_i をケット $|a\rangle$ の成分と呼ぶ．

3　内積

ブラとケットの積—ブラケット—をベクトル $\boldsymbol{a}$ とベクトル $\boldsymbol{b}$ の内積とする．

ベクトル空間 $\mathbb{V}$ の任意の元 $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \in \mathbb{V}$ に次の性質を満たす複素数 $\langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \rangle \in \mathbb{C}$ が定義されるとき，それを内積と呼ぶ．

1. 任意の $\boldsymbol{a} \in \mathbb{V}$ に対して $\langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{a} \rangle \in \mathbb{R}$ かつ $\langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{a} \rangle \geq 0$．等号成立は $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{0}$ のときのみ．
2. 任意の $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \in \mathbb{V}$ に対して $\langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \rangle = \langle \boldsymbol{b}, \boldsymbol{a} \rangle^*$
3. 任意の複素数 $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ と任意の $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{c} \in \mathbb{V}$ に対して $\langle \alpha\boldsymbol{a} + \beta\boldsymbol{b}, \boldsymbol{c} \rangle = \alpha\langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{c} \rangle + \beta\langle \boldsymbol{b}, \boldsymbol{c} \rangle$

$\langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \rangle = 0$ のときベクトル $\boldsymbol{a}$ とベクトル $\boldsymbol{b}$ は直交するといい，$\sum_i a_i b_i = 0$ のときベクトル $\boldsymbol{a}$ とベクトル $\boldsymbol{b}$ は直角であるという．

ブラ $\langle a|$ とケット $|a\rangle$ の成分 a_i の関係を

$$\langle a| = \sum_{i=1}^{N} \langle i| {a_i}^* \tag{2}$$

と定義してみる．すると，

$$\langle a|b\rangle = \left(\sum_i \langle i| {a_i}^*\right)\left(\sum_j b_j |j\rangle\right) \tag{3}$$

$$= \sum_i \sum_j {a_i}^* b_j \langle i|j\rangle \tag{4}$$

であるから，ブラケット $\langle i|j\rangle$ の値さえどうにか決まれば，$\langle a|b\rangle$ はベクトル $\boldsymbol{a}$ とベクトル $\boldsymbol{b}$ の内積の条件を満たしていることになる．そこでブラケット $\langle a|b\rangle$ をベクトル $\boldsymbol{a}$ とベクトル $\boldsymbol{b}$ の内積とする．

幸い，$\langle i|j\rangle$ は任意に選ぶことができる．最もよく使われる定義は

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij} \tag{5}$$

である．（δ_{ij} はクロネッカーのデルタ記号である．）このとき，

$$\langle a|b\rangle = \sum_i {a_i}^* b_i; \quad (\langle i|j\rangle = \delta_{ij}) \tag{6}$$

である．$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$ と定義することを，「座標系に正規直交座標系を選ぶ」という．また $\langle i|j\rangle$ は「計量テンソル」と呼ばれることがある．

もし $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$ を認めるならば

$$a_i = \langle i|a\rangle = \langle a|i\rangle^*; \quad (\langle i|j\rangle = \delta_{ij})$$

である．

内積 $\langle a|b\rangle$ は座標系に依存しない（基底ベクトルに依存しない）量である．すなわち内積はスカラーである．そこで，一般に

$$\langle a|b\rangle = \sum_i \langle a|i\rangle\langle i|b\rangle \tag{7}$$

であるが，和記号を省略して（この省略は「アインシュタインの規約」の拡大解釈である），

$$\langle a|b\rangle = \langle a|i\rangle\langle i|b\rangle \tag{8}$$

と書くことにしよう．上式から $\langle a|$ を取り去る．

$$|b\rangle = |i\rangle\langle i|b\rangle \tag{9}$$

上式から $|b\rangle$ も取り去る．

$$|= |i\rangle\langle i| \tag{10}$$

この関係はきわめて重要である．

4　ノルム

ベクトル（ブラでもケットでもよい）$\boldsymbol{a}$ のノルムを $\|\boldsymbol{a}\|$ で表すことにする．

ベクトル $\boldsymbol{a}$ のノルム $\|\boldsymbol{a}\|$ とは次の条件を満たす非負の実数のことである．

1. $\|\boldsymbol{a}\| \geq 0;\ \|\boldsymbol{a}\| = 0 \Leftrightarrow \boldsymbol{a} = \boldsymbol{0}$
2. $\|\alpha\boldsymbol{a}\| = |\alpha| \cdot \|\boldsymbol{a}\|;\ \alpha \in \mathbb{R}$
3. $\|\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b}\| \leq \|\boldsymbol{a}\| + \|\boldsymbol{b}\|$
4. $\|\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b}\| \leq \|\boldsymbol{a}\| \cdot \|\boldsymbol{b}\|$

