Relações de Kramers & Kronig ou relações de dispersão

Da análise do modelo de Drude & Lorentz segue que a polarização em um meio dispersivo não é proporcional ao campo elétrico. No entanto, definimos a polarização complexa, $\mathcal{P}$, que é proporcional ao campo elétrico complexo, isto é,

$$\boldsymbol{\mathcal{P}} = \chi_c \boldsymbol{\epsilon},$$

onde

$$\chi_c = \chi_c(\omega)$$

é a susceptibilidade elétrica complexa e que depende da frequência. Sendo assim, o campo deslocamento elétrico complexo é dado por

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\mathcal{D}} &= \boldsymbol{\epsilon} + 4\pi\boldsymbol{\mathcal{P}} \\ &= (1 + 4\pi\chi_c)\,\boldsymbol{\epsilon} \\ &= K_c \boldsymbol{\epsilon},\end{aligned}$$

onde também definimos a constante dielétrica complexa,

$$K_c = 1 + 4\pi\chi_c.$$

Sendo assim, o campo deslocamento elétrico real não é, em geral, proporcional ao campo elétrico real, pois

$$\begin{aligned}\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) &= \mathrm{Re}\left[\boldsymbol{\mathcal{D}}(\mathbf{r}, t)\right] \\ &= \mathrm{Re}\left[K_c \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{r}, t)\right].\end{aligned}$$

Essa análise tem sido feita para ondas monocromáticas, mas vale também para um pacote de ondas com uma distribuição finita de frequências, que passamos a considerar a seguir.

Podemos pensar, no caso geral, que $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$ é um pacote de ondas monocromáticas e escrever

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\, \widetilde{\mathbf{D}}(\mathbf{r}, \omega) \exp(-i\omega t).$$

Ora, $\widetilde{\mathbf{D}}(\mathbf{r}, \omega) \exp(-i\omega t)$ é um campo monocromático, de frequência ω, e, portanto, podemos escrever

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\mathcal{D}}(\omega; \mathbf{r}, t) &= \widetilde{\mathbf{D}}(\mathbf{r}, \omega) \exp(-i\omega t) \\ &= K_c(\omega)\, \widetilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) \exp(-i\omega t)\end{aligned}$$

para um campo elétrico complexo monocromático dado por

$$\boldsymbol{\epsilon}(\omega; \mathbf{r}, t) = \widetilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) \exp(-i\omega t)$$

que, integrado sobre ω, resulta no campo elétrico real:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\, \widetilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, \omega) \exp(-i\omega t).$$

Logo, para um meio dispersivo, podemos escrever

$$\mathbf{D}(\mathbf{r},t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\, K_c(\omega)\, \widetilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r},\omega) \exp(-i\omega t)\,.$$

Da transformada de Fourier inversa para o campo elétrico real acima, temos

$$\widetilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r},\omega) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dt'\, \mathbf{E}(\mathbf{r},t') \exp(i\omega t')\,.$$

Com isso,

$$\begin{aligned}
\mathbf{D}(\mathbf{r},t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\, K_c(\omega)\, \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dt'\, \mathbf{E}(\mathbf{r},t') \exp(i\omega t') \exp(-i\omega t) \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\, \left[1 + 4\pi\chi_c(\omega)\right] \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dt'\, \mathbf{E}(\mathbf{r},t') \exp\left[-i\omega(t-t')\right] \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dt'\, \mathbf{E}(\mathbf{r},t') \left\{\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\, \exp\left[-i\omega(t-t')\right]\right\} \\
&+ \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\, \left[4\pi\chi_c(\omega)\right] \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dt'\, \mathbf{E}(\mathbf{r},t') \exp\left[-i\omega(t-t')\right] \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dt'\, \mathbf{E}(\mathbf{r},t')\, \delta(t-t') \\
&+ \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\, \left[4\pi\chi_c(\omega)\right] \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dt'\, \mathbf{E}(\mathbf{r},t') \exp\left[-i\omega(t-t')\right] \\
&= \mathbf{E}(\mathbf{r},t) \\
&+ \int_{-\infty}^{+\infty} dt'\, \left\{\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\, \left[4\pi\chi_c(\omega)\right] \exp\left[-i\omega(t-t')\right]\right\} \mathbf{E}(\mathbf{r},t')\,,
\end{aligned}$$

isto é,

$$\mathbf{D}(\mathbf{r},t) = \mathbf{E}(\mathbf{r},t) + \int_{-\infty}^{+\infty} dt'\, G(t-t')\, \mathbf{E}(\mathbf{r},t')\,,$$

onde definimos

$$G(\tau) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\, \left[4\pi\chi_c(\omega)\right] \exp(-i\omega\tau)\,.$$

