

As relações de Kramers-Kronig

Ricardo José da Silva Afonso*
Instituto de Física de São Carlos - USP
Avenida Trabalhador São-Carlense n° 400
Parque Arnold Schmidt - CEP 13566-590
São Carlos - São Paulo - Brasil
(Dated: 8 de Junho de 2018)

Este artigo tem como objetivo principal derivar as relações de Kramer-Kronig (KK) em meios ópticos lineares que possam ser descrito pelo modelo de Drude-Lorentz. Em seguida, as relações foram investigadas de acordo com suas aplicações no atual quadro das pesquisas em meio ópticos dispersivos. Salientamos alguns exemplos onde as relações de Kramers Kronig poderia ser modificada para explicar meios ópticos não lineares, bem como possíveis métodos que poderiam substituir as relações KK para outros sistemas dispersivos. Por fim, utilizamos um código que simula o modelo de Lorentz para meios dielétricos perfeitos e derivamos a curva da parte real do índice de refração utilizando um código em Python2.

I. INTRODUÇÃO

Em espectroscopia de óptica linear, a análise das relações de K-K possui duas funções práticas dependendo se a medida é baseada na transmissão ou na reflexão da luz. No primeiro caso, geralmente mede-se a componente complexa da transmissão ao passo que no último tem-se a parte real da reflexão. As relação dão origem a um conceito mais aprofundado da causalidade em meios ópticos lineares e não lineares. Suas relações podem ser entendidas como um caso específico das transformadas de Hilbert [1] sob a condição do teorema de Sokhotski–Plemelj [2] e de fato somente nessas condições é possível ter as relações de K-K. É conhecido também que essas relações são mais gerais do que o desenvolvimento que será apresentado, isto é, elas possuem aplicações em demais áreas como estudos de sinais elétricos, telecomunicações, fibra óptica, sistemas ópticos não lineares entre outras. Suas derivações podem ser dada por outros modelos também que estão além do escopo deste projeto.

II. DESENVOLVIMENTO

A. Princípio de Causalidade

Causalidade é uma dos princípios fundamentais em Física, apresentado inicialmente na mecânica clássica por Newton, porém existem algumas definições que se ajustam melhor a cada efeito ou fenômeno que estejamos analisando. Para óptica, o conceito mais útil é de causalidade relativística, a qual diz que nenhum sinal pode se propagar mais rápido do que a velocidade da luz no vácuo [3].

No caso de ondas espalhadas, a causalidade aponta que nenhuma onda espalhada possa existir antes da onda incidente ter alcançado o centro espalhador, cujo tamanho assume-se finito. De forma matemática, diz-se que

a matriz de espalhamento, tem continuação analítica (ou seja, é holomórfica) no plano complexo superior e os polos estão localizados no plano complexo inferior. Em óptica, com o uso da continuação analítica do índice de refração em relação a frequência angular no plano complexo superior, Kramers [4] mostrou que o princípio de causalidade relativístico permite o cálculo do índice de refração real de um meio pelo espectro de absorção. Kronig [5] mostrou que a existência de uma relação de dispersão é suficiente e necessária para assegurar a causalidade do sistema, muito embora tenha assumido sempre o comportamento holomórfico da função. As bases para da existência entre causalidade e relações de dispersão encontram-se no teorema de Titchmarsh [6].

A relevância das relações de Kramers-Kronig em física vai além da esfera conceitual. A parte real e imaginária da susceptibilidade são relacionadas qualitativamente a diferentes fenômenos - absorção e dispersão da luz, cujos arranjos experimentais requerem diferentes instrumentos e técnicas. Qualquer função que descreva a susceptibilidade linear ou qualquer conjunto de dados experimentais da parte real ou imaginária da susceptibilidade linear devem respeitar as relações de Kramers-Kronig, além disso, as mesmas constituem-se como teste fundamental da consistência desses experimentos.

