

構造化学配布資料 第 4 回 2025 年 5 月 9 日（金）

8. 波の表現

前節の式 7-12 の第 1 項 $\cos(\omega t + kx)$ を検討する． $U_1(x, t) = \cos(\omega t + kx)$ とする． ある特定の位置，たとえば $x=0$ での時間変化は

$$U_1(0, t) = \cos \omega t \quad 8-1$$

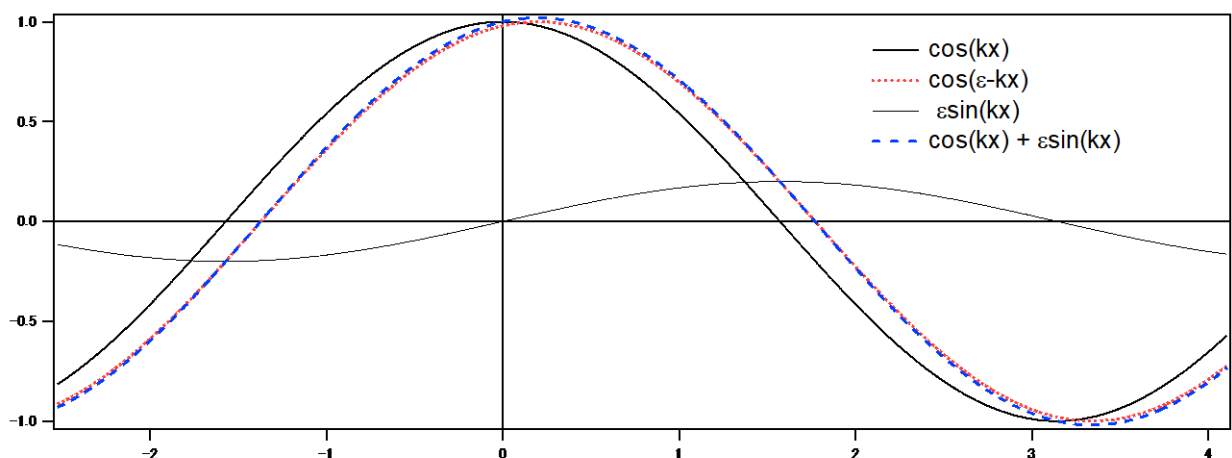
となる． また， ある特定の時刻， たとえば $t=0$ での座標に対する変化は

$$U_1(x, 0) = \cos kx \quad 8-2$$

となる． $t=\varepsilon/\omega$ （ただし ε は 1 に比べて小さな正の数）では，

$$U_1\left(x, \frac{\varepsilon}{\omega}\right) = \cos(\varepsilon + kx) \quad 8-3$$

となる． $U_1(x, t) = \cos(\omega t + kx)$ は， $\cos kx$ が x 軸の負の方向に $\frac{\omega}{k}t$ だけずれた形をしている． 時間が経つと負の方向に動くのであるから， $\cos(\omega t + kx)$ は負の方向に進行する波を表現している． 同様に， $\cos(\omega t - kx)$ は正の方向に進行する波を表現している．



正の方向に進行する波である $\cos(\varepsilon - kx)$ についてももう少し議論する． ε が 1 に比べて十分に小さいという条件で式 3-4 と式 3-5 を使うと，

$$\begin{aligned} \cos(\varepsilon - kx) &= \cos \varepsilon \cos kx + \sin \varepsilon \sin kx \\ &= \cos kx + \varepsilon \sin kx \end{aligned} \quad 8-4$$

となる． 式 8-4 の近似式を $\varepsilon=0.2$ の条件で計算してみると， 上のグラフのようになる． 式 8-4 はかなりよい近似になっているのがわかる．

偏微分方程式

$$\frac{\partial^2(T(t))}{\partial t^2} = -\omega^2 T(t) \quad 7-4$$

の解として,

$$T(t) = A_t \cos(\omega t) \quad 7-6$$

ではなく,

$$T_c(t) = A_c \exp(i\omega t) \quad 8-5$$

を考えることもできる. 式 8-5 も確かに式 7-4 を満たす.