Com a substituição de variável definida por

$$\tau = t - t',$$

podemos também escrever

$$\mathbf{D}(\mathbf{r},t) = \mathbf{E}(\mathbf{r},t) + \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\, G(\tau)\, \mathbf{E}(\mathbf{r},t-\tau)\,.$$

Fica claro, assim, que o campo deslocamento elétrico não é proporcional ao campo elétrico no mesmo instante de tempo, pois recebe contribuições do campo elétrico em outros tempos, isto é, a relação acima, entre **D** e **E**, não é local no tempo.

Usando o modelo harmônico de Drude & Lorentz, a dispersão em meios materiais é caracterizada por uma susceptibilidade elétrica complexa dada por

$$\chi_c = \sum_k \frac{Nn_k e^2}{m\left(\omega_k^2 - \omega^2 - i\gamma_k\omega\right)},$$

onde n_k é o número de elétrons do tipo k por molécula, N é o número de moléculas por unidade de volume, e é a carga eletrônica, m é a massa do elétron, γ_k é o coeficiente de dissipação, ω_k é a frequência natural de oscilação dos elétrons do tipo k e ω é a frequência da onda eletromagnética incidente. Seguindo o livro de J. D. Jackson, vamos utilizar o fato de que χ_c pode ser aproximada por

$$\chi_c \approx \frac{Nn_1 e^2}{m\left(\omega_1^2 - \omega^2 - i\gamma_1\omega\right)},$$

se $\omega \approx \omega_1$. Nesse caso,

$$\begin{aligned} G(\tau) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\, \frac{4\pi N n_1 e^2}{m\left(\omega_1^2 - \omega^2 - i\gamma_1\omega\right)} \exp(-i\omega\tau) \\ &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\, \frac{\omega_p^2}{\omega_1^2 - \omega^2 - i\gamma_1\omega} \exp(-i\omega\tau), \end{aligned}$$

onde ω_p é a frequência de plasma do material. Essa integral pode ser calculada se usarmos o teorema dos Resíduos. Para isso, consideremos a integral no plano complexo:

$$I(C) = \oint_C dz\, \frac{\omega_p^2}{\omega_1^2 - z^2 - i\gamma_1 z} \exp(-iz\tau).$$

Os polos do integrando dessa integral ocorrem quando

$$\omega_1^2 - z^2 - i\gamma_1 z = 0,$$

isto é,

$$z^2 + i\gamma_1 z - \omega_1^2 = 0,$$

ou seja,

$$z_\pm = \frac{-i\gamma_1 \pm \sqrt{4\omega_1^2 - \gamma_1^2}}{2}.$$

Mesmo quando

$$4\omega_1^2 - \gamma_1^2 < 0,$$

se $\omega_1 \neq 0$, ambos os polos localizam-se no semi-plano complexo com $\mathrm{Im}(z) < 0$, supondo, como sempre, que $\gamma_1 > 0$. Portanto, para $\tau < 0$ podemos tomar o contorno C no semi-plano complexo superior e obter

$$\begin{aligned} I(C) &= \oint_C dz\, \frac{\omega_p^2}{\omega_1^2 - z^2 - i\gamma_1 z} \exp(-iz\tau) \\ &= 0, \end{aligned}$$

ou seja, para $\tau < 0$,

$$\begin{aligned}\oint_C dz\,\frac{\omega_p^2}{\omega_1^2 - z^2 - i\gamma_1 z}\exp(-iz\tau) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\,\frac{\omega_p^2}{\omega_1^2 - \omega^2 - i\gamma_1\omega}\exp(-i\omega\tau)\\ &= 0\end{aligned}$$

e, portanto,

$$G(\tau) = 0,\ \text{para } \tau < 0.$$

Já para $\tau > 0$ o contorno deve ser fechado no semi-plano complexo inferior e, nesse caso, o Teorema dos Resíduos dá

