

09

## Модовый состав волноводов на основе гиперболического в видимом диапазоне ван-дер-ваальсова кристалла

© О.Г. Матвеева<sup>1</sup>, К.В. Воронин<sup>2</sup>, Д.В. Грудинин<sup>1,3</sup>, С.Д. Чикалкин<sup>1,4</sup>, Н.В. Пак<sup>1</sup>,  
М.И. Титова<sup>5</sup>, Д.Г. Баранов<sup>1</sup>, А.А. Вишневый<sup>1</sup>, В.С. Волков<sup>3</sup>, А.В. Арсенин<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> Центр фотоники и двумерных материалов, Московский физико-технический институт (Национальный исследовательский университет), Долгопрудный, Московская обл., Россия

<sup>2</sup> Donostia International Physics Center (DIPC), Donostia/San-Sebastián, Spain

<sup>3</sup> Emerging Technologies Research Center, XPACEO, Internet City, Dubai, United Arab Emirates

<sup>4</sup> Российский квантовый центр, Москва, Россия

<sup>5</sup> Лаборатория программируемых функциональных материалов, Центр нейробиологии и нейроморфных технологий, Москва, Россия

E-mail: matveeva@phystech.edu

Поступило в Редакцию 17 июня 2025 г.

В окончательной редакции 15 октября 2025 г.

Принято к публикации 15 октября 2025 г.

Оптические волноводы являются фундаментальным элементом для нанотехнологических приложений благодаря их способности эффективно передавать световой сигнал в наноразмерных масштабах. Продемонстрированы плазмон-поляритонные волноводы, основанные на гиперболическом в ближнем инфракрасном и видимом свете ван-дер-ваальсовом материале  $\text{MoOCl}_2$ . В интервале 530–960 nm наблюдается величина показателя качества волноводных мод FOM (figure of merit) около 40. Кроме того, наблюдается высочайшая степень локализации волноводных мод, вплоть до  $q = 15$ . В дополнение рассчитана зависимость характеристик волноводов от угла между основной осью волновода и осью, вдоль которой может распространяться возбуждение в кристаллическом слое.

**Ключевые слова:** оптические волноводы, гиперболические плазмон-поляритоны, двуосный ван-дер-ваальсов кристалл, сверхлокализованные моды.

DOI: 10.61011/PJTF.2026.04.62320.20409

В последние годы поляритоны, представляющие собой гибридные состояния света и вещества, возникающие при связывании фотонов с квантовыми возбуждениями кристаллов (например, оптическими фононами или плазмонами), стали главным инструментом для управления светом на субволновых масштабах. Поляритонные моды лежат в основе таких приложений, как плазмонный фотокатализ [1,2] и сенсоры [3], спектроскопия гигантского комбинационного рассеяния [4], управление волновым фронтом [5–7] и нелинейная оптика [8,9].

Чем выше эффективный показатель преломления поляритонной моды, тем сильнее, т.е. на меньшем пространственном масштабе, в ней локализовано поле. В диэлектриках, включая анизотропные, эффективный показатель преломления распространяющейся волны фундаментально ограничен наибольшей из компонент тензора показателя преломления. Напротив, если в анизотропном кристалле одно или два главных значения диэлектрической проницаемости отрицательны, а другие положительны, то он может поддерживать волны со сколь угодно высоким эффективным показателем преломления. Такой материал называют гиперболическим, поскольку изочастотные поверхности в пространстве волновых векторов образуют гиперboloид, а поддерживаемые им электромагнитные волны — гиперболическими поляритонами. За счет высокого эффективного

показателя преломления гиперболические поляритоны позволяют локализовать свет в экстремально субволновых масштабах [10,11]. Из гиперболических материалов, особенно натуральных [12], удобно изготавливать такие фотонные элементы, как резонаторы [13], фотонные кристаллы [14] и волноводы [15].

Анализ геометрической и химической структуры кристаллов [16] дает возможность открывать все новые материалы для фотонных применений. Ван-дер-ваальсов гиперболический материал  $\text{MoOCl}_2$  [17–19] уникален тем, что является гиперболическим в широкой спектральной полосе от видимого до ближнего инфракрасного диапазона, а не в узких интервалах среднего инфракрасного диапазона, как практически все ранее известные аналоги.

