

09

Эволюция топологических фазовых сингулярностей первого и второго порядков в тонком слое MoOCl_2

© С.Д. Чикалкин¹, О.Г. Матвеева¹, К.В. Воронин², А.В. Грибачев¹, А.Д. Большаков¹,
В.С. Волков³, А.В. Арсенин^{1,3}

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

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

³ Emerging Technologies Research Center, XPANCEO, Internet City, Dubai, United Arab Emirates

E-mail: matveeva@phystech.edu

Поступило в Редакцию 26 мая 2026 г.

В окончательной редакции 13 июня 2026 г.

Принято к публикации 13 июня 2026 г.

Исследован отраженный сигнал от тонкого слоя MoOCl_2 , расположенного на стандартной подложке Si/SiO_2 , на наличие фазовых сингулярностей первого и второго порядков. Изучена эволюция топологических точек первого порядка s - и p -типов в двух случаях ориентации плоскости падения относительно кристаллографических осей MoOCl_2 : вдоль $[100]$ и вдоль $[010]$. Для достижения топологического заряда -2 предложена модификация схемы путем дополнительного расположения поверх MoOCl_2 слоя Si . В результате предложена экспериментально реализуемая структура, на основе которой может быть изготовлен высокочувствительный сенсор и которая также может применяться в качестве оптического фазового модулятора для длины волны 748 nm.

Ключевые слова: топологический заряд, фазовая сингулярность, гиперболические плазмон-поляритоны, MoOCl_2 .

DOI: 10.61011/PJTF.2026.18.63544.20784

Инструменты фазовой инженерии [1–3], позволяющие манипулировать фазой оптического сигнала, сегодня востребованы в плоской оптике, например, для кодирования информации. Вместе с тем в настоящее время наиболее интересны с точки зрения миниатюризации фотонных устройств тонкие слои ван-дер-ваальсовых материалов [4,5] из-за их способности сильно локализовывать свет. Однако вследствие их малой толщины фазовый набег также является небольшим. В этом контексте было предложено решение [6] задействовать для указанного класса материалов фазовые сингулярности [7–10] для управляемого и значимого изменения фазы сигнала. В работах [1–3] манипулирование фазой света осуществлялось посредством изготовления метаматериалов, в то время как в работе [6] предложено использовать натуральные высокопреломляющие ван-дер-ваальсовы материалы, где при малом изменении угла падения или длины волны падающего света в окрестности топологической точки отражательная фаза дает скачок, а даже небольшое изменение электродинамики системы, например добавление слоя молекул или помещение в газовую среду, смещает положение топологической точки. Недавно ставший широко известным гиперболический в видимом и ближнем инфракрасном (включая телекоммуникационный) диапазонах ван-дер-ваальсов материал MoOCl_2 [11–20] представляется особенно перспективным с точки зрения потенциальной интегрируемости его в существующие оптоволоконные системы.

В настоящей работе рассмотрена эволюция топологических точек первого порядка в зависимости от толщины кристаллического слоя MoOCl_2 , а также предложена экспериментальная схема на основе MoOCl_2 с добавлением управляющего кремниевого слоя, позволяющая достичь фазовой сингулярности с топологическим зарядом -2 , что ранее было продемонстрировано только на модельном материале [6] и потенциально применимо при разработке сенсоров, в аналоговых вычислениях и криптографии.

Рассмотрим сигнал, отраженный от структуры, изображенной на рис. 1, а. Введем величину ρ , равную отношению комплекснозначных амплитудных коэффициентов отражения для p - и s -поляризаций, как $\rho = r_p/r_s = |\rho|e^{i\Delta}$. Топологическим точкам соответствуют нули абсолютного значения $|\rho|$, в таких случаях значение фазы $\Delta = \arg(\rho)$ не определено, и она может принимать любые значения от $-\pi$ до π . Аргумент комплексного числа ρ вокруг точки сингулярности может быть получен как экспериментально посредством эллипсометрических измерений, так и численно методом матриц переноса. В пакете Pyllama мы создали многослойную структуру воздух– MoOCl_2 – SiO_2 (280 nm)– Si и вычисляли положение топологических точек p - и s -типа для варьирующейся толщины слоя MoOCl_2 . Заряд топологической точки определяется направлением ее обхода от $-\pi$ до π , а модуль равен величине нормированного на 2π интеграла градиента фазы Δ по замкнутому контуру в плоскости (λ, φ) в ее сколь угодно малой окрестности,

