



UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
DI PADOVA

DEPARTMENT OF CHEMICAL SCIENCES
DEPARTMENT OF MOLECULAR MEDICINE



Metodi di Calcolo per la Chimica

Serie e Trasformata di Fourier

Agostino Migliore

Se $f(x)$ è una funzione della variabile x che soddisfa le seguenti condizioni:

- $f(x)$ è periodica con periodo L
- $f(x)$ è continua in ogni intervallo di ampiezza L , eccetto al più un numero finito di punti
- $f(x)$ è modulo quadro integrabile tra 0 ed L :

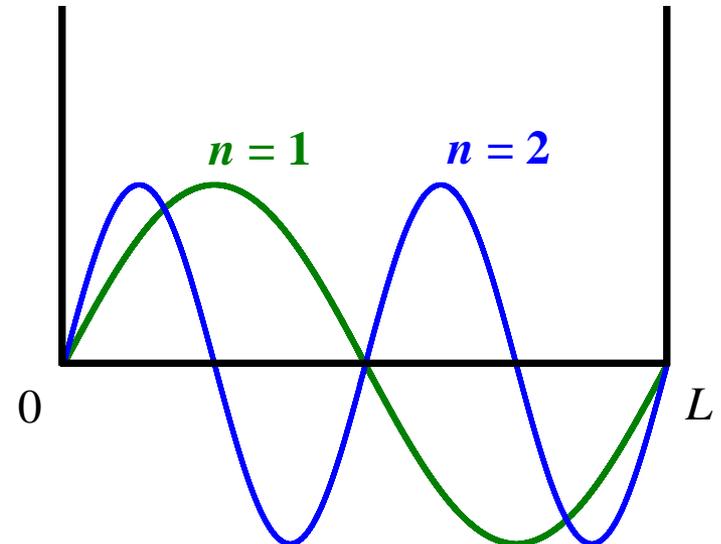
$$\int_0^L |f(x)|^2 dx < \infty$$

allora si può scrivere

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} [a_n \cos(k_n x) + b_n \sin(k_n x)] \quad \text{con} \quad k_n = n \frac{2\pi}{L}$$

$$a_n = \frac{2}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f(x) \cos(k_n x) dx$$

$$b_n = \frac{2}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f(x) \sin(k_n x) dx$$



Formule di Eulero:

$$\begin{cases} e^{iw} = \cos w + i \sin w \\ + e^{-iw} = \cos w - i \sin w \end{cases}$$

$$e^{iw} + e^{-iw} = 2 \cos w$$

$$\Downarrow$$

$$\cos w = \frac{e^{iw} + e^{-iw}}{2}$$

$$\begin{cases} e^{iw} = \cos w + i \sin w \\ - e^{-iw} = \cos w - i \sin w \end{cases}$$

$$e^{iw} - e^{-iw} = 2i \sin w$$

$$\Downarrow$$

$$\sin w = \frac{e^{iw} - e^{-iw}}{2i}$$

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{ik_n x} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{in \frac{2\pi}{L} x} \quad \text{con } k_n = n \frac{2\pi}{L}$$

Serie di Fourier

$$c_{n=m} = \frac{1}{2}(a_m - ib_m) = \frac{1}{2} \left[\frac{2}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f(x) \cos(k_m x) dx - i \frac{2}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f(x) \sin(k_m x) dx \right]$$

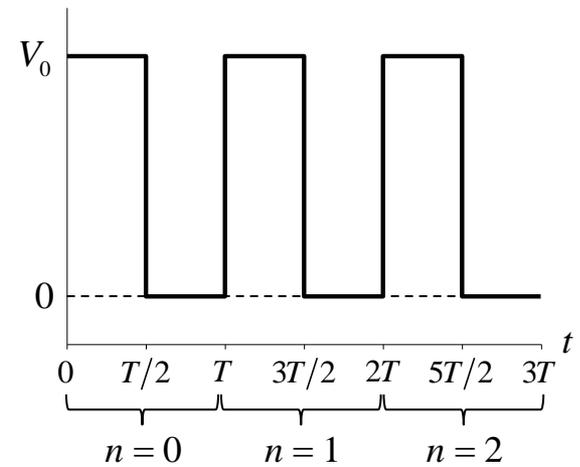
$$= \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f(x) [\cos(k_m x) - i \sin(k_m x)] dx = \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f(x) e^{-ik_m x} dx = \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f(x) e^{-ik_n x} dx$$

$$c_{n=-m} = c_m^* = \frac{1}{2}(a_m + ib_m) = \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f(x) e^{im \frac{2\pi}{L} x} dx = \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f(x) e^{-i(-m) \frac{2\pi}{L} x} dx = \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f(x) e^{-in \frac{2\pi}{L} x} dx$$

$$c_n = \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f(x) e^{-ik_n x} dx = \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f(\xi) e^{-ik_n \xi} d\xi = \frac{1}{L} \tilde{f}(k_n)$$

Esempio di serie di Fourier: l'onda quadra

$$f(t) = \begin{cases} V_0 & nT \leq t < \left(n + \frac{1}{2}\right)T \\ 0 & \left(n + \frac{1}{2}\right)T \leq t < (n+1)T \end{cases} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

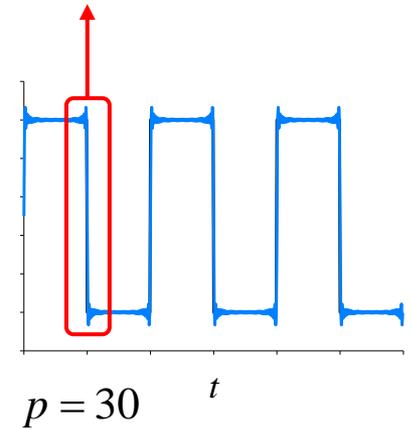
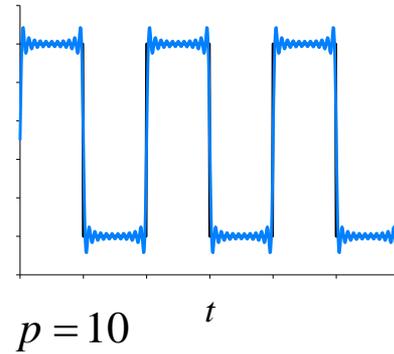
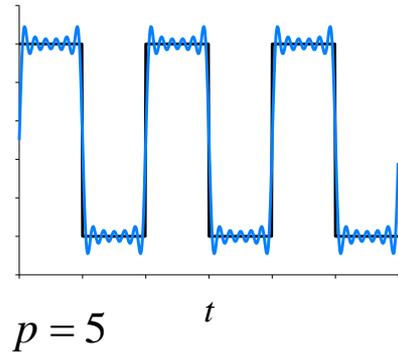
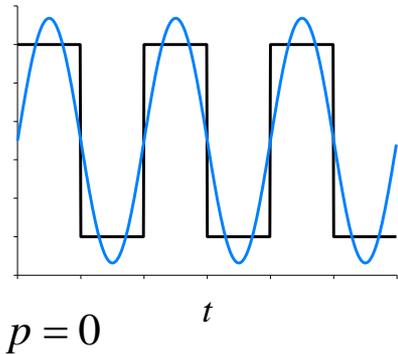


$$f(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} [a_n \cos(\omega_n t) + b_n \sin(\omega_n t)]$$

dove $\omega_n = n \frac{2\pi}{T} = n2\pi\nu$, $a_n = \frac{2}{T} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f(t) \cos(\omega_n t) dt$, $b_n = \frac{2}{T} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f(t) \sin(\omega_n t) dt$

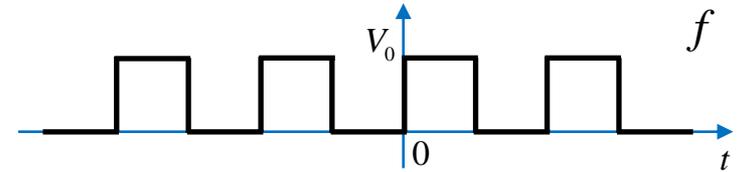
$$f(t) = \frac{V_0}{2} + \frac{2V_0}{\pi} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{\sin[(2p+1)2\pi\nu t]}{2p+1}$$

Variazioni in un piccolo intervallo di tempo
→ grandi frequenze coinvolte.

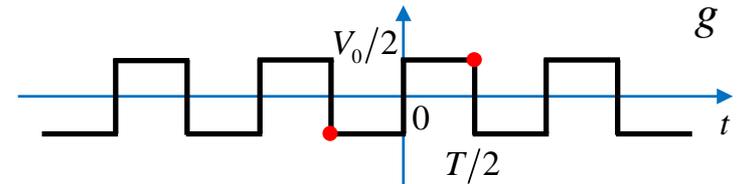


Parità della funzione onda quadra e serie di Fourier

$$f(t) = \frac{V_0}{2} + \frac{2V_0}{\pi} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{\sin[(2p+1)2\pi vt]}{2p+1}$$



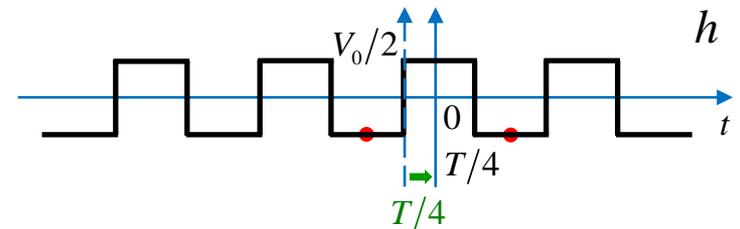
$$g(t) = f(t) - \frac{V_0}{2} = \frac{2V_0}{\pi} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{\sin[(2p+1)2\pi vt]}{2p+1}; \quad g(t) = -g(-t)$$



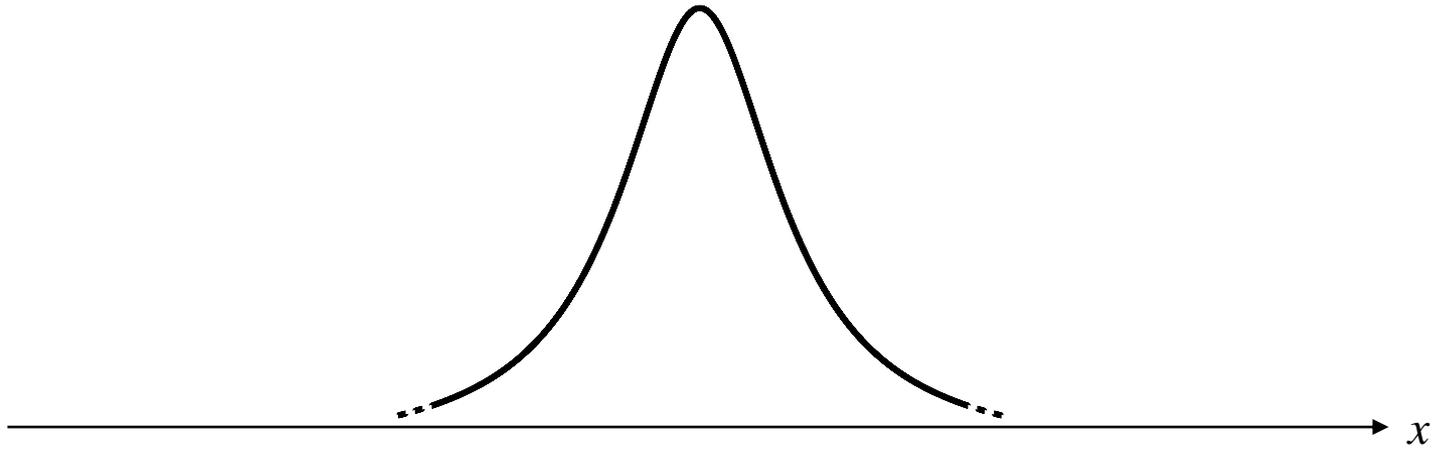
Traslando l'asse dei tempi di $T/4$:

$$h(t) = g\left(t + \frac{T}{4}\right) = \frac{2V_0}{\pi} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{\sin[(2p+1)2\pi v\left(t + \frac{T}{4}\right)]}{2p+1}$$

