



GRUPO LEMAC

Relatório de Progresso: Metassuperfícies Holográficas

Versão 1.0

Humberto B. Cavallaro Neto
João Pedro Oliveira Casalli
Vinícius A. O. L. Moura

humberto25043@ilum.cnpem.br
joao25042@ilum.cnpem.br
vinicius23011@ilum.cnpem.br/v199593@g.unicamp.br

Orientador: Prof. Dr. Hugo Enrique Hernandez Figueroa

October 9, 2025

1 Objetivos anteriores

No início destas últimas duas semanas, estabelecemos os seguintes objetivos principais:

- Aplicação preliminar de algoritmos de otimização.
- Aprofundar os estudos sobre operação em bandas.
- Aprofunda os estudos das referências selecionadas e contextualizar o projeto.

Status dos objetivos

- A aplicação de algoritmos de otimização avançou, porém o foco foi em realizar o tratamento das bibliotecas de meta-átomos gerados. Nesse sentido a aplicação foi bem sucedida, contudo, otimizações via *surrogate* ainda não foram iniciadas.
- Devido à baixa prioridade do estudo de bandas, essa seção não foi continuada nas últimas duas semanas.

2 Resultados obtidos

2.1 Contextualização Teórica

Para contextualizar melhor o funcionamento dos algoritmos implementados tanto para a criação dos mapas de fase quanto para configurar a metassuperfície final, foi realizado um estudo aprofundado da teoria por trás do algoritmo de Gerchberg-Saxton (GS), do método do espectro angular (AS), das grades de Damman e, por fim, uma revisão abrangendo todo o panorama atual da holografia de metassuperfície.

As fontes para tal pesquisa foram os artigos originais que primeiro sugeriram o GS ("A Practical Algorithm for the Determination of Phase from Image and Diffraction Plane Pictures", 1971)[1] e as grades de Damman ("High-Efficiency In-Line Multiple Imaging by Means of Multiple Phase Holograms", 1971)[2], um artigo de revisão que se propõe a apresentar os principais avanços nas áreas de holografia e metassuperfícies [3] e o livro "Introduction to Fourier Optics", de Joseph W. Goodman, de 1968[4]. Todas as anotações realizadas durante esses estudos foram digitalizadas e armazenadas em uma pasta coletiva do grupo no Google Drive.

Por fim, as informações obtidas foram compartilhadas com toda a equipe e utilizadas para a calibração dos algoritmos computacionais, incluindo a replicação de alguns testes apresentados pelos autores originais como forma de validação.

2.2 Geração da biblioteca de meta-átomos

Para gerar uma biblioteca de meta átomos, primeiramente se simulou um único meta átomo composto por um cilindro elíptico de altura $H = 600 \text{ nm}$ e semi-eixos $L_x = L_y = 70 \text{ nm}$ feito de silício (Si) em um substrato em formato de paralelepípedo com base quadrada de lado $p = 520 \text{ nm}$ e comprimento de cinco alturas (3000 nm) composto por dióxido de silício (SiO_2). Inicialmente, pouca atenção foi dada a forma com que as propriedades desses materiais estavam configuradas, sendo o silício utilizado o *silicon lossy*, da biblioteca do CST e o SiO_2 , apenas uma substância modificada para ter um $\epsilon = 2.1025$. Para testar o método, primeiramente se simulou um conjunto de 196 nanopilares diferentes, variando os semi-eixos com passo de 10 nm , após isso, se repetiu o mesmo processo, mas com passo $5,2 \text{ nm}$, em um total de 676 combinações diferentes. É importante ressaltar que as simulações foram realizadas em uma pequena banda $281,7 \text{ THz}$ até $281,8 \text{ THz}$, valores escolhidos pois queremos reproduzir um experimento que aplica um laser cujo comprimento de onda é 1064 nm ($281,6 \text{ THz}$). Os resultados dessa etapa podem ser vistos na figura 2.