ここで，

$$\|\boldsymbol{a}\| = \langle a|a\rangle \tag{11}$$

と定義しよう．このようにして決められた $\|\boldsymbol{a}\|$ はベクトル $\boldsymbol{a}$ のノルムとしての役割を果たす．$|\boldsymbol{a}| = \sqrt{\|\boldsymbol{a}\|}$ はベクトルの長さ（1-ノルム）と呼ばれ，よく使われる．

後で見るように，ベクトルのノルムを不変に保つ演算を回転演算と呼ぶ．

5　線形演算子

ケット $|a\rangle \in \mathbb{V}$ がとある写像 $\mathcal{T}$ によってケット $|b\rangle \in \mathbb{V}$ になることを，

$$\mathcal{T} : |a\rangle \mapsto |b\rangle \tag{12}$$

と書く．特に写像 $\mathcal{T}$ が線形写像の場合，特別に $\mathcal{T}$ を $\hat{T}$ と書き，次のように書く．

$$|b\rangle = \hat{T}|a\rangle \tag{13}$$

$\hat{T}$ と書くのは，それが演算子であることを忘れないようにするためである．$\hat{T}$ は線形演算子（線形作用素）と呼ばれる．

ベクトル $\boldsymbol{a} \in \mathbb{V}$ に対してある操作 $\hat{T}$ を施すとベクトル $\boldsymbol{b} \in \mathbb{V}$ になることを $\boldsymbol{b} = \hat{T}\boldsymbol{a}$ と表し，$\hat{T}$ を演算子（作用素）と呼ぶ．演算子 $\hat{T}$ が任意のベクトル $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \in \mathbb{V}$，任意の複素数 $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ に対して

$$\hat{T}(\alpha\boldsymbol{a} + \beta\boldsymbol{b}) = \hat{T}(\alpha\boldsymbol{a}) + \hat{T}(\beta\boldsymbol{b}) = \alpha\hat{T}\boldsymbol{a} + \beta\hat{T}\boldsymbol{b}$$

を満たすとき，演算子 $\hat{T}$ を線形演算子と呼ぶ．

ケットについて $|b\rangle = \hat{T}|a\rangle$ のとき，対応するブラについても

$$\langle b| = \langle a|\hat{T}^\dagger \tag{14}$$

となるような演算子 $\hat{T}^\dagger$ を考えることができる．恒等演算子（つまり 1）を除けば，$\hat{T} \neq \hat{T}^\dagger$ である[*1]．

[*1] ただし $\langle i|\hat{T}|j\rangle = \langle j|\hat{T}^\dagger|i\rangle^*$ である．

線形演算子 $\hat{A}$ に対して $\hat{A}|a\rangle = \alpha|a\rangle$ を満たす $\alpha \in \mathbb{C}$ を固有値，$|a\rangle \in \mathbb{V}$ を固有ケット（固有ベクトル）と呼ぶ．一般に固有ケットは複数個あるので，添え字 i を使って

$$\hat{A}|a_i\rangle = \alpha_i|a_i\rangle \tag{15}$$

と書くことがある．

演算子，固有値，固有ベクトルに別々の文字を割り当てる必要はない．例えば，演算子 $\hat{A}$ の固有値を A，固有ベクトルを $|A\rangle$ とすれば $\hat{A}|A\rangle = A|A\rangle$ と書ける．この表記法は，演算子 $\hat{A}$ が，演算子 $\hat{A}$ の固有空間では単なる数値（または対角行列）になる（例えば伝達関数はその固有空間である波数領域では対角化される）ことを明示している．

6　回転演算子

線形演算子 $\hat{T}$ によってケット $|a\rangle$ が $|b\rangle$ に変換されるとする．このとき，$\|\boldsymbol{a}\| = \|\boldsymbol{b}\|$ であるならば（すなわち $\langle a|a\rangle = \langle b|b\rangle$ であるならば），線形演算子 $\hat{T}$ は特別に回転演算子と呼ばれる．

