固体物理学 I　講義ノート

井野明洋
ino@hiroshima-u.ac.jp
広島大学

2017 年 11 月 16 日

第 A 章

フーリエ変換

A.1　流儀によらない公式

フーリエ変換の定義には、様々な流儀が混在するのが、混乱の種である。 この節では、フーリエ変換の定義に依存しない数学公式を、整理しておく。

■ 極限としてのデルタ関数

一般に、ピークの面積を 1 に保ちつつ幅を狭くすると、その極限で **デルタ関数** が得られる。 次の五種類のピーク関数は、面積が 1 、高さが $1/a$ になるように規格化されている。

$$
\begin{aligned}
\delta(x) &= \lim_{a\to+0} \frac{1}{a} \exp\!\left(-\frac{\pi\, x^2}{a^2}\right) && \text{ガウシアン (Gaussian)} \\
&= \lim_{a\to+0} \frac{1}{a} \cdot \frac{a^2}{\pi^2 x^2 + a^2} && \text{ローレンチアン (Lorentzian)} \\
&= \lim_{a\to+0} \frac{1}{a} \exp\!\left(-\frac{2\,|x|}{a}\right) && \text{両側指数関数 (Bilateral exponential)} \\
&= \lim_{a\to+0} \frac{1}{a} \operatorname{Sinc}\!\left(\frac{x}{a}\right) && \text{正規化シンク関数 (Normalized cardinal sine)} \\
&= \lim_{a\to+0} \frac{1}{a} \operatorname{Rect}\!\left(\frac{x}{a}\right) && \text{矩形関数 (Rectangular function)}
\end{aligned}
$$

ただし、 $\operatorname{Sinc}(x) \overset{\text{def.}}{=} \dfrac{\sin(\pi x)}{\pi x}$ 　および　 $\operatorname{Rect}(x) \overset{\text{def.}}{=} \begin{cases} 1 & \left(|x| < \frac{1}{2} \text{ のとき}\right) \\ 0 & \left(|x| > \frac{1}{2} \text{ のとき}\right) \end{cases}$ と定義した。

ガウシアンの面積を求めるには、次の有名な積分公式を用いる。 導出は省略する。

ガウス積分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a\,(x-b-ic)^2} dx \;=\; \sqrt{\frac{\pi}{a}} \qquad \left(\begin{array}{l} a \text{ は正の実数} \\ b \text{ は任意の実数} \end{array} \right) \tag{A.1}$$

ローレンチアンやシンク関数の面積を求めるには、複素積分が使えるが、 詳しくは他書を参照せよ。 矩形関数と両側指数関数の面積は、自明であろう。

■ デルタ関数の伸縮則

$c \neq 0$ のとき、$\delta(cx) = \lim_{a\to+0} \frac{1}{a}\,\mathrm{Rect}\left(\frac{|c|\,x}{a}\right) = \frac{1}{|c|} \lim_{a/|c|\to+0} \frac{1}{a/|c|}\,\mathrm{Rect}\left(\frac{x}{a/|c|}\right) = \frac{1}{|c|}\,\delta(x)$ と変形できることから、次の公式が得られる。

$$\text{デルタ関数の伸縮則} \qquad \delta(ax) \;=\; \frac{1}{|a|}\delta(x) \qquad \big(a \neq 0 \text{ のとき} \big) \tag{A.2}$$

■ デルタ関数の積分表示

フーリエ変換の核心原理を、以下に示す。

デルタ関数の積分表示

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk\; e^{ikx} \;=\; 2\pi\;\delta(x) \tag{A.3}$$

(A.3) 式は、デルタ関数が **すべての波数成分を均一に含む** ことを示している。 (A.3) 式の導出には、収束因子 ϵ を入れた積分 $\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} e^{-\epsilon|x|} dx$ または $\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} e^{-\epsilon x^2} dx$ を計算して、$\epsilon \to 0$ の極限をとる。 (A.3) 式において、$k = 2\pi\xi$ と変数変換すると、次のように表すこ

ともできる。

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, e^{2\pi i\,\xi x} \;=\; \delta(x) \tag{A.3$'$}$$

■ ディリクレ積分核

ディリクレ核の定義

$$D_N(\theta) \overset{\text{def.}}{=} \sum_{n=-N}^{N} e^{in\theta} \;=\; \frac{\sin\left(N+\frac{1}{2}\right)\theta}{\sin\frac{1}{2}\theta} \tag{A.4}$$