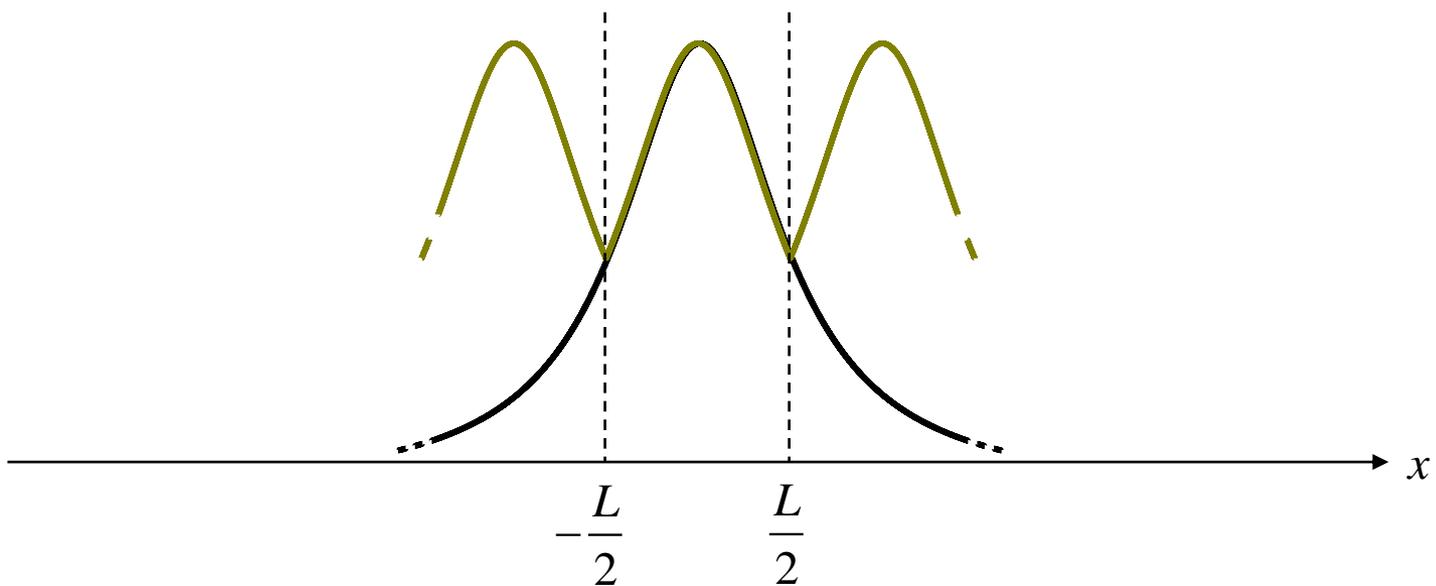
$$= \frac{2V_0}{\pi} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{\cos[(2p+1)2\pi vt]}{2p+1}; \quad h(t) = h(-t)$$



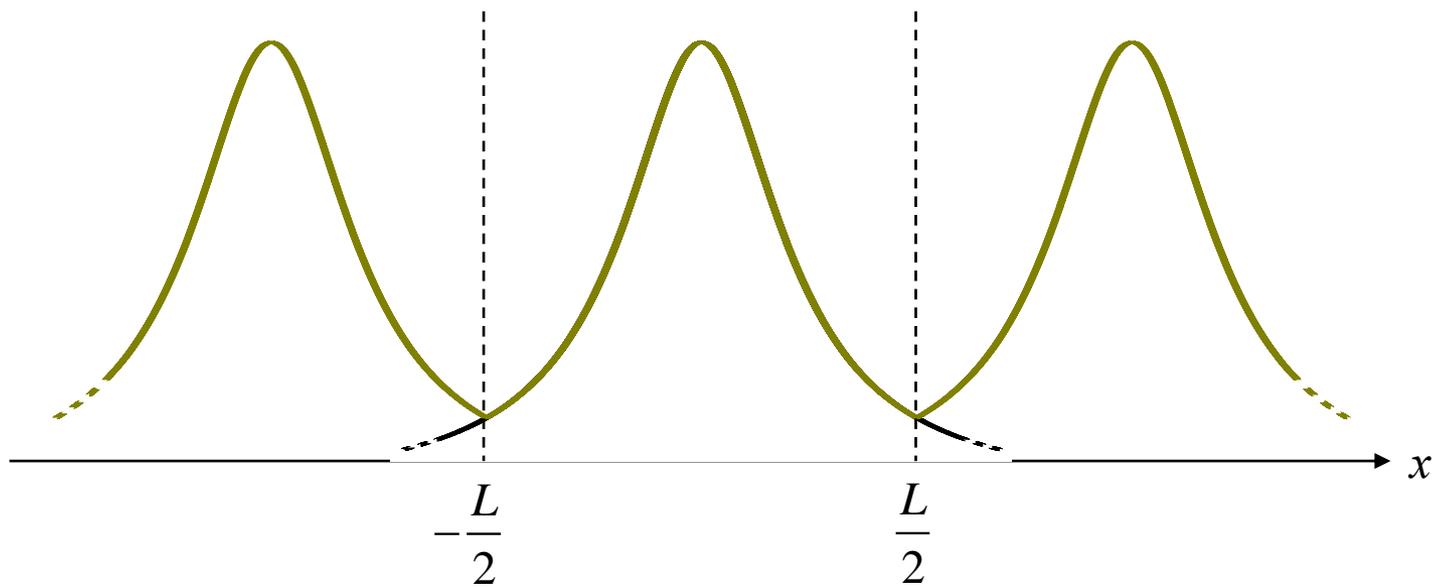
Una funzione non periodica può essere definita come una funzione periodica di periodo infinito.⁶



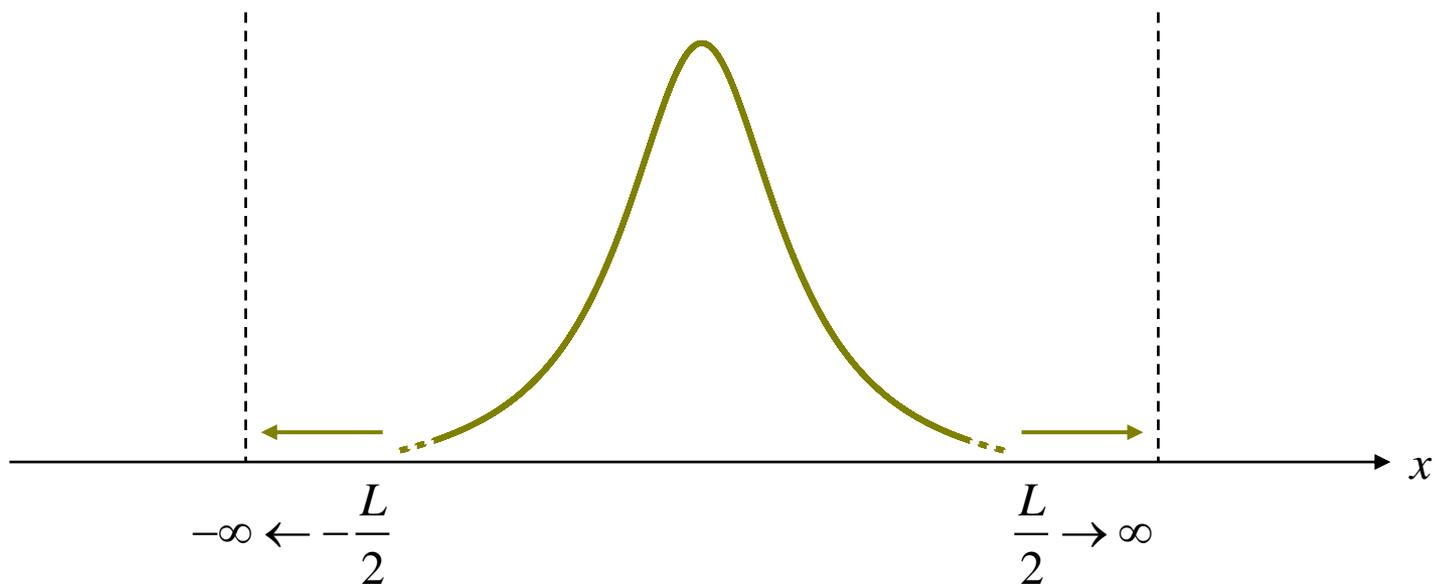
Una funzione non periodica può essere definita come una funzione periodica di periodo infinito.⁷



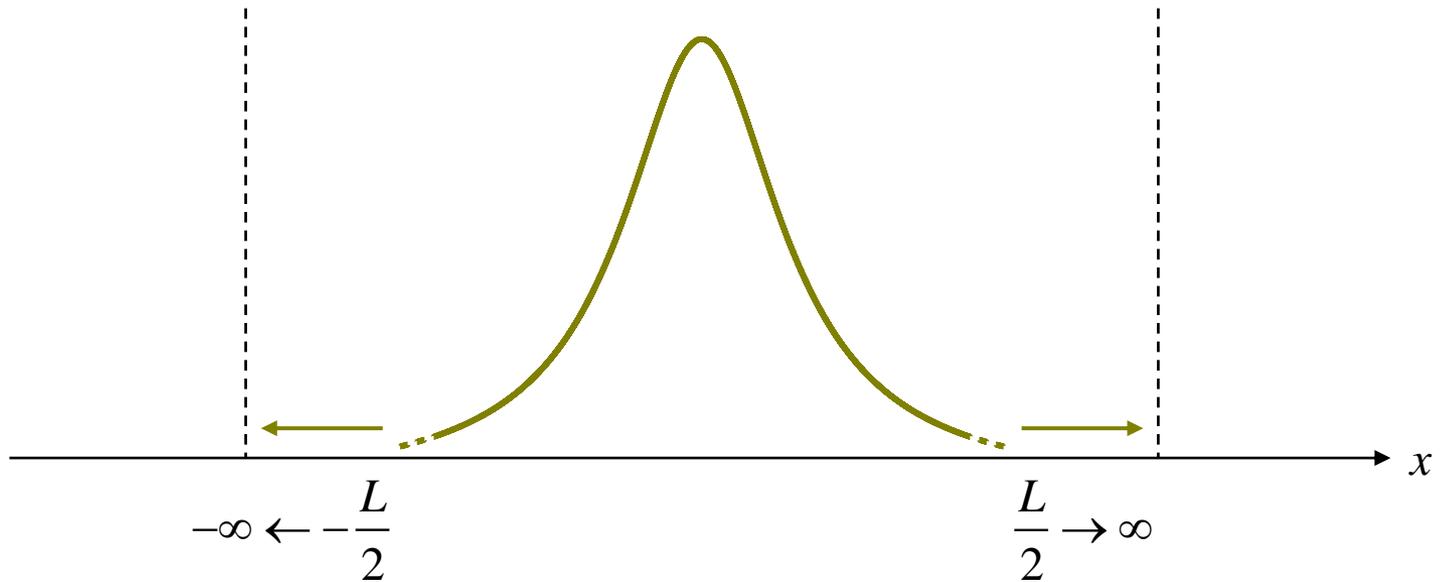
Una funzione non periodica può essere definita come una funzione periodica di periodo infinito.



Una funzione non periodica può essere definita come una funzione periodica di periodo infinito.⁹



Una funzione non periodica può essere definita come una funzione periodica di periodo infinito.



$$L \rightarrow \infty \Rightarrow f_L(x) \rightarrow f(x)$$

cioè

$$\lim_{L \rightarrow \infty} f_L(x) = f(x)$$

$$f_L(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{ik_n x} \quad \text{con} \quad c_n = \frac{1}{L} \tilde{f}_L(k_n), \quad k_n = n \frac{2\pi}{L}$$

$$\tilde{f}_L(k_n) = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f_L(x) e^{-ik_n x} dx = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f(x) e^{-ik_n x} dx$$

$$k_{n+1} - k_n = (n+1) \frac{2\pi}{L} - n \frac{2\pi}{L} = n \frac{2\pi}{L} + \frac{2\pi}{L} - n \frac{2\pi}{L} = \frac{2\pi}{L} \rightarrow \frac{1}{L} = \frac{k_{n+1} - k_n}{2\pi}$$

$$f_L(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{L} \tilde{f}_L(k_n) e^{ik_n x} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{k_{n+1} - k_n}{2\pi} \tilde{f}_L(k_n) e^{ik_n x}$$

$$L \rightarrow \infty \Rightarrow \begin{cases} k_n \rightarrow k \text{ (diventa una variabile continua)} \\ k_{n+1} - k_n \rightarrow dk \\ \sum_{n=-\infty}^{\infty} \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \end{cases} \Rightarrow f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \tilde{f}(k) e^{ikx}$$

$$\tilde{f}_L(k_n) = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f(x) e^{-ik_n x} dx \rightarrow \tilde{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad \boxed{\mathcal{F}[f(x)]}$$

Trasformata di Fourier

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k) e^{ikx} dk$$

$$\mathcal{F}^{-1}[\tilde{f}(k)]$$

Funzione periodica – serie di Fourier:

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} [a_n \cos(k_n x) + b_n \sin(k_n x)]$$

$$\text{dove } k_n = n \frac{2\pi}{L}, \quad a_n = \frac{2}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f(x) \cos(k_n x) dx, \quad b_n = \frac{2}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f(x) \sin(k_n x) dx$$

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{ik_n x}$$

$$\text{dove } c_n = \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f(x) e^{-ik_n x} dx$$

Funzione generalmente non periodica – trasformata di Fourier:

$$\tilde{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx \equiv \mathcal{F}[f(x)] \qquad \tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx$$

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k) e^{ikx} dk \equiv \mathcal{F}^{-1}[\tilde{f}(k)] \qquad f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k) e^{ikx} dk$$

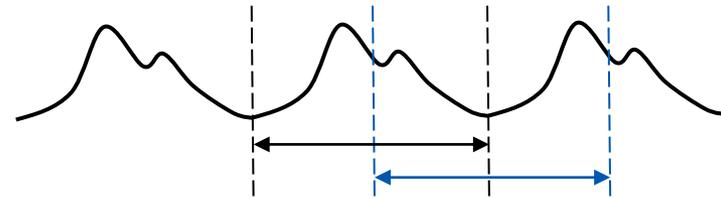
Funzione periodica – serie di Fourier:

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} [a_n \cos(k_n x) + b_n \sin(k_n x)]$$

$$\text{dove } k_n = n \frac{2\pi}{L}, \quad a_n = \frac{2}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f(x) \cos(k_n x) dx, \quad b_n = \frac{2}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f(x) \sin(k_n x) dx$$

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{ik_n x} \quad a_n = \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \cos(k_n x) dx, \quad b_n = \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \sin(k_n x) dx$$

$$\text{dove } c_n = \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f(x) e^{-ik_n x} dx$$



Funzione generalmente non periodica – trasformata di Fourier:

$$\tilde{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx \equiv \mathcal{F}[f(x)] \quad \text{or} \quad \tilde{f}(\bar{\nu}) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-i2\pi\bar{\nu}x} dx \quad \tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx$$

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k) e^{ikx} dk \equiv \mathcal{F}^{-1}[\tilde{f}(k)] = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(\bar{\nu}) e^{i2\pi\bar{\nu}x} d\bar{\nu} \quad f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k) e^{ikx} dk$$

Trasformata di Fourier nel caso tridimensionale

$$\tilde{f}(\mathbf{k}) = \int f(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3r \equiv \mathcal{F}[f(\mathbf{r})]$$

$$\tilde{f}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int f(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3r \equiv \mathcal{F}[f(\mathbf{r})]$$

$$f(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \tilde{f}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3k \equiv \mathcal{F}^{-1}[\tilde{f}(\mathbf{k})] \quad \text{or}$$

$$f(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \tilde{f}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3k \equiv \mathcal{F}^{-1}[\tilde{f}(\mathbf{k})]$$

Scelta delle variabili

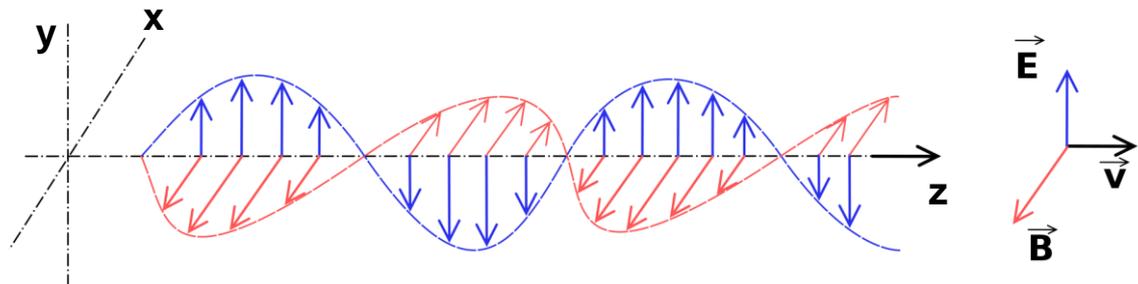
$x \leftrightarrow k$ oppure $\bar{v} = \frac{k}{2\pi}$. Le due variabili hanno unità di misura inverse: m e m⁻¹.

$t \leftrightarrow \omega$ oppure $\nu = \frac{\omega}{2\pi}$. Le due variabili hanno unità di misura inverse: s e s⁻¹ = Hz.

In spettroscopia si usa la radiazione elettromagnetica, che, **per un singolo emettitore** a distanza infinita, è descritta da funzioni periodiche nello spazio e nel tempo con frequenza temporale ν e frequenza spaziale $1/\lambda$ (numero d'onda).

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \cos(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} - \omega_0 t)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{B}_0 \cos(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} - \omega_0 t)$$



Trasformate di Fourier in termini di tempo e frequenza

$$\begin{array}{ll}
 \text{"segnale"} & f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(\omega) e^{i\omega t} d\omega \equiv \mathcal{F}[\tilde{f}(\omega)] \\
 \text{"spettro"} & \tilde{f}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt \equiv \mathcal{F}^{-1}[f(t)]
 \end{array}
 \quad \text{or} \quad
 \begin{array}{l}
 f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(\nu) e^{i2\pi\nu t} d\nu \equiv \mathcal{F}[\tilde{f}(\nu)] \\
 \tilde{f}(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i2\pi\nu t} dt \equiv \mathcal{F}^{-1}[f(t)]
 \end{array}$$

Proprietà di parità. La trasformata di Fourier di una funzione pari/dispari è pari/dispari.

Funzione pari: $f(t) = f(-t)$

$$\rightarrow \tilde{f}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt \stackrel{t \rightarrow -t}{=} \int_{-\infty}^{\infty} f(-t) e^{i\omega t} dt = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{i\omega t} dt = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i(-\omega)t} dt = \tilde{f}(-\omega): \tilde{f}(\omega) \text{ è } \mathbf{pari}$$

Funzione reale pari: $f^*(t) = f(t) = f(-t)$

$$\rightarrow \tilde{f}^*(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{i\omega t} dt = \tilde{f}(-\omega) = \tilde{f}(\omega): \tilde{f}(\omega) \text{ è } \mathbf{reale e pari}$$

Funzione dispari: $f(t) = -f(-t)$, cioè $f(-t) = -f(t)$

$$\rightarrow \tilde{f}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(-t) e^{i\omega t} dt = -\int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{i\omega t} dt = -\int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i(-\omega)t} dt = -\tilde{f}(-\omega): \tilde{f}(\omega) \text{ è } \mathbf{dispari}$$

Funzione reale dispari: $f^*(t) = f(t) = -f(-t)$

$$\rightarrow \tilde{f}^*(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{i\omega t} dt = -\int_{-\infty}^{\infty} f(-t) e^{i\omega t} dt \stackrel{t \rightarrow -t}{=} -\int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt = -\tilde{f}(\omega)$$

$$\rightarrow \operatorname{Re}[\tilde{f}(\omega)] = \frac{\tilde{f}^*(\omega) + \tilde{f}(\omega)}{2} = \frac{-\tilde{f}(\omega) + \tilde{f}(\omega)}{2} = 0: \tilde{f}(\omega) \text{ è } \mathbf{puramente immaginaria e dispari}$$

In generale, la trasformata di Fourier di una funzione reale è complessa:

$$\tilde{f}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \cos(\omega t) dt - i \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \sin(\omega t) dt \rightarrow \begin{cases} \text{Re}[\tilde{f}(\omega)] = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \cos(\omega t) dt & \text{trasformata coseno} \\ \text{Im}[\tilde{f}(\omega)] = -\int_{-\infty}^{\infty} f(t) \sin(\omega t) dt & \text{trasformata seno} \end{cases}$$

Possiamo allora definire l'**ampiezza dello spettro** $|\tilde{f}(\omega)| = \sqrt{\left\{ \text{Re}[\tilde{f}(\omega)] \right\}^2 + \left\{ \text{Im}[\tilde{f}(\omega)] \right\}^2}$

e la **fase dello spettro** $\varphi[\tilde{f}(\omega)] = \arctan \frac{\text{Im}[\tilde{f}(\omega)]}{\text{Re}[\tilde{f}(\omega)]}$

La funzione cos è pari $\rightarrow \text{Re}[\tilde{f}(-\omega)] = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \cos(-\omega t) dt = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \cos(\omega t) dt = \text{Re}[\tilde{f}(\omega)]$

La funzione sin è dispari $\rightarrow \text{Im}[\tilde{f}(-\omega)] = -\int_{-\infty}^{\infty} f(t) \sin(-\omega t) dt = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \sin(\omega t) dt = -\text{Im}[\tilde{f}(\omega)]$

Di conseguenza,

$$|\tilde{f}(-\omega)| = |\tilde{f}(\omega)| \quad \varphi[\tilde{f}(-\omega)] = \arctan \frac{\text{Im}[\tilde{f}(-\omega)]}{\text{Re}[\tilde{f}(-\omega)]} = -\varphi[\tilde{f}(\omega)]$$

Se $f(t)$ è una funzione reale pari,

$$\begin{cases} \text{pari} \times \text{pari} = \text{pari} \\ \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \cos(\omega t) dt = 2 \int_0^{\infty} f(t) \cos(\omega t) dt \\ \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \sin(\omega t) dt = 0 \end{cases} \rightarrow \tilde{f}(\omega) = 2 \int_0^{\infty} f(t) \cos(\omega t) dt$$

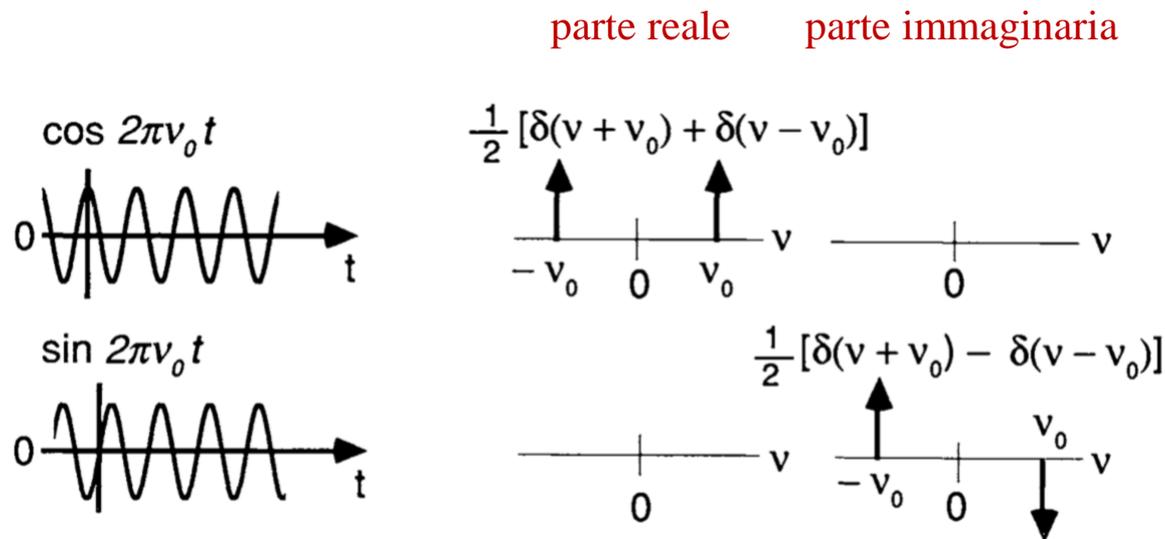
che è un altro modo per dimostrare che la trasformata di Fourier di una funzione reale pari è pure reale pari.

Se $f(t)$ è una funzione reale dispari,

$$\begin{cases} \text{dispari} \times \text{pari} = \text{dispari} \\ \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \cos(\omega t) dt = 0 \\ \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \sin(\omega t) dt = 2 \int_0^{\infty} f(t) \sin(\omega t) dt \end{cases} \rightarrow \tilde{f}(\omega) = -2i \int_0^{\infty} f(t) \sin(\omega t) dt$$

che è un altro modo per dimostrare che la trasformata di Fourier di una funzione reale e pari è pure reale e pari.

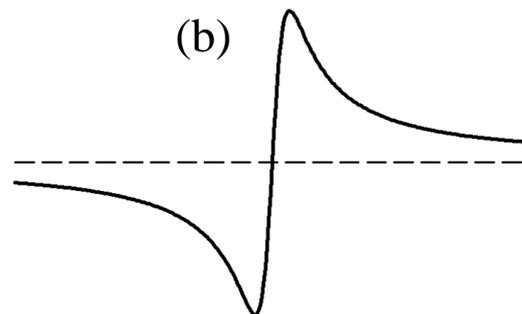
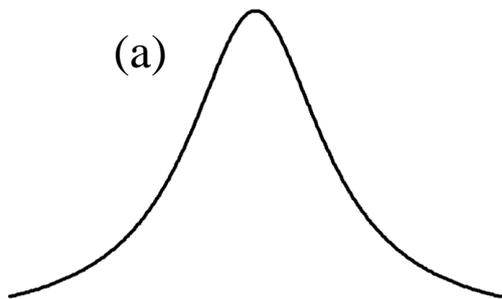
Esempio 1. Funzione coseno (anticipazione).