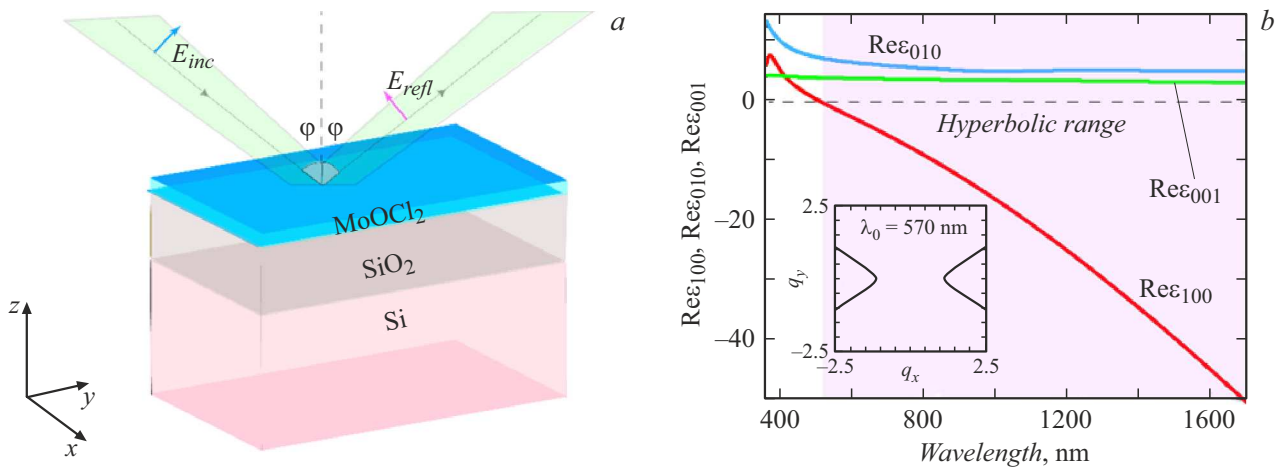


Рис. 1. Отражение света от анизотропного MoOCl_2 . *a* — схема структуры, состоящей из тонкого слоя MoOCl_2 , расположенного на подложке Si/SiO_2 ; *b* — зависимость диэлектрических функций от длины волны падающего света. Фиолетовым цветом выделена область гиперболического поведения материала. На вставке для наглядности представлена изочастотная кривая плазмон-поляритона фундаментальной моды слоя толщиной 50 нм для длины волны $\lambda = 570$ нм. Цветной вариант рисунков представлен в электронной версии статьи.

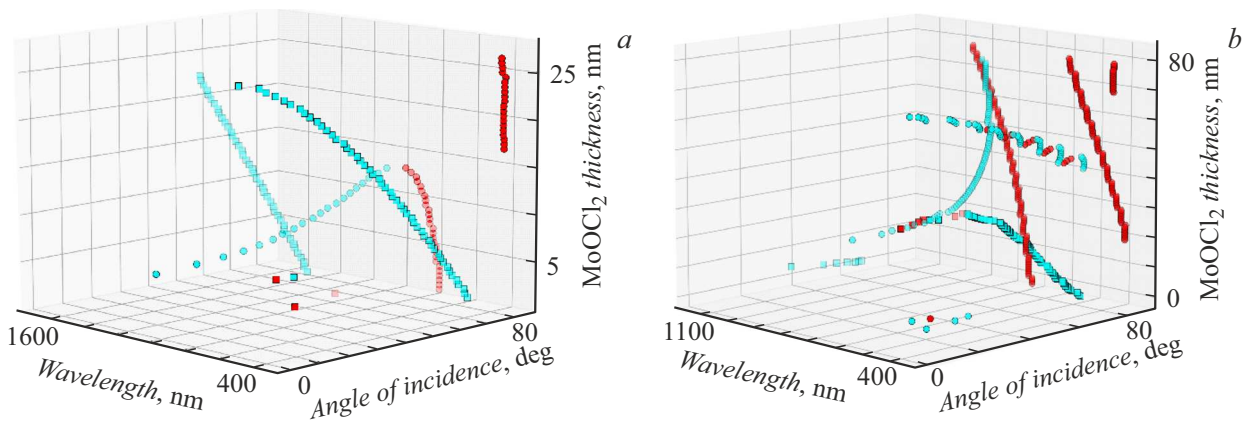


Рис. 2. Эволюция по толщине анизотропного слоя MoOCl_2 топологических сингулярностей первого порядка для двух случаев расположения кристаллических осей $[100]$ и $[010]$ MoOCl_2 в плоскости падения. *a* — в плоскости падения лежит „металлическая“ ось $[100]$, *b* — в плоскости падения лежит „диэлектрическая“ ось $[010]$. Красным и голубым цветом обозначены топологические точки с зарядами $+1$ и -1 соответственно. Кружками и квадратами показаны точки p - и s -типа соответственно.