ディリクレ核の極限公式

$$D_\infty(\theta) \;=\; \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta} \;=\; 2\pi \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(\theta - 2\pi\, m) \tag{A.5}$$

(A.4) 式の中辺から右辺は、等比級数の和の公式を用いて導出する。

$$\sum_{n=-N}^{N} e^{in\theta} = \frac{e^{-iN\theta} - e^{i(N+1)\theta}}{1 - e^{i\theta}} = \frac{e^{-i(N+\frac{1}{2})\theta} - e^{i(N+\frac{1}{2})\theta}}{e^{-i\theta/2} - e^{i\theta/2}} = \frac{\sin\left(N+\frac{1}{2}\right)\theta}{\sin\frac{1}{2}\theta}$$

また、定義式 (A.4) より、ディリクレ核は **周期関数** になる。

$$D_N(\theta + 2\pi) \;=\; D_N(\theta) \tag{A.6}$$

$N \to \infty$ のとき、(A.4) 式右辺の分子 $\sin\left(N+\dfrac{1}{2}\right)\theta$ の波長が $\dfrac{2\pi}{2N+1} \to 0$ と短くなって、$D_N(\theta)$ の値がゼロを中心に激しく振動する。物理量は常に微小な区間で平均化されるので、$\theta \neq 2\pi\, n$ のときは、$\lim_{N\to\infty} D_N(\theta) \sim 0$ とみなすことができる[*1][*2]。 ただし、$\theta \simeq 2\pi\, n$ のときは、分母もゼロになるので話が変わる。 (A.6) 式より、

$$D_N(0) \;=\; \lim_{\theta\to 0} \frac{\sin\left(N+\frac{1}{2}\right)\theta}{\sin\frac{1}{2}\theta} = 2N+1$$

となるので、$\lim_{N\to\infty} D_N(0) = +\infty$ と発散する。 一方で、$D_N(\theta)$ の一周期にわたる積分を計算すると、 (A.6) 式より、

$$\int_{-\pi}^{\pi} D_N(\theta)\, d\theta \;=\; \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \left(1 \;+ \sum_{\substack{n=-N \\ n\neq 0}}^{N} e^{in\theta} \right) \;=\; 2\pi \;+\; \sum_{\substack{n=-N \\ n\neq 0}}^{N} \left[\frac{e^{in\theta}}{in} \right]_{\theta=-\pi}^{\theta=\pi} \;=\; 2\pi$$

*1 **Rieman-Lebesgue の定理：** $f(x)$ が区分的に連続のとき、任意の a、b について、$\lim_{n\to\infty} \int_a^b f(x)\, e^{inx} dx = 0$

*2 物理の立場としては、限りなく狭い幅で平均化すると値が消えるものは、実質的にゼロとみなせるだろう。この発想を数学的に定式化したのが超関数 (distribution) で、概念としては、直訳の通り、**分布** を表す。

となる。従って、$\theta = 2\pi n$ のピーク面積は、N によらず常に 2π であり、$N \to \infty$ の極限でデルタ関数になる。周期性を考慮して、式で表すと、$D_\infty(\theta) = 2\pi \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(\theta - 2\pi\, m)$ となり、(A.5) の公式に到達する。

■ 畳み込み積分

畳み込み積分 を「$*$」という記号で表記し、次のように定義する。

畳み込み積分 $$(f*g)(x) \overset{\text{def.}}{=} \int_{-\infty}^{\infty} f(x')\, g(x-x')\, dx' \qquad \text{(A.7)}$$

定義式から、畳み込み積分の **代数的性質** が導かれる。

$$\begin{aligned}
&\text{交換則} & f*g &= g*f \\
&\text{結合則} & (f*g)*h &= f*(g*h) \\
&\text{線形性} & f*(ag+bh) &= a\,(f*g) + b\,(f*h) \\
&\text{単位元} & \delta*f &= f
\end{aligned}$$

ただし、a、b は定数、f、g、h は任意の関数、δ はディラックのデルタ関数を表す。また、部分積分の性質により

$$\text{微分則} \qquad \frac{d}{dx}\Big[(f*g)(x)\Big] = \frac{d\,f(x)}{dx} * g(x) = f(x) * \frac{d\,g(x)}{dx}$$