Esempio 2. Decadimento esponenziale unilaterale (nessuna definita parità): $f(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ e^{-at} & t \geq 0 \end{cases}$

$$\tilde{f}(\omega) = \int_0^{\infty} e^{-at} e^{-i\omega t} dt = \int_0^{\infty} e^{-(a+i\omega)t} dt = \frac{e^{-(a+i\omega)t}}{-(a+i\omega)} \Big|_0^{\infty} = \frac{1}{a+i\omega} = \frac{a-i\omega}{(a+i\omega)(a-i\omega)} = \frac{a}{a^2+\omega^2} - i \frac{\omega}{a^2+\omega^2}$$

Lorentzian funzione di
dispersione
(parte reale)

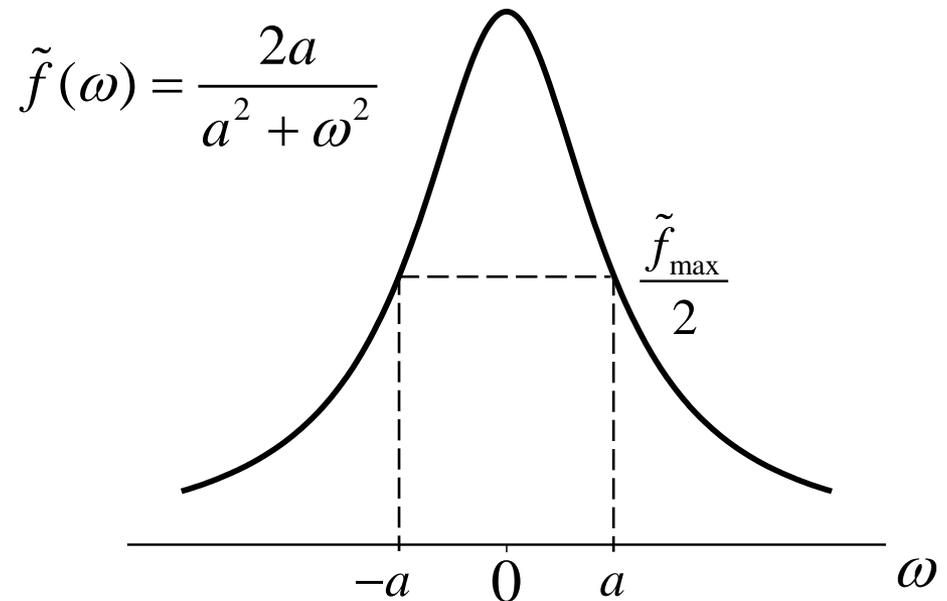
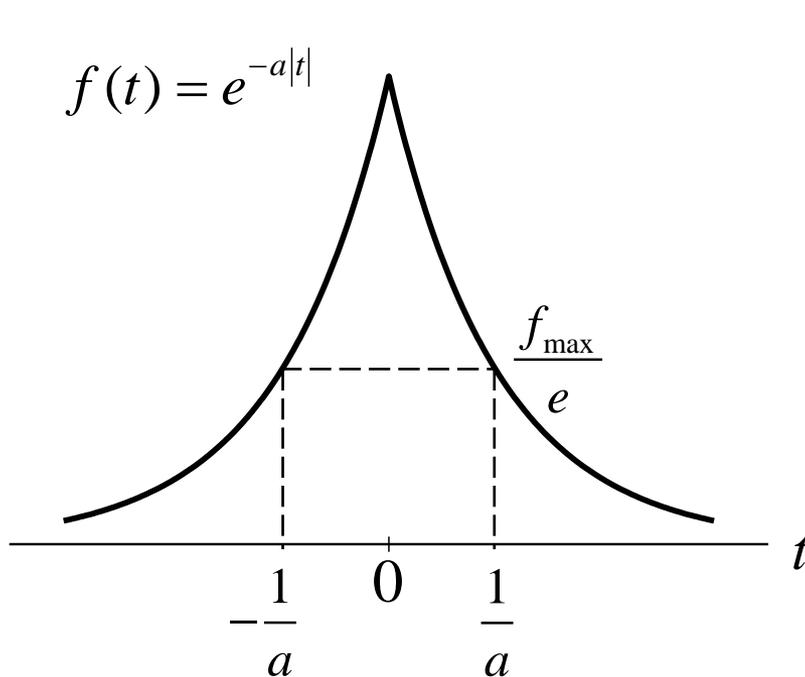


(a)

(b)

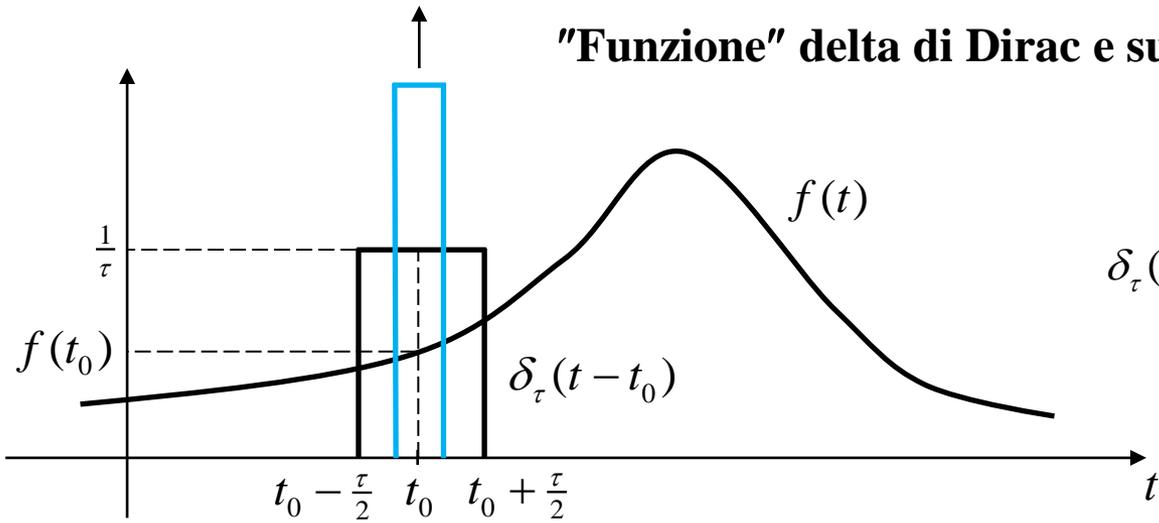
Esempio 3. Decadimento esponenziale simmetrico: $f(t) = e^{-a|t|}$, con $a > 0$. A differenza della esponenziale unilaterale, questa funzione è pari; quindi

$$\begin{aligned}\tilde{f}(\omega) &= 2 \int_0^{\infty} f(t) \cos(\omega t) dt = 2 \int_0^{\infty} e^{-at} \cos(\omega t) dt = 2 \int_0^{\infty} e^{-at} \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2} dt \\ &= \int_0^{\infty} \left[e^{(-a+i\omega)t} + e^{-(a+i\omega)t} \right] dt = \frac{e^{(-a+i\omega)t}}{-a+i\omega} \Big|_0^{\infty} - \frac{e^{(a+i\omega)t}}{a+i\omega} \Big|_0^{\infty} = \frac{1}{a-i\omega} + \frac{1}{a+i\omega} = \frac{a+i\omega + a-i\omega}{a^2 + \omega^2} = \frac{2a}{a^2 + \omega^2}\end{aligned}$$



In generale, $\Delta f \cdot \Delta \tilde{f} \geq \frac{1}{2}$; $\Delta f \cdot \Delta \tilde{f} = \frac{1}{2}$ se f e \tilde{f} sono gaussiane.

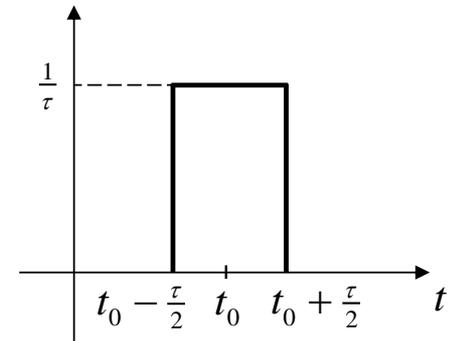
"Funzione" delta di Dirac e sua trasformata di Fourier



$$\delta_\tau(t-t_0) = \begin{cases} \frac{1}{\tau} & \text{for } t_0 - \frac{\tau}{2} < t < t_0 + \frac{\tau}{2} \\ 0 & \text{for } |t-t_0| > \frac{\tau}{2} \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta_\tau(t-t_0) dt = \tau \frac{1}{\tau} = 1 \quad \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \delta_\tau(t-t_0) dt \cong f(t_0)$$

$$\tau \rightarrow 0 \Rightarrow \delta_\tau(t-t_0) \rightarrow \delta(t-t_0), \quad \text{tale che } \boxed{\int_{-\infty}^{\infty} f(t) \delta(t-t_0) dt = f(t_0)}$$

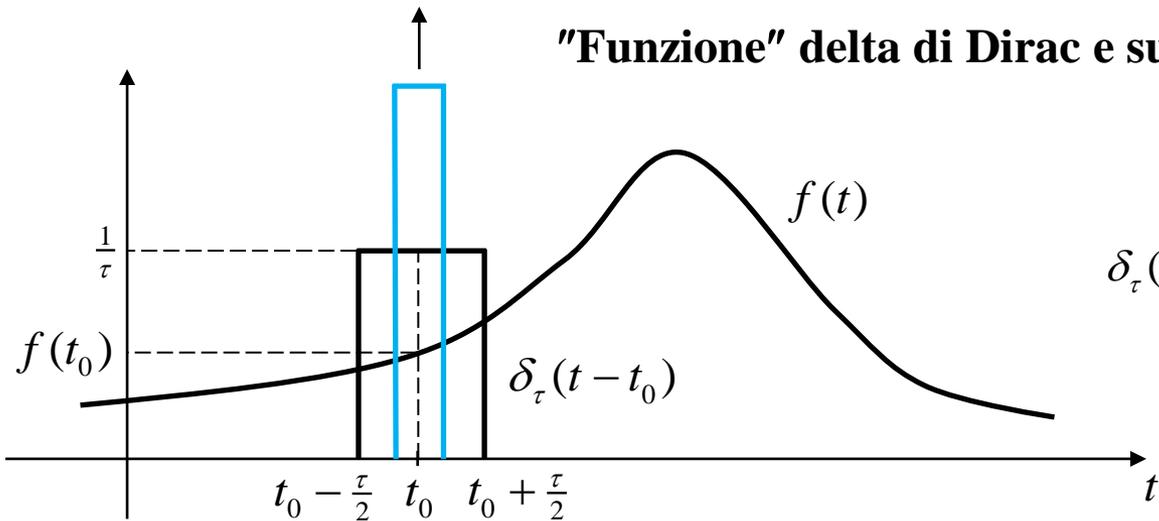


$$\tilde{\delta}_{\tau,t_0}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta_\tau(t-t_0) e^{-i\omega t} dt = \frac{1}{\tau} \int_{t_0 - \frac{\tau}{2}}^{t_0 + \frac{\tau}{2}} e^{-i\omega t} dt = \frac{1}{\tau} \frac{e^{-i\omega t}}{-i\omega} \Bigg|_{t_0 - \frac{\tau}{2}}^{t_0 + \frac{\tau}{2}} = \frac{1}{-i\omega\tau} \left[e^{-i\omega(t_0 + \frac{\tau}{2})} - e^{-i\omega(t_0 - \frac{\tau}{2})} \right]$$

$$= \frac{e^{-i\omega t_0}}{i\omega\tau} \left[e^{i\omega \frac{\tau}{2}} - e^{-i\omega \frac{\tau}{2}} \right] = \frac{2}{\omega\tau} \frac{e^{i\omega \frac{\tau}{2}} - e^{-i\omega \frac{\tau}{2}}}{2i} = e^{-i\omega t_0} \frac{\sin(\omega\tau/2)}{\omega\tau/2} \xrightarrow{\tau \rightarrow 0} \boxed{\tilde{\delta}_{t_0}(\omega) = e^{-i\omega t_0}}$$

$$\delta(t-t_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\delta}_{t_0}(\omega) e^{i\omega t} d\omega = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t_0} e^{i\omega t} d\omega, \quad \text{cioè } \boxed{\delta(t-t_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega(t-t_0)} d\omega = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega(t-t_0)} d\omega}$$

"Funzione" delta di Dirac e sua trasformata di Fourier



$$\delta_\tau(t - t_0) = \begin{cases} \frac{1}{\tau} & \text{for } t_0 - \frac{\tau}{2} < t < t_0 + \frac{\tau}{2} \\ 0 & \text{for } |t - t_0| > \frac{\tau}{2} \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta_\tau(t - t_0) dt = \tau \frac{1}{\tau} = 1 \quad \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \delta_\tau(t - t_0) dt \cong f(t_0)$$

$$\tau \rightarrow 0 \Rightarrow \delta_\tau(t - t_0) \rightarrow \delta(t - t_0), \quad \text{tale che } \boxed{\int_{-\infty}^{\infty} f(t) \delta(t - t_0) dt = f(t_0)}$$

Traslazione:

$$\tilde{f}(\omega) = \mathcal{F}^{-1}[f(t)]$$

$$\tilde{f}(\omega) e^{-i\omega a} = \mathcal{F}^{-1}[f(t - a)]$$

$$\tilde{\delta}_{\tau, t_0}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta_\tau(t - t_0) e^{-i\omega t} dt = \frac{1}{\tau} \int_{t_0 - \frac{\tau}{2}}^{t_0 + \frac{\tau}{2}} e^{-i\omega t} dt = \frac{1}{\tau} \frac{e^{-i\omega t}}{-i\omega} \Bigg|_{t_0 - \frac{\tau}{2}}^{t_0 + \frac{\tau}{2}} = \frac{1}{-i\omega\tau} \left[e^{-i\omega(t_0 + \frac{\tau}{2})} - e^{-i\omega(t_0 - \frac{\tau}{2})} \right]$$

$$= \frac{e^{-i\omega t_0}}{i\omega\tau} \left[e^{i\omega \frac{\tau}{2}} - e^{-i\omega \frac{\tau}{2}} \right] = \frac{2}{\omega\tau} \frac{e^{i\omega \frac{\tau}{2}} - e^{-i\omega \frac{\tau}{2}}}{2i} = e^{-i\omega t_0} \frac{\sin(\omega\tau/2)}{\omega\tau/2} \xrightarrow{\tau \rightarrow 0} \boxed{\tilde{\delta}_{t_0}(\omega) = e^{-i\omega t_0}}$$

$$\delta(t - t_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\delta}_{t_0}(\omega) e^{i\omega t} d\omega = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t_0} e^{i\omega t} d\omega, \quad \text{cioè } \boxed{\delta(t - t_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega(t - t_0)} d\omega = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega(t - t_0)} d\omega}$$

$$\delta(t - t_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega(t-t_0)} d\omega = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega(t-t_0)} d \frac{\omega}{2\pi} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i2\pi\nu(t-t_0)} d\nu \quad (1)$$