где λ — длина волны падающего света, а φ — угол падения.

Поскольку материал MoOCl_2 обладает внутривещной гиперболической анизотропией (рис. 1, *b*), во избежание смешивания поляризаций были исследованы два разных случая: плоскость падения содержит кристаллическую „металлическую“ ось $[100]$ (рис. 2, *a*) или „диэлектрическую“ ось $[010]$ (рис. 2, *b*). Длина волны варьировалась в диапазоне 360–1700 нм, а угол падения — от 0 до 90°. Данные для записи тензора диэлектрической проницаемости MoOCl_2 были взяты из работы [14]. При расчете коэффициентов отражения для обеих поляризаций было выявлено, что в случае ориентации плоскости падения по оси $[100]$ имеем несколько топологических точек лишь на толщинах от 1 до 30 нм, при больших толщинах остается лишь одна

точка p -типа с топологическим зарядом $+1$. Напротив, при ориентации плоскости падения по оси $[010]$ топологические точки на толщинах порядка десятков нанометров не пропадают, что позволяет наблюдать их возможное взаимодействие: аннигиляцию, удвоение заряда. Как показано в [6], положение топологической точки с зарядами $+1$ и -1 задается функцией $(\lambda, \varphi) = f(t)$, непрерывной по толщине слоя, поэтому мы наблюдаем отдельные ветви топологических точек.

Отметим, что на толщине 10 нм в случае ориентации плоскости падения по оси $[100]$ наблюдались две точки с одинаковым зарядом, потенциально подходящие для их сближения с целью формирования точки с двойным топологическим зарядом. Однако добавление верхнего слоя Si лишь увеличило расстояние между ними. В противоположность этому при ориентации плоскости паде-