В настоящей работе проведено численное исследование гиперболических волноводов на основе тонких пленок кристалла  $\text{MoOCl}_2$ . Были изучены степень локализации мод и дальность их распространения с подбором оптимальных параметров волноводов для достижения максимальной дальности распространения. В отличие от диэлектрических волноводов аналогичного размера, поддерживающих одну или две волноводные моды, гиперболический волновод поддерживает формально бесконечное их количество, причем длина распространения мод уменьшается по мере увеличения порядка моды [20].

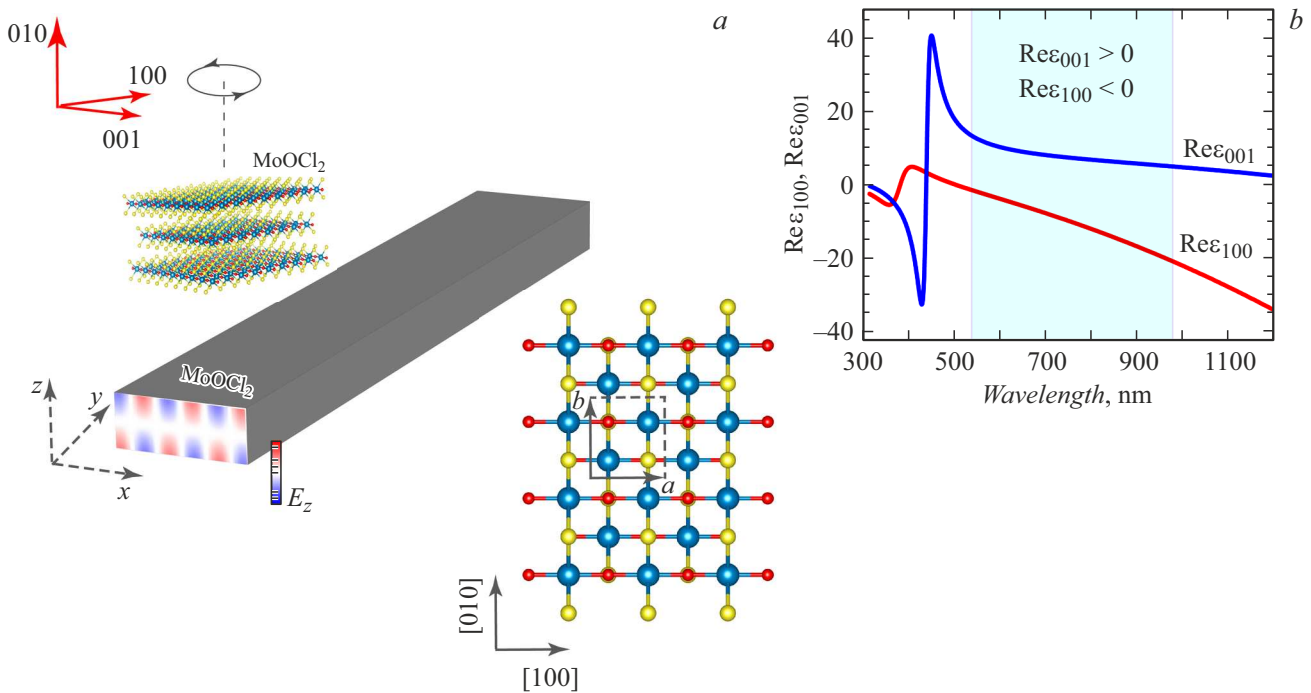


**Рис. 1.** Плазмон-поляритонные волноводы в  $\text{MoOCl}_2$ . *a* — схема волновода, на которой отображается возможность ориентировать волновод под произвольным углом к оптическим осям кристалла, и схема кристаллической решетки (голубым обозначены ядра молибдена, красным — кислорода, желтым — хлора) с элементарной ячейкой (*a*, *b*) материала  $\text{MoOCl}_2$ . *b* — зависимость диэлектрических функций в плоскости от длины волны падающего света, голубым цветом отмечена область гиперболического поведения материала. Цветной вариант рисунка представлен в электронной версии статьи.

Дана классификация волноводных мод и показана их эволюция при изменении угла распространения волны в анизотропной пленке. В заключение проведено сравнение полученных результатов со свойствами металлических плазмонных волноводов. В настоящей работе продемонстрированы волноводы, поддерживающие сверхлокализованные моды с малыми потерями на распространение, что открывает новые возможности для приложений в высокочастотной двумерной оптоэлектронике.