Visando melhorar o *setup* das simulações, primeiramente, foram alterados os valores numéricos do epsilon dos dois materiais para $\epsilon_{Si} = 12,599$ e $\epsilon_{SiO_2} = 2,1013$, dados retirados do site *refractiveIndex.info*. Além disso, em outra rodada, também se aumentou a caixa de ar que envolve o elemento, que estava inicialmente em zero, para $3 \cdot \lambda$ acima e abaixo. Os resultados para esses testes podem ser vistos na imagens 3 e 4, respectivamente. Nessas simulações, como nas próximas que serão explicadas, o passo de mudança nos semi-eixos foi de 10 nm, gerando 729 meta átomos.

Por fim, foi detalhada a condutividade no silício com uma tangente de perda igual a 0,000743, e a dispersão no silício fundido por meio da importação para dentro do *software* de uma tabela contendo as partes real e imaginária da permissividade elétrica relativa dessa substância para diversas frequências, sendo essas informações retiradas do site já citado. Aplicando essas mudanças para as duas caixas de ar que já haviam sido testadas, os resultados não foram apreciáveis o suficiente para serem distinguíveis da figuras 3 e 4.

2.3 Análise Computacional

A análise computacional é composta por duas etapas: A comparação de *heatmaps* obtidos sobre fases e transmitâncias dos S parâmetros S_{13} e S_{24} , que são coeficientes que descrevem o comportamento de espalhamento óptico de reflexão ou transmissão de um dispositivo. Os parâmetros selecionados representam uma onda que incide com uma polarização e é transmitida com a mesma polarização. A outra etapa é o casamento de fase ou, *phase matching*, técnica aplicada no artigo [5], para reconstruir a metassuperfície computacionalmente através da equação: $\min[(\hat{E}_{xx} - e^{i\varphi_{xx}}) + (\hat{E}_{yy} - e^{i\varphi_{yy}})]$, que é uma função de erro que busca ser minimizada, que permite selecionar o meta-átomo com menor erro para determinado pixel. O " \hat{E} " representa a amplitude complexa das polarizações x e y das células unitárias, enquanto o " φ " é a fase alvo das mesmas polarizações.

- **Análise dos *Heatmaps*:** Dos quatro *heatmaps* gerados, a partir de quatro bibliotecas de meta-átomos diferentes, dois deles (figura 2) se assemelharam com os *heatmaps* encontrados no material complementar do artigo [5] (figura 1).

