Научная статья УДК 535.3 ББК 22.343 ГРНТИ 29.31.21 BAK 1.3.6. PACS 42.25.Bs OCIS 310.6628 MSC 00A79

# Нелокальные полевые уравнения в наноструктурах с учётом высших мультипольных моментов

К. К. Алтунин <sup>1</sup>



Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Ульяновский государственный педагогический университет имени И. Н. Ульянова», 432071, Ульяновск, Россия

> Поступила в редакцию 27 ноября 2023 года После переработки 30 ноября 2023 года Опубликована 12 декабря 2023 года

Аннотация. Предложены нелокальные полевые уравнения для описания распространения оптических волн в наноструктурах с учётом высших мультипольных моментов для различных типов разрешённых квантовых переходов. Учёт различных типов квантовых переходов высшей мультипольности в спектре взаимодействующих атомов наноструктурной среды может существенно улучшить точность описания оптических явлений в наноструктурных средах при помощи нелокальных полевых уравнений.

Ключевые слова: наноструктурная среда, электрические дипольные переходы, электрические квадрупольные переходы, магнитные дипольные переходы, нелокальные уравнения, полевые уравнения, макроскопические поля, микроскопические поля

## Введение

Актуальность исследования обусловлена необходимостью разработки более точных теоретических и численных методов описания оптических свойств наноструктурных сред в поле внешней оптической волны для их дальнейшего использования в процессе проектирования новых приборов и устройств оптоэлектроники. Учёт различных типов квантовых переходов высшей мультипольности в спектре взаимодействующих атомов наноструктурной среды может существенно улучшить точность описания оптических явлений в наноструктурных средах при помощи нелокальных полевых уравнений.

Целью работы является исследование возможностей применения нелокальных полевых уравнений для описания свойств наноструктур с учётом высших мультипольных моментов и различных типов квантовых переходов в спектре взаимодействующих атомов наноструктурной среды.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>E-mail: kostya\_altunin@mail.ru

Задачи исследования включают в себя разработку системы нелокальных полевых уравнений для описания взаимодействия оптической волны с атомами наноструктурной среды с учётом различных типов квантовых переходов в спектрах атомов наноструктурной среды, а также исследование влияния высших мультипольных моментов на оптические свойства наноструктурных сред.

Гипотезой исследования состоит в том, что если использовать нелокальные полевые уравнения с учётом различных типов квантовых переходов высшей мультипольности, то можно улучшить точность описания оптических свойств наноструктур по сравнению с локальными моделями классической электродинамики.

Научная новизна исследования состоит в том, что впервые предложена система нелокальных полевых уравнений для описания оптических процессов в наноструктурных средах с учётом различных типов квантовых переходов определённой мультипольности в спектре атомов наноструктурной среды.

В качестве метода исследования используется теоретический анализ нелокальных полевых уравнений с учётом различных типов квантовых переходов в атомах наноструктурной среды для описания свойств наноструктур в поле внешнего оптического излучения. В качестве материалов исследования используются теоретические модели наноструктур, основанные на нелокальных полевых уравнениях, для описания оптических процессов в наноструктурных средах.

Теоретическая значимость исследования заключается в том, что полученные нелокальные полевые уравнения для наноструктурных сред с учётом различных типов квантовых переходов в атомах наноструктурной среды могут быть использованы для создания новых теоретических моделей наноструктурных сред, которые будут более точными и эффективными, чем существующие модели. Нелокальные нелокальные полевые уравнения для наноструктурных сред позволяют учитывать эффекты, которые не учитываются в традиционных моделях классической электродинамики, такие как эффект локального поля и эффект ближнего поля для наноструктурных сред. Практическая значимость исследования заключается в том, что результаты исследования нелокальных полевых уравнений для наноструктурных сред могут быть использованы для разработки новых методов описания наноматериалов и наноструктур с заданными физическими свойствами для различных приложений в оптоэлектронике, таких как фотовольтаика, наносенсорика и наноплазмоника.

# Обзор

В статье [1] исследуется оптическая спиральность, оптический спин в теории электромагнетизма и показано, что эти сохраняющиеся величины можно объединить, чтобы сформировать новое описание углового момента, связанного с оптической поляризацией: описание, аналогичное знакомому описанию с использованием оптической энергии и линейного импульса. В статье [1] представлены и обсуждаются симметрии уравнений Максвелла, лежащие в основе сохранения наших величин. В статье [1] объясняется, что аналогичный, но отличный набор величин в модели Липкина, описывает момент импульса вихря электромагнитного поля, а не момент импульса самого электромагнитного поля.

В статье [2] показано, что если оптическое уравнение Дирака интерпретировать как динамическое уравнение для фотона в традиционной квантовой механике, волновая функция, называемая полем фотона, действительно преобразуется при преобразовании Лоренца как спинор. Однако для того, чтобы оптическое уравнение Дирака было лоренц-ковариантным, необходимо ограничение на поле фотонов, которое можно представить в форме уравнений дивергенции Максвелла. В статье [2] обнаружено, что спинорное поле фотонов не только удовлетворяет принципу локальности, но и имеет

правильную размерность, как того требует традиционная квантовая механика.