На рис. 1 можно видеть, что волновод был смоделирован таким образом, чтобы компонента диэлектрического тензора  $[100]$  была соосна главной оси волновода (рис. 1, *a*), поскольку в диапазоне длин волн 530–960 nm мы наблюдаем гиперболический закон распространения волн, при котором волна идет либо вдоль направления  $[100]$ , либо под некоторым острым углом к нему. Это явление обусловлено тем, что  $\text{Re}\epsilon_{100} < 0$  и  $\text{Re}\epsilon_{001} > 0$  в данном частотном диапазоне (рис. 1, *b*), что в свою очередь обусловлено химическим составом и геометрическими свойствами кристаллической решетки. В нашем случае ширина волновода составляет 100 nm, а высота — 50 nm.

В ходе исследования мод, возникающих в волноводе, была сделана классификация по количеству осцилляций  $y$ -компоненты электрического поля вдоль вертикального и вдоль горизонтального направлений в сечении

волновода (рис. 2, *a*). При построении дисперсии  $q(\lambda)$  (волновое число  $q = \frac{|\mathbf{k}|}{k_0}$ ,  $k_0 = \frac{2\pi}{\lambda}$ ,  $\mathbf{k}$  — волновой вектор) было замечено, что начиная с моды  $M_{10}$  появляется новое семейство дисперсионных кривых  $M_{1i}$  (рис. 2, *b*), которые пересекают дисперсионные кривые из нулевого семейства  $M_{0i}$ . Изучив подробнее точки пересечения, мы выявили, что при совпадающей действительной части волнового числа  $\text{Re}q$  у них отличается мнимая часть  $\text{Im}q$ , что объясняется увеличением потерь при увеличении количества осцилляций  $i$  вдоль горизонтального направления в поперечном сечении волновода. Здесь встает вопрос о добротности разных мод.

Для того чтобы оценить характеристики качества различных мод, посчитаем длину пробега моды в волноводе (рис. 3, *b*)

$$L_{\text{decay}} = \frac{1}{\text{Im}k}. \quad (1)$$

Помимо этого для каждой моды вычислим отношение действительной и мнимой частей модуля волнового вектора FOM (figure of merit) (рис. 3, *a*), которое пропорционально отношению длины пробега  $L_{\text{decay}}$  поляритона к его длине волны  $\lambda_{\text{pol}}$ :

$$\text{FOM} = \frac{\text{Re}k}{\text{Im}k} = 2\pi \frac{L_{\text{decay}}}{\lambda_{\text{pol}}}. \quad (2)$$

На основе представленных на рис. 3 зависимостей можно сделать неожиданный вывод, что добротность бо-