In generale,

$$\delta(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ixz} dx \quad (2)$$

In particolare, per $x = \nu$ e $z = t - t_0$,

$$\delta(t - t_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\nu(t-t_0)} d\nu \quad (3)$$

Si mostra facilmente che la (3) è equivalente alla (1). Infatti, sostituendo $\nu = 2\pi\xi$ nella (3), si ha

$$\delta(t - t_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i2\pi\xi(t-t_0)} d(2\pi\xi) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i2\pi\xi(t-t_0)} 2\pi d\xi = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i2\pi\xi(t-t_0)} d\xi$$

e, ridenominando ν la variabile d'integrazione si riottiene la (1). Vale la proprietà

$$t\delta(t - t_0) = t_0\delta(t - t_0) \quad (4)$$

Altra utile proprietà:

$$\delta(at) = \frac{1}{|a|} \delta(t); \text{ analogamente, } \delta(a(t - t_0)) = \frac{1}{|a|} \delta(t - t_0) \quad (5)$$

Tale proprietà permette, per esempio, di verificare la (1) usando la (2):

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i2\pi\nu(t-t_0)} d\nu = 2\pi \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i2\pi\nu(t-t_0)} d\nu \right] \underset{(2) \text{ con } x=\nu \text{ e } z=2\pi(t-t_0)}{=} 2\pi\delta(2\pi(t-t_0)) \underset{(5)}{=} 2\pi \frac{1}{2\pi} \delta(t-t_0) = \delta(t-t_0)$$

Onda piana

$$\mathbf{E}(z, t) = E(z, t) \hat{\mathbf{y}}$$

with

$$E(z, t) = E_0 \cos(k_0 z - \omega_0 t)$$

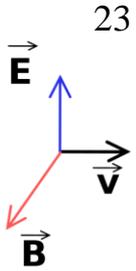
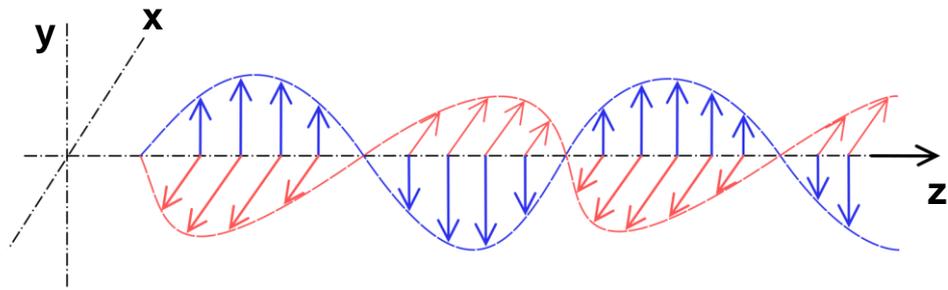


Immagine adattata da https://it.wikipedia.org/wiki/Radiazione_elettromagnetica

La serie di Fourier contiene un solo termine coseno che coincide con la funzione stessa!

La trasformata di Fourier rispetto al vettore d'onda (o al numero d'onda) è

$$\begin{aligned} \tilde{E}(k, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} E(z, t) e^{-ikz} dz = E_0 \int_{-\infty}^{\infty} \cos(k_0 z - \omega_0 t) e^{-ikz} dz = \frac{E_0}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left[e^{i(k_0 z - \omega_0 t)} + e^{-i(k_0 z - \omega_0 t)} \right] e^{-ikz} dz \\ &= \frac{E_0}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left[e^{ik_0 z - i\omega_0 t - ikz} + e^{-ik_0 z + i\omega_0 t - ikz} \right] dz = \frac{E_0}{2} \left[e^{-i\omega_0 t} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(k-k_0)z} dz + e^{i\omega_0 t} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(k+k_0)z} dz \right] \\ &= \frac{E_0}{2} \left[e^{-i\omega_0 t} \delta(k - k_0) + e^{i\omega_0 t} \delta(k + k_0) \right] = E_0 \frac{e^{i\omega_0 t} \delta(k + k_0) + e^{-i\omega_0 t} \delta(k - k_0)}{2} \end{aligned}$$

In particolare, guardando l'onda, per esempio, a $t = 0$:

$$\tilde{E}(k, 0) = E_0 \frac{\delta(k + k_0) + \delta(k - k_0)}{2}$$

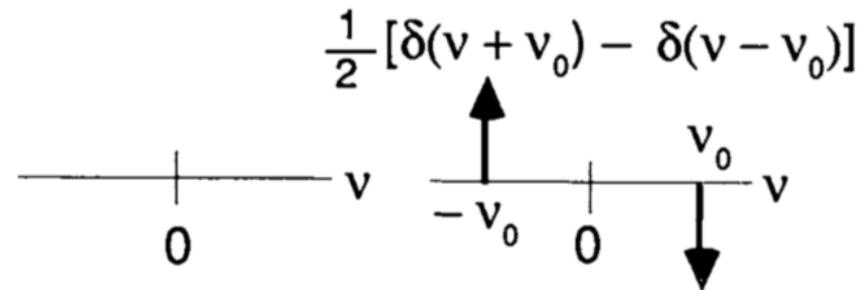
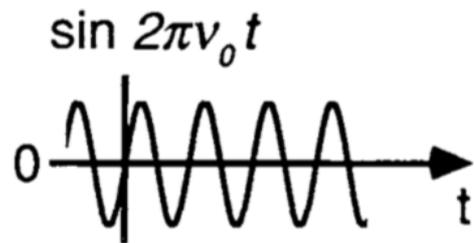
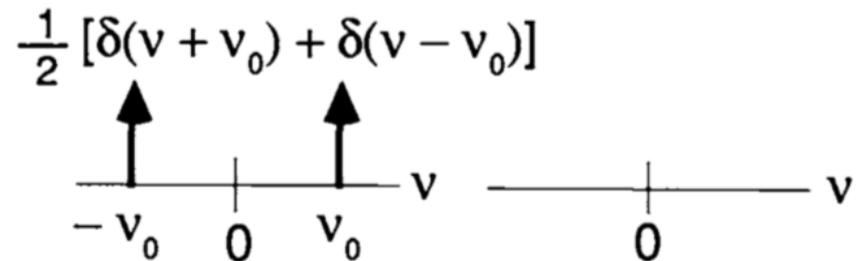
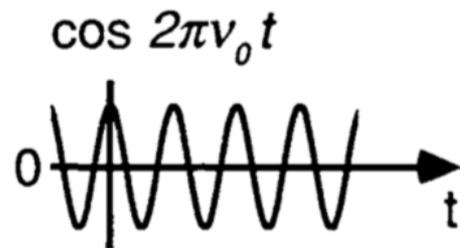
La trasformata di Fourier rispetto alla frequenza, per esempio a $z = 0$, è

termine fisico

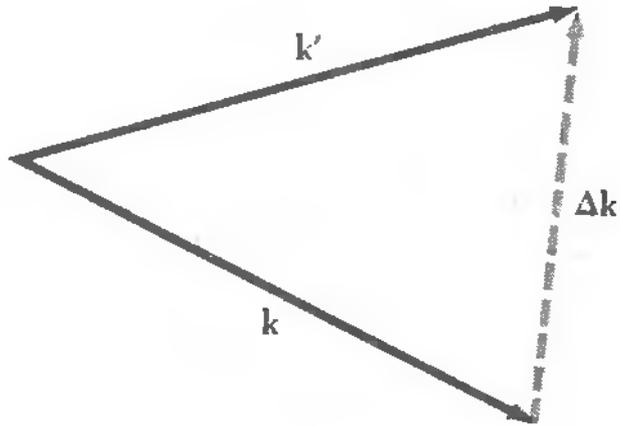
$$\tilde{E}(0, \nu) = \int_{-\infty}^{\infty} E(0, t) e^{-i2\pi\nu t} d\nu = \frac{E_0}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{-i2\pi\nu_0 t} + e^{i2\pi\nu_0 t} \right) e^{-i2\pi\nu t} d\omega = E_0 \frac{\delta(\nu + \nu_0) + \delta(\nu - \nu_0)}{2} = \tilde{E}(0, -\nu)$$

parte reale

parte immaginaria



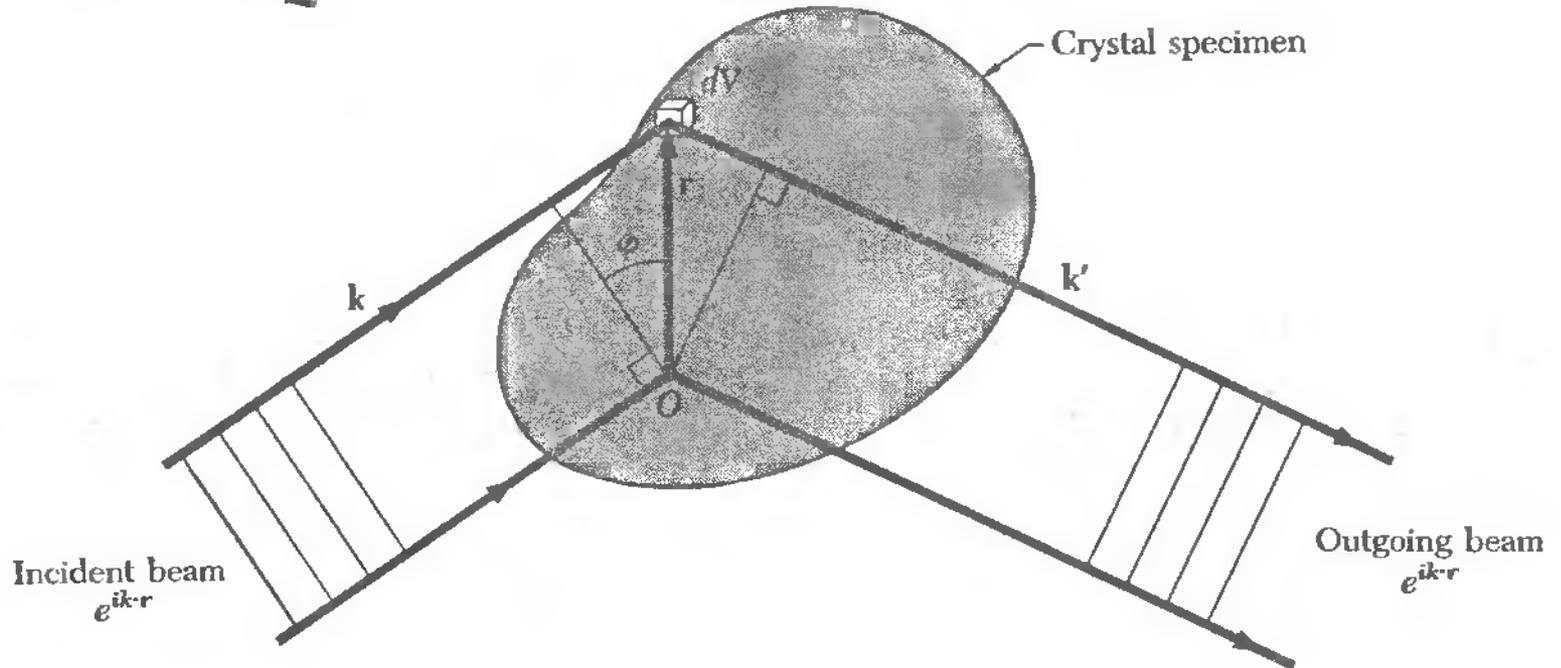
Somma di onde: struttura dalla trasformata di Fourier di radiazione diffratta.