B. Deduções da Relação de Kramers-Kronig

As relações (KK) foram introduzidas a partir do modelo de Drude [7] que descrevem a condução de elétrons em meio metálico dada por uma frequência característica do material a qual poderia permitir a entrada do campo elétrico ou sua reflexão total. Desta análise segue que a polarização em um meio dispersivo não é proporcional ao campo elétrico, no entanto definimos a polarização complexa como:

$$\tilde{\mathbf{P}} = \chi(\omega)\tilde{\mathbf{E}}, \quad (1)$$

* Contato Eletrônico: ricado.afonso@ifsc.usp.br;

onde $\tilde{\mathbf{E}}$ e $\chi(\omega)$ são ambas grandezas complexas. Por outro lado o campo de deslocamento elétrico é definido como:

$$\tilde{\mathbf{D}} = \tilde{\mathbf{E}} + 4\pi\tilde{\mathbf{P}} \quad (2)$$

sabendo que a constante dielétrica complexa é dada por $\tilde{K} = 1 + 4\pi\chi(\omega)$, então $\tilde{\mathbf{D}} = \tilde{K}\tilde{\mathbf{E}}$, isso mostra que o campo de deslocamento elétrico real não é, em geral, proporcional ao campo elétrico real, pois $\mathbf{D} = \Re\{\tilde{K}\tilde{\mathbf{E}}\}$. Essa análise é simplificada, pois estamos assumindo que o campo é monocromático, isto é, dado apenas por uma frequência. Devemos expandir para o caso de pacotes de onda, no qual o vetor deslocamento real possa ser considerado como:

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{D}_0(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega \quad (3)$$

O campo \mathbf{D}_0 é um campo monocromático de frequência ω , logo $\tilde{\mathbf{D}}(\omega, \mathbf{r}, t) = \mathbf{D}_0(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t}$. Das equações 1, 2 e 3, temos que o campo elétrico complexo pode ser dado por: $\tilde{\mathbf{E}} = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t}$. que integrando sobre ω resulta no campo elétrico real:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}_0(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega \quad (4)$$

Com isso, para meios dispersivos podemos escrever:

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{K}(\omega) \mathbf{E}_0(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega, \quad (5)$$

além disso, da transformada inversa de Fourier para o campo elétrico na equação 5:

$$\mathbf{E}_0(\mathbf{r}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t') e^{i\omega t'} dt'$$

Resulta que,

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

De modo que podemos definir uma função $G(\tau)$ dada por:

$$G(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} 4\pi\chi(\omega) e^{-i\omega\tau} d\omega \quad (6)$$

com isso, o campo de deslocamento elétrico se torna, pela mudança de variável $\tau = t - t'$,

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \int_{-\infty}^{\infty} G(t-t') \mathbf{E}(\mathbf{r}, t') dt' \quad (7)$$

com isso, o campo de deslocamento elétrico real e o campo elétrico real não são proporcional evidentemente e isso se deve, de acordo com a Equação 7, à contribuição do campo elétrico em outros tempos, ou seja, a relação entre os campos 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:

$$\chi(\omega) = \sum_{k=1}^N \frac{N n_k q^2}{m(\omega_k^2 - \omega^2 + i\gamma_k \omega)} \quad (8)$$

onde n_k é o número de elétrons do tipo k por molécula, N é o número de moléculas por unidade de volume, q é a carga eletrônica, m é a massa do elétron, γ 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. vamos utilizar o fato de que $\chi(\omega)$ pode ser aproximada por, se $\omega \approx \omega_1$:

$$\chi(\omega) = \frac{\omega_p^2}{(\omega_1^2 - \omega + i\gamma_1 \omega)} \quad (9)$$

onde se introduz a frequência de plasma definida pelo modelo de Drude, $\omega_p = \sqrt{N n_1 q^2 / m}$. De modo que teríamos a seguinte forma explícita para o função $G(\tau)$:

$$G(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\omega_p^2}{(\omega_1^2 - \omega + i\gamma_1 \omega)} e^{-i\omega\tau} d\omega \quad (10)$$