$$\begin{aligned}I(C) &= \oint_C dz\,\frac{\omega_p^2}{\omega_1^2 - z^2 - i\gamma_1 z}\exp(-iz\tau)\\ &= -\oint_C dz\,\frac{\omega_p^2}{z^2 + i\gamma_1 z - \omega_1^2}\exp(-iz\tau)\\ &= 2\pi i\frac{\omega_p^2\exp(-iz_-\tau)}{z_- - z_+} + 2\pi i\frac{\omega_p^2\exp(-iz_+\tau)}{z_+ - z_-}\\ &= 2\pi i\omega_p^2\frac{\exp(-iz_+\tau) - \exp(-iz_-\tau)}{z_+ - z_-}\\ &= 4\pi i\omega_p^2\frac{\exp\left(-i\frac{-i\gamma_1+\sqrt{4\omega_1^2-\gamma_1^2}}{2}\tau\right) - \exp\left(-i\frac{-i\gamma_1-\sqrt{4\omega_1^2-\gamma_1^2}}{2}\tau\right)}{-i\gamma_1 + \sqrt{4\omega_1^2-\gamma_1^2} + i\gamma_1 + \sqrt{4\omega_1^2-\gamma_1^2}}\\ &= 2\pi i\frac{\omega_p^2}{\sqrt{4\omega_1^2-\gamma_1^2}}\left[\exp\left(\frac{-\gamma_1 - i\sqrt{4\omega_1^2-\gamma_1^2}}{2}\tau\right) - \exp\left(\frac{-\gamma_1 + i\sqrt{4\omega_1^2-\gamma_1^2}}{2}\tau\right)\right]\\ &= 2\pi i\frac{\omega_p^2}{\sqrt{4\omega_1^2-\gamma_1^2}}\exp\left(-\frac{\gamma_1}{2}\tau\right)\left[\exp\left(-i\sqrt{\omega_1^2 - \frac{\gamma_1^2}{4}}\tau\right) - \exp\left(i\sqrt{\omega_1^2 - \frac{\gamma_1^2}{4}}\tau\right)\right]\\ &= 4\pi\frac{\omega_p^2}{\sqrt{4\omega_1^2-\gamma_1^2}}\exp\left(-\frac{\gamma_1}{2}\tau\right)\operatorname{sen}\left(\sqrt{\omega_1^2 - \frac{\gamma_1^2}{4}}\tau\right).\end{aligned}$$

Assim,

$$G(\tau) = \frac{\omega_p^2}{\sqrt{\omega_1^2 - \frac{\gamma_1^2}{4}}}\exp\left(-\frac{\gamma_1}{2}\tau\right)\operatorname{sen}\left(\sqrt{\omega_1^2 - \frac{\gamma_1^2}{4}}\tau\right),\ \text{para } \tau > 0.$$

Logo, $G(\tau)$ só não é zero para $\tau > 0$ e, portanto, podemos escrever

$$\begin{aligned}\mathbf{D}(\mathbf{r},t) &= \mathbf{E}(\mathbf{r},t) + \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\,G(\tau)\,\mathbf{E}(\mathbf{r},t-\tau).\\ &= \mathbf{E}(\mathbf{r},t) + \int_0^{\infty} d\tau\,G(\tau)\,\mathbf{E}(\mathbf{r},t-\tau),\end{aligned}$$

mostrando que, neste modelo, o campo deslocamento elétrico depende apenas dos valores do campo elétrico anteriores ao tempo presente, de acordo com o princípio de causalidade. A relação

$$\mathbf{D}(\mathbf{r},t) = \mathbf{E}(\mathbf{r},t) + \int_0^\infty d\tau\, G(\tau)\, \mathbf{E}(\mathbf{r},t-\tau)\,,$$

pode ser tomada como sendo válida apenas porque o princípio de causalidade é válido, independentemente do particular modelo de susceptibilidade elétrica que utilizamos. Assim, mesmo sem realmente conhecermos $G(\tau)$, sabemos que, por causalidade, a relação entre $\mathbf{D}$ e $\mathbf{E}$ deve ser dada como acima. Além disso,

$$G(\tau) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\ \left[4\pi\chi_c(\omega)\right]\exp(-i\omega\tau)$$

e, invertendo, podemos escrever

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\, G(\tau)\exp(i\omega\tau) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\ \exp(i\omega\tau)\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega'\ \left[4\pi\chi_c(\omega')\right]\exp(-i\omega'\tau) \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega'\ \left[4\pi\chi_c(\omega')\right]\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\ \exp\left[i(\omega-\omega')\tau\right] \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega'\ \left[4\pi\chi_c(\omega')\right]\delta(\omega-\omega') \\
&= 4\pi\chi_c(\omega)\,,
\end{aligned}$$

isto é,

$$\chi_c(\omega) = \frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\, G(\tau)\exp(i\omega\tau)$$

e, como

$$G(\tau) = 0,\ \text{para}\ \tau < 0,$$

segue que

$$\chi_c(\omega) = \frac{1}{4\pi}\int_0^\infty d\tau\, G(\tau)\exp(i\omega\tau)\,,$$

independentemente da escolha do modelo; apenas o princípio de causalidade está presente nessa expressão para a susceptibilidade elétrica.