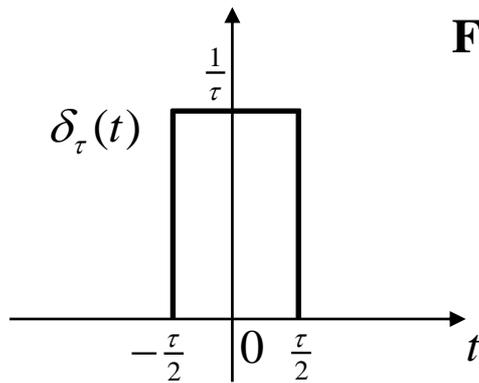
$$E_{\text{diffratto}}(\Delta \mathbf{k}) \propto \int n(\mathbf{r}) e^{-i\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^3 r$$

variazione del vettore d'onda
("scattering vector")

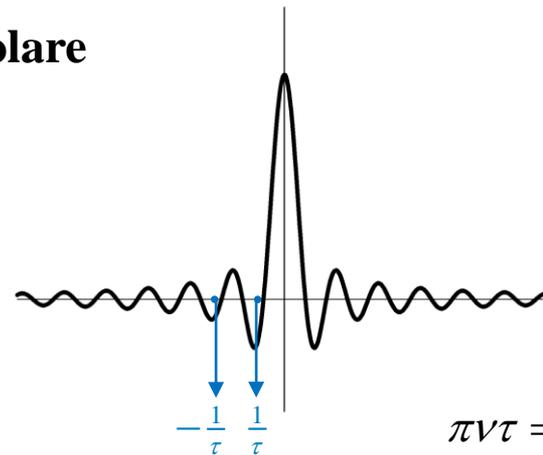
concentrazione
elettronica locale



Funzione rettangolare

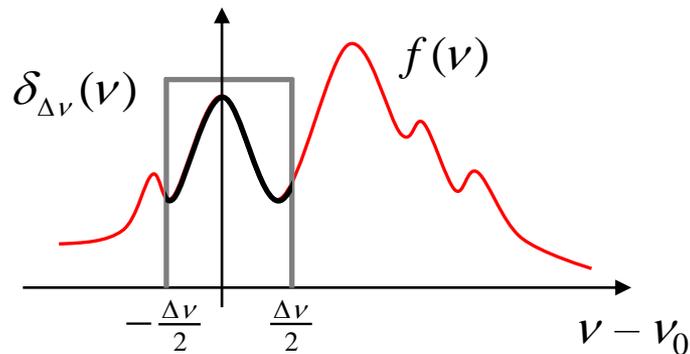


$$\delta_\tau(t) = \begin{cases} \frac{1}{\tau} & \text{for } -\frac{\tau}{2} < t < \frac{\tau}{2} \\ 0 & \text{for } |t| > \frac{\tau}{2} \end{cases}$$

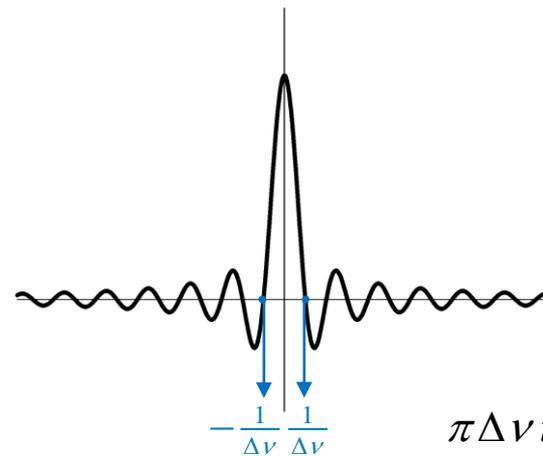


$$\pi\nu\tau = \pm\pi \rightarrow \nu = \pm\frac{1}{\tau} \equiv \pm\Delta\nu$$

$$\tilde{\delta}_\tau(\nu) = \frac{\sin(2\pi\nu\tau/2)}{2\pi\nu\tau/2} = \frac{\sin(\pi\tau\nu)}{\pi\tau\nu} \equiv \text{sinc}(\pi\tau\nu)$$



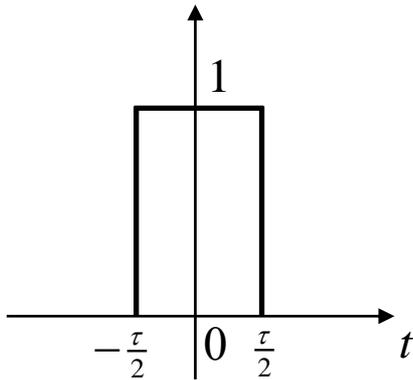
$$\delta_{\Delta\nu}(\nu) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta\nu} & \text{for } -\frac{\Delta\nu}{2} < t < \frac{\Delta\nu}{2} \\ 0 & \text{for } |t| > \frac{\Delta\nu}{2} \end{cases}$$



$$\pi\Delta\nu t = \pm\pi \rightarrow t = \pm\frac{1}{\Delta\nu} \equiv \tau$$

$$\tilde{\delta}_{\Delta\nu}(t) = \text{sinc}(\pi\Delta\nu t)$$

Funzione rettangolare non normalizzata



$$\Pi_{\tau}(t) = \begin{cases} 1 & \text{for } -\frac{\tau}{2} < t < \frac{\tau}{2} \\ 0 & \text{for } |t| > \frac{\tau}{2} \end{cases}$$

$$\tilde{\Pi}_{\tau}(\nu) = \int_{t_0 - \frac{\tau}{2}}^{t_0 + \frac{\tau}{2}} e^{-i2\pi\nu t} dt = \frac{\sin(\pi\nu\tau)}{\pi\nu} = \tau \frac{\sin(\pi\nu\tau)}{\pi\nu\tau} = \tau \operatorname{sinc}(\pi\tau\nu)$$

Proprietà di linearità. Se $f(t)$ e $g(t)$ hanno trasformate di Fourier $\tilde{f}(\nu)$ e $\tilde{g}(\nu)$ rispettivamente, allora una qualsiasi combinazione lineare $w(t)$ delle due funzioni ha la trasformata di Fourier

$$\tilde{w}(\nu) \equiv \mathcal{F}[w(t)] = \mathcal{F}[af(t) + bg(t)] = a\mathcal{F}[f(t)] + b\mathcal{F}[g(t)] \equiv a\tilde{f}(\nu) + b\tilde{g}(\nu)$$

Convoluzione di funzioni e proprietà della sua trasformata di Fourier

La convoluzione di due funzioni $f(z)$ e $g(z)$ generalmente complesse di una variabile z è

$$h(z) = f(z) \circ g(z) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} f(u)g(z-u)du$$

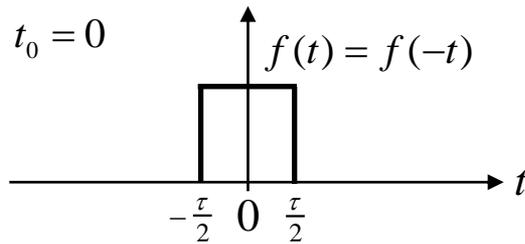
z è il punto a cui è calcolata la convoluzione e u è la variabile di integrazione, che possiamo chiamare come vogliamo, purché il suo nome differisca dal simbolo usato per il punto specifico a cui si calcola la convoluzione. Per esempio, se calcoliamo la convoluzione di due funzioni del tempo a uno specifico istante t_0 , si ha $z = t_0$, mentre come, consueto, possiamo usare $u = t$ per denotare la variabile temporale che copre tutto l'asse dei tempi nell'operazione di integrazione:

$$h(t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)g(t_0 - t)dt$$

Se vogliamo considerare la funzione di convoluzione a un istante generico t , allora $z = t$ e dobbiamo usare un simbolo diverso per indicare la variabile d'integrazione che, per ogni dato t , copre tutto l'asse dei tempi nell'integrazione; per esempio, possiamo scrivere

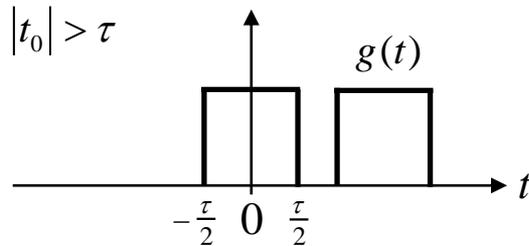
$$h(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(u)g(t-u)du$$

Esemplificazione del significato di convoluzione usando due funzioni rettangolari

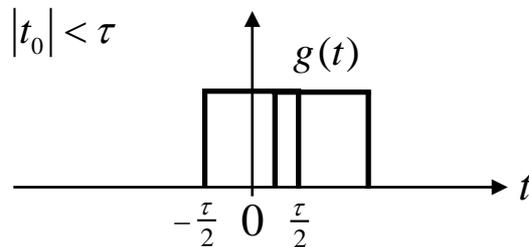


$$g(t) = f(t_0 - t)$$

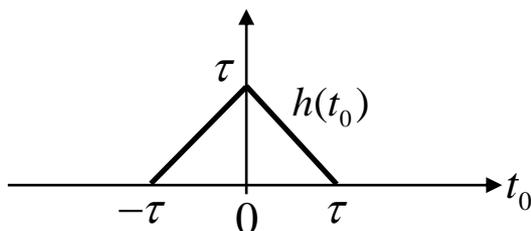
$$g(t) = f(-t) = f(t) \quad \text{and} \quad h(t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} f^2(t) dt = \int_{-\frac{\tau}{2}}^{\frac{\tau}{2}} dt = \tau$$



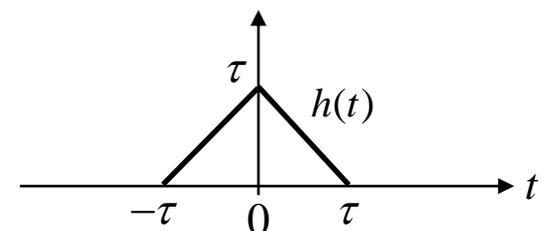
$$h(t) = 0$$



Si può vedere facilmente che $h(t_0)$ varia linearmente con t_0



o, ridenominando la
variabile indipendente,



Abbiamo visto già un esempio di convoluzione

$$h(t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} h(t)\delta(t - t_0)dt = \int_{-\infty}^{\infty} h(t)\delta(t_0 - t)dt$$

Teorema di convoluzione. La trasformata di Fourier della convoluzione di due funzioni è data dal prodotto delle trasformate di Fourier delle due funzioni:

$$h(t) = f(t) \circ g(t) = \mathcal{F}^{-1} \left[\tilde{f}(\nu) \tilde{g}(\nu) \right] \quad \text{cioè} \quad \tilde{h}(\nu) = \mathcal{F} [f(t) \circ g(t)] = \tilde{f}(\nu) \tilde{g}(\nu) = \mathcal{F} [f(t)] \mathcal{F} [g(t)]$$

quindi

$$h(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(u)g(t-u)du = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(\nu)\tilde{g}(\nu)e^{i2\pi\nu t}d\nu$$

Tale teorema porta ai **risultati (importanti in spettroscopia)**

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(t)g^*(t)dt = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(\nu)\tilde{g}^*(\nu)d\nu \quad \text{da cui, per } f(t) = g(t), \quad \int_{-\infty}^{\infty} |f(t)|^2 dt = \int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{f}(\nu)|^2 d\nu$$

e in particolare, se le funzioni f e g sono reali (mentre le loro trasformate di Fourier in generale comunque non lo sono)

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(t)g(t)dt = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(\nu)\tilde{g}^*(\nu)d\nu$$

Abbiamo visto già un esempio di convoluzione

$$h(t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} h(t)\delta(t - t_0)dt = \int_{-\infty}^{\infty} h(t)\delta(t_0 - t)dt$$

Teorema di convoluzione. La trasformata di Fourier della convoluzione di due funzioni è data dal prodotto delle trasformate di Fourier delle due funzioni:

$$\tilde{h}(\nu) = \tilde{f}(\nu) \circ \tilde{g}(\nu) = \mathcal{F}[f(t)g(t)] \rightarrow h(t) = \mathcal{F}^{-1}[\tilde{f}(\nu) \circ \tilde{g}(\nu)] = f(t)g(t) = \mathcal{F}^{-1}[\tilde{f}(\nu)]\mathcal{F}^{-1}[\tilde{g}(\nu)]$$

quindi

$$\tilde{h}(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(u)\tilde{g}(\nu - u)du = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)g(t)e^{-i2\pi\nu t} dt$$

Tale teorema porta ai **risultati (importanti in spettroscopia)**

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(t)g^*(t)dt = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(\nu)\tilde{g}^*(\nu)d\nu \quad \text{da cui, per } f(t) = g(t), \quad \int_{-\infty}^{\infty} |f(t)|^2 dt = \int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{f}(\nu)|^2 d\nu$$

e in particolare, se le funzioni f e g sono reali (mentre le loro trasformate di Fourier in generale comunque non lo sono)

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(t)g(t)dt = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(\nu)\tilde{g}^*(\nu)d\nu$$

Infine, se anche le trasformate di Fourier sono reali, $\int_{-\infty}^{\infty} f(t)g(t)dt = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(v)\tilde{g}(v)dv$

Dimostrazione (per chi vuole approfondire).