A Integral 10 pode ser calculada utilizando o teorema dos resíduos, para isso vamos considerá-la no plano complexo:

$$I = \oint_C \frac{\omega_p^2}{(\omega_1^2 - z^2 + i\gamma_1 z)} e^{-iz\tau} dz \quad (11)$$

Os polos dessa integral ocorrem quando seu denominador se anula, o que resulta em:

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

ou seja, os polos localizam-se no plano inferior complexo, mesmo quando $4\omega_1^2 - \gamma_1^2 \leq 0$ e supondo $\gamma_1 \geq 0$ sempre. Assim, para $\tau < 0$ podemos sempre tomar um contorno C no semi-plano complexo superior e isso resultará em $G(\tau) = 0$ de acordo com a Integral 11 e o Teorema dos Resíduos. Por outro lado, para $\tau > 0$, devemos escolher

um contorno C tal que ambas singularidades sejam inclusas e, novamente, utilizando o Teorema dos Resíduos deduz-se que,

$$G(\tau) = \frac{\omega_p}{\sqrt{4\omega_1^2 - \gamma_1^2}} e^{-\frac{\gamma_1}{2}\tau} \sin\left(\sqrt{\omega_1^2 - \frac{\gamma_1^2}{4}}\tau\right), \tau > 0 \quad (12)$$

logo, temos que $G(\tau)$ só não é zero para valores positivos de τ , o que em termos do campos de deslocamento elétrico se torna:

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \int_0^\infty G(\tau)\mathbf{E}(\mathbf{r}, t - \tau)d\tau. \quad (13)$$

Isso demonstra que o campo deslocamento elétrico depende apenas dos valores do campo elétrico anteriores ao tempo presente, de acordo com o princípio de causalidade. Em outras palavras, a Equação 13 pode ser entendida como válida apenas pelo princípio de causalidade independente do modelo que seja tratado. Mesmo que não conhecêssemos $G(\tau)$ sabe-se que pelo princípio de causalidade \mathbf{D} e \mathbf{E} devem ser dado pela relação na Equação 13. Além disso, da Equação 6 e da transformada inversa de Fourier, temos:

$$\chi(\omega) = \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty G(\tau)e^{i\omega\tau} d\tau \quad (14)$$

onde o limite inferior da integral é nulo, pois para $\tau < 0$ a função $G(\tau)$ é nula. Ou seja, independente do modelo, apenas o princípio de causalidade fica presente na expressão da susceptibilidade elétrica. Para derivarmos a relação de Kramers-Kronig, é necessário analisar a continuidade da susceptibilidade para isso vamos escrever a Equação 14 para $z \in \mathbb{C}$.

$$\chi(z) = \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty G(\tau)e^{iz\tau} d\tau$$

Porém, como \mathbf{D} e \mathbf{E} são reais, ou seja

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

então segue que $G(\tau) = G^*(\tau)$, portanto,

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

Como $e^{-iz\tau}$ é analítica em todo plano complexo, logo a função $\chi(z)$ será analítica no semiplano complexo superior, se $G(\tau)$ for finita para todo τ . Isso decorre do fato de que condutores $G(\tau)$ não é finita, assim para dielétricos sem qualquer condutividade tem-se que χ é analítica tanto no eixo real como complexo positivo. Do Teorema de Cauchy, temos:

$$\chi(z) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{\chi(z')}{z' - z} dz' \quad (15)$$

onde C é um contorno que contém o eixo real e se fecha no plano superior complexo. Nota-se também que:

$$\begin{aligned} \chi(\omega) &= \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty G(\tau)e^{i\omega\tau} d\tau \\ &= \frac{1}{4i\omega\pi} \int_0^\infty G(\tau) \frac{\partial}{\partial\tau} e^{i\omega\tau} d\tau \\ &= \frac{1}{4i\omega\pi} \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial\tau} [G(\tau)e^{i\omega\tau}] d\tau \\ &\quad - \frac{1}{4i\omega\pi} \int_0^\infty e^{i\omega\tau} \frac{\partial[G(\tau)]}{\partial\tau} d\tau \end{aligned}$$