いま，

$$|b\rangle = \hat{T}|a\rangle \tag{16}$$

とする．内積 $\langle b|b\rangle$ は

$$\langle b|b\rangle = \langle a|\hat{T}^\dagger|\hat{T}|a\rangle \tag{17}$$

$$= \hat{T}^\dagger\hat{T}\langle a|a\rangle \tag{18}$$

であり，回転演算の条件は $\langle a|a\rangle = \langle b|b\rangle$ であったから，回転演算子 $\hat{T}$ と，対になる回転演算子 $\hat{T}^\dagger$ の関係は

$$\hat{T}^\dagger\hat{T} = 1 \tag{19}$$

でなければならない．すなわち，回転演算子 $\hat{T}$ は

$$\hat{T}^\dagger = \hat{T}^{-1} \tag{20}$$

でなければならない．上式の関係を満たす演算子はユニタリ演算子とも呼ばれる．

7　フーリエ変換

状態（状態ベクトル）$\boldsymbol{f}$ を独立変数 x で表すことを，

$$\langle x|f\rangle \tag{21}$$

と書く（複素量 $\langle x|f\rangle$ はしばしば $\boldsymbol{f}(x)$ と書かれる）．

複素量 $\langle x|f\rangle$ とは，状態 $|f\rangle$ を基底ベクトル $\langle 1|, \langle 2|, \ldots, \langle x|, \ldots, \langle N|$ で展開したときの係数である．

状態 f は以下の操作によって異なる独立変数 k で表示することができる．

$$\langle k|f\rangle = \langle k|x\rangle\langle x|f\rangle \tag{22}$$

ここに，関係 $|= |x\rangle\langle x|$ を用いた．

拡大解釈したアインシュタインの規約に基づいて，本稿では $|x\rangle\langle x|$ のように同じ変数 x が 2 回登場したときは変数 x について積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle\langle x|dx$$

をとるものと約束する．式 (22) は

$$\langle k|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle k|x\rangle\langle x|f\rangle dx$$

を簡略化して表記したものである．

1 次元フーリエ変換は，基底ベクトル $\langle x|$ として空間（時間）領域 $-\infty < \xi < \infty$ における位置 $\xi = x$ のインパルスすなわち $\langle \xi|x\rangle = \delta(\xi - x)$ を，基底ベクトル $\langle k|$ として空間（時間）領域全体にわたり振幅が一定で波数が k の波すなわち $\langle \xi|k\rangle = \exp(2\pi \boldsymbol{i} k\xi)$ を仮定する．故に

$$\langle x|k\rangle = \langle x|\xi\rangle\langle \xi|k\rangle \tag{23}$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} \langle \xi|x\rangle^* \langle \xi|k\rangle d\xi \tag{24}$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\xi - x) \exp(2\pi \boldsymbol{i} k\xi) d\xi \tag{25}$$
$$= \exp(2\pi \boldsymbol{i} kx) \tag{26}$$

である．

1 次元フーリエ変換は次のように具象化できる．

$$f(k) = \langle k|f\rangle \tag{27}$$
$$= \langle k|x\rangle\langle x|f\rangle \tag{28}$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} \langle x|k\rangle^* \langle x|f\rangle dx \tag{29}$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-2\pi \boldsymbol{i} kx) f(x) dx \tag{30}$$

線形演算子 $\hat{T}$ によって，ケット $|f\rangle$ が

$$|g\rangle = \hat{T}|f\rangle \tag{31}$$

という変換を受けるとする．ところが，演算子 $\hat{T}$ の固有ベクトルが $|k\rangle$ であったとしよう．すなわち

$$\hat{T}|k\rangle = T_k|k\rangle \tag{32}$$

であるとする．このとき，

$$|g\rangle = \hat{T}|f\rangle \tag{33}$$
$$= \hat{T}|k\rangle\langle k|f\rangle \tag{34}$$
$$= T_k|k\rangle\langle k|f\rangle \tag{35}$$

と変形できる．

工学の問題では，

$$|g\rangle = \hat{T}|x\rangle\langle x|f\rangle \tag{36}$$

を解きたい場合が数多くある．この問題は，上式を次のように変形すれば容易に解ける．

$$|g\rangle = \hat{T}|k\rangle\langle k|f\rangle \tag{37}$$
$$= T_k|k\rangle\langle k|f\rangle \tag{38}$$