Consideriamo una funzione $\varphi(u) \equiv g^*(-u)$. Allora, $\varphi^*(u) = g(-u)$ e $\varphi(-u) = g^*(u)$. Per $\varphi(u)$ si ha

$$\varphi(u) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\varphi}(v)e^{i2\pi v u} dv \rightarrow \varphi^*(u) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\varphi}^*(v)e^{-i2\pi v u} dv \rightarrow g(-u) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\varphi}^*(v)e^{-i2\pi v u} dv$$

e quindi

$$g(u) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\varphi}^*(v)e^{i2\pi v u} dv$$

Vediamo che $\tilde{\varphi}^*(v)$ è la trasformata (o trasformata inversa) di Fourier di $g(u)$: $\tilde{\varphi}^*(v) = \tilde{g}(v)$, quindi

$$\tilde{\varphi}(v) = \tilde{g}^*(v)$$

Il teorema di convoluzione per le funzioni $f(u)$ e $\varphi(u)$ si scrive

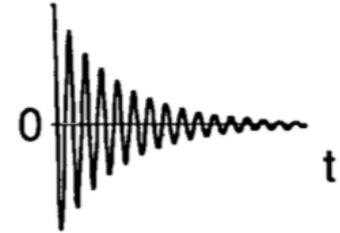
$$\int_{-\infty}^{\infty} f(u)\varphi(t-u)du = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(v)\tilde{\varphi}(v)e^{i2\pi v t} dv$$

In particolare, per $t = 0$,

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(u)\varphi(-u)du = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(v)\tilde{\varphi}(v)dv \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} f(u)g^*(u)du = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(v)\tilde{g}^*(v)dv$$

Esempio dell'uso del teorema di convoluzione per trovare la trasformata di Fourier di un prodotto di funzioni. Negli esperimenti di NMR, si incontra un segnale oscillante con ampiezza decrescente esponenzialmente, che è chiamato il decadimento libero dell'induzione ("free induction decay" o FID) ed è descritto da una legge del tipo

$$h(t) = e^{-\frac{t}{\tau}} \cos(2\pi\nu_0 t)$$



Poniamo $a = 1/\tau$. Abbiamo

$$h(t) = f(t)g(t) \quad \text{con} \quad f(t) = e^{-at} \begin{cases} 0 & t < 0 \\ e^{-at} & t \geq 0 \end{cases} \quad \text{e} \quad g(t) = \cos(2\pi\nu_0 t)$$

Si può calcolare l'integrale seguente usando la formula di Eulero:

$$\tilde{h}(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)g(t)e^{-i2\pi\nu t} dt = \int_0^{\infty} e^{-at} \cos(2\pi\nu_0 t) e^{-i2\pi\nu t} dt = \int_0^{\infty} e^{-(a+i2\pi\nu)t} \cos(2\pi\nu_0 t) dt$$

In alternativa, si può usare il teorema di convoluzione, secondo il quale

$$\tilde{h}(\nu) = \tilde{f}(\nu) \circ \tilde{g}(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(u) \tilde{g}(\nu - u) du$$

$$\tilde{f}(v) = \frac{1}{a + i2\pi v}, \quad \tilde{g}(v) = \frac{\delta(v + v_0) + \delta(v - v_0)}{2} \quad (\text{si veda sopra})$$

$$\begin{aligned} \tilde{h}(v) &= \tilde{f}(v) \circ \tilde{g}(v) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(u) \tilde{g}(v - u) du \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{a + i2\pi u} \frac{\delta(v - u + v_0) + \delta(v - u - v_0)}{2} du = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{a + i2\pi(v + v_0)} + \frac{1}{a + i2\pi(v - v_0)} \right] \\ &= \frac{1}{2} \frac{a + i2\pi(v - v_0) + a + i2\pi(v + v_0)}{(a + i2\pi v + i2\pi v_0)(a + i2\pi v - i2\pi v_0)} = \frac{1}{2} \frac{2a + i4\pi v}{(a + i2\pi v)^2 - i^2 4\pi^2 v_0^2} = \frac{a + i2\pi v}{(a + i2\pi v)^2 + 4\pi^2 v_0^2} \end{aligned}$$

$$\frac{1}{2} \frac{1}{a + i2\pi(v - v_0)} = \frac{1}{2} \frac{a - i2\pi(v - v_0)}{a^2 + 4\pi^2(v - v_0)^2} = \frac{1}{2} \left[\frac{a}{a^2 + 4\pi^2(v - v_0)^2} - i \frac{2\pi(v - v_0)}{a^2 + 4\pi^2(v - v_0)^2} \right]$$

Prima abbiamo visto che $\int_{-\infty}^{\infty} |f(t)|^2 dt = \int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{f}(\nu)|^2 d\nu$

Dato un segnale $f(t)$, la quantità

$$P(t) = |f(t)|^2$$

(o una quantità ad essa proporzionale) viene definita la sua **potenza istantanea**; quindi

$$\bar{P} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} |f(t)|^2 dt$$

ha il significato di una **potenza media**, mentre

$$E = \int_{-\infty}^{\infty} |f(t)|^2 dt = \int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{f}(\nu)|^2 d\nu$$

di un' **energia**. Allora, la quantità

$$dE = |\tilde{f}(\nu)|^2 d\nu$$

è il contributo all'energia del segnale da parte delle sue componenti con frequenza compresa tra ω e $\omega + d\omega$.

La convoluzione di segnali è diffusamente usata in spettroscopia. Vediamo alcuni esempi.

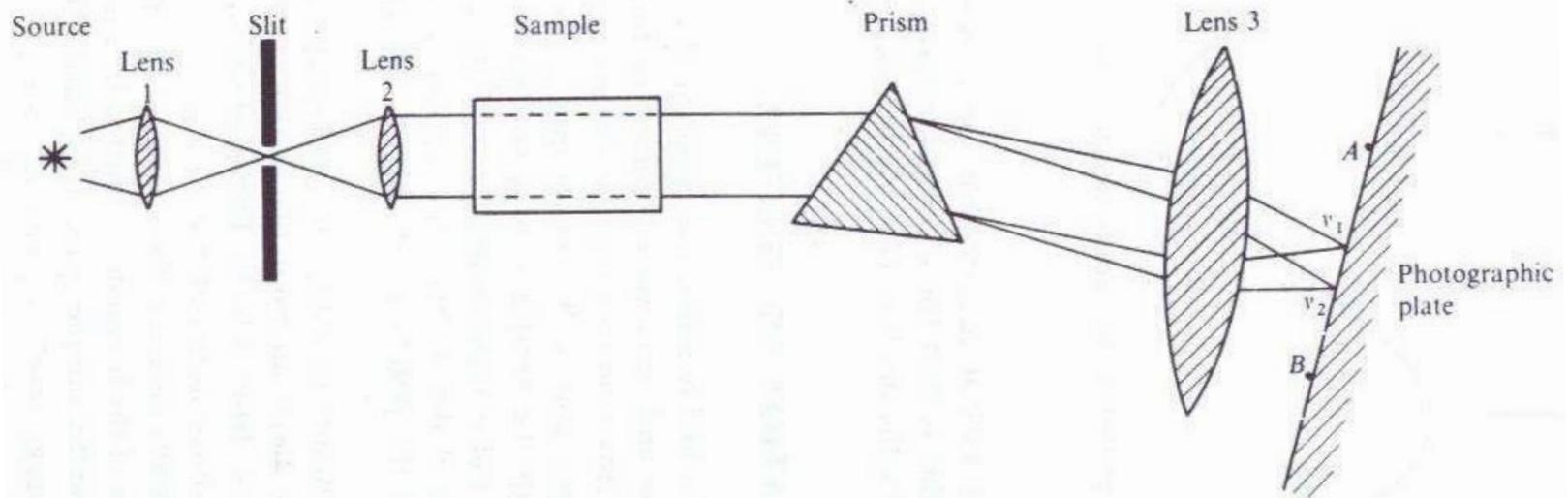


Figure 1.9 Schematic diagram of a spectrometer suitable for operation in the visible region.

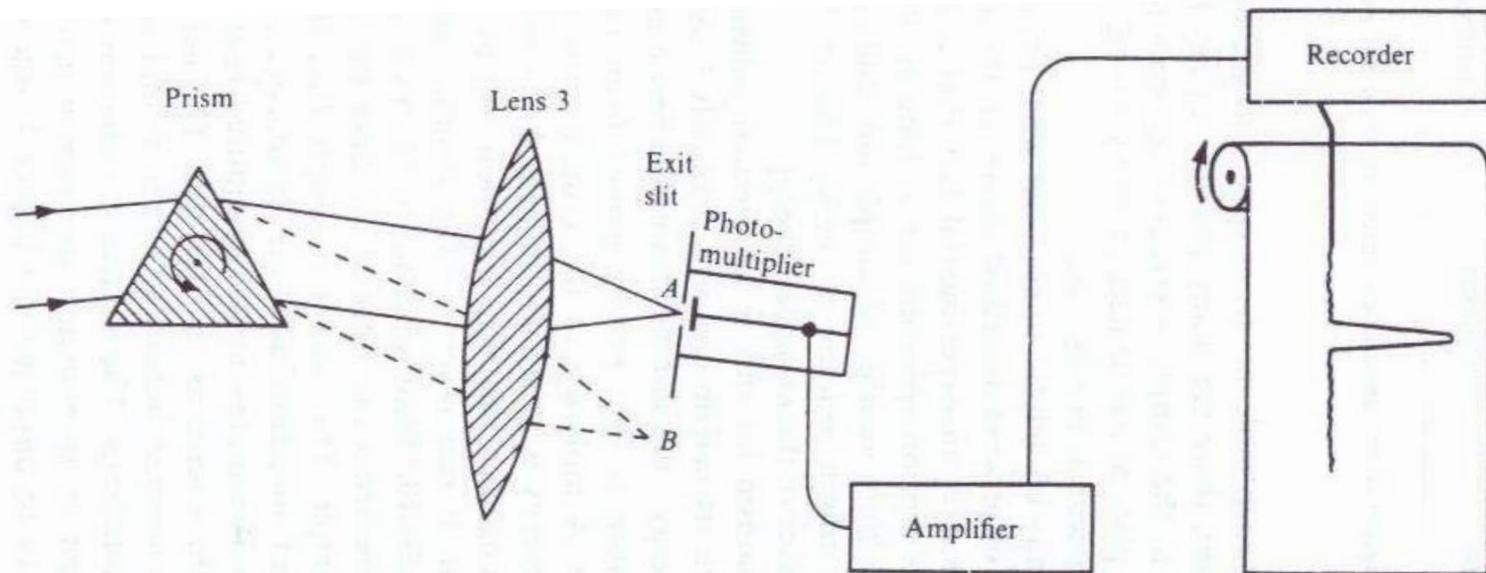


Figure 1.11 Schematic diagram of a spectrometer employing a photomultiplier or other sensitive element as detector and recording the spectrum graphically on chart paper.

potere risolvete

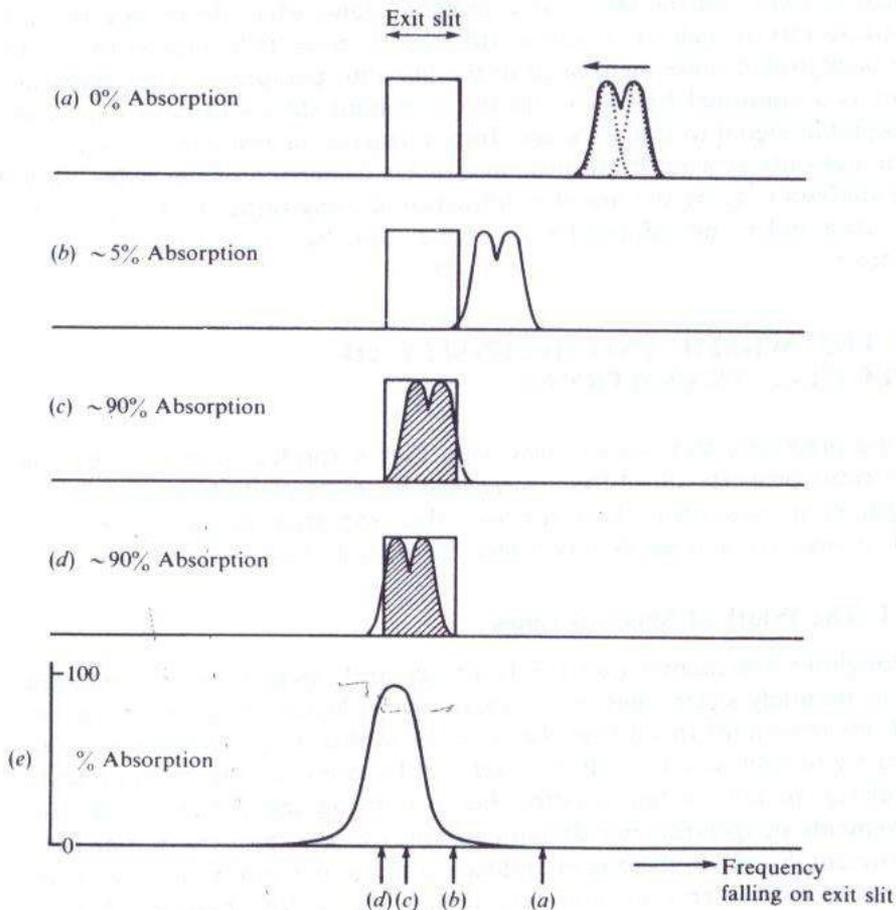


Figure 1.17 Illustrating the relation between slit width and resolving power: see text for discussion.