数学的な取扱いが容易になるので, しばしば波動方程式の解を三角関数ではなく, 式 8-5 のような複素数の指数関数で表す. しかし, 多くの場合, 波動方程式の解である $U(x, t)$ には実数であることが要求される. たとえば, 電磁波における電場の大きさは実数である. $U(x, t)$ が実数である場合は, 波動方程式の解 8-5 で意味を持つのはその実部

$$\text{Re}(T_c(t)) = \frac{1}{2}(T_c(t) + T_c(t)^*) \quad 8-6$$

である. $T_c(t) = \exp(i\omega t)$ の場合は

$$\text{Re}(\exp(i\omega t)) = \frac{1}{2}(\exp(i\omega t) + \exp(-i\omega t)) = \cos \omega t \quad 8-7$$

となる. 複素数を使って波動方程式を解くときは, 多くの場合に(暗黙の了解として)意味があるのは解の実部であると考えている. あるいは, $+c.c.$ という項を補って考えている.

9. フーリエ変換

フーリエ変換 (Fourier Transform) という数学操作がある. フーリエ変換型赤外分光光度計 (FTIR) で有名かもしれない. フーリエ変換は, たとえば

$$F(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \exp(-i\omega t) dt \quad 9-1$$

と表現される (いくつかの方法がある). ω は角周波数あるいは角振動数であり, 周波数の 2π 倍である. 逆変換は

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) \exp(i\omega t) d\omega \quad 9-2$$

である. 式 9-1 は, t の関数である $f(t)$ をフーリエ変換すると, ω の関数である $F(\omega)$ が得られることを示している. t について積分するので, t は変数として残らない.

オイラーの公式から得られる

$$\exp(-i\omega t) = \cos \omega t - i \sin \omega t \quad 9-3$$

を使うと、式 9-1 は

$$F(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\int_{-\infty}^{\infty} f(t) \cos \omega t dt - i \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \sin \omega t dt \right) \quad 9-4$$

となる。 $\cos \omega t$ は偶関数、 $\sin \omega t$ は奇関数だから、 $f(t)$ が実関数だとすると、 $f(t)$ が偶関数のときは式 9-4 の右辺第 2 項がゼロ、 $f(t)$ が奇関数のときは式 9-4 の右辺第 1 項がゼロとなる。

以下では、簡単のために、 $f(t)$ が実の偶関数であるとする。このとき、フーリエ変換は

$$F(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \cos \omega t dt \quad 9-5$$

となる。改めてこの式を見ると、右辺の被積分関数は、 $f(t)$ に $\cos \omega t$ をかけたものである。 t について積分してしまうので、 ω のみがパラメータとして残る。それゆえ、左辺の引数が ω となっている。右辺は、あらゆる ω について積分を計算して、その結果をそれぞれの ω について報告している。