Vamos agora tomar a continuação analítica da susceptibilidade e escrever, para z complexo,

$$\chi_c(z) = \frac{1}{4\pi}\int_0^\infty d\tau\, G(\tau)\exp(iz\tau)\,.$$

Como $\mathbf{D}$ e $\mathbf{E}$ são reais,

$$\begin{aligned}
\mathbf{D}(\mathbf{r},t) &= \mathbf{E}(\mathbf{r},t) + \int_0^{+\infty} d\tau\, G(\tau)\, \mathbf{E}(\mathbf{r},t-\tau) \\
&= \mathbf{E}(\mathbf{r},t) + \int_0^{+\infty} d\tau\, G^*(\tau)\, \mathbf{E}(\mathbf{r},t-\tau)\,,
\end{aligned}$$

implicando que

$$G^*(\tau) \quad = \quad G(\tau)\,,$$

já que a relação acima é suposta valer para quaisquer campos $\mathbf{D}$ e $\mathbf{E}$ que existem na natureza. Portanto,

$$\begin{aligned}
\chi_c(z^*) &= \frac{1}{4\pi}\int_0^{+\infty} d\tau\, G(\tau)\exp(iz^*\tau) \\
&= \left[\frac{1}{4\pi}\int_0^{+\infty} d\tau\, G^*(\tau)\exp(-iz\tau)\right]^* \\
&= \left[\frac{1}{4\pi}\int_0^{+\infty} d\tau\, G(\tau)\exp(-iz\tau)\right]^* \\
&= [\chi_c(-z)]^*\,,
\end{aligned}$$

ou seja,

$$[\chi_c(z^*)]^* \quad = \quad \chi_c(-z)\,,$$

que é mais um critério que um modelo fisicamente aceitável de susceptibilidade elétrica deve satisfazer.

Como $\exp(-iz\tau)$ é uma função analítica, segue que $\chi_c(z)$ será analítica no semi-plano complexo superior se $G(\tau)$ for finita para todo τ. No entanto, é necessário que

$$\lim_{\tau\to\infty} G(\tau) \quad = \quad 0 \tag{1}$$

para que $\chi_c(z)$ também seja analítica sobre o eixo real. Para ver isso, suponha que, conforme τ cresce acima de um certo valor, $G(\tau)$ assuma um valor finito diferente de zero. Supondo que $\chi_c(z)$ seja analítica em cada ponto do eixo real mesmo com $G(\tau)$ finita, então é necessário que $\chi_c(z)$ seja contínua no eixo real, isto é,

$$\lim_{\eta\to 0^+}\chi_c(a+i\eta) \quad = \quad \lim_{\eta\to 0^-}\chi_c(a+i\eta)\,,$$

com $a\in\mathbb{R}$. Então,

$$\lim_{\eta\to 0^+}\int_0^{\infty} d\tau\, G(\tau)\exp[i(a+i\eta)\tau] \quad = \quad \lim_{\eta\to 0^-}\int_0^{\infty} d\tau\, G(\tau)\exp[i(a+i\eta)\tau]\,,$$

isto é,

$$\lim_{\eta\to 0^+}\int_0^{\infty} d\tau\, G(\tau)\exp(ia\tau-\eta\tau) \quad = \quad \lim_{\eta\to 0^-}\int_0^{\infty} d\tau\, G(\tau)\exp(ia\tau-\eta\tau)\,,$$

ou seja,

$$''\lim_{\eta\to 0^+}(\text{algo finito})'' \quad = \quad ''\lim_{\eta\to 0^-}(\pm\infty)''\,,$$

que é uma contradição. Logo, temos que a Eq. (1) deve ser válida para que $\chi_c(z)$ seja analítica no eixo real.