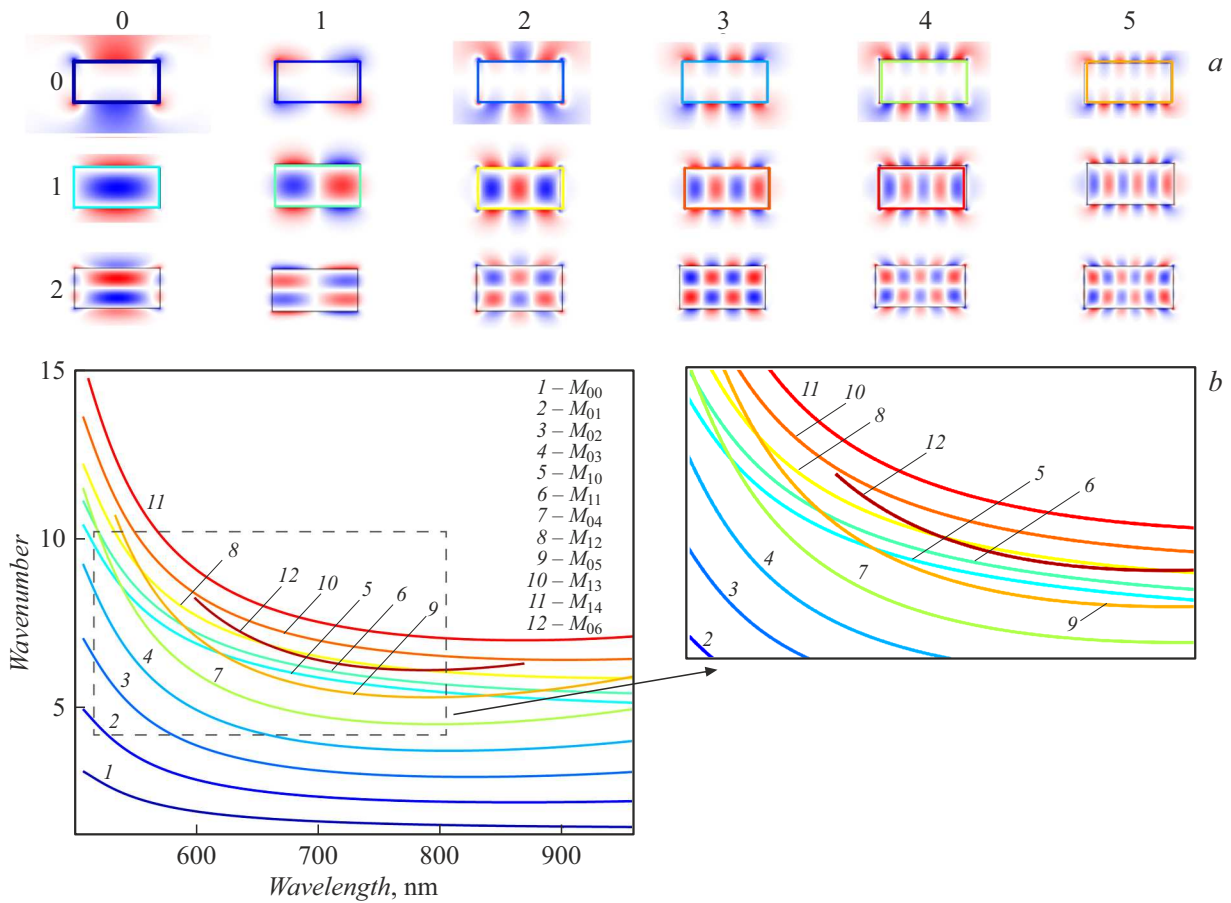


**Рис. 2.** Классификация волноводных мод. *a* — распределение действительной части вертикальной компоненты электрического поля  $E_y$  для мод  $M_{ij}$  ( $i$  — строка,  $j$  — столбец) волновода сечением  $100 \times 50$  nm на длине волны 570 nm (цветной вариант рисунка представлен в электронной версии статьи). *b* — дисперсия волноводных мод в волноводе сечением  $100 \times 50$  nm.

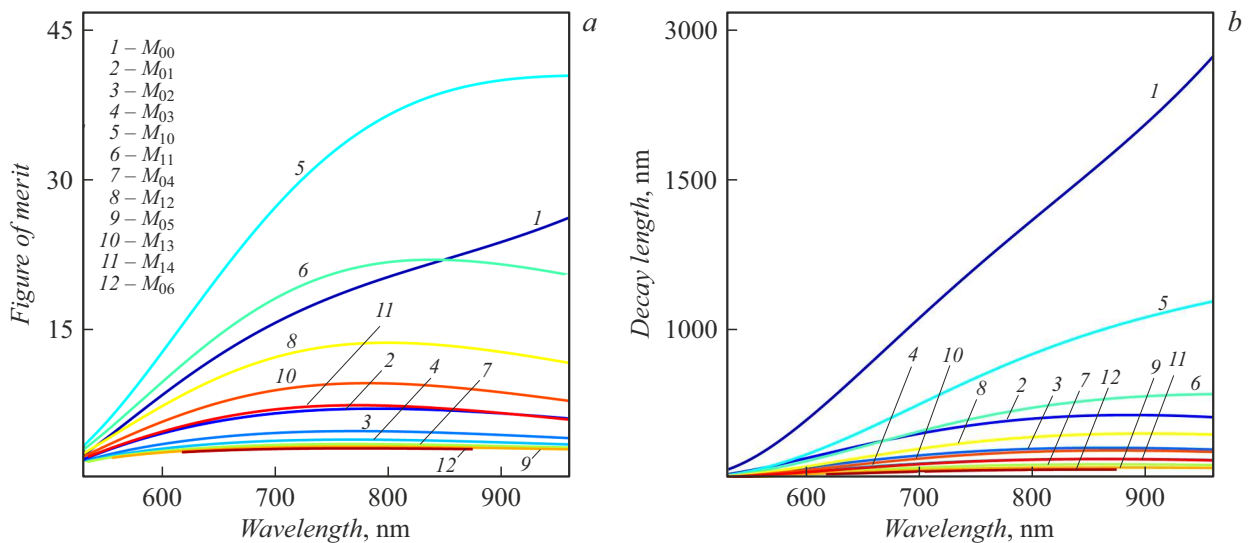


**Рис. 3.** Качественные характеристики волноводных мод. *a* — FOM волноводных мод в волноводе сечением  $100 \times 50$  nm, ориентированном вдоль оси  $[100]$ . *b* — зависимость длины затухания от длины волны для разных мод.