Como $G(\tau)$ tem que ser contínua, isso implica que:

$$\lim_{\tau \rightarrow 0^+} G(\tau) = \lim_{\tau \rightarrow 0^-} G(\tau) \quad (16)$$

além disso é uma função finita em τ , ou seja

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} G(\tau) = 0, \quad (17)$$

portanto, temos que:

$$\frac{1}{4i\omega\pi} \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial\tau} [G(\tau)e^{i\omega\tau}] d\tau = 0 \quad (18)$$

Assim conclui-se que:

$$\chi(\omega) = \frac{i}{4\omega\pi} \int_0^\infty e^{i\omega\tau} G'(\tau) d\tau \quad (19)$$

Tomando a transformação das derivadas de $G(\tau)$ dentro da integral na Equação 14 infinitamente chega-se na seguinte continuação analítica para χ :

$$\chi(\omega) = -\frac{G'(0^+)}{4\pi\omega^2} + \frac{iG''(0^+)}{4\pi\omega^3} - \frac{G'''(0^+)}{4\pi\omega^4} + \dots \quad (20)$$

Este resultado mostra que $\chi(\omega)$ é uma função finita também para $\omega \rightarrow \infty$. Quando o contorno no semiplano complexo tender ao infinito e identificarmos nesse limite que Equação 15 se torna:

$$\chi(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^\infty \frac{\chi(\omega')}{\omega' - z} d\omega' \quad (21)$$

podemos tomar $z = \omega + i\eta$ e portanto,

$$\chi(\omega + i\eta) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^\infty \frac{\chi(\omega')}{\omega' - \omega - i\eta} d\omega' \quad (22)$$

de modo que, tomando o limite à direita para η indo a zero,

$$\chi(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi(\omega')}{\omega' - \omega - i\eta} d\omega' \quad (23)$$

Podemos reescrever a integral na Equação 23 utilizando o Valor Principal de Cauchy:

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

De modo que podemos escrever a susceptibilidade como:

$$\chi(\omega) = \frac{1}{i\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \quad (24)$$

A susceptibilidade possa ser escrita como $\chi(\omega) = \chi_1(\omega) + i\chi_2(\omega)$ onde χ_1 e χ_2 são reais, identificando os termos da Equação 24 pelas partes real e imaginária deduz-se a forma usual das relações de Kramers e Kronig para susceptibilidade:

$$\chi_1(\omega) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi_2(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \quad (25)$$

$$\chi_2(\omega) = -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi_1(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \quad (26)$$

C. Extensões da Relação de K-K

Podemos lembrar também que a permissividade elétrica está relacionada ao susceptibilidade por $\chi(\omega) = \epsilon(\omega)/\epsilon_0 - 1$, a qual poderíamos substituir novamente na Equação 24 e deduzir as relações de K-K para o caso da permissividade elétrica ou índice de refração.

É necessário enfatizar que estamos no regime de óptica linear e tal regime é válido principalmente quando a interação radiação e matéria é válida para uma fonte de radiação considerada fraca. No contexto de fontes fortes, a interação se torna mais complexa e descrita pela óptica não linear e ocorre o fenômeno de mistura de frequências [8]. Existe a extensão das relações de K-K para o caso onde a susceptibilidade ainda possui parte real e imaginária holomórfica e continuam sendo relações para julgar o sucesso ou falha do experimento, além disso, é claro a relação de causalidade é mantida. A equação 24 é modificada para:

$$\chi_{ij_1 \dots j_n}^{(n)}(\Omega) = \frac{1}{i\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi_{ij_1 \dots j_n}^{(n)}(\Omega)}{(\omega'_1 - \omega_1) \dots (\omega'_n - \omega_n)} d\omega'_1 \quad (27)$$

onde $\Omega = (\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n)$ é o vetor de frequência das ondas monocromáticas incidentes no material, $\chi_{ij_1 \dots j_n}$

é uma função não linear, resultado da polarização não linear de grau n da interação de n fótons mediado pelo material. Apesar dessa extensão ser relevante para vários materiais, torna-se necessário uma teoria mais robusta e flexível, na qual a não linearidade seja inteiramente entendida, como por exemplo, regras de somas advindas da mecânica quântica [3].