時間に依存する関数 $f(t)$ がいろいろな角周波数の波の重ね合わせであるとする。 $f(t)$ が実の偶関数と仮定してあるので、

$$f(t) = \sum_i A_i \cos \omega_i t \quad 9-6$$

となる。このときのフーリエ変換 (9-5) を考える。さらに話を簡単にするために、関数 $f(t)$ がただひとつの波しか含まない場合を考える：

$$f(t) = A_0 \cos \omega_0 t \quad 9-7$$

このとき、フーリエ変換 (9-5) は

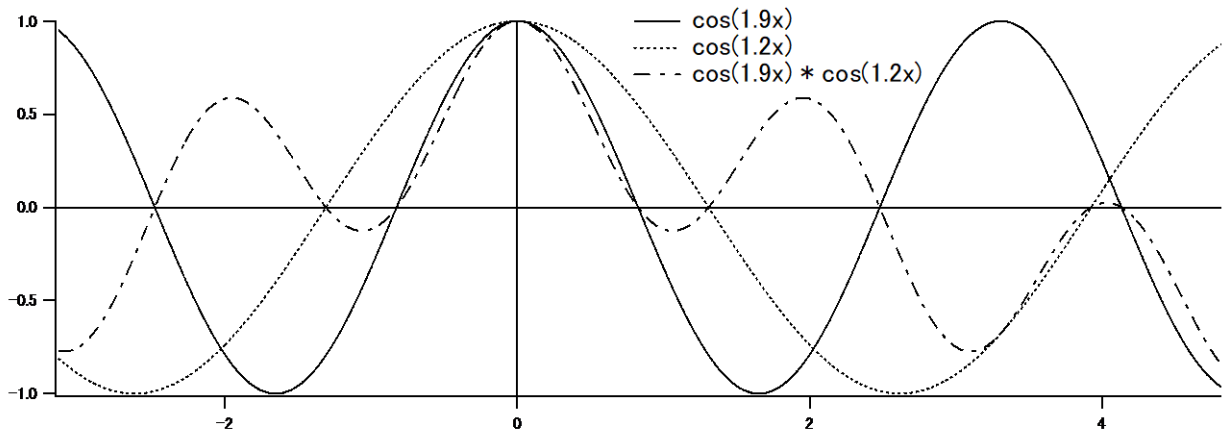
$$F(\omega) = \frac{A_0}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \cos \omega_0 t \cos \omega t dt \quad 9-8$$

となる。

9-8 式の右辺の被積分関数

$$\cos \omega_0 t \cos \omega t \quad 9-9$$

の因数である $\cos \omega_0 t$ と $\cos \omega t$ は、それぞれの周期でプラスとマイナスの値を示す。それらの積である $\cos \omega_0 t \cos \omega t$ も、プラスとマイナスの値を示しつつ変動する。



$\cos\omega_0 t$, $\cos\omega t$ および $\cos\omega_0 t$ と $\cos\omega t$ の積の計算例を図に示した. この図を見ていると, $\cos\omega_0 t$ と $\cos\omega t$ の積 $\cos\omega_0 t \cos\omega t$ をマイナス無限大からプラス無限大まで積分した式 9-8 の値はゼロになりそうである. しかし, 唯一の例外がある. それは, $\omega=\omega_0$ のときである. このときは, 被積分関数が

$$(\cos \omega_0 t)^2$$

となつて, 積分した値はゼロにならない.

以上の推論を, もう少し定量的に議論する. 三角関数の公式を使うと式 9-8 は

$$F(\omega) = \frac{A_0}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \cos \omega_0 t \cos \omega t dt = \frac{A_0}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} (\cos(\omega_0 + \omega)t + \cos(\omega_0 - \omega)t) dt \quad 9-10$$

である. $\omega \neq \omega_0$ のときは右辺がゼロになる. $\omega=\omega_0$ のときは,

$$F(\omega_0) = \frac{A_0}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} (\cos 2\omega_0 t + 1) dt = \frac{A_0}{2\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \quad 9-11$$

となつて, 右辺がゼロとならず発散する. ただし, ω は実数なので, ω について積分すると発散しなくなる.

フーリエ変換 (9-8) のときには, すべての ω について式 9-8 の右辺を計算する. その過程で, 「たまたま」 $\omega=\omega_0$ となったときにのみ, 積分がゼロとならない. ω が他の値のときはすべてゼロとなる. 結果として, もとの波の角周波数であった ω_0 を探し当てたことになる. フーリエ変換した結果, $f(t)$ に含まれる波の角周波数 (2π で割ると周波数) が分かったのである.

ここまでしばらく, $f(t)$ に含まれる波の成分が 1 個のみである (9-7) と仮定していた. $f(t)$ に含まれる波の成分が複数ある場合 (9-6) は, それぞれの ω_i で積分がゼロとならない.