Si raccoglie $\tilde{I}(\nu)$ a ogni ν . Variando le condizioni del monocromatore, la fenditura dovrebbe selezionare di volta in volta luce di una sola ν , comportandosi quindi come una delta di Dirac rispetto alla frequenza. In corrispondenza a tale frequenza ν , raccogliendo tutta la luce che arriva sul rilevatore, uno dovrebbe ottenere solo l'intensità alla frequenza ν , come desiderato, in quanto

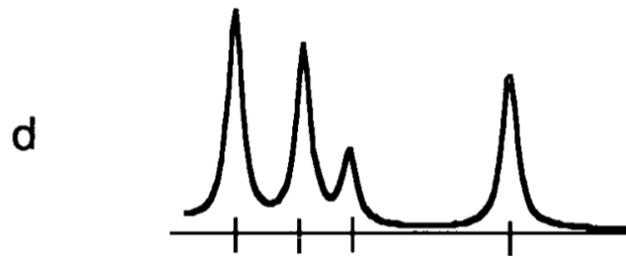
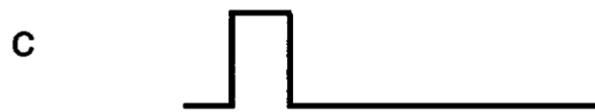
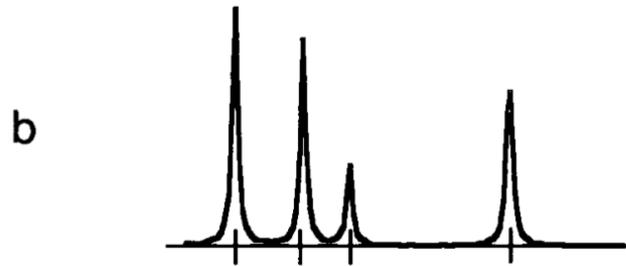
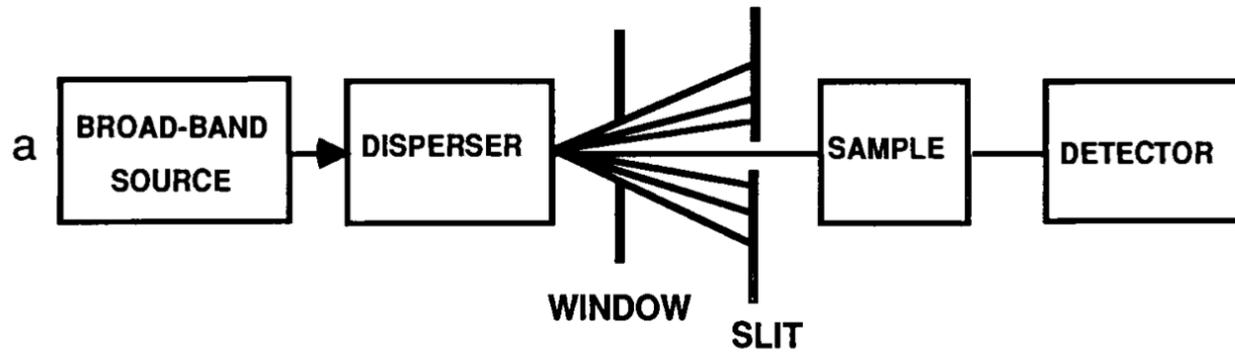
$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(\nu' - \nu) \tilde{I}(\nu') d\nu' = \tilde{I}(\nu).$$

La fenditura fa passare, invece, un certo intervallo di frequenze $\Delta\nu$ alla volta, comportandosi per esempio come la funzione gradino in figura, per cui si ottiene

$$\int_{\Delta\nu} \tilde{I}(\nu') d\nu'$$

che tanto più differisce da $\tilde{I}(\nu)$ quanto più grande è $\Delta\nu$. Si ha, così uno "smearing" dei valori di $\tilde{I}(\nu)$, che implica un allargamento dello spettro e progressiva perdita delle sue caratteristiche al crescere di $\Delta\nu$.

Tuttavia, se la fenditura si comporta quasi come una delta di Dirac, poca luce è raccolta, (intensità insufficiente). Si deve trovare un giusto compromesso.



Spettroscopia a trasformata di Fourier

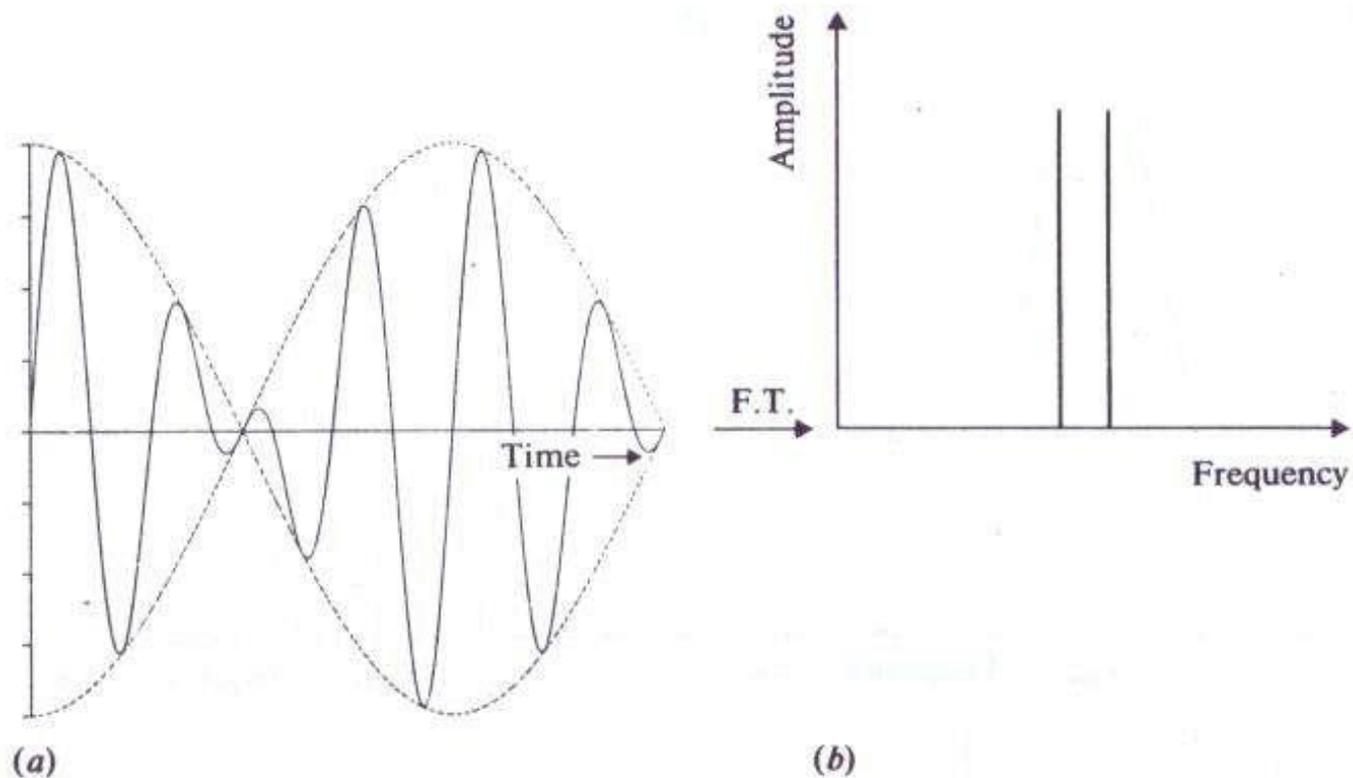
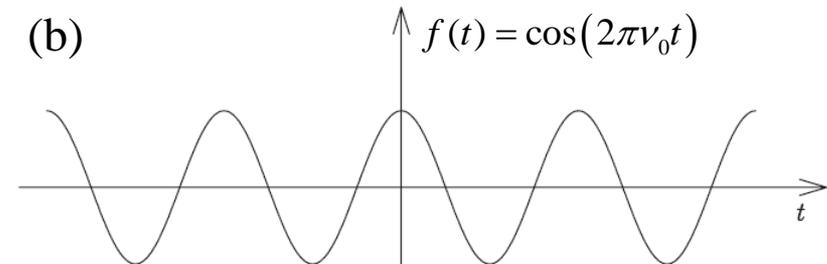
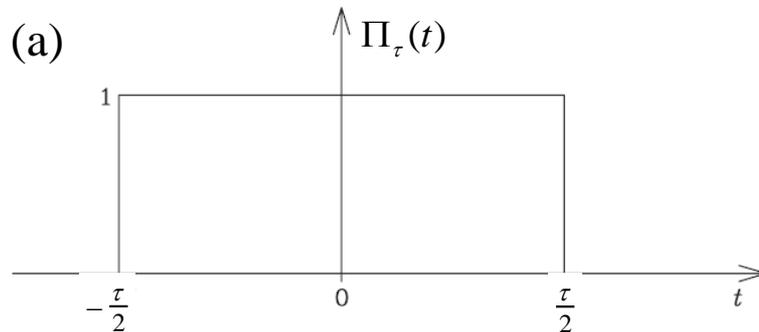


Figure 1.19 The use of the Fourier transform to convert the summed sine waves of (a) into their frequency spectrum, (b).

Il detector raccoglie tutta l'informazione spettrale simultaneamente e il computer decodifica tale informazione (tramite trasformata di Fourier), producendo lo spettro.

Si consideri un semplice segnale cosinusoidale proveniente dal sistema studiato. In realtà, il segnale viene necessariamente acquisito per un tempo finito, cioè, si fa il suo prodotto con un segnale rettangolare come in (a) per ottenere il segnale in (b).

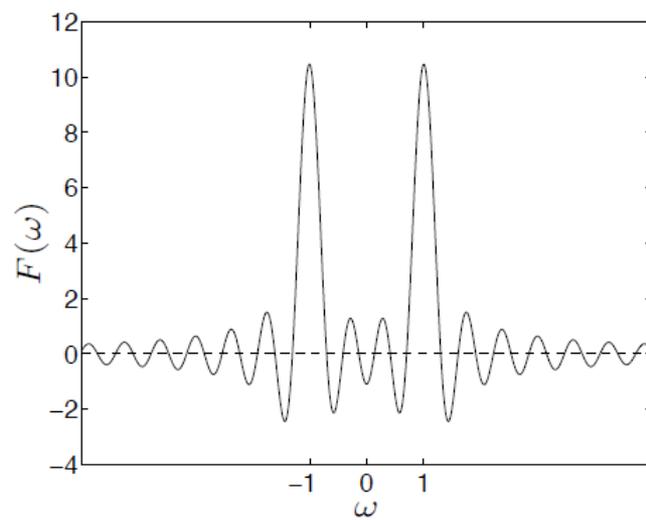
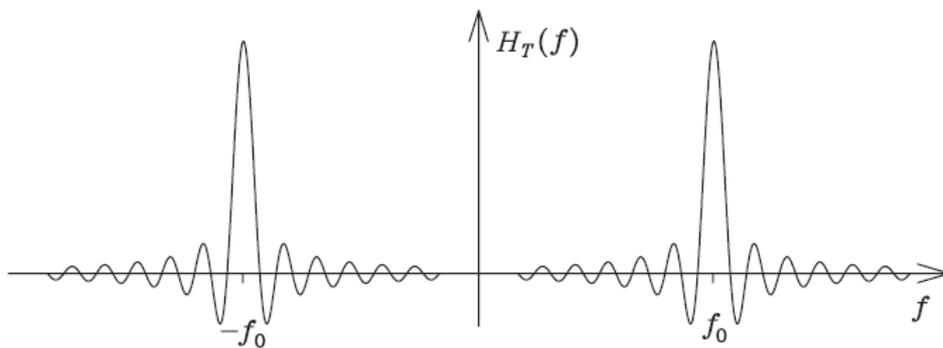
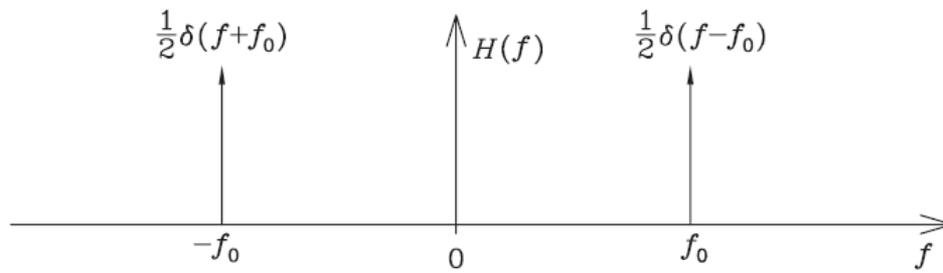


La trasformata (inversa) di Fourier della convoluzione è il prodotto delle trasformate di Fourier:

$$\tilde{\Pi}_\tau(\nu) = \tau \operatorname{sinc}(\pi\tau\nu), \quad \tilde{f}(\nu) = \frac{\delta(\nu + \nu_0) + \delta(\nu - \nu_0)}{2}$$

$$\tilde{f}_{\text{ricavata da misura}}(\nu) = \mathcal{F}^{-1}[\Pi_\tau(t)f(t)] = \tilde{\Pi}_\tau(\nu) \circ \tilde{f}(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Pi}_\tau(\nu') \tilde{f}(\nu - \nu') d\nu'$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \tau \operatorname{sinc}(\pi\tau\nu') \frac{\delta(\nu - \nu' + \nu_0) + \delta(\nu - \nu' - \nu_0)}{2} d\nu' = \frac{\tau}{2} \left\{ \operatorname{sinc}[\pi\tau(\nu + \nu_0)] + \operatorname{sinc}[\pi\tau(\nu - \nu_0)] \right\}$$



Bibliografia

Jyrki Kauppinen and Jari Partanen, *Fourier Transforms in Spectroscopy*, Wiley-WHC, 2011

<https://redox-college.s3.ap-south-1.amazonaws.com/kmc/2020/Apr/26/Ii3Cx59PBkwtvsRsYNAK.pdf>

Alan G. Marshall and Francis R. Verdun, *Fourier Transforms in NMR, Optical and Mass Spectrometry*, Elsevier 1990

Cohen-Tannoudji, C.; Diu, B.; Laloë, F. *Quantum Mechanics*; Hermann: Paris, 1977; pages 1457-1479.