A Eq. (1), de fato, é verdade para dielétricos, mas não é verdade para condutores, para os quais $G(\tau)\to 4\pi\sigma$ quando $\tau\to\infty$. Assim, para dielétricos, sem condutividade alguma, $\chi_c(z)$ é analítica no semi-plano complexo superior e sobre o eixo real. Então, do teorema de Cauchy decorre que

$$\chi_c(z) \quad = \quad \frac{1}{2\pi i}\oint_C dz'\,\frac{\chi_c(z')}{z'-z},$$

se C for um contorno que contenha um intervalo do eixo real e feche-se no semi-plano complexo superior. Também é importante notarmos que

$$\begin{aligned}
\chi_c(\omega) &= \frac{1}{4\pi}\int_0^{+\infty} d\tau\, G(\tau)\exp(i\omega\tau) \\
&= \frac{1}{4\pi i\omega}\int_0^{+\infty} d\tau\, G(\tau)\frac{\partial}{\partial\tau}\exp(i\omega\tau) \\
&= \frac{1}{4\pi i\omega}\int_0^{+\infty} d\tau\, \frac{\partial}{\partial\tau}\left[G(\tau)\exp(i\omega\tau)\right] \\
&- \frac{1}{4\pi i\omega}\int_0^{+\infty} d\tau\, G'(\tau)\exp(i\omega\tau),
\end{aligned}$$

onde

$$G'(\tau) = \frac{dG(\tau)}{d\tau}.$$

Notemos que, como vimos, no modelo ilustrativo acima,

$$\lim_{\tau\to 0^-} G(\tau) = 0.$$

Também notamos que

$$\begin{aligned}
\int_0^{+\infty} d\tau\,\frac{\partial}{\partial\tau}\left[G(\tau)\exp(i\omega\tau)\right] &= \lim_{\eta\to 0^+}\int_\eta^{+\infty} d\tau\,\frac{\partial}{\partial\tau}\left[G(\tau)\exp(i\omega\tau)\right] \\
&= \lim_{\eta\to 0^+}\left[G(\tau)\exp(i\omega\tau)\Big|_\eta^{+\infty}\right] \\
&= \lim_{\eta\to 0^+}\left[-G(\eta)\exp(i\omega\eta)\right] \\
&= -\lim_{\eta\to 0^+} G(\eta),
\end{aligned}$$

pois, para dielétricos,

$$\lim_{\tau\to\infty} G(\tau) = 0.$$

Por continuidade de $G(\tau)$, devemos ter

$$\lim_{\eta\to 0^+} G(\eta) = \lim_{\tau\to 0^-} G(\tau)$$

e, portanto,

$$\int_0^{+\infty} d\tau\,\frac{\partial}{\partial\tau}\left[G(\tau)\exp(i\omega\tau)\right] = 0,$$

implicando em

$$\chi_c(\omega) = \frac{i}{4\pi\omega}\int_0^{+\infty} d\tau\, G'(\tau)\exp(i\omega\tau).$$

Podemos repetir esse procedimento *ad infinitum* e obter

$$\begin{aligned}
\chi_c(\omega) &= \frac{i}{4\pi\omega}\int_0^{+\infty} d\tau\, G'(\tau)\exp(i\omega\tau) \\
&= \frac{1}{4\pi\omega^2}\int_0^{+\infty} d\tau\, G'(\tau)\frac{\partial}{\partial\tau}\exp(i\omega\tau) \\
&= \frac{1}{4\pi\omega^2}\int_0^{+\infty} d\tau\, \frac{\partial}{\partial\tau}\left[G'(\tau)\exp(i\omega\tau)\right] \\
&- \frac{1}{4\pi\omega^2}\int_0^{+\infty} d\tau\, G''(\tau)\exp(i\omega\tau) \\
&= -\frac{G'(0^+)}{4\pi\omega^2} \\
&- \frac{1}{4\pi\omega^2}\int_0^{+\infty} d\tau\, G''(\tau)\exp(i\omega\tau) \\
&= -\frac{G'(0^+)}{4\pi\omega^2} \\
&+ \frac{i}{4\pi\omega^3}\int_0^{+\infty} d\tau\, G''(\tau)\frac{\partial}{\partial\tau}\exp(i\omega\tau) \\
&= -\frac{G'(0^+)}{4\pi\omega^2} \\
&+ \frac{i}{4\pi\omega^3}\int_0^{+\infty} d\tau\, \frac{\partial}{\partial\tau}\left[G''(\tau)\exp(i\omega\tau)\right] \\
&- \frac{i}{4\pi\omega^3}\int_0^{+\infty} d\tau\, G'''(\tau)\exp(i\omega\tau) \\
&= -\frac{G'(0^+)}{4\pi\omega^2} + \frac{iG''(0^+)}{4\pi\omega^3} \\
&- \frac{i}{4\pi\omega^3}\int_0^{+\infty} d\tau\, G'''(\tau)\exp(i\omega\tau),
\end{aligned}$$