Двойная симметрия между электрическим и магнитным полями является важным внутренним свойством уравнений Максвелла в свободном пространстве. В статье [3] показано, что эта симметрия лежит в основе сохранения оптической спиральности и тесно связана с разделением спиновых и орбитальных степеней свободы света (поток спиральности совпадает со спиновым моментом). Однако в стандартной формулировке электромагнетизма, основанной на теории поля, лагранжиан поля не является дуально-симметричным. Это приводит к проблематичным дуально-асимметричным формам канонических тензоров энергии-импульса, спина и орбитального момента количества движения. Более того, в статье [3] показано, что компоненты этих тензоров противоречат законам спиральности и сохранения энергии. Чтобы устранить это несоответствие между симметриями уравнений Лагранжа и Максвелла, в статье [3] предложена дуально-симметричная лагранжева формулировка классического электромагнетизма. Этот двойной электромагнетизм сохраняет форму уравнений Максвелла, даёт значимые канонические тензоры энергии-импульса и углового момента и обеспечивает самосогласованное разделение спиновых и орбитальных степеней свободы. Это обеспечивает строгий вывод результатов, предложенных в других недавних подходах. В статье [3] проведён нётеровский анализ дуальной симметрии и всех симметрий Пуанкаре, исследуем как локальные, так и интегральные сохраняющиеся величины и показываем, что только дуальный электромагнетизм естественным образом порождает полный самосогласованный набор законов сохранения. В статье [3] также обсуждается наблюдаемость физических величин, отличающих стандартную и двойственную теории, а также связь с квантово-слабыми измерениями и различными оптическими экспериментами.

Последние достижения в формировании оптического луча позволили создать широкий класс структурированных источников света, которые следуют по экзотическим траекториям, открывая множество путей для многочисленных применений. Хотя уравнение Гельмгольца устанавливает строгие условия на поля, которые могут быть физически реализованы, эти ограничения можно снять, если источники можно ввести внутри среды. Однако введение источников не всегда возможно и практично. В статье [4] предложен аналитический подход, который преобразует эффекты необходимых источников изнутри среды к её границам. В статье [4] показано, что полученные граничные условия затем можно использовать для создания любого желаемого оптического поля (амплитуда и фаза). В статье [4] демонстрируется осуществимость подхода, экспериментально генерируя два оптических поля внутри простой среды без источников, демонстрируя контроль над траекториями, фазами и интенсивностью полей.

В статье [5] с помощью потенциалов Дебая полностью получены точные уравнения собственных значений и соответствующие распределения полей мод сердцевины и оболочки для трехслойных, радиально стратифицированных и диэлектрических одноосных оптических волокон; эти режимы включают ТЕ-режим, ТМ-режим и гибридные НЕ/ЕН режимы. Теоретически исследованы деформационные характеристики длиннопериодных волоконных решёток с приложенной осевой деформацией на основе исследования трехслойных одноосных оптических волокон. Когда к волокну прикладывается равномерная осевая деформация, сердцевина, а также внутренняя и внешняя оболочки оптически становятся одноосным кристаллом; то есть оптические оси параллельны оси волокна. В статье [5] получены аналитические выражения тензочувствительности длиннопериодных волоконных решёток. Деформационная чувствительность длиннопериодных волоконных решёток на основе различных мод оболочки, в том числе величина сдвига и направление резонансной длины волны, существенно различаются.

В статье [6] изучаются классические и квантовые аспекты скалярных полей, удовлетворяющих параксиальному волновому уравнению. В статье [6] сначала определяются

законы сохранения энергии, линейного и углового момента параксиальных полей в классическом контексте, а затем приступаем к квантованию поля и сравниваем результат с традиционными результатами.

Поиск оптических солитонных решений нелинейных уравнений в частных производных стал популярной темой в последние десятилетия. В статье [7] выявлен разнообразный набор волновых решений обобщённой версии нелинейного уравнения Шрёдингера. В статье [7] исследуются две модификации метода обобщенной экспоненциальной рациональной функции, чтобы получить ожидаемые результаты для этой модели. Первый метод основан в первую очередь на использовании элементарных функций, таких как экспоненциальная, тригонометрическая и гиперболическая формы, которые обычно используются для расчёта результатов. Что касается второго метода, то он основан на применении эллиптических функций Якоби для формулирования решений, тогда как основная идея та же, что и у первого метода. В статье [7] чтобы улучшить понимание результатов, отображаются графические свойства решений. Основываясь на результатах статьи [7], можно сделать вывод, что оба метода просты в использовании, но при этом очень эффективны и могут определять различные категории решений в единой структуре.

Уравнение Герджикова-Иванова заняло замечательную область исследований в научной литературе. В статье [8] рассматривается полученное модифицированное уравнение Герджикова-Иванова, которое является новым и не изучалось в литературе. Также модифицированный и унифицированный метод используется для получения приближённых аналитических решений модифицированного уравнения Герджикова-Иванова. Насколько известно, приближённых аналитических решений для неинтегрируемого уравнения комплексного поля до сих пор не найдено. Таким образом, в статье [8] найденные приближённые аналитические решения являются новыми. Единый метод направлен на поиск точных решений интегрируемых уравнений. В этом смысле точного решения модифицированного уравнения Герджикова-Иванова не существует, следовательно, оно неинтегрируемо. Итак, в статье [8] используются приближённые аналитические оптические солитонные решения. Единый метод заключается в выражении решения нелинейных эволюционных уравнений в полиномиальной и рациональной формах через вспомогательную функцию с помощью соответствующего вспомогательного уравнения. Для нахождения точных решений единым методом коэффициенты вспомогательной функции при всех степенях принимаются равными нулю. Для неинтегрируемого уравнения допустимы только приближенные решения. В статье [8] в этом случае вынуждены использовать модифицированный метод. Здесь ненулевые коэффициенты (вычеты) рассматриваются как ошибки, которые не зависят от пространства и времени. Стоит отметить, что это отличается от ошибок, обнаруженных различными численными методами, где они зависят от пространства и времени. Далее, в данном случае максимальная погрешность контролируется адекватным выбором параметров в остатках. Эти решения отображаются на графиках. Наблюдаются, среди прочего, бризерный солитон, чирпированный солитон и солитон М-образной формы. Кроме того, исследована нестабильность модуляции и обнаружено, что нестабильность модуляции возникает, когда коэффициент нелинейной дисперсии превышает критическое значение.