が成り立つ。また、デルタ関数と畳み込み積分を組み合わせると、様々な **関数操作** を表現できる。

$$\begin{aligned}
\delta(x)\, * \ &\text{は、恒等操作} & \delta(x) * f(x) &= f(x) \\
\delta(x-x_0)\, * \ &\text{は、並進操作} & \delta(x-x_0) * f(x) &= f(x-x_0) \\
\sum_n \delta(x-na)\, * \ &\text{は、周期化操作} & \sum_n \delta(x-na) * f_0(x) &= \sum_n f_0(x-na) \\
\frac{d\,\delta(x)}{dx}\, * \ &\text{は、微分操作} & \frac{d\,\delta(x)}{dx} * f(x) &= \frac{d\,f(x)}{dx}
\end{aligned}$$

A.2　無限区間・連続波数

■ 波数表示

変換式の定義

正変換
$$F(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-2\pi i\,\xi x} f(x) \tag{A.8a}$$

逆変換
$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, e^{2\pi i\,\xi x} F(\xi) \tag{A.8b}$$

復元性の根拠
(A.3′) 式より
$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, e^{2\pi i\,\xi x} = \delta(x)$$

線形性
$$a\,f(x) + b\,g(x) \xleftrightarrow{\text{FT}} a\,F(\xi) + b\,G(\xi)$$

伸縮則
$$f\,(ax) \xleftrightarrow{\text{FT}} \frac{1}{|a|}\,F\left(\frac{\xi}{a}\right)$$

$$\begin{cases} \textbf{並進} & f(x - x_0) \xleftrightarrow{\text{FT}} F(\xi)\, e^{-2\pi i\,\xi x_0} \\ \textbf{変調} & f(x)\, e^{2\pi i\,\xi_0 x} \xleftrightarrow{\text{FT}} F(\xi - \xi_0) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \textbf{畳み込み} & (f * g)\,(x) \xleftrightarrow{\text{FT}} F(\xi)\cdot G(\xi) \\ \textbf{単純積} & f(x)\cdot g(x) \xleftrightarrow{\text{FT}} (F * G)\,(\xi) \end{cases}$$

微分則
$$\frac{d}{dx} f(x) \xleftrightarrow{\text{FT}} 2\pi i\,\xi \cdot F(\xi)$$

積分則
$$\int_{-\infty}^{x} f(X)\, dX \xleftrightarrow{\text{FT}} \frac{F(\xi)}{2\pi i\,\xi}$$

正規性
$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \left|f(x)\right|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi\, \left|F(\xi)\right|^2$$

双対性
$$F(x) \xleftrightarrow{\text{FT}} f(-\xi)$$

■ 角波数表示

$k = 2\pi\xi$ とおいて、逆空間の座標を ξ から k に変換すると、一般的な形式に移行する。

変換式の定義

$$\text{正変換} \qquad F(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ikx} f(x) \tag{A.11a}$$

$$\text{逆変換} \qquad f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} F(k) \tag{A.11b}$$

復元性の根拠
(A.3) 式より

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} = \delta(x)$$

$$\textbf{線形性} \quad a\,f(x) + b\,g(x) \xleftrightarrow{\text{FT}} a\,F(k) + b\,G(k) \tag{A.12}$$

$$\textbf{伸縮則} \quad f(ax) \xleftrightarrow{\text{FT}} \frac{1}{|a|} F\left(\frac{k}{a}\right) \tag{A.13}$$

$$\textbf{並進} \quad f(x - x_0) \xleftrightarrow{\text{FT}} F(k)\, e^{-ikx_0} \tag{A.14a}$$

$$\textbf{変調} \quad f(x)\, e^{ik_0x} \xleftrightarrow{\text{FT}} F(k - k_0) \tag{A.14b}$$

$$\textbf{畳み込み} \quad (f * g)(x) \xleftrightarrow{\text{FT}} F(k) \cdot G(k) \tag{A.15a}$$

$$\textbf{単純積} \quad f(x) \cdot g(x) \xleftrightarrow{\text{FT}} \frac{1}{2\pi}(F * G)(k) \tag{A.15b}$$

$$\textbf{微分則} \quad \frac{d}{dx} f(x) \xleftrightarrow{\text{FT}} ik \cdot F(k) \tag{A.16}$$

$$\textbf{積分則} \quad \int_{-\infty}^{x} f(X)\, dX \xleftrightarrow{\text{FT}} \frac{F(k)}{ik} \tag{A.17}$$

