RIASSUNTINO SU SERIE E TRASFORMATE DI FOURIER, a cura di G.B. BACHELET
NB: Qui discuto funzioni periodiche nello spazio, lo stesso vale per funzioni periodiche nel tempo.

SERIE DI FOURIER (analisi armonica di una funzione periodica)

$$f(x+a)=f(x) \iff f(x)=\sum_{n=-\infty}^{\infty} \widetilde{f}_n \, e^{i\frac{2n\pi x}{a}} \quad \text{con} \quad \widetilde{f}_n=\frac{1}{a}\int_{-a/2}^{+a/2} dx \; e^{-i\frac{2n\pi x}{a}} \, f(x)\,;$$

ciò è dovuto alla completezza e ortogonalità, sul segmento $x \in [-a/2, a/2]$, della base $|n\rangle$ di infinite funzioni trigonometriche di periodo na $\forall\, n$ intero $\langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{a}} e^{i\frac{2n\pi x}{a}} : \sum_{n=-\infty}^{\infty} |n\rangle\langle n| = \mathbb{I},\ \langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}$.

A voce: esempi, derivate, integrali, pti. discontinuità, fenomeno di Gibbs, prodotto di convoluzione.

TRASFORMATA DI FOURIER (analisi armonica di una funzione "qualunque")

Si parte dalla serie di Fourier $f(x)=\sum_{n=-\infty}^{\infty} \widetilde{f}_n \, e^{i\frac{2n\pi x}{a}} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{a}\int_{-a/2}^{+a/2} dx' \; e^{-i\frac{2n\pi x'}{a}} \, f(x')\right] e^{i\frac{2n\pi x}{a}} =$

$$\frac{1}{2\pi}\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{2\pi}{a}\left[\int_{-a/2}^{+a/2} dx' \, e^{-i\frac{2n\pi x'}{a}} \, f(x')\right] e^{i\frac{2n\pi x}{a}} = \frac{1}{2\pi}\sum_{n=-\infty}^{\infty} \Delta q \left[\int_{-a/2}^{+a/2} dx' \, e^{-in\Delta q x'} \, f(x')\right] e^{in\Delta q x}, \ \text{con} \ \Delta q = \frac{2\pi}{a}\,.$$

Prendendo il periodo a sempre piú grande (limite $a \to \infty$), la variabile discreta $n\Delta q$ tende alla variabile continua q e la somma tende all'integrale : $\sum_{n=-\infty}^{\infty} \Delta q \to \int_{-\infty}^{\infty} dq$. In questo stesso limite troviamo

$$f(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dq \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dx' \, e^{-in\Delta q x'} \, f(x')\right] e^{iqx} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dq \, \widetilde{f}(q) \, e^{iqx}, \ \text{dove} \ \widetilde{f}(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, e^{-iqx} \, f(x)$$

è la trasformata di Fourier. A voce: ipotesi su $f(x)$, esempi, derivate (etc.), equazioni differenziali.

IL TEOREMA DELLA CONVOLUZIONE

SERIE DI FOURIER, convoluzione (nell'integrale di convoluzione c'è il prefattore $\frac{1}{a}$)

$$\text{se} \quad f(x) = f(x+a) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \widetilde{f}_n \, e^{\,i\frac{2n\pi x}{a}} \quad \text{con} \quad \widetilde{f}_n = \frac{1}{a}\int_{-a/2}^{+a/2} dx \; e^{-i\frac{2n\pi x}{a}} \, f(x)$$

$$\text{e} \quad g(x) = g(x+a) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \widetilde{g}_n \, e^{\,i\frac{2n\pi x}{a}} \quad \text{con} \quad \widetilde{g}_n = \frac{1}{a}\int_{-a/2}^{+a/2} dx \; e^{-i\frac{2n\pi x}{a}} \, g(x)\,, \text{ allora}$$