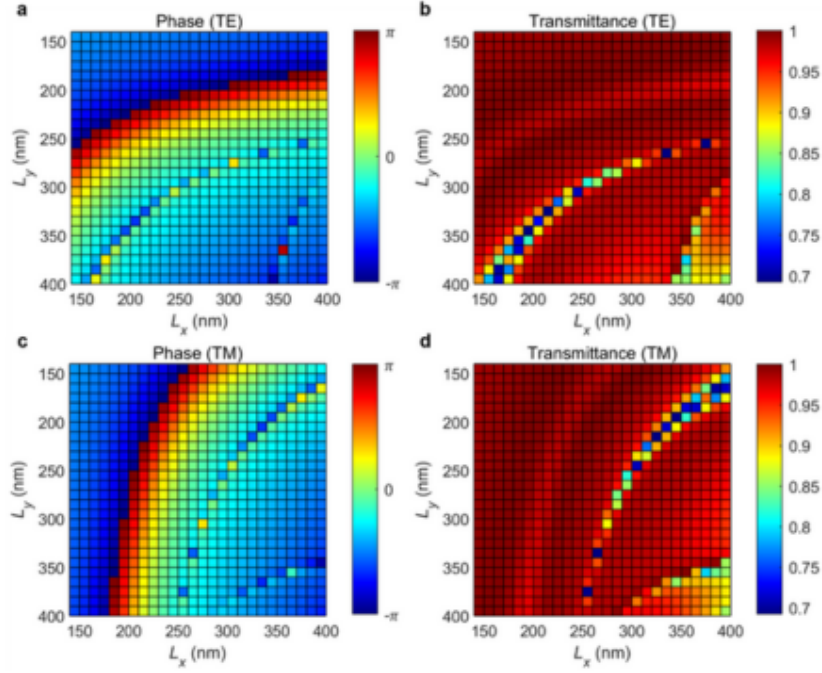
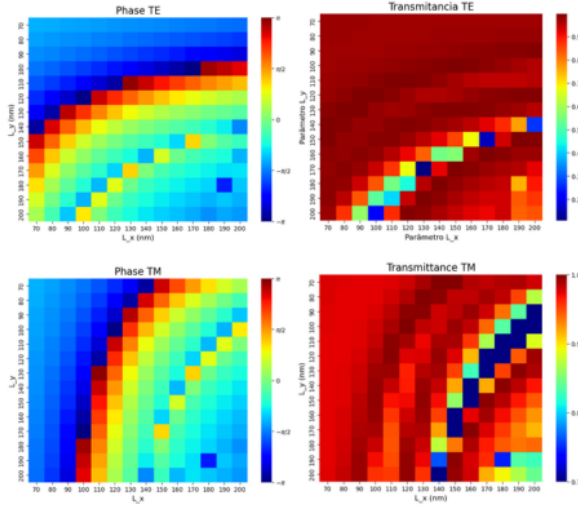
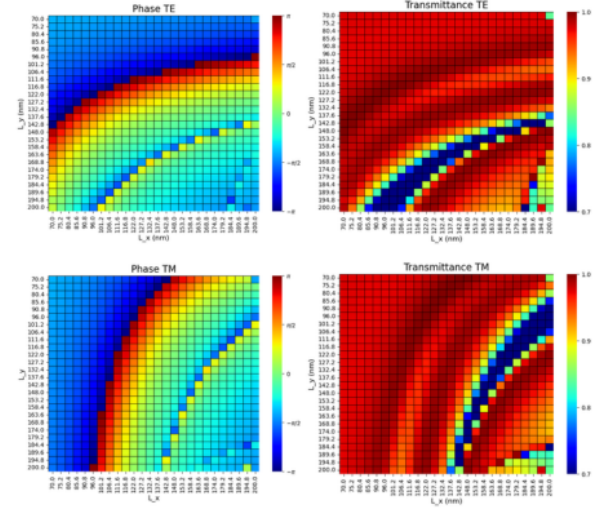


Figure 1: Heatmaps de fase e transmitância para polarizações TE e TM que servem como referência para a replicação computacional. Figura adaptada do Material Suplementar de Guo et al. [5].

Na figura 2, à esquerda, há o heatmap de uma simulação que foi feita com passo 10 nm, ou seja, para os semi-eixos a e b, fixamos um semi-eixo e variamos o outro, segundo o passo, até um teto de 200 nm, ao atingir o teto, variamos o semi-eixo anteriormente fixado segundo o passo e reiniciamos o ciclo. O passo de 10 nm em 10 nm fornece uma combinação de 14x14 meta-átomos, é por esse fator que a imagem aparenta ter menos *pixels* do que no artigo referência, pois este utiliza uma combinação de 26x26. À direita, há a segunda simulação seguindo o passo de 5.2 nm. Esse passo resulta em uma combinação de 26x26, assim como o artigo citado, logo ao comparar os resultados, é possível constatar uma grande semelhança entre os dois.



(a) Heatmaps da Simulação 1



(b) Heatmaps da Simulação 2

Figure 2: Comparação dos heatmaps de fase e transmitância obtidos de duas simulações computacionais distintas.