$$\textbf{正規性} \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |f(x)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} |F(k)|^2 \tag{A.18}$$

$$\textbf{双対性} \quad F(x) \xleftrightarrow{\text{FT}} 2\pi\, f(-k) \tag{A.19}$$

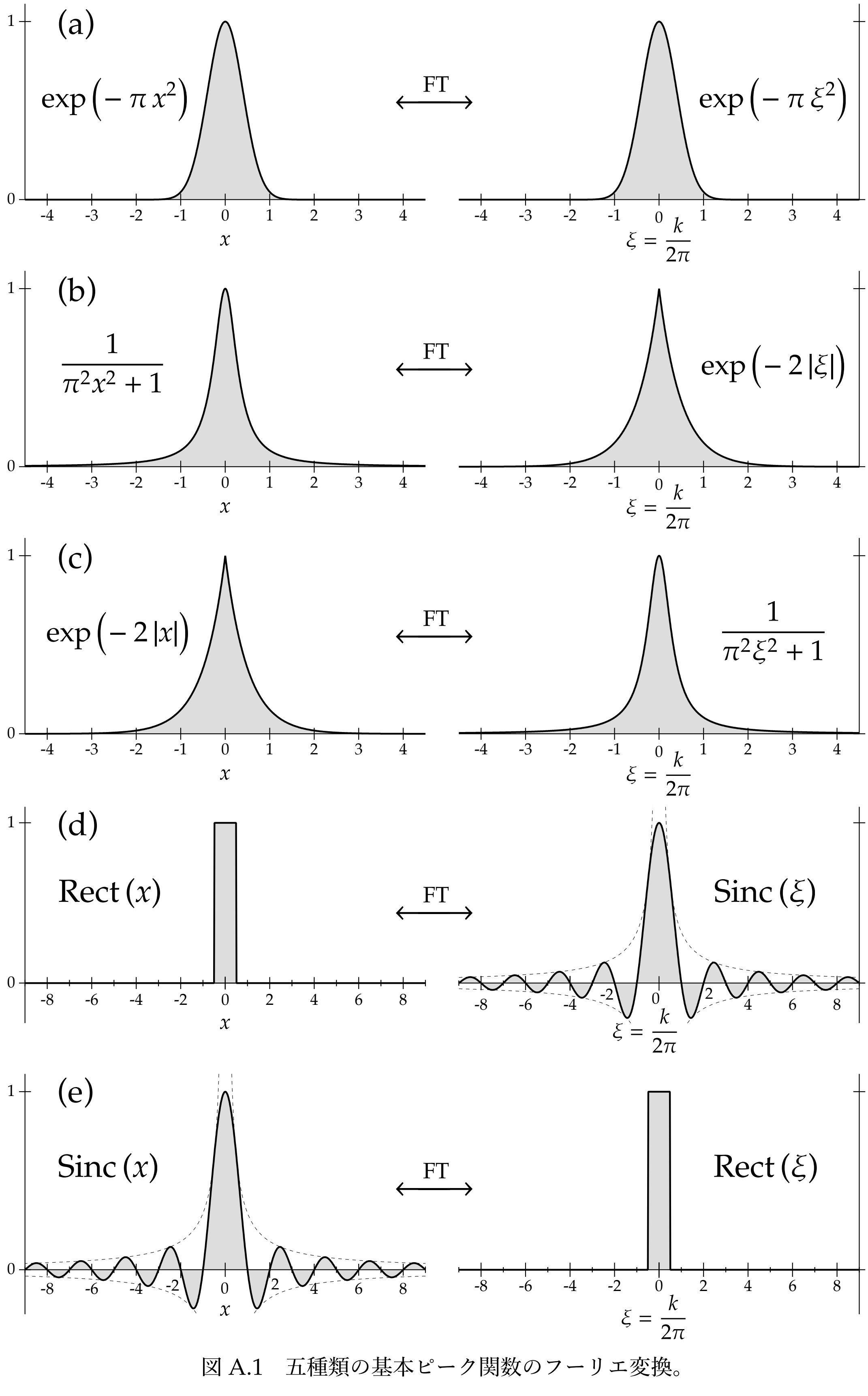

図 A.1　五種類の基本ピーク関数のフーリエ変換。

■ 基本要素

$$\textbf{ガウシアン}\qquad \exp\left(-\pi x^2\right) \xleftrightarrow{\text{FT}} \exp\left(-\pi\,\xi^2\right) = \exp\left(-\frac{k^2}{4\pi}\right) \tag{A.20}$$