В статье [9] дан краткий обзор классической модели атома Лоренца, взаимодействующего с оптическим полем. Затем в статье [9] решается вопрос, как следует изменить уравнения, описывающие поведение атома, чтобы включить квантование уровня атомной энергии. Простое обсуждение того, какие модификации имеют смысл, даёт сильный аргумент в пользу правдоподобности оптических уравнений Блоха. По сравнению со стандартным выводом, этот аргумент менее строгий, но имеет определенную педагогическую привлекательность: он просто предполагает два атомных состояния с разницей

в энергии  $\hbar\omega$ , а не обращается к уравнению Шрёдингера. Кроме того, удаётся более или менее угадать правильные уравнения с минимальным формализмом, основанном на уравнениях Блоха.

Выборка плотного светового поля является важной основой для перефокусировки, оценки глубины и трехмерной визуализации. Трудно получить плотное световое поле высокого разрешения с помощью большой матрицы камер и дорогостоящего оборудования. В то же время существующие устройства хранения и пропускная способность передачи также ограничивают постобработку и применение этой технологии. Чтобы эффективно восстановить угловую область светового поля на основе разреженных данных светового поля, в статье [10] анализируются отношения корреляции и ограничений между полем оптического потока и полем движения многоракурсных изображений в одной и той же сцене, расширяя традиционные методы. уравнение ограничения оптического потока двумерного изображения к уравнению ограничения оптического потока четырехмерного светового поля и устанавливает эффективную математическую модель. Координатное положение исходного пикселя на новом ракурсном изображении определяется путем поиска координат и восстанавливается его интенсивность. В статье [10] экспериментальные результаты многосценной плотной реконструкции показывают, что предложенный метод позволяет с высоким качеством восстанавливать информацию о текстуре, тенях и цвете в световом поле сцены с длинной базой. Результаты количественной оценки показывают, что алгоритм можно применять для реконструкции плотного светового поля сложных сцен. Алгоритм в статье [10] подходит только для случая ограничения оптического потока в линейном световом поле, а последующие исследования будут сосредоточены на случае ограничения нелинейного оптического потока.

В статье [11] рассматриваются представления оптического уравнения Дирака, особенно те, в которых гамильтониан является чисто вещественным. Для уравнений Максвелла это эквивалентно майорановскому представлению безмассового уравнения Дирака (Вейля). Проведены аналогии между дираковским, киральным и майорановским представлениями уравнений Дирака и оптическими уравнениями Дирака, а также получены два новых оптических представления Майораны. Точно так же, как представления Дирака и киральные представления связаны с состояниями оптического спина и спиральности, эти представления Майораны оптического уравнения Дирака связаны с линейной поляризацией света. Это даёт возможность сравнить уравнения электронных и электромагнитных волн в контексте классической теории поля.

Двумерный материал, образованный, например, самоорганизующимся молекулярным монослоем или одним слоем материала, может эффективно взаимодействовать с фотонными нанополостями, потенциально достигая режима сильной связи. Связь можно смоделировать с использованием классических моделей гармонических осцилляторов или гамильтонианов квантовой электродинамики полости, которые часто пренебрегают прямыми диполь-дипольными взаимодействиями внутри монослоя. В статье [12] диагонализуется полный гамильтониан системы, включая эти прямые дипольдипольные взаимодействия. Основное влияние на оптические свойства типичной двумерной системы заключается просто в перенормировке эффективной энергии яркого коллективного возбуждения монослоя, связанного с нанофотонной модой. С другой стороны, в статье [12] показано, что в ситуациях экстремального ограничения поля, больших дипольных моментов перехода и низких потерь полное включение прямых диполь-дипольных взаимодействий имеет решающее значение для правильного захвата оптического отклика, в котором участвует множество коллективных состояний. Для количественной оценки этого результата в статье [12] предложено простое уравнение, которое указывает условие, при котором прямые взаимодействия сильно изменяют оптический отклик.

В статье [13] предложены новые формы граничных интегральных уравнений для автоматизированного проектирования и моделирования оптических схем ближнего поля. Эти интегральные уравнения можно легко решить численно, используя метод граничных элементов или метод моментов, без использования сложных методов расширения мод для открытых волноводных структур. Например, новые уравнения используются для проектирования двумерного оптического манипулятора частиц, а эффективность и корректность демонстрируются численными результатами.

В статье [14] представлен обзор интерпретации процесса регистрации в ближнепольной оптической микроскопии рассмотрен на основе дискуссии о возможности установления прямых сравнений экспериментальных изображений с решениями уравнений Максвелла или электромагнитной локальной плотности состояний. На основе простых физических аргументов ожидается, что решения уравнений Максвелла должны согласовываться с изображениями, полученными с помощью собирающих микроскопов ближнего поля, в то время как электромагнитная локальная плотность состояний должна учитываться для практической интерпретации режима освещения ближнего поля в полевых микроскопах. В статье [14] рассматриваются изображения ближнепольного микроскопа в режиме сбора, где действительно были идентифицированы условия для получения хорошего согласия с решениями уравнений Максвелла. В контексте микроскопов ближнего поля с собирающим режимом принципиально разные функциональные возможности между диэлектрическими и позолоченными наконечниками были чётко идентифицированы экспериментально путём проверки решений уравнений Максвелла. Оказывается, что диэлектрические наконечники улавливают сигнал, пропорциональный напряженности оптического электрического поля, тогда как наконечники с золотым покрытием обнаруживают сигнал, пропорциональный напряженности оптического магнитного поля. В статье [14] обсуждаются возможные последствия этого удивительного явления.