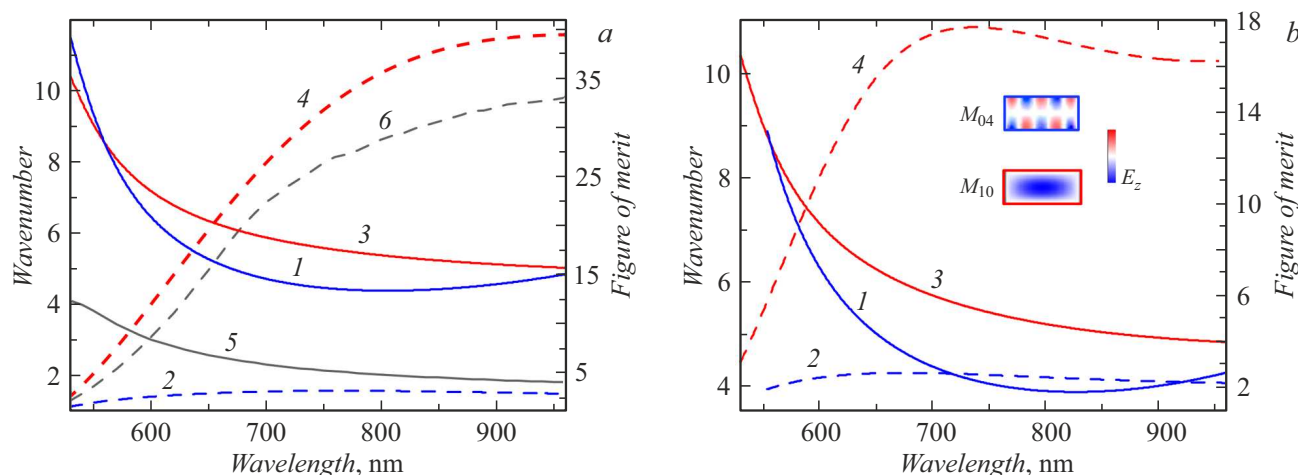


**Рис. 4.** Сравнительная характеристика мод  $M_{04}$  (1, 2) и  $M_{10}$  (3, 4) для волноводов, ориентированных вдоль оси  $[100]$  и под углом  $5^\circ$  к ней, а также симметричной моды в металле (5, 6). *a* — дисперсии мод  $M_{04}$  и  $M_{10}$  для угла  $0^\circ$ , а также металлической моды (сплошные линии, шкала слева), FOM мод  $M_{04}$  и  $M_{10}$  для угла  $0^\circ$ , а также металлической моды (штриховые линии, шкала справа). *b* — дисперсии мод  $M_{04}$  и  $M_{10}$  для угла  $5^\circ$  (сплошные линии, шкала слева), FOM мод  $M_{04}$  и  $M_{10}$  для угла  $5^\circ$  (штриховые линии, шкала справа).

лее локализованной первой моды  $M_{10}$  выше, чем у фундаментальной  $M_{00}$ , которая при этом распространяется дальше. Таким образом, применение материала  $\text{MoOCl}_2$  решает задачу информационных приложений фотоники: уместить как можно большее количество информации на минимальном пространстве с минимальными потерями при распространении сигнала.

Анизотропия материала в плоскости дает дополнительную степень свободы исследуемому объекту, что позволяет сделать вывод о характере влияния угла между основной осью волновода и направлением распространения волн в кристалле, отвечающим самому короткому из возможных волновых векторов — вдоль кристаллической оси  $[100]$ , на степень локализации мод в волноводе. Взяв для сравнения моды  $M_{04}$  и  $M_{10}$  (см. вставку на рис. 4, *a*), можно увидеть, что с увеличением угла уменьшается степень локализации для обеих мод (рис. 4, *a, b*, левая шкала, сплошные линии) в противоположность тому, что наблюдается в пленке. Кроме того, падает и добротность мод (рис. 4, *a, b*, правая шкала, штриховые линии). Наблюдаемая зависимость будет иметь место и при дальнейшем увеличении угла вследствие монотонности функции, задающей волновое число, по углу распространения волны. Данное наблюдение позволяет сделать вывод, что имеет практический смысл изготавливать волноводы соосно с  $[100]$  в данном гиперболическом кристалле.