ou seja,

$$\chi_c(\omega) = -\frac{G'(0^+)}{4\pi\omega^2} + \frac{iG''(0^+)}{4\pi\omega^3} - \frac{G'''(0^+)}{4\pi\omega^4} + \cdots$$

Esse resultado mostra que

$$\lim_{\omega\to\infty}\chi_c(\omega) = 0.$$

Então, a continuação analítica da susceptibilidade elétrica, isto é,

$$\chi_c(z) = -\frac{G'(0^+)}{4\pi z^2} + \frac{iG''(0^+)}{4\pi z^3} - \frac{G'''(0^+)}{4\pi z^4} + \cdots,$$

também fornece

$$\lim_{|z|\to\infty}\chi_c(z) = 0.$$

Desse resultado, segue que

$$\chi_c(z') \quad \to \quad 0$$

quando o raio do contorno no semi-plano complexo superior tender a infinito e, portanto,

$$\begin{aligned}
\chi_c(z) &= \frac{1}{2\pi i}\oint_C dz'\,\frac{\chi_c(z')}{z'-z} \\
&= \frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega'\,\frac{\chi_c(\omega')}{\omega'-z}.
\end{aligned}$$

Seja η uma quantidade real, positiva e infinitesimal. Então, tomando

$$z \quad = \quad \omega + i\eta,$$

podemos escrever

$$\chi_c(\omega+i\eta) \quad = \quad \frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega'\,\frac{\chi_c(\omega')}{\omega'-\omega-i\eta}$$

e, portanto,

$$\chi_c(\omega) \quad = \quad \frac{1}{2\pi i}\lim_{\eta\to 0^+}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega'\,\frac{\chi_c(\omega')}{\omega'-\omega-i\eta}.$$

Há uma maneira bastante útil de reescrever esse limite:

$$\begin{aligned}
\lim_{\eta\to 0^+}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega'\,\frac{\chi_c(\omega')}{\omega'-\omega-i\eta} &= \mathcal{P}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega'\,\frac{\chi_c(\omega')}{\omega'-\omega} \\
&+ i\pi\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega'\,\chi_c(\omega')\,\delta(\omega'-\omega) \\
&= \mathcal{P}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega'\,\frac{\chi_c(\omega')}{\omega'-\omega} + i\pi\chi_c(\omega).
\end{aligned}$$

Digressão: uma relação útil para denominadores singulares

Consideremos a função complexa

$$f_\eta(x) \quad = \quad \frac{1}{x-i\eta},$$

onde η é uma quantidade real, positiva e infinitesimal. Tipicamente, essa função aparece dentro de integrais como, por exemplo,

$$\lim_{\eta\to 0^+}\int_a^b dx'\,f_\eta(x'-x)\,g(x') \quad = \quad \lim_{\eta\to 0^+}\int_a^b dx'\,\frac{g(x')}{x'-x-i\eta},$$

onde $g(x)$ é uma função de x real, com a e b reais tais que

$$a \quad < \quad x < b.$$

Olhemos, agora, esta representação da função delta de Dirac:

$$\delta\left(x-x'\right) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dk\,\exp\left[ik\left(x-x'\right)\right].$$

Podemos manipular o membro direito dessa expressão assim:

$$\begin{aligned}
\delta\left(x-x'\right) &= \frac{1}{2\pi}\lim_{\eta\to 0^+}\int_{-\infty}^{+\infty} dk\,\exp\left[-\eta\left|k\right|+ik\left(x-x'\right)\right] \\
&= \frac{1}{2\pi}\lim_{\eta\to 0^+}\int_{-\infty}^{0} dk\,\exp\left[\eta k+ik\left(x-x'\right)\right] \\
&+ \frac{1}{2\pi}\lim_{\eta\to 0^+}\int_{0}^{+\infty} dk\,\exp\left[-\eta k+ik\left(x-x'\right)\right] \\
&= \frac{1}{2\pi}\lim_{\eta\to 0^+}\frac{1}{\eta+i\left(x-x'\right)}+\frac{1}{2\pi}\lim_{\eta\to 0^+}\frac{1}{\eta-i\left(x-x'\right)} \\
&= \frac{1}{2\pi}\lim_{\eta\to 0^+}\left[\frac{1}{\eta+i\left(x-x'\right)}+\frac{1}{\eta-i\left(x-x'\right)}\right] \\
&= \frac{1}{2\pi}\lim_{\eta\to 0^+}\frac{2\eta}{\eta^2+\left(x-x'\right)^2} \\
&= \frac{1}{\pi}\lim_{\eta\to 0^+}\frac{\eta}{\eta^2+\left(x-x'\right)^2},
\end{aligned}$$