$$\varphi(x) = \varphi(x+a) = \frac{1}{a}\int_{-a/2}^{+a/2} dy \; f(x-y)g(y) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \widetilde{\varphi}_n \, e^{\,i\frac{2n\pi x}{a}} \quad \text{con} \quad \widetilde{\varphi}_n = \frac{1}{a}\int_{-a/2}^{+a/2} dx \; e^{-i\frac{2n\pi x}{a}} \, \varphi(x) = \widetilde{f}_n \, \widetilde{g}_n \; :$$

$$\text{infatti} \quad \varphi(x) = \sum_{n,n'=-\infty}^{\infty} \widetilde{f}_n \, \widetilde{g}_{n'} \, e^{\,i\frac{2n\pi x}{a}} \left[\frac{1}{a}\int_{-a/2}^{+a/2} dy \;\; e^{-i\frac{2\pi}{a}(n-n')y} \right] =$$

$$= \sum_{n,n'=-\infty}^{\infty} \widetilde{f}_n \, \widetilde{g}_{n'} \, e^{\,i\frac{2n\pi x}{a}} \, \delta_{nn'} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \widetilde{f}_n \; \widetilde{g}_n \; e^{\,i\frac{2n\pi x}{a}} \qquad \Longleftrightarrow \qquad \widetilde{\varphi}_n = \widetilde{f}_n \; \widetilde{g}_n$$

TRASFORMATA DI FOURIER, convoluzione (nell'integrale di convoluzione c'è il prefattore $\frac{1}{2\pi}$)

$$\text{se} \quad f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dq \, \widetilde{f}(q) \, e^{iqx} \quad \text{con} \quad \widetilde{f}(q) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dx \;\; e^{-iqx} \, f(x)$$

$$\text{e} \quad g(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dq \, \widetilde{g}(q) \, e^{iqx} \quad \text{con} \quad \widetilde{g}(q) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dx \;\; e^{-iqx} \, g(x), \quad \text{allora}$$

$$\varphi(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dy \;\; f(x-y)g(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} dq \, \widetilde{\varphi}(q) \, e^{iqx} \quad \text{con} \quad \widetilde{\varphi}(q) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dx \;\; e^{-iqx} \, \varphi(x) = \widetilde{f}(q)\,\widetilde{g}(q) \; :$$

$$\text{infatti } \varphi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dq \int_{-\infty}^{+\infty} dq' \; \widetilde{f}(q)\,\widetilde{g}(q') \, e^{iqx} \left[\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dy \;\; e^{-i(q-q')y} \right] =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dq \int_{-\infty}^{+\infty} dq' \; \widetilde{f}(q)\,\widetilde{g}(q') \, e^{iqx} \delta(q-q') = \int_{-\infty}^{+\infty} dq \, \widetilde{f}(q)\,\widetilde{g}(q) \, e^{iqx} \quad \Longleftrightarrow \quad \widetilde{\varphi}(q) = \widetilde{f}(q) \; \widetilde{g}(q)$$

NB Le componenti di una funzione sviluppata in *serie* di Fourier hanno le stesse dimensioni della funzione ; ad esempio, se $f(x)$ è un campo elettrico, anche $\widetilde{f}_n$ ha le dimensioni di un campo elettrico. Invece $\widetilde{f}(q)$, *trasformata* di Fourier, ha le dimensioni della funzione $f(x)$ moltiplicate per le di– mensioni della variabile x : se $f(x)$ è un campo elettrico e x una lunghezza, $\widetilde{f}(q)$ ha le dimensioni di un campo elettrico moltiplicato per una lunghezza.

TRASFORMATA DI FOURIER DI UNA DISTRIBUZIONE GAUSSIANA

Tesi: per la gaussiana $\mathrm{g}_\alpha(\mathrm{x}) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\,\mathrm{e}^{-\alpha \mathrm{x}^2}$, che è normalizzata $\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{dx}\; \mathrm{g}_\alpha(\mathrm{x}) = 1$,

la trasformata di Fourier è $\mathrm{F.T.}\,[\mathrm{g}_\alpha(\mathrm{x})] = \widetilde{\mathrm{g}}_\alpha(\mathrm{q}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{dx}\;\; \mathrm{e}^{-\mathrm{iqx}}\, \mathrm{g}_\alpha(\mathrm{x}) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{q}^2}{4\alpha}}$.