8　2次元フーリエ変換

状態 f がふたつの独立変数 x, y で表されることを

$$\langle x, y|f\rangle \tag{39}$$

と書く．表示 $\langle k, l|f\rangle$ は次式で求められる．

$$\langle k, l|f\rangle = \langle k, l|x, y\rangle\langle x, y|f\rangle \tag{40}$$

2次元フーリエ変換では，独立変数 x, y と k, l の間に次の関係を要求する．

$$\langle k, l|x, y\rangle = \exp(-\boldsymbol{i}kx)\exp(-\boldsymbol{i}ly) \tag{41}$$

2次元フーリエ変換は次のように具象化できる．

$$\begin{aligned} f(k, l) &= \langle k, l|f\rangle && (42)\\ &= \langle k, l|x, y\rangle\langle x, y|f\rangle && (43)\\ &= \iint_{-\infty}^{\infty}\langle k, l|x, y\rangle\langle x, y|f\rangle dxdy && (44)\\ &= \iint_{-\infty}^{\infty}\exp(-\boldsymbol{i}kx)\exp(-\boldsymbol{i}ly)f(x, y)dxdy && (45)\end{aligned}$$

9　球面調和変換

状態 f が（平面ではなく）球面上のふたつの独立変数 θ, ϕ によって表されることを

$$\langle \theta, \phi|f\rangle \tag{46}$$

と書く．表示 $\langle k, m|f\rangle$ は次式で求められる．

$$\langle k, m|f\rangle = \langle k, m|\theta, \phi\rangle\langle \theta, \phi|f\rangle \tag{47}$$

ただし，変数 θ, ϕ は球面上にあるので，積分に気をつけなければならない．

積分は次のようになる．球面上の変数 θ を天頂角（ゼニス），ϕ を方位角（アジマス）とすると，

$$|\theta, \phi\rangle\langle \theta, \phi| = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}|\theta, \phi\rangle\langle \theta, \phi|d\theta\wedge d\phi = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}|\theta, \phi\rangle\langle \theta, \phi|\sin\theta d\theta d\phi$$

である．

球面調和変換では，天頂角 θ，方位角 ϕ，次数 k，位相 m の球面調和関数を $Y_{km}(\theta, \phi)$ とすると

$$\langle k, m|\theta, \phi\rangle = Y_{km}(\theta, \phi) \tag{48}$$

である．ただし，

$$0 \le \theta < 2\pi,\ 0 \le \phi < \pi \tag{49}$$

であり，

$$k, m \in \mathbb{Z} \quad \text{and} \quad 0 \le k,\ -m \le k \le m \tag{50}$$

である．（積分区間が有限であるため，変数 k, m は離散値をとる．これはフーリエ級数展開と同じ事情である．）

付録 A　量子力学とフーリエ変換

量子力学によれば，物理量とは物理量作用素（演算子）の固有値のことである．そこで，位置 x，波数 k に対応する作用素として，位置作用素 $\hat{x}$，波数作用素 $\hat{k}$ を考える．ここに量子力学では

$$[\hat{x}, \hat{k}] = \boldsymbol{i}$$

を要求する．

作用素 $\hat{x}$ の固有ベクトルを基底ベクトルにとると

$$\hat{x} = x$$

である．（作用素 $\hat{x}$ の基底ベクトルはインパルスで，固有値は連続値をとる．）このとき

$$\hat{k} = -\boldsymbol{i}\frac{\partial}{\partial x}$$

である．これは次のようにして確認できる．

$$\begin{aligned}
[\hat{x}, \hat{k}]\psi(x) &= -\boldsymbol{i}\left(x\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}x\right)\psi(x) \\
&= -\boldsymbol{i}\left(x\frac{\partial}{\partial x}\psi(x) - \frac{\partial}{\partial x}x\psi(x)\right) \\
&= -\boldsymbol{i}\left(x\frac{\partial}{\partial x}\psi(x) - \left(\psi(x) + x\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\right)\right) \\
&= \boldsymbol{i}\psi(x)
\end{aligned}$$

ここで

$$\hat{k}\langle x|k\rangle = \langle x|\hat{k}|k\rangle = \langle x|k|k\rangle = k\langle x|k\rangle$$

ゆえ微分方程式

$$\hat{k}\langle x|k\rangle = k\langle x|k\rangle$$

または同じ意味の

$$-\boldsymbol{i}(\partial/\partial x)\langle x|k\rangle = k\langle x|k\rangle$$

を解いて

$$\langle x|k\rangle = \exp(2\pi\boldsymbol{i}kx)$$

を得る．