isto é,

$$\delta\left(x-x'\right) = \lim_{\eta\to 0^+}\frac{\eta}{\pi\left[\eta^2+\left(x-x'\right)^2\right]}.$$

Como

$$\begin{aligned}
\frac{1}{x'-x-i\eta} &= \frac{x'-x+i\eta}{\left(x'-x\right)^2+\eta^2} \\
&= \frac{\left(x'-x\right)}{\left(x'-x\right)^2+\eta^2}+i\frac{\eta}{\left(x'-x\right)^2+\eta^2} \\
&= \frac{\left(x'-x\right)}{\left(x'-x\right)^2+\eta^2}+i\pi\left\{\frac{\eta}{\pi\left[\eta^2+\left(x-x'\right)^2\right]}\right\},
\end{aligned}$$

segue que

$$\begin{aligned}
\lim_{\eta\to 0^+}\int_a^b dx'\,\frac{g\left(x'\right)}{x'-x-i\eta} &= \lim_{\eta\to 0^+}\int_a^b dx'\,g\left(x'\right)\left[\frac{\left(x'-x\right)}{\left(x'-x\right)^2+\eta^2}\right] \\
&+ \lim_{\eta\to 0^+}\int_a^b dx'\,g\left(x'\right)i\pi\left\{\frac{\eta}{\pi\left[\eta^2+\left(x-x'\right)^2\right]}\right\}
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \lim_{\eta\to 0^+}\int_a^b dx'\, g(x') \left[\frac{(x'-x)}{(x'-x)^2+\eta^2}\right] \\
&+ \int_a^b dx'\, g(x')\, i\pi\delta(x-x') \,.
\end{aligned}
$$

Resta entendermos o significado do primeiro integrando do membro direito dessa equação. Sempre que

$$
x' \neq x,
$$

temos

$$
\begin{aligned}
\frac{(x'-x)}{(x'-x)^2+\eta^2} &\approx \frac{(x'-x)}{(x'-x)^2} \\
&= \frac{1}{x'-x},
\end{aligned}
$$

quando $\eta \to 0^+$. No entanto, no único ponto em que

$$
x' = x,
$$

temos

$$
\begin{aligned}
\frac{(x'-x)}{(x'-x)^2+\eta^2} &= \frac{0}{0^2+\eta^2} \\
&= 0
\end{aligned}
$$

e, portanto,

$$
\lim_{\eta\to 0^+}\int_a^b dx'\, g(x') \left[\frac{(x'-x)}{(x'-x)^2+\eta^2}\right] = \mathcal{P}\int_a^b dx'\, \frac{g(x')}{x'-x},
$$

onde o símbolo $\mathcal{P}$ indica que se deve tomar apenas a parte principal da integral que o segue. Com isso, o limite que procuramos pode ser escrito como

$$
\lim_{\eta\to 0^+}\int_a^b dx'\, \frac{g(x')}{x'-x-i\eta} = \mathcal{P}\int_a^b dx'\, \frac{g(x')}{x'-x} + \int_a^b dx'\, g(x')\, i\pi\delta(x-x') \,,
$$

que, com um certo abuso notacional, pode ser indicado assim:

$$
\lim_{\eta\to 0^+}\int_a^b dx'\, \frac{g(x')}{x'-x-i\eta} = \int_a^b dx'\, g(x') \left[\mathcal{P}\frac{1}{x'-x} + i\pi\delta(x-x')\right].
$$

Abusando ainda mais, podemos até mesmo escrever a fórmula útil:

$$
\lim_{\eta\to 0^+}\frac{1}{x'-x-i\eta} = \mathcal{P}\frac{1}{x'-x} + i\pi\delta(x-x') \,.
$$

Fim da digressão