III. APLICAÇÕES

Em espectroscopia eletrônica, a relação de K-K permite calcular a dependência da energia com a parte real e imaginária da permissividade (óptica) de certo material, bem como outras propriedades ópticas como coeficiente de absorção e de reflexão. Em resumo, mede-se o número de elétrons de alta energia os quais perdem certa quantidade de energia atravessando um filme do material (aproximação de um único espalhamento), com isso, é possível calcular a parte imaginária da permissividade elétrica. Ao usar os dados da permissividade com a análise K-K é possível achar a parte real da permissividade elétrica em função da energia.

Em espectroscopia de foto-emissão de ângulo resolvido as relações K-K tem um papel importante em ligar as partes reais e imaginárias das auto-energia dos elétrons. Esta é uma característica da interação de vários corpos. Em espalhamento hadrônicos as relações de K-K são conhecidas como relação integral de dispersão. Neste caso, a função é a amplitude de espalhamento. utilizando o teorema óptico a parte imaginária da amplitude de espalhamento é relacionada a seção de espalhamento, a qual é uma quantidade física observável [9]. No campo da Física Matemática, as relações K-K permitem soluções exatas para problemas de espalhamentos não triviais, os quais possuem aplicações em magneto-óptica [10].

Para testarmos a relação de K-K, foi usado o modelo analítico de Lorentz para o índice de refração [11, 12] a qual assumimos que uma onda monocromática é incidente em um meio dielétrico transparente, este meio é formado por elétrons que são osciladores harmônicos perfeitos, seguindo este raciocínio chegaremos que o índice de refração é parecido com a Expressão 8:

$$n = 1 + \frac{4\pi N e^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \quad (28)$$

Onde neste caso, ω_0 é a frequência fundamental dos osciladores que compõem a matéria e γ é a constante de amortecimento devido a perda de radiação e ω é uma frequência dentro do espectro do visível. Utilizando o código escrito em Python2, fornecido ao final deste artigo, foi possível simular as componentes reais e imaginárias dentro do espectro do visível para o índice de refração e utilizando a relação K-K, deduzimos a componente real do índice. Pela Figura 1, conseguimos notar que a relação de K-K não resulta exatamente em cima da curva, isso ocorre, porque as relações pedem que todo

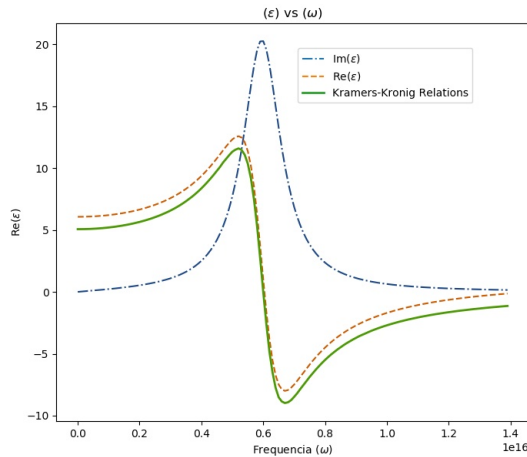


Figura 1. Índice de refração complexo para modelo de Lorentz. Parte real, curva tracejada; parte imaginária, curva ponto e traço; dedução da relação de K-K da parte real em linha cheia.

o espectro de frequência seja contabilizado o que é impossível, neste caso o integrador utilizado utiliza uma extrapolação para limites assintóticos.

IV. CONCLUSÃO

Neste projeto, foi possível concluir que as relações de Kramers-Kronig vão além de um modelo simplista e conseguem atingir bases mais fundamentais da Física como o princípio de causalidade em meios ópticos (lineares e não lineares). Suas aplicações são vastas, sendo desde aplicações como teoria de sinais elétricos como evolução temporal de modelos perturbativos da mecânica quântica [13]. Sua aplicação para modelagem experimentais tem se mostrado como um método fácil e rápido para analisar tanto dados experimentais como também dados de modelos teóricos analíticos.