Таким образом, обзор литературы показывает, что нелокальные полевые уравнения являются перспективными уравнениями для описания оптических свойств наноструктурных сред.

# Модель

Применим метод нелокальных полевых уравнений для описания распространения оптических волн в наноструктурных средах с учётом высших мультипольных моментов для различных типов разрешённых квантовых переходов в спектре взаимодействующих атомов наноструктурной среды. Нелокальное полевое уравнение представляет собой интегральное уравнение, которое описывает взаимодействие системы взаимодействующих движущихся зарядов в наноструктурной среде с полем внешней оптической волны. Для учёта высших мультипольных моментов в системе взаимодействующих атомов наноструктурной среды необходимо в разложении запаздывающих потенциалов, определяющих функцию Лагранжа системы взаимодействующих движущихся зарядов, учесть слагаемые, содержащие более высокие степени смещений атомных электронов относительно своих атомных ядер в наноструктурной среде.

Запишем нелокальные уравнения для микроскопических полей в случае распространения электромагнитных волн в наноструктурных средах с учётом электрических дипольных, электрических квадрупольных и магнитных дипольных вкладов в оптические свойства наноструктурной среды. Пусть вектора  $\mathbf{E}'(\mathbf{r}_i)$  и  $\mathbf{H}'(\mathbf{r}_i)$  представляют собой вектора напряжённостей электрического и магнитного макроскопических полей в некоторой точке наблюдения  $\mathbf{r}_i$ . Обозначим через  $\boldsymbol{\mu}_i(\mathbf{r}_i)$  магнитный дипольный момент и  $\mathbf{q}_i(\mathbf{r}_i)$  вектор, связанный с тензором квадрупольного момента атома в наноструктурной среде. Тогда соответствующие нелокальные полевые уравнения для микроскопиче-

ских полей примут следующий вид [15]:

$$\mathbf{E}'(\mathbf{r}_{i}) = \mathbf{E}_{I}(\mathbf{r}_{i}) + \sum_{j \neq i} \left( \nabla \times \nabla \times \frac{\exp(ik_{0}|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|) \mathbf{d}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} - \nabla \times \nabla \times \nabla \times \frac{\exp(ik_{0}|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|) \mathbf{q}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} + ik_{0}\nabla \times \frac{\exp(ik_{0}|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|) \boldsymbol{\mu}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} \right), \quad (1)$$

$$\mathbf{H}'(\mathbf{r}_{i}) = \mathbf{H}_{I}(\mathbf{r}_{i}) + \sum_{j \neq i} \left( -ik_{0}\nabla \times \frac{\exp(ik_{0}|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|) \mathbf{d}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} + ik_{0}\nabla \times \nabla \times \frac{\exp(ik_{0}|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|) \mathbf{q}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} + \nabla \times \nabla \times \frac{\exp(ik_{0}|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|) \boldsymbol{\mu}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} \right), \quad (2)$$

где  $k_0 = \omega/c$  – волновое число оптической волны в вакууме,  $\mathbf{E}_I(\mathbf{r}_i)$  – напряжённость электрического поля внешней оптической волны в точке наблюдения  $\mathbf{r}_i$ ,  $\mathbf{H}_I(\mathbf{r}_i)$  – напряжённость магнитного поля внешней оптической волны в точке наблюдения  $\mathbf{r}_i$ .

Введём относительное расстояние между атомом, находящимся в точке наблюдения поля, и текущим расположением i-го атома наноструктурной среды  $R_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ . Тогда нелокальные полевые уравнениям в наноструктурной среде (1) и (2) примут вид:

$$\mathbf{E}'(\mathbf{r}_{i}) = \mathbf{E}_{I}(\mathbf{r}_{i}) + \sum_{j \neq \ell} \left( \nabla \times \nabla \times \frac{\exp(ik_{0}R_{ij}) \mathbf{d}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{R_{ij}} - \right.$$
$$\left. - \nabla \times \nabla \times \nabla \times \frac{\exp(ik_{0}R_{ij}) \mathbf{q}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{R_{ij}} + ik_{0}\nabla \times \frac{\exp(ik_{0}R_{ij}) \boldsymbol{\mu}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{R_{ij}} \right), \quad (3)$$

$$\mathbf{H}'(\mathbf{r}_{i}) = \mathbf{H}_{I}(\mathbf{r}_{i}) + \sum_{j \neq \ell} \left( -ik_{0}\nabla \times \frac{\exp(ik_{0}R_{ij})\mathbf{d}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{R_{ij}} + ik_{0}\nabla \times \nabla \times \frac{\exp(ik_{0}R_{ij})\mathbf{q}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{R_{ij}} + \nabla \times \nabla \times \frac{\exp(ik_{0}R_{ij})\boldsymbol{\mu}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{R_{ij}} \right), \quad (4)$$