В заключение отметим, что в настоящем исследовании наблюдается высочайшая степень локализации волноводных мод, вплоть до  $q = 15$ , что заметно больше, чем в металлических волноводах аналогичного размера. Для сравнения в прямоугольном золотом волноводе сечением  $100 \times 50 \text{ nm}$  величина локализации составляет всего  $q = 4$ . При этом добротность моды  $M_{10}$  превышает

добротность моды в золотом волноводе (рис. 4, *a*, линии 5 и 6).

Таким образом, представлена модовая структура волновода на основе гиперболического материала, качественно отличающаяся от обычного диэлектрического волновода наличием все более высоких степеней локализации с увеличением порядка моды. Кроме того, было выявлено, что высшие моды не только более локализованы, но и обладают большей добротностью по сравнению с низшими, что не может не вдохновлять исследователей на применение материала  $\text{MoOCl}_2$  для изготовления оптических волноводов самого высокого класса.

### Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант 24-79-00308).

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] E. Cortés, L.V. Besteiro, A. Alabastri, A. Baldi, G. Tagliabue, A. Demetriadou, P. Narang, ACS Nano, **14**, 16202 (2020). DOI: 10.1021/acsnano.0c08773
- [2] M. Herran, S. Juergensen, M. Kessens, D. Hoeing, A. Köppen, A. Sousa-Castillo, W.J. Parak, H. Lange, S. Reich, F. Schulz, E. Cortés, Nat. Catal., **6**, 1205 (2023). DOI: 10.1038/s41929-023-01053-9
- [3] Y. Xu, P. Bai, X. Zhou, Yu. Akimov, C.E. Png, L.-K. Ang, W. Knoll, L. Wu, Adv. Opt. Mater., **7**, 1801433 (2019). DOI: 10.1002/adom.201801433