Infatti: per la definizione di F.T., visto che $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}\mathrm{e}^{\mathrm{iqx}} = \mathrm{iq}\,\mathrm{e}^{\mathrm{iqx}}$, $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dq}}\mathrm{e}^{\mathrm{iqx}} = \mathrm{ix}\,\mathrm{e}^{\mathrm{iqx}}$,
abbiamo $\mathrm{F.T.}\,[\mathrm{x}\,\mathrm{g}_\alpha(\mathrm{x})] = \mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dq}}\widetilde{\mathrm{g}}_\alpha(\mathrm{q})$; $\mathrm{F.T.}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}\mathrm{g}_\alpha(\mathrm{x})\right] = \mathrm{iq}\,\widetilde{\mathrm{g}}_\alpha(\mathrm{q})$; d'altronde
$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}\mathrm{g}_\alpha(\mathrm{x}) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\,\mathrm{e}^{-\alpha\mathrm{x}^2} = -2\alpha\mathrm{x}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\,\mathrm{e}^{-\alpha\mathrm{x}^2} = -2\alpha\mathrm{x}\,\mathrm{g}_\alpha(\mathrm{x})$; ne consegue che
$\mathrm{F.T.}\,[-2\alpha\mathrm{x}\,\mathrm{g}_\alpha(\mathrm{x})] = -2\alpha\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dq}}\widetilde{\mathrm{g}}_\alpha(\mathrm{q}) = \mathrm{F.T.}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}\mathrm{g}_\alpha(\mathrm{x})\right] = \mathrm{iq}\,\widetilde{\mathrm{g}}_\alpha(\mathrm{q})$, quindi per
$\widetilde{\mathrm{g}}_\alpha(\mathrm{q})$ vale l'equazione $-2\alpha\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dq}}\widetilde{\mathrm{g}}_\alpha(\mathrm{q}) = \mathrm{q}\,\widetilde{\mathrm{g}}_\alpha(\mathrm{q})$, con soluzione $\widetilde{\mathrm{g}}_\alpha(\mathrm{q}) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{q}^2}{4\alpha}}$.

Osservazione: in altre parole, la trasformata di Fourier di una gaussiana *nor–lizzata* nello spazio diretto x è una gaussiana *non normalizzata* nello spazio reciproco q. Quindi nel limite $\alpha \to \infty$, quando la larghezza $\sigma = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \to 0$ e la gaussiana tende alla delta di Dirac, la sua trasformata di Fourier tende a uno.

DA UNA A TRE DIMENSIONI

SERIE DI FOURIER $(\mathrm{n_a}, \mathrm{n_b}, \mathrm{n_c}, \mathrm{m}, \mathrm{n_1}, \mathrm{n_2}, \mathrm{n_3}$ interi qualsiasi)

$$\mathrm{f}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = \mathrm{f}(\mathbf{r}) \iff \mathrm{f}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \widetilde{\mathrm{f}}_{\mathbf{G}}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \text{ con } \mathbf{r} = \mathrm{x,y,z}\,;\ \mathbf{R} = \mathrm{n_a}\mathbf{a} + \mathrm{n_b}\mathbf{b} + \mathrm{n_c}\mathbf{c}\,;\ \mathbf{G}\cdot\mathbf{R} = 2\mathrm{m}\pi :$$