A figura três ilustra um modelo advindo de uma simulação com passo 5nm e, portanto, 27x27 combinações. Houve uma alteração no coeficiente do silício e acredita-se que por esse motivo houve um padrão de cor levemente diferente quando comparado com a figura 1. Ao analisar o padrão pixelado é possível notar que os *heatmaps* de fase continuam tendo o mesmo padrão que as figuras anteriores, porém há uma ligeira mudança no ângulo das fases tornando a tonalidade predominando um azul mais claro. Enquanto isso, as transmitâncias permaneceram muito parecidas com as figuras anteriores

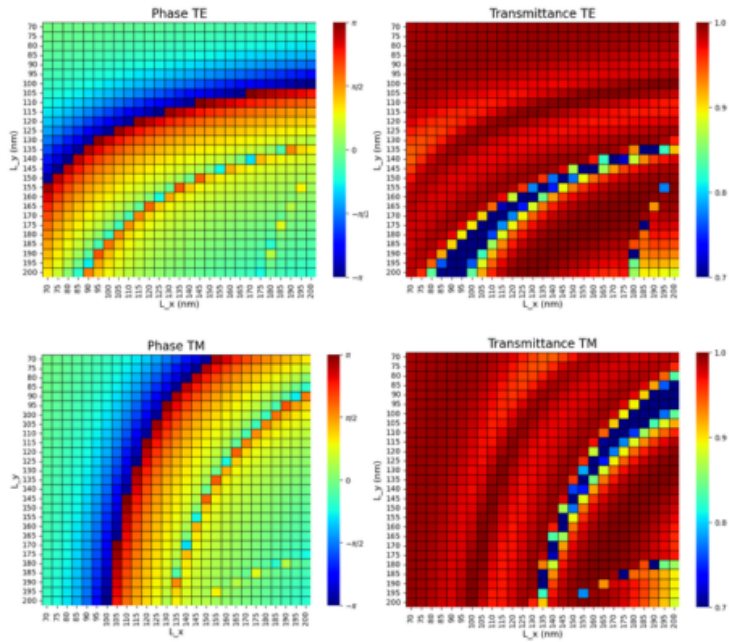


Figure 3

Para o quarto e último *heatmap* (figura 4) gerado, o espaçamento da caixa de ar ("air box") foi modificado, aumentando a distância de 0λ (contato direto) para 3λ . Além disso, foi mantido o a alteração no coeficiente do silício.

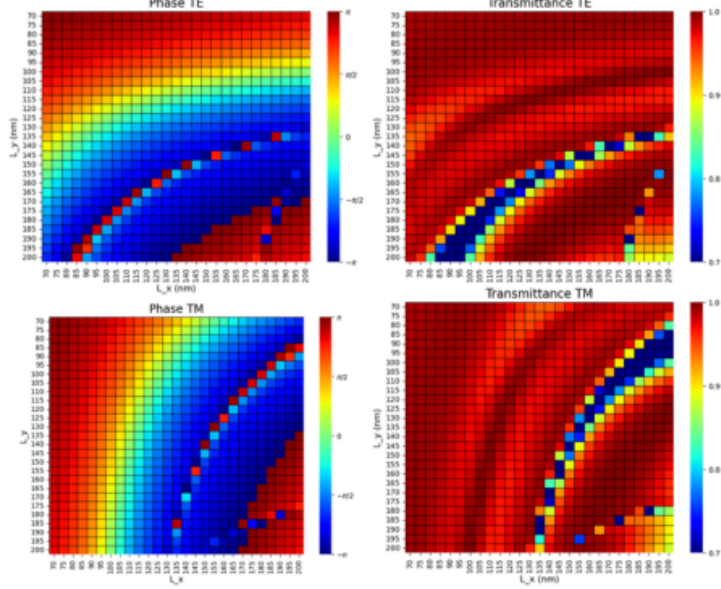


Figure 4

É possível notar, novamente, que o padrão pixelado se manteve, contudo, nos *heatmaps* de fase, mais especificamente na extremidade superior para a fase TE e extremidade esquerda para a fase TM, a fase difere bastante dos primeiros mapas de fase obtidos. Em alguns pontos, quando comparado com o mapa de fase da segunda simulação constata-se uma variação de cerca π radianos na fase. No entanto, os gráficos de transmitância se mantiveram praticamente idênticos, com apenas algumas alterações.