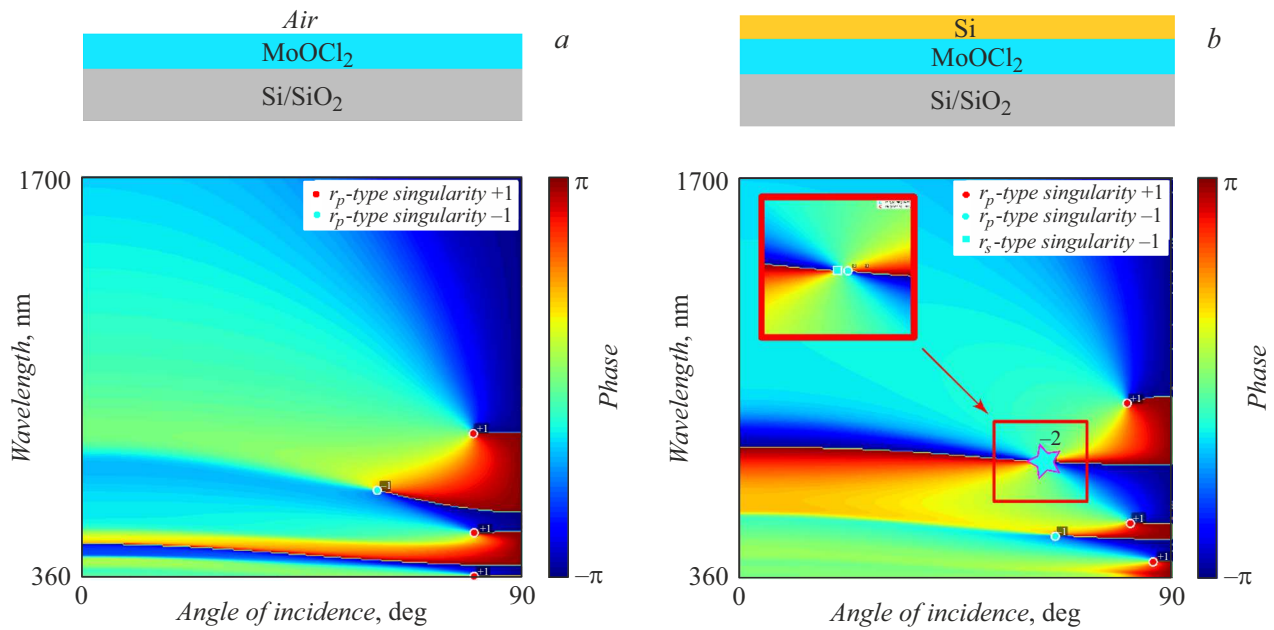


Рис. 3. Влияние наличия верхнего слоя Si на положение и заряд топологических точек. Вверху изображены схемы исследуемых структур: *a* — слой MoOCl_2 на подложке Si/SiO_2 без дополнительного покрытия, *b* — структура с дополнительным слоем Si поверх MoOCl_2 . Внизу — отражательные фазовые карты $\Delta(\lambda, \varphi)$ для обеих структур с указанием топологических сингулярностей разного типа и заряда. Красной рамкой выделена область, соответствующая положению сингулярности второго порядка.

ния по оси $[010]$ при добавлении верхнего слоя Si наблюдается интересный эффект рождения дополнительной топологической точки и последующего „закручивания-штопора“ со сближением двух топологических точек одноименного заряда -1 и их слияния в сингулярность второго порядка на фазовой карте в координатах длина волны–угол падения света (λ, φ) при увеличении толщин слоев (рис. 3, *a, b*). С физической точки зрения верхний слой высокопреломляющего Si существенно изменяет граничные условия и перераспределяет фазовый вклад волн, отраженных от верхней и нижней границ структуры. Именно это приводит к рождению новой топологической точки, которая впоследствии сливается с одноименной сингулярностью в топологическую точку второго порядка. Этого эффекта удалось достичь при следующих параметрах: толщина слоя MoOCl_2 равна 73 nm, толщина слоя Si равна 22 nm, длина волны 748 nm и угол падения 62° .

Предположительно такого же эффекта можно добиться для меньшей длины волны с учетом схожести фазовой картины для областей, лежащих ниже топологической точки с зарядом -2 на рис. 3, *b*. Однако в данном случае задачу лучше сводить не к параметрическому поиску, а к аналитическому объяснению наблюдаемого явления, что будет являться предметом дальнейших исследований.

Таким образом, в работе исследован отраженный сигнал от тонкого слоя MoOCl_2 , расположенного на стандартной подложке Si/SiO_2 , на наличие фазовых сингулярностей первого и второго порядков для оценки возможности создания сенсоров и фазовых модулято-

ров на их основе, что особенно актуально с учетом технологической важности частотного диапазона, в котором они могут возникать. Топологические сингулярности ранее наблюдались для широкого класса вандер-ваальсовых материалов [6], однако для материала с внутриволновой дисперсией гиперболического типа в видимом диапазоне обнаружены впервые. Исследована эволюция топологических точек s - и p -типа в двух случаях: плоскость падения ориентирована вдоль кристаллографической оси $[100]$ и вдоль кристаллографической оси $[010]$. Исследована эволюция топологических точек с зарядами $+1$ и -1 по толщине слоя MoOCl_2 , а также предложена модификация схемы: поверх слоя MoOCl_2 дополнительно располагали слой Si, и путем вариации толщин слоев была достигнута сингулярность второго порядка. Главным результатом работы является предложенная экспериментально реализуемая гиперболическая структура, способная работать как сенсор за счет большого градиента фазы вблизи топологической точки, а также применимая в качестве оптического фазового модулятора для длины волны 748 nm. Для расчетов оптического отклика были задействованы пакеты COMSOL Multiphysics (полноволновое моделирование) и Pyllama (метод трансфер-матриц).