Введём выражение для запаздывающей функции Грина

$$G(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = G(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = G(R_{ij}) = \frac{\exp(ik_0R_{ij})}{R_{ij}} = \frac{\exp(ik_0|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}.$$
 (5)

После введения запаздывающей функции Грина (5) нелокальные полевые уравнениям в наноструктурной среде (3) и (4) запишутся в виде

$$\mathbf{E}'(\mathbf{r}_{i}) = \mathbf{E}_{I}(\mathbf{r}_{i}) + \sum_{j \neq i} \left( \nabla \times \nabla \times G(R_{ij}) \, \mathbf{d}_{j}(\mathbf{r}_{j}) - \right.$$
$$\left. - \nabla \times \nabla \times \nabla \times G(R_{ij}) \, \mathbf{q}_{j}(\mathbf{r}_{j}) + i k_{0} \nabla \times G(R_{ij}) \, \boldsymbol{\mu}_{j}(\mathbf{r}_{j}) \right), \quad (6)$$

$$\mathbf{H}'(\mathbf{r}_{i}) = \mathbf{H}_{I}(\mathbf{r}_{i}) + \sum_{j \neq i} \left( -ik_{0}\nabla \times G(R_{ij}) \mathbf{d}_{j}(\mathbf{r}_{j}) + ik_{0}\nabla \times \nabla \times G(R_{ij}) \mathbf{q}_{j}(\mathbf{r}_{j}) + \nabla \times \nabla \times G(R_{ij}) \boldsymbol{\mu}_{j}(\mathbf{r}_{j}) \right), \quad (7)$$

Переход к соответствующим нелокальным полевым интегральным уравнениям распространения электромагнитных волн осуществляется в (1) и (2) с помощью величин

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}_j) = \frac{1}{V} \sum_{j=1}^{N} \mathbf{d}_j(\mathbf{r}_j) = \frac{1}{V} \sum_{j=1}^{N} e_j \mathbf{r}_j, \qquad (8)$$

$$\mathbf{Q}_{\alpha}\left(\mathbf{r}_{j}\right) = \frac{1}{V} \sum_{j=1}^{N} \mathbf{q}_{\alpha}\left(\mathbf{r}_{j}\right) = \frac{1}{V} \sum_{j=1}^{N} e_{j} \left(3\left(\mathbf{r}_{j}\right)_{\alpha}\left(\mathbf{r}_{j}\right)_{\beta} - \left(\mathbf{r}_{j}\right)^{2} \delta_{\alpha\beta}\right) n_{\beta} , \qquad (9)$$

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}_j) = \frac{1}{V} \sum_{j=1}^{N} \boldsymbol{\mu}_j(\mathbf{r}_j) = \frac{1}{V} \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{2} [\mathbf{r}_j, \mathbf{v}_j] , \qquad (10)$$

где N — число атомов в наноструктурной среде, V — объём наноструктурной среды. Тогда получаем полевые интегральные уравнения распространения электромагнитных волн в наноструктурной среде в виде

$$\mathbf{E}'(\mathbf{r}_{i}) = \mathbf{E}_{I}(\mathbf{r}_{i}) + \int_{V} \left( \nabla \times \nabla \times \frac{\exp(ik_{0}|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|) \mathbf{P}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} - \nabla \times \nabla \times \nabla \times \frac{\exp(ik_{0}|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|) \mathbf{Q}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} + ik_{0}\nabla \times \frac{\exp(ik_{0}|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|) \mathbf{M}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} \right) d\mathbf{r}_{j}, \quad (11)$$

$$\mathbf{H}'(\mathbf{r}_{i}) = \mathbf{H}_{I}(\mathbf{r}_{i}) + \int_{V} \left( -ik_{0}\nabla \times \frac{\exp(ik_{0}|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|) \mathbf{P}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} + ik_{0}\nabla \times \nabla \times \frac{\exp(ik_{0}|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|) \mathbf{Q}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} + \nabla \times \nabla \times \frac{\exp(ik_{0}|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|) \mathbf{M}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} \right) d\mathbf{r}_{j}. \quad (12)$$

Если разрешены только электрические дипольные переходы в спектре взаимодействующих атомов наноструктурной среды, то уравнения (11) и (12) примут вид:

$$\mathbf{E}'(\mathbf{r}_i) = \mathbf{E}_I(\mathbf{r}_i) + \int_{\mathcal{X}} \left( \nabla \times \nabla \times \frac{\exp(ik_0|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \mathbf{P}_j(\mathbf{r}_j)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right) d\mathbf{r}_j, \qquad (13)$$

$$\mathbf{H}'(\mathbf{r}_{i}) = \mathbf{H}_{I}(\mathbf{r}_{i}) + \int_{V} \left( -ik_{0}\nabla \times \frac{\exp\left(ik_{0}|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|\right)\mathbf{P}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} \right) d\mathbf{r}_{j}.$$
 (14)

Если разрешены только электрические квадрупольные переходы в спектре взаимодействующих атомов наноструктурной среды, то уравнения (11) и (12) примут вид:

$$\mathbf{E}'(\mathbf{r}_i) = \mathbf{E}_I(\mathbf{r}_i) + \int_V \left( -\nabla \times \nabla \times \nabla \times \frac{\exp(ik_0|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \mathbf{Q}_j(\mathbf{r}_j)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right) d\mathbf{r}_j, \qquad (15)$$

$$\mathbf{H}'(\mathbf{r}_{i}) = \mathbf{H}_{I}(\mathbf{r}_{i}) + \int_{V} \left( ik_{0}\nabla \times \nabla \times \frac{\exp\left(ik_{0}|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|\right) \mathbf{Q}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} \right) d\mathbf{r}_{j}.$$
(16)