- [4] J. Langer, D. Jimenez de Aberasturi, J. Aizpurua, R.A. Alvarez-Puebla, B. Auguie, J.J. Baumberg, G.C. Bazan, S.E.J. Bell, A. Boisen, A.G. Brolo, J. Choo, D. Cialla-May, V. Deckert, L. Fabris, K. Faulds, F.J. García de Abajo, R. Goodacre, D. Graham, A.J. Haes, C.L. Haynes, C. Huck, T. Itoh, M. Kall, J. Kneipp, N.A. Kotov, H. Kuang, E.C. Le Ru, H.K. Lee, J.-F. Li, X.Y. Ling, S.A. Maier, T. Mayerhöfer, M. Moskovits, K. Murakoshi, J.-M. Nam, S. Nie, Y. Ozaki, I. Pastoriza-Santos, J. Perez-Juste, J. Popp, A. Pucci, S. Reich, B. Ren, G.C. Schatz, T. Shegai, S. Schlücker, L.-L. Tay, K.G. Thomas, Z.-Q. Tian, R.P. Van Duyne, T. Vo-Dinh, Y. Wang, K.A. Willets, C. Xu, H. Xu, Y. Xu, Y.S. Yamamoto, B. Zhao, L.M. Liz-Marzán, *ACS Nano*, **14**, 28 (2020). DOI: 10.1021/acsnano.9b04224
- [5] N. Yu, P. Genevet, M.A. Kats, F. Aieta, J.-P. Tetienne, F. Capasso, Z. Gaburro, *Science*, **334**, 333 (2011). DOI: 10.1126/science.1210713
- [6] P. Genevet, D. Wintz, A. Ambrosio, A. She, R. Blanchard, F. Capasso, *Nat. Nanotechnol.*, **10**, 804 (2015). DOI: 10.1038/nnano.2015.137
- [7] D. Wintz, A. Ambrosio, A.Y. Zhu, P. Genevet, F. Capasso, *ACS Photon.*, **4**, 22 (2017). DOI: 10.1021/acsp Photonics.6b00758
- [8] J. Lee, M. Tymchenko, C. Argyropoulos, P.-Y. Chen, F. Lu, F. Demmerle, G. Boehm, M.-C. Amann, A. Alú, M.A. Belkin, *Nature*, **511**, 65 (2014). DOI: 10.1038/nature13455
- [9] M. Mesch, B. Metzger, M. Hentschel, H. Giessen, *Nano Lett.*, **16**, 3155 (2016). DOI: 10.1103/PhysRevLett.117.123904
- [10] E. Galiffi, G. Carini, X. Ni, G. Álvarez-Pérez, S. Yves, E.M. Renzi, R. Nolen, S. Wasserroth, M. Wolf, P. Alonso-Gonzalez, A. Paarmann, A. Alú, *Nat. Rev. Mater.*, **9**, 9 (2023). DOI: 10.1038/s41578-023-00620-7
- [11] M. Tamagnone, A. Ambrosio, K. Chaudhary, L.A. Jauregui, P. Kim, W.L. Wilson, F. Capasso, *Sci. Adv.*, **4**, eaat7189 (2018). DOI: 10.1126/sciadv.aat7189
- [12] W. Ma, P. Alonso-González, S. Li, A.Y. Nikitin, J. Yuan, J. Martín-Sánchez, J. Taboada-Gutiérrez, I. Amenabar, P. Li, S. Vélez, C. Tollan, Z. Dai, Y. Zhang, S. Sriram, K. Kalantar-Zadeh, S.-T. Lee, R. Hillenbrand, Q. Bao, *Nature*, **562**, 557 (2018). DOI: 10.1038/s41586-018-0618-9
- [13] O.G. Matveeva, A.I.F. Tresguerres-Mata, R.V. Kirtaev, K.V. Voronin, J. Taboada-Gutiérrez, C. Lanza, J. Duan, J. Martín-Sánchez, V.S. Volkov, P. Alonso-González, A.Y. Nikitin, *npj 2D Mater. Appl.*, **7**, 31 (2023). DOI: 10.1038/s41699-023-00387-z
- [14] N. Capote-Robayna, O.G. Matveeva, V.S. Volkov, P. Alonso-Gonzalez, A.Y. Nikitin, *Laser Photon. Rev.*, **16**, 9 (2022). DOI: 10.1002/lpor.202200428
- [15] D. Grudinin, O. Matveeva, G. Ermolaev, A. Vyshnevyy, A. Arsenin, V. Volkov, *Photonics*, **10**, 59 (2023). DOI: 10.3390/photonics10010059
- [16] A.S. Slavich, G.A. Ermolaev, M.K. Tatmyshevskiy, A.N. Toksumakov, O.G. Matveeva, D.V. Grudinin, K.V. Voronin, A. Mazitov, K.V. Kravtsov, A.V. Syuy, D.M. Tsybarenko, M.S. Mironov, S.M. Novikov, I. Kruglov, D.A. Ghazaryan, A.A. Vyshnevyy, A.V. Arsenin, V.S. Volkov, K.S. Novoselov, *Light Sci. Appl.*, **13**, 68 (2024). DOI: 10.1038/s41377-024-01407-3
- [17] Z. Wang, M. Huang, J. Zhao, C. Chen, H. Huang, X. Wang, P. Liu, J. Wang, J. Xiang, C. Feng, Z. Zhang, X. Cui, Y. Lu, S.A. Yang, B. Xiang, *Phys. Rev. Mater.*, **4**, 041001(R) (2020). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.4.041001
- [18] G. Venturi, A. Mancini, N. Melchioni, S. Chiodini, A. Ambrosio, *Nat. Commun.*, **15**, 9727 (2024). DOI: 10.1038/s41467-024-53988-7
- [19] F.L. Ruta, Y. Shao, S. Acharya, A. Mu, N.H. Jo, S.H. Ryu, D. Balatsky, Y. Su, D. Pashov, B.S.Y. Kim, M.I. Katsnelson, J.G. Analytis, E. Rotenberg, A.J. Millis, M. van Schilfgaarde, D.N. Basov, *Science*, **387**, 786791 (2025). DOI: 10.1126/science.adr5926
- [20] G. Álvarez-Pérez, K.V. Voronin, V.S. Volkov, P. Alonso-González, A.Y. Nikitin, *Phys. Rev. B*, **100**, 11 (2019). DOI: 10.1103/PhysRevB.100.235408