- **Casamento de Fase:** Foi desenvolvido um algoritmo para realizar o casamento de fase, ou "*phase matching*", das bibliotecas obtidas. Para isso, inicialmente foi feito um programa para ler e extrair os dados advindos do CST *Studio Suite* que estavam no formato de *touchstone*. Para essa tarefa, o algoritmo desenvolvido extraía os dados dos meta-átomo simulados e armazenava os dados em colunas que possuíam o: nome do arquivo, ID do meta-átomo, frequência e todas as combinações de S parâmetros em seus valores reais e imaginários. As colunas foram definidas segundo esses credita-se uma importância em ter e armazenar os dados brutos para possíveis análises estatísticas posteriores. Através da linguagem de programação *python* importamos o programa anterior, filtramos apenas para as frequências de 281760 GHz, pois essa representa a frequência de 1064 nm. Após essa etapa, filtramos o *dataframe* para que suas colunas de S parâmetros fossem apenas os S_{13} e S_{24} , os mesmos utilizados para a criação dos *heatmaps*. A justificativa é, justamente, a mesma: Esses parâmetros carregam informações ópticas de transmissão sem polarização cruzada. O próximo passo consiste em converter os valores reais e imaginários dos S parâmetros para valores complexos. Definimos então S_{13} como $S_{complexTE}$ e S_{24} como $S_{complexTM}$, pois TM e TE são polarizações que representam as polarizações x e y respectivamente. Para finalizar, performamos o algoritmo de casamento de fase, que seleciona o meta-átomo com o menor erro dada a função $\min[(\hat{E}_{xx} - e^{i\varphi_{xx}}) + (\hat{E}_{yy} - e^{i\varphi_{yy}})]$. Conforme

a função era realizada, em um *loop* iterativo, as informações sobre L_x e L_y (os semi-eixos da elipse do meta-átomo) eram armazenadas em matrizes, assim como os erros. Essas matrizes são capazes de conectar os meta-átomos com menor erro para um determinado pixel, servindo como uma espécie de mapa óptico. A figura abaixo mostra o design físico das duas polarizações. Essa representação é baseada nas matrizes geradas pelo algoritmo de casamento de fase:

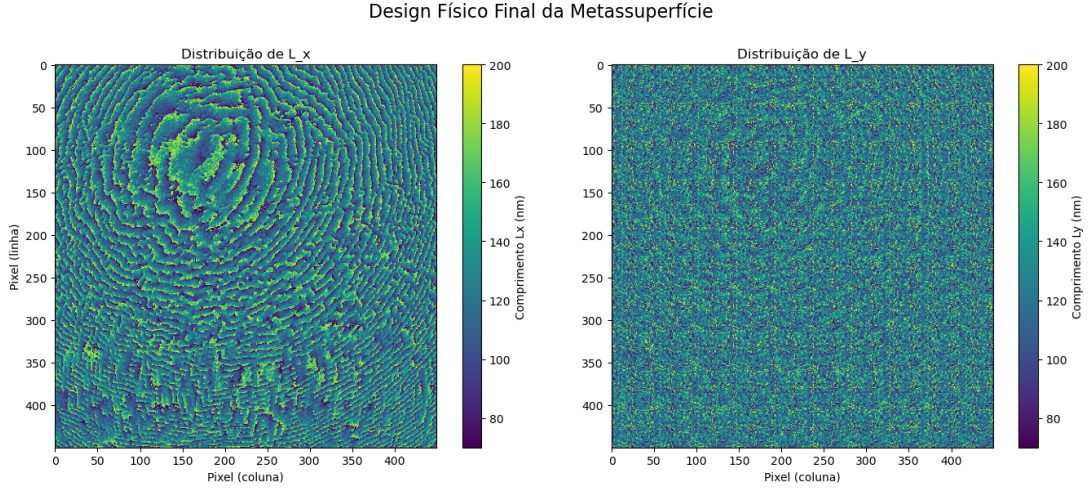


Figure 5: À esquerda temos a representação gráfica do *layout* geométrico do comprimento físico L_x , enquanto à direita temos o *layout* geométrico do comprimento físico L_y

A matriz que armazena a informação dos erros do casamento de fase, segundo a fórmula explicitada acima, foi representada na figura abaixo. Foi calculado, também, o erro médio que foi de 0.149.