Если разрешены только магнитные дипольные переходы в спектре взаимодействующих атомов наноструктурной среды, то уравнения (11) и (12) примут вид:

$$\mathbf{E}'(\mathbf{r}_i) = \mathbf{E}_I(\mathbf{r}_i) + \int_V \left( ik_0 \nabla \times \frac{\exp(ik_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \mathbf{M}_j(\mathbf{r}_j)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right) d\mathbf{r}_j, \qquad (17)$$

$$\mathbf{H}'(\mathbf{r}_i) = \mathbf{H}_I(\mathbf{r}_i) + \int_V \left( \nabla \times \nabla \times \frac{\exp(ik_0|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \mathbf{M}_j(\mathbf{r}_j)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right) d\mathbf{r}_j.$$
(18)

Если разрешены только электрические дипольные переходы и электрические квадрупольные переходы в спектре взаимодействующих атомов наноструктурной среды, то уравнения (11) и (12) примут вид:

$$\mathbf{E}'(\mathbf{r}_{i}) = \mathbf{E}_{I}(\mathbf{r}_{i}) + \int_{V} \left( \nabla \times \nabla \times \frac{\exp(ik_{0}|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|) \mathbf{P}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} - \nabla \times \nabla \times \nabla \times \frac{\exp(ik_{0}|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|) \mathbf{Q}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} \right) d\mathbf{r}_{j}, \quad (19)$$

$$\mathbf{H}'(\mathbf{r}_{i}) = \mathbf{H}_{I}(\mathbf{r}_{i}) + \int_{V} \left( -ik_{0}\nabla \times \frac{\exp(ik_{0}|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|) \mathbf{P}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} + ik_{0}\nabla \times \nabla \times \frac{\exp(ik_{0}|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|) \mathbf{Q}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} \right) d\mathbf{r}_{j}. \quad (20)$$

Если разрешены только электрические дипольные переходы и магнитные дипольные переходы в спектре взаимодействующих атомов наноструктурной среды, то уравнения (11) и (12) примут вид:

$$\mathbf{E}'(\mathbf{r}_{i}) = \mathbf{E}_{I}(\mathbf{r}_{i}) + \int_{V} \left( \nabla \times \nabla \times \frac{\exp(ik_{0}|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|) \mathbf{P}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} + ik_{0}\nabla \times \frac{\exp(ik_{0}|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|) \mathbf{M}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} \right) d\mathbf{r}_{j}, \quad (21)$$

$$\mathbf{H}'(\mathbf{r}_{i}) = \mathbf{H}_{I}(\mathbf{r}_{i}) + \int_{V} \left( -ik_{0}\nabla \times \frac{\exp(ik_{0}|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|) \mathbf{P}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} + \nabla \times \nabla \times \frac{\exp(ik_{0}|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|) \mathbf{M}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} \right) d\mathbf{r}_{j}. \quad (22)$$

Если разрешены только электрические квадрупольные переходы и магнитные дипольные переходы в спектре взаимодействующих атомов наноструктурной среды, то уравнения (11) и (12) примут вид:

$$\mathbf{E}'(\mathbf{r}_{i}) = \mathbf{E}_{I}(\mathbf{r}_{i}) + \int_{V} \left( -\nabla \times \nabla \times \nabla \times \frac{\exp(ik_{0}|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|) \mathbf{Q}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} + ik_{0}\nabla \times \frac{\exp(ik_{0}|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|) \mathbf{M}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} \right) d\mathbf{r}_{j}, \quad (23)$$

$$\mathbf{H}'(\mathbf{r}_{i}) = \mathbf{H}_{I}(\mathbf{r}_{i}) + \int_{V} \left( ik_{0}\nabla \times \nabla \times \frac{\exp(ik_{0}|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|) \mathbf{Q}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} + \nabla \times \nabla \times \frac{\exp(ik_{0}|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|) \mathbf{M}_{j}(\mathbf{r}_{j})}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} \right) d\mathbf{r}_{j}. \quad (24)$$

Полученные нелокальные интегральные уравнения для действующих полей позволяют учитывать различные типы разрешённых квантовых переходов в спектре взаимодействующих атомов наноструктурной среды для описания распространения оптических волн в наноструктурных средах.

## Заключение

Предложенные нелокальные полевые уравнения позволяют учитывать различные типы разрешённых квантовых переходов для описания распространения оптических волн в наноструктурных средах. Учёт различных типов квантовых переходов высшей мультипольности в спектре взаимодействующих атомов наноструктурной среды может существенно улучшить точность описания оптических явлений в наноструктурных средах при помощи нелокальных полевых уравнений в оптике.

В заключении можно сделать следующие выводы:

- 1. подход на основе нелокальных полевых уравнений представляет собой перспективный подход для описания оптических свойств наноструктурных сред благодаря учёту различных типов квантовых переходов в спектре взаимодействующих атомов наноструктурной среды;
- 2. применение нелокальных полевых уравнений может способствовать проектированию приборов и устройств на основе наноструктур с заданными оптическими свойствами.

Гипотезой исследования, состоящая в том, что если использовать нелокальные полевые уравнения с учётом различных типов квантовых переходов высшей мультипольности, то можно улучшить точность описания оптических свойств наноструктур по сравнению с локальными моделями классической электродинамики, подтверждена полностью.