$$\mathbf{G} = \mathrm{n_1}\mathbf{g}_1 + \mathrm{n_2}\mathbf{g}_2 + \mathrm{n_3}\mathbf{g}_3\ ;\quad \mathbf{g}_1 = 2\pi\frac{\mathbf{b}\times\mathbf{c}}{\mathrm{v_{cella}}},\ \mathbf{g}_2 = 2\pi\frac{\mathbf{c}\times\mathbf{a}}{\mathrm{v_{cella}}},\ \mathbf{g}_3 = 2\pi\frac{\mathbf{a}\times\mathbf{b}}{\mathrm{v_{cella}}}\ ;\ \mathrm{v_{cella}} = |\mathbf{a}\cdot(\mathbf{b}\times\mathbf{c})|\ ;$$

$$\widetilde{\mathrm{f}}_{\mathbf{G}} = \frac{1}{\mathrm{v_{cella}}}\int_{\mathrm{v_{cella}}} \mathrm{d}^3\mathbf{r}\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}\, \mathrm{f}(\mathbf{r}) \text{ con } \mathrm{d}^3\mathbf{r} = \mathrm{dx\,dy\,dz}\,.$$

TRASFORMATA DI FOURIER $(\mathbf{r} = \mathrm{x,y,z}\,;\ \mathbf{q} = \mathrm{q_x, q_y, q_z})$

In modo analogo al caso 1D si ottiene $\mathrm{f}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{\text{tutto lo spazio }\mathbf{q}} \mathrm{d}^3\mathbf{q}\ \widetilde{\mathrm{f}}(\mathbf{q})\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$, dove $\widetilde{\mathrm{f}}(\mathbf{q}) = \int_{\text{tutto lo spazio }\mathbf{r}} \mathrm{d}^3\mathbf{r}\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\, \mathrm{f}(\mathbf{r})$.

COROLLARIO UTILE NEI SOLIDI

Se per la funzione $\varphi(\mathbf{r})$ esiste la trasformata di Fourier $\widetilde{\varphi}(\mathbf{q})$, allora lo sviluppo in serie di Fourier di una funzione $\mathrm{f}(\mathbf{r})$ definita come somma di $\varphi(\mathbf{r})$ su tutti i siti di un reticolo $\mathrm{f}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} \varphi(\mathbf{r}-\mathbf{R})$, che per costruzione è periodica su quel reticolo $\mathrm{f}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) = \mathrm{f}(\mathbf{r})$, è dato da $\mathrm{f}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \widetilde{\mathrm{f}}_{\mathbf{G}}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}$ con

$$\widetilde{\mathrm{f}}_{\mathbf{G}} = \frac{1}{\mathrm{v_{cell}}}\widetilde{\varphi}(\mathbf{q}=\mathbf{G})\,. \text{ Infatti } \widetilde{\mathrm{f}}_{\mathbf{G}} = \frac{1}{\mathrm{v_{cella}}}\int_{\mathrm{v_{cella}}} \mathrm{d}^3\mathbf{r}\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}\, \mathrm{f}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\mathrm{v_{cella}}}\int_{\mathrm{v_{cella}}} \mathrm{d}^3\mathbf{r}\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{R}} \varphi(\mathbf{r}-\mathbf{R}) =$$

$$= [\text{ essendo } \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}} = 1\ \forall\, \mathbf{G},\mathbf{R}\,]\ \frac{1}{\mathrm{v_{cella}}}\sum_{\mathbf{R}}\int_{\mathrm{v_{cella}}} \mathrm{d}^3\mathbf{r}\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{G}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{R})}\, \varphi(\mathbf{r}-\mathbf{R}) = \frac{1}{\mathrm{v_{cella}}}\int_{\text{tutto lo spazio }\mathbf{r}} \mathrm{d}^3\mathbf{r}\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}\, \varphi(\mathbf{r}) =$$

$= \frac{1}{\mathrm{v_{cella}}}\widetilde{\varphi}(\mathbf{q}=\mathbf{G})$. In altre parole: di tutte le componenti di Fourier della funzione $\varphi(\mathbf{r})$ sopravvivono solo quelle che sul reticolo $\mathbf{R}$ interferiscono costruttivamente (che sono quelle con $\mathbf{q}=\mathbf{G}$).