$$\begin{cases} \text{ローレンチアン} \quad \dfrac{1}{\pi^2 x^2+1} \xleftrightarrow{\text{FT}} \exp\left(-2\,|\xi|\right) = \exp\left(-\dfrac{|k|}{\pi}\right) & \text{(A.21a)} \\ \text{両側指数関数} \quad \exp\left(-2\,|x|\right) \xleftrightarrow{\text{FT}} \dfrac{1}{\pi^2\xi^2+1} = \dfrac{4}{k^2+4} & \text{(A.21b)} \end{cases}$$

$$\begin{cases} \text{矩形関数} \quad \mathrm{Rect}\,(x) \xleftrightarrow{\text{FT}} \mathrm{Sinc}\,(\xi) = \mathrm{Sinc}\left(\dfrac{k}{2\pi}\right) & \text{(A.22a)} \\ \text{正規化シンク関数} \quad \mathrm{Sinc}\,(x) \xleftrightarrow{\text{FT}} \mathrm{Rect}\,(\xi) = \mathrm{Rect}\left(\dfrac{k}{2\pi}\right) & \text{(A.22b)} \end{cases}$$

$$\begin{array}{c}\text{ガウシアン}\\ \text{の伸縮}\end{array} \quad \frac{1}{\sqrt{a}}\exp\left(-\pi\frac{x^2}{a^2}\right) \xleftrightarrow{\text{FT}} \sqrt{a}\,\exp\left(-\pi\,a^2\xi^2\right) = \sqrt{a}\,\exp\left(-\frac{a^2k^2}{4\pi}\right) \tag{A.23}$$

$$\text{標準偏差}\ \sigma \qquad \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \xleftrightarrow{\text{FT}} \exp\left(-\frac{\sigma^2k^2}{2}\right)$$

いずれのピーク関数についても、面積を一定に保ちつつ幅を狭めると、その極限でデルタ関数になり、フーリエ変換の出発点 (A.3) に戻る。

$$\begin{cases} \textbf{デルタ関数} \quad \delta\,(x) \xleftrightarrow{\text{FT}} 1 \\ \textbf{定数} \quad 1 \xleftrightarrow{\text{FT}} \delta(\xi) = 2\pi\,\delta(k) \end{cases}$$

$$\text{デルタ関数列} \quad \sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta(x-na) \xleftrightarrow{\text{FT}} b\sum_{m=-\infty}^{\infty}\delta(\xi-mb) = g\sum_{m=-\infty}^{\infty}\delta(k-mg)$$

$$\text{周期関数} \quad \sum_{n=-\infty}^{\infty}f_0(x-na) \xleftrightarrow{\text{FT}} b\,F_0(\xi)\sum_{m=-\infty}^{\infty}\delta(\xi-mb) = g\,F_0(k)\sum_{m=-\infty}^{\infty}\delta(k-mg)$$