Можно преодолеть некоторые трудности, если использовать метод интегральных уравнений в оптике для того, чтобы предсказывать состояния наноматериала. Такой метод, тем не менее, принимает во внимание только взаимодействие между оптическим излучением и наноструктурной системой. Теоретическая модель никак не учитывает то, что пробное оптическое излучение существует в данной системе с самого начала.

Полученные нелокальные полевые уравнения для наноструктурных сред с учётом различных типов квантовых переходов в атомах наноструктурной среды могут быть использованы для создания новых теоретических моделей наноструктурных сред и наносистем, которые будут более точными и эффективными, чем существующие модели. Нелокальные нелокальные полевые уравнения для наноструктурных сред и наносистем позволяют учитывать эффекты, которые не учитываются в традиционных моделях классической электродинамики, такие как эффект локального поля и эффект ближнего поля для наноструктурных сред и наносистем. Результаты исследования нелокальных полевых уравнений для наноструктурных сред и наносистем могут быть использованы для разработки новых методов описания физических явлений в наноструктурах и наносистемах из наноматериалов с заданными физическими свойствами для различных приложений в оптоэлектронике, таких как фотовольтаика, наносенсорика и наноплазмоника.

#### Список использованных источников

- 1. Cameron R. P., Barnett S. M., Yao A. M. Optical helicity, optical spin and related quantities in electromagnetic theory // New Journal of Physics. 2012. may. Vol. 14, no. 5. P. 053050. URL: http://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/14/5/053050.
- 2. You X.-L., Li Ch.-F. Lorentz covariance of optical Dirac equation and spinorial photon field // New Journal of Physics. 2021. jul. Vol. 23, no. 7. P. 073030. URL: http://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/ac1142.
- 3. Bliokh K. Y., Bekshaev A. Y., Nori F. Dual electromagnetism: helicity, spin, momentum and angular momentum // New Journal of Physics. 2013. mar. Vol. 15, no. 3. P. 033026. URL: http://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/15/3/033026.
- 4. Aborahama Y., Mojahedi M. Designing optical fields in three dimensions using source-boundary transformations // Physical Review Applied. 2021. apr. Vol. 15, no. 4. URL: http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevApplied.15.044019.
- 5. Zhang Zi-jia, Shi Wen-kang. Eigenvalue and field equations of three-layered uniaxial fibers and their applications to the characteristics of long-period fiber gratings with applied axial strain // Journal of the Optical Society of America A. 2005. nov. Vol. 22, no. 11. P. 2516. URL: http://dx.doi.org/10.1364/JOSAA.22.002516.
- 6. Aiello A. Field theory of monochromatic optical beams: II. Classical and quantum paraxial fields // Journal of Optics. 2019. dec. Vol. 22, no. 1. P. 014002. URL: http://dx.doi.org/10.1088/2040-8986/ab5c6d.
- 7. Ghanbari B., Baleanu D. Applications of two novel techniques in finding optical soliton solutions of modified nonlinear Schrödinger equations // Results in Physics. 2023. jan. Vol. 44. P. 106171. URL: http://dx.doi.org/10.1016/j.rinp.2022. 106171.
- 8. Abdel-Gawad H. I. Approximate-analytic optical soliton solutions of a modified-Gerdjikov-Ivanov equation: modulation instability // Optical and Quantum Electronics.— 2023.—feb.— Vol. 55, no. 4.— URL: http://dx.doi.org/10.1007/s11082-023-04566-6.
- 9. Supplee J. M. Optical Bloch equations: informal motivation without the Schrödinger equation // American Journal of Physics. 2000. feb. Vol. 68, no. 2. P. 180–185. URL: http://dx.doi.org/10.1119/1.19392.
- 10. A dense light field reconstruction algorithm for four-dimensional optical flow constraint equation / J. Liu [et al.] // Pattern Recognition.— 2023.—feb.— Vol. 134.—P. 109101.— URL: http://dx.doi.org/10.1016/j.patcog.2022.109101.
- 11. Dennis M. R., Tijssen T., Morgan M. A. On the Majorana representation of the optical Dirac equation // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical.— 2023.— jan.— Vol. 56, no. 2.— P. 024004.— URL: http://dx.doi.org/10.1088/1751-8121/acb182.
- 12. Ribeiro S., Aizpurua J., Esteban R. Influence of direct dipole-dipole interactions on the optical response of two-dimensional materials in strongly inhomogeneous infrared cavity fields // Physical Review A. 2023. oct. Vol. 108, no. 4. P. 043718. URL: http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.108.043718.

- 13. Tanaka M., Tanaka K. Boundary integral equations for computer aided design of near-field optics // Electronics and Communications in Japan (Part II: Electronics).— 1996.—jan.— Vol. 79, no. 11.— P. 10–18.— URL: http://dx.doi.org/10.1002/ecjb.4420791102.
- 14. Direct interpretation of near-field optical images / A. Dereux [et al.] // Journal of Microscopy. 2001. may. Vol. 202, no. 2. P. 320–331. URL: http://dx.doi.org/10.1046/j.1365-2818.2001.00868.x.
- 15. Gadomsky O. N., Altunin K. K. The problem of two electrons in an external field and the method of integral equations in optics // Journal of Experimental and Theoretical Physics. 1998. nov. Vol. 87, no. 5. P. 842–854. URL: http://dx.doi.org/10.1134/1.558733.

# Сведения об авторах:

**Константин Константинович Алтунин** — кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры физики и технических дисциплин ФГБОУ ВО «Ульяновский государственный педагогический университет имени И. Н. Ульянова», Ульяновск, Россия.

Original article PACS 42.25.Bs OCIS 310.6628 MSC 00A79

# Nonlocal field equations in nanostructures taking into account higher multipole moments

K. K. Altunin 🗓

Ulyanovsk State Pedagogical University, 432071, Ulyanovsk, Russia

Submitted November 27, 2023 Resubmitted November 30, 2023 Published December 12, 2023

**Abstract.** Nonlocal field equations are proposed to describe the propagation of optical waves in nanostructures, taking into account higher multipole moments for various types of allowed quantum transitions. Taking into account various types of quantum transitions of higher multipolarity in the spectrum of interacting atoms of a nanostructured medium can significantly improve the accuracy of the description of optical phenomena in nanostructured media using nonlocal field equations.

**Keywords:** nanostructured medium, electric dipole transitions, electric quadrupole transitions, magnetic dipole transitions, nonlocal equations, field equations, macroscopic fields, microscopic fields

## References

- 1. Cameron R. P., Barnett S. M., Yao A. M. Optical helicity, optical spin and related quantities in electromagnetic theory // New Journal of Physics. 2012. may. Vol. 14, no. 5. P. 053050. URL: http://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/14/5/053050.
- 2. You X.-L., Li Ch.-F. Lorentz covariance of optical Dirac equation and spinorial photon field // New Journal of Physics. 2021. jul. Vol. 23, no. 7. P. 073030. URL: http://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/ac1142.
- 3. Bliokh K. Y., Bekshaev A. Y., Nori F. Dual electromagnetism: helicity, spin, momentum and angular momentum // New Journal of Physics. 2013. mar. Vol. 15, no. 3. P. 033026. URL: http://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/15/3/033026.
- 4. Aborahama Y., Mojahedi M. Designing optical fields in three dimensions using source-boundary transformations // Physical Review Applied. 2021. apr. Vol. 15, no. 4. URL: http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevApplied.15.044019.
- 5. Zhang Zi-jia, Shi Wen-kang. Eigenvalue and field equations of three-layered uniaxial fibers and their applications to the characteristics of long-period fiber gratings with applied axial strain // Journal of the Optical Society of America A. 2005. nov. Vol. 22, no. 11. P. 2516. URL: http://dx.doi.org/10.1364/JOSAA.22.002516.

- 6. Aiello A. Field theory of monochromatic optical beams: II. Classical and quantum paraxial fields // Journal of Optics. 2019. dec. Vol. 22, no. 1. P. 014002. URL: http://dx.doi.org/10.1088/2040-8986/ab5c6d.
- 7. Ghanbari B., Baleanu D. Applications of two novel techniques in finding optical soliton solutions of modified nonlinear Schrödinger equations // Results in Physics. 2023. jan. Vol. 44. P. 106171. URL: http://dx.doi.org/10.1016/j.rinp.2022. 106171.
- 8. Abdel-Gawad H. I. Approximate-analytic optical soliton solutions of a modified-Gerdjikov-Ivanov equation: modulation instability // Optical and Quantum Electronics. 2023. feb. Vol. 55, no. 4. URL: http://dx.doi.org/10.1007/s11082-023-04566-6.
- 9. Supplee J. M. Optical Bloch equations: informal motivation without the Schrödinger equation // American Journal of Physics. 2000. feb. Vol. 68, no. 2. P. 180–185. URL: http://dx.doi.org/10.1119/1.19392.
- 10. A dense light field reconstruction algorithm for four-dimensional optical flow constraint equation / J. Liu [et al.] // Pattern Recognition. 2023. feb. Vol. 134. P. 109101. URL: http://dx.doi.org/10.1016/j.patcog.2022.109101.
- 11. Dennis M. R., Tijssen T., Morgan M. A. On the Majorana representation of the optical Dirac equation // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical.— 2023.— jan.— Vol. 56, no. 2.— P. 024004.— URL: http://dx.doi.org/10.1088/1751-8121/acb182.
- 12. Ribeiro S., Aizpurua J., Esteban R. Influence of direct dipole-dipole interactions on the optical response of two-dimensional materials in strongly inhomogeneous infrared cavity fields // Physical Review A. 2023. oct. Vol. 108, no. 4. P. 043718. URL: http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.108.043718.
- 13. Tanaka M., Tanaka K. Boundary integral equations for computer aided design of near-field optics // Electronics and Communications in Japan (Part II: Electronics).— 1996.—jan.— Vol. 79, no. 11.— P. 10–18.— URL: http://dx.doi.org/10.1002/ecjb.4420791102.
- 14. Direct interpretation of near-field optical images / A. Dereux [et al.] // Journal of Microscopy. 2001. may. Vol. 202, no. 2. P. 320–331. URL: http://dx.doi.org/10.1046/j.1365-2818.2001.00868.x.
- 15. Gadomsky O. N., Altunin K. K. The problem of two electrons in an external field and the method of integral equations in optics // Journal of Experimental and Theoretical Physics. 1998. nov. Vol. 87, no. 5. P. 842–854. URL: http://dx.doi.org/10.1134/1.558733.

### Information about authors:

Konstantin Konstantinovich Altunin — PhD in Physics and Mathematics, Associate Professor, Associate Professor of the Department of Physics and Technical Disciplines of the Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education "Ulyanovsk State Pedagogical University", Ulyanovsk, Russia.

E-mail: kostya\_altunin@mail.ru ORCID iD © 0000-0002-0725-9416 Web of Science ResearcherID P I-5739-2014 SCOPUS ID 57201126207 IstinaResearcherID 66185348