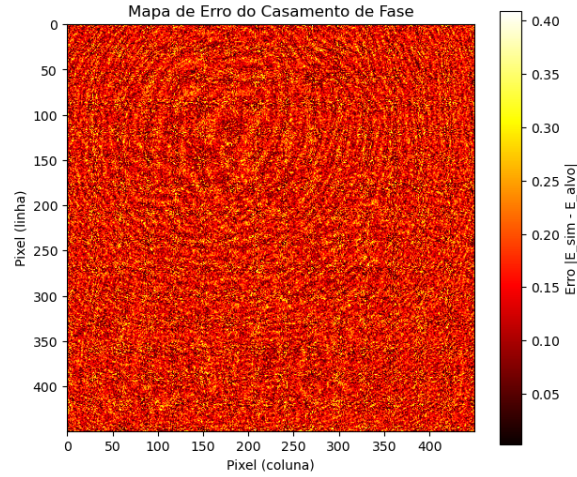


Figure 6: A figura representa a matriz de erros da metassuperfície.

Para comparação com o artigo [5] também foi construído gráficos sobre o erro das fases e amplitudes (Figura 7) segundo as polarizações TM e TE (respectivamente x e y). Esses gráficos foram feitos a partir das matrizes que identificam as geometrias ideais para cada pixel. Acessamos as informações ópticas sobre esses meta-átomos e calculou-se a diferença de fase (fase encontrada - fase alvo) e diferença de amplitude (Amplitude encontrada - Amplitude alvo). Os erros calculados são: O erro médio de fase absoluto TM foi: ≈ 0.09 rad O erro médio de fase absoluto TE foi: ≈ 0.9 rad (Valor do artigo para comparação:

Erro Fase ≈ 0.9 rad) O erro médio de amplitude absoluto TM foi: ≈ 0.02 O erro médio de amplitude absoluto TE foi: ≈ 0.02 (Valor do artigo para comparação: Erro Amplitude ≈ 0.015 por pixel)

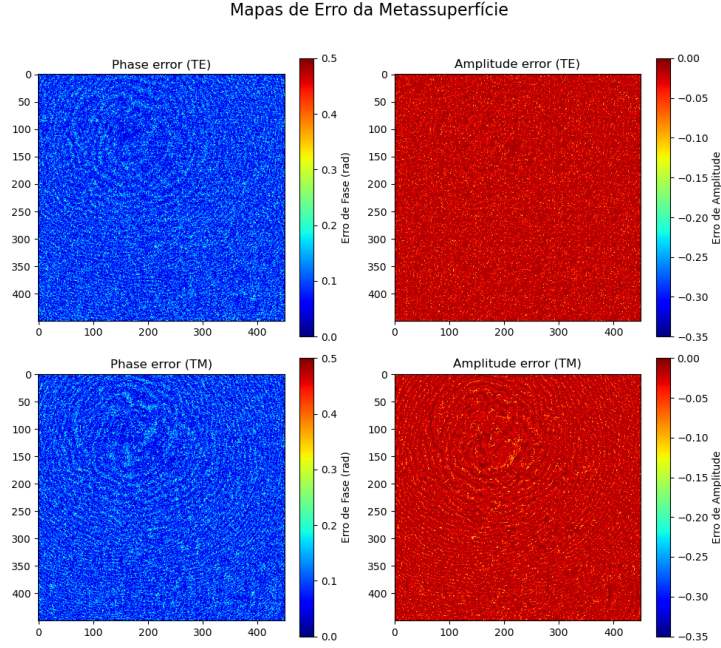


Figure 7: Os erros de fase estão representados em azul, enquanto os erros de amplitude estão representados de vermelho. A polarização TE encontra-se acima das polarizações TM

Para finalizar a seção de análise de casamento de fase, foi feita a reconstrução da imagem (figura 8) através de um mapa de fase gerado pelo algoritmo GS. A correlação de pearson da imagem reconstruída foi de ≈ 0.8 .