ただし、 $ba=1$ 、 $ga=2\pi$

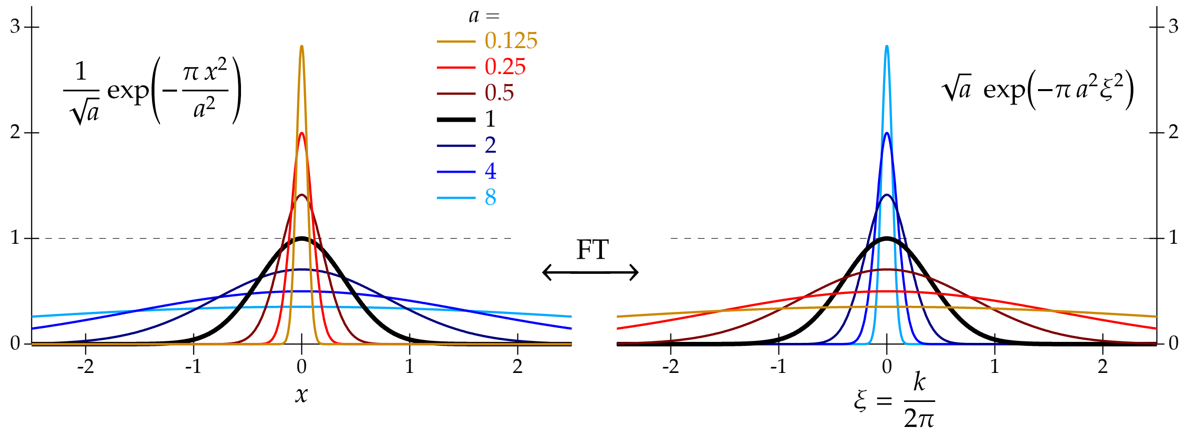

図 A.2　ガウシアンのピーク幅の伸縮。

■ 波数表示の補足

- 実空間と逆空間の **双対性** が、**完璧に表現される** 形式。
- 数学やデジタル信号理論などで用いられるが、物理の分野では あまり使われない。
- 逆空間座標 ξ の定義が、物理分野の慣習と違うので、混乱を避けられない。
- 指数関数の肩に必ず 2π が入るのが、うざいかもしれない。
- ξ の符号を反対に定義する流派もある。
- いずれにしても、正変換と逆変換は対になっており、**両者を組み合わせて元に戻ること** が要請される。

■ 角波数表示の補足

- 角波数の採用により、逆空間座標 k の定義が、物理分野の **慣習通り**。
- 厳密には、ξ を波数、k を **角波数** と呼び分けるのが正しいが、一般には、どちらも単に「波数」と呼ばれている。 文脈で判断せよ。
- 規格化定数 $\dfrac{1}{2\pi}$ を変換式のどこに入れるかで、少なくとも三つの流派に分かれ、さらに、k の符号も考慮すると、六通りの流派に分かれる。
- いずれにしても、正変換と逆変換は対になっており、**両者を組み合わせて元に戻ること** が要請される。
- **角波数表示** を採用すると、畳み込み定理やデルタ関数列に規格化因子が出現する。
- **非ユニタリな定義** を採用すると、双対性と正規性にも 2π の因子が出現する。

A.3　有限区間・離散波数

固体物理の分野では、**周期的境界条件**

$$f(x+L)=f(x)$$

を課して、実空間の大きさを L に制限し、波数空間を離散化した形式がよく用いられる。

変換式の定義

$$\text{正変換}\qquad F_k = \frac{1}{L}\int_0^L dx\, e^{-ikx} f(x) \tag{A.24a}$$

$$\text{逆変換}\qquad f(x) = \sum_k F_k\, e^{ikx} \tag{A.24b}$$

ただし、n を整数として、波数は $k=\dfrac{2\pi}{L}n$ に **離散化** される。

$$\text{復元性の根拠}\quad \begin{cases} \displaystyle\sum_k e^{ikx} = L\sum_n \delta(x-nL) & \text{(A.25a)} \\ \displaystyle\int_0^L dx\, e^{-ikx} = L\,\delta_{k0} & \text{(A.25b)} \end{cases}$$

(A.25a) を示すには、公式 (A.5) を用いる。

$$\sum_k e^{ikx} = \sum_n e^{i\frac{2\pi x}{L}n} = \sum_n 2\pi\,\delta\!\left(\frac{2\pi x}{L} - 2\pi n\right) = \sum_n L\,\delta(x-nL)$$

(A.25b) を示すには、$k=0$ とそれ以外に場合分けをして、積分を実行する。

$$\int_0^L dx\, e^{-ikx} = \int_0^L dx\, e^{-i\frac{2\pi}{L}nx} = L\,\delta_{n\,n'} = L\,\delta_{k\,k'}$$

■ 主な性質

$$\begin{cases} \textbf{畳み込み}\quad \dfrac{1}{L}(f*g)(x) \xleftrightarrow{\text{FT}} F_k\cdot G_k & \text{(A.26a)} \\ \textbf{単純積}\quad f(x)\cdot g(x) \xleftrightarrow{\text{FT}} (F*G)_k & \text{(A.26b)} \end{cases}$$

$$\textbf{正規性} \qquad \frac{1}{L}\int_0^L dx\,\left|f(x)\right|^2 = \sum_k \left|F_k\right|^2 \tag{A.27}$$