Nossas deduções e aplicações bastaram até o presente momento em modelos clássicos advindos do eletromagnetismo, sendo possível estender a mesma abordagem utilizando modelos da mecânica quântica e da óptica não linear.

-
- [1] J. J. Benedetto, *Harmonic analysis and applications*, Vol. 23 (CRC Press, 1996).
 - [2] J. Plemelj, “Problems in the sense of riemann and klein (interscience tracts in pure and applied mathematics 16),” (1964).
 - [3] V. Lucarini, J. J. Saarinen, K.-E. Peiponen, and E. M. Vartiainen, *Kramers-Kronig relations in optical materials research*, Vol. 110 (Springer Science & Business Media, 2005).
 - [4] H. A. Kramers, *La diffusion de la lumiere par les atomes* (1927).
 - [5] R. d. L. Kronig, *Josa* **12**, 547 (1926).
 - [6] H. M. Nussenzveig, (1972).
 - [7] P. Drude, *Phys Z* **1**, 161 (1900).
 - [8] Fenômeno no qual a matéria interage com uma ou mais fontes de luz monocromática, isto é, ocorre a presença, no espectro da radiação espalhada, de componentes correspondentes à soma e diferença das componentes da frequência da radiação recebida.
 - [9] M. M. Block and R. Cahn, *Reviews of Modern Physics* **57**, 563 (1985).
 - [10] C. Sun and N. A. Sinitsyn, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **48**, 505202 (2015).
 - [11] H. A. Lorentz, *The Theory of Electrons and Its Applications to the Phenomena of Light and Radiant Heat: A Course of Lectures Delivered in Columbia University, New York, in March and April, 1906*, Vol. 29 (Columbia University Press, 1909).
 - [12] J. D. Jackson, “Classical electrodynamics,” (1999).
 - [13] J. J. Sakurai, *Advanced quantum mechanics* (Pearson Education India, 1967).

V. MATERIAL EXTRAS.

Este código possui pequenas modificações e foi encontrado no seguinte endereço eletrônico: <https://github.com/shibhash/Kramers-kronig-relations/blob/master/kkr.py> (último acesso em 07/06/2018).

```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
from scipy.integrate import quad
import scipy.constants as sc

wp=1.35*10e15
w0=0.6*10e15
w = np.arange(0, 1.4*10e15, 0.01*10e15) #faixa de visível
gamma=0.15*10e15

def imaginary_e(w):      #permissividade elétrica imaginária
```

```

x=w0**2
y=w**2
z=x-y
e_i= (wp**2)*gamma*w/(z**2+w**2*gamma**2)
return e_i;

def real_e(w):          #permissividade elétrica real
    x=w0**2
    y=w**2
    z=x-y
    e_r= 1.0 + (wp**2)*z/(z**2+w**2*gamma**2)
    return e_r;

eps=sc.epsilon_0

def integration(w):    # Valor principal de Cauchy , delta=100
    integrand = lambda w1 : w1*(imaginary_e(w1))/((w1**2-w**2))
    integral1, err1 = quad(integrand, w+100, 5*10e15)
    integral2, err2 = quad(integrand, 0, w-100)
    return eps*(1+(2/(np.pi*eps))*(integral1+integral2));
KK_real=[]
for i in range(len(w)):
    KK_real.append(integration(w[i]))

line1, =plt.plot(w, imaginary_e(w), label='Im($\epsilon$)', linestyle='-.')
line2, =plt.plot(w, real_e(w), label='Re($\epsilon$)', linestyle='--')
line3, =plt.plot(w, KK_real, label='Kramers-Kronig Relations', linewidth=2)
plt.xlabel('Frequencia ($\omega$)')
plt.ylabel('Re($\epsilon$)')
plt.title('($\epsilon$) vs ($\omega$)')
plt.grid(False)
#first_legend = plt.legend(handles=[line3], loc=1)
#ax = plt.gca().add_artist(first_legend)
plt.legend(bbox_to_anchor=(0.50, 0.95), loc=2)
plt.show()

```