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] 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
- [2] Z.-L. Deng, G. Li, *Mater. Today Phys.*, **3**, 16 (2017). DOI: 10.1016/j.mtphys.2017.11.001
- [3] C. Jung, J. Noh, J. Rho, *Nanophotonics*, **10**, 919 (2020). DOI: 10.1515/nanoph-2020-0440
- [4] D.N. Basov, M.M. Fogler, F.J.G. de Abajo, *Science*, **354**, aag1992 (2016). DOI: 10.1126/science.aag1992
- [5] T. Low, A. Chaves, J.D. Caldwell, A. Kumar, N.X. Fang, P. Avouris, T.F. Heinz, F. Guinea, L. Martin-Moreno, F.H.L. Koppens, *Nat. Mater.*, **16**, 182 (2017). DOI: 10.1038/nmat4792
- [6] G. Ermolaev, K. Voronin, D.G. Baranov, A.S. Slavich, A.V. Prokhorov, A.A. Bogdanov, A.K. Samusev, P.A. Belov, A.V. Zayats, *Nat. Commun.*, **13**, 2049 (2022). DOI: 10.1038/s41467-022-29716-4
- [7] A.N. Grigorenko, P.I. Nikitin, A.V. Kabashin, *Appl. Phys. Lett.*, **75**, 3917 (1999). DOI: 10.1063/1.125493
- [8] V.G. Kravets, F. Schedin, R. Jalil, L. Britnell, R.V. Gorbachev, D. Ansell, B. Thackray, K.S. Novoselov, A.K. Geim, A.V. Kabashin, A.N. Grigorenko, *Nat. Mater.*, **12**, 304 (2013). DOI: 10.1038/nmat3537
- [9] C. Yan, T.V. Raziman, O.J.F. Martin, *ACS Photonics*, **4**, 852 (2017). DOI: 10.1021/acsphotonics.6b00914
- [10] A. Berkhout, A.F. Koenderink, *ACS Photonics*, **6**, 2917 (2019). DOI: 10.1021/acsphotonics.9b01019
- [11] Z. Wang, X. Cheng, B. Yang, S. Zhang, Y. Wu, Z.H. Hang, H. Chen, C.T. Chan, *Phys. Rev. Mater.*, **4**, 041001(R) (2020). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.4.041001
- [12] G. Venturi, A. Mancini, N. Melchioni, S. Chiodini, A. Ambrosio, *Nat. Commun.*, **15**, 9727 (2024). DOI: 10.1038/s41467-024-53988-7
- [13] 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**, 786 (2025). DOI: 10.1126/science.adr5926
- [14] G. Ermolaev, A. Toksumakov, A. Slavich, A. Minnekhanov, G. Tselikov, A. Mazitov, I. Kruglov, G. Tikhonowski, M. Mironov, I.P. Radko, D. Grudinin, I. Fradkin, A. Vyshnevyy, Z. Sofer, A. Arsenin, K.S. Novoselov, V. Volkov, *Nano Lett.*, **26**, 13 (2026). DOI: 10.1021/acs.nanolett.5c06153
- [15] A. Minnekhanov, G. Tikhonowski, G. Ermolaev, K.V. Kravtsov, G. Tselikov, A. Toksumakov, A. Slavich, I. Kazantsev, A. Vyshnevyy, I. Kruglov, I. Radko, Z. Sofer, A. Arsenin, K.S. Novoselov, V. Volkov, *arXiv:2512.17647* (2025). DOI: 10.48550/arXiv.2512.17647
- [16] H. Tong, C. Clemente-Marcuello, K.V. Voronin, P. Alonso-González, A.Y. Nikitin, *arXiv:2602.09186* (2026). DOI: 10.48550/arXiv.2602.09186
- [17] N. Melchioni, A. Mancini, L. Nan, A. Efimova, G. Venturi, A. Ambrosio, *ACS Nano*, **19**, 27 (2025). DOI: 10.1021/acsnano.5c07323
- [18] G. Ermolaev, A. Toksumakov, V. Maslova, A. Slavich, A. Minnekhanov, G. Tselikov, N. Pak, A. Vyshnevyy, A. Söll, Z. Sofer, A. Arsenin, K.S. Novoselov, V. Volkov, *arXiv:2604.05236* (2026). DOI: 10.48550/arXiv.2604.05236
- [19] Y. Li, Y. Zhang, W. Zhang, X. Li, J. Tang, J. Xiao, G. Zhang, X. Liao, P. Jiang, Q. Liu, Y. Luo, Z. Cao, Q. Lyu, Y. Tong, R. Yang, H. Yang, Q. Sun, Y. Gao, P. Wang, Z. Chen, W. Liu, S. Wang, G. Lyu, X. Hu, M. Aeschlimann, Q. Gong, *Nat. Commun.*, **16**, 6172 (2025). DOI: 10.1038/s41467-025-61548-w
- [20] C. Clemente-Marcuello, H. Tong, K.V. Voronin, P. Alonso-González, A.Y. Nikitin, *arXiv:2602.09180* (2026). DOI: 10.48550/arXiv.2602.09180