ただし、**離散数列の畳み込み** は、次のように定義する。

$$(F * F)_k \stackrel{\text{def.}}{=} \sum_K F_K\,G_{k-K} \tag{A.7′}$$

線型性 (A.12)、変調と並進 (A.14)、微分則 (A.16) と積分則 (A.17) は、連続角波数表示と同様に成り立つ。

■ 基本要素

$$\begin{cases} \textbf{デルタ関数} & \displaystyle\sum_n \delta(x-nL) \xleftrightarrow{\text{FT}} \frac{1}{L} \\ \textbf{定数} & 1 \xleftrightarrow{\text{FT}} \delta_{k0} \end{cases}$$

$$\begin{array}{ll} \text{デルタ関数列} & \displaystyle\sum_{n=0}^{N} \delta(x-na) \xleftrightarrow{\text{FT}} \frac{1}{a}\sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta_{k,mg} \\ \text{周期関数} & \displaystyle\frac{1}{L}\sum_{n=0}^{N} f(x-na) \xleftrightarrow{\text{FT}} \frac{1}{a}\sum_{m=-\infty}^{\infty} F_{mg} \end{array}$$

ただし、 $L = Na$ および $ga = 2\pi$

■ 補足

- **固体物理** の分野で、よく用いられる。
- 角波数の採用により、逆空間座標 k の定義が、物理分野の **慣習通り**。
- 規格化定数 $\dfrac{1}{L}$ を変換式のどこに入れるかで、少なくとも三つの流派に分かれ、さらに、k の符号も考慮すると、六通りの流派に分かれる。
- いずれにしても、正変換と逆変換は対になっており、**両者を組み合わせて元に戻ること** が要請される。

A.4 三次元

一次元から三次元の移行は容易である。 ここでは、無限区間・角波数表示の式の一部を三次元化する。 他の形式の三次元化も同様である。

$$\textbf{三次元デルタ関数} \qquad \delta^3(\mathbf{r}) \overset{\text{def.}}{=} \delta(x)\,\delta(y)\,\delta(z)$$

$$\begin{aligned}
&\textbf{正変換} \quad F(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{r}\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{r}) &&= \int dx\, e^{-ik_x x}\int dy\, e^{-ik_y y}\int dz\, e^{-ik_z z} f(\mathbf{r}) \\
&\textbf{逆変換} \quad f(\mathbf{r}) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} F(\mathbf{k}) &&= \int \frac{dk_x}{2\pi} e^{ik_x x}\int \frac{dk_y}{2\pi} e^{ik_y y}\int \frac{dk_z}{2\pi} e^{ik_z z} f(\mathbf{k})
\end{aligned}$$

$$\begin{cases}
\textbf{畳み込み} \quad (f * g)\,(\mathbf{r}) \xleftrightarrow{\text{FT}} F(\mathbf{k})\cdot G(\mathbf{k}) & \text{(A.28a)} \\
\textbf{単純積} \quad f(\mathbf{r})\cdot g(\mathbf{r}) \xleftrightarrow{\text{FT}} \dfrac{1}{(2\pi)^3}(F * G)\,(\mathbf{k}) & \text{(A.28b)}
\end{cases}$$

$$\begin{aligned}
&\textbf{点列 と 面列} && \sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta^3(\mathbf{r}-n\mathbf{a}) \xleftrightarrow{\text{FT}} 2\pi\sum_{m=-\infty}^{\infty}\delta(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}-2\pi\, m) \\
&\textbf{ブラベー格子} && \sum_{\mathbf{R}}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{R}) \xleftrightarrow{\text{FT}} \frac{(2\pi)^3}{V_{\text{uc}}}\sum_{\mathbf{G}}\delta^3(\mathbf{k}-\mathbf{G}) \\
&\textbf{周期関数} && \sum_{\mathbf{R}} f_0(\mathbf{r}-\mathbf{R}) \xleftrightarrow{\text{FT}} \frac{(2\pi)^3}{V_{\text{uc}}} F_0(\mathbf{k})\sum_{\mathbf{G}}\delta^3(\mathbf{k}-\mathbf{G})
\end{aligned}$$

$$\textbf{実格子と逆格子} \qquad \mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3 \xleftrightarrow{\text{FT}} \mathbf{G} = m_1\mathbf{g}_1 + m_2\mathbf{g}_2 + m_3\mathbf{g}_3$$

$$\textbf{正規直交性} \qquad \mathbf{g}_i\cdot\mathbf{a}_j = 2\pi\,\delta_{ij}$$

$$\textbf{単位胞の体積} \qquad V_{\text{uc}} = \begin{vmatrix} \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \mathbf{a}_3 \end{vmatrix} = (2\pi)^3 \begin{vmatrix} \mathbf{g}_1 \\ \mathbf{g}_2 \\ \mathbf{g}_3 \end{vmatrix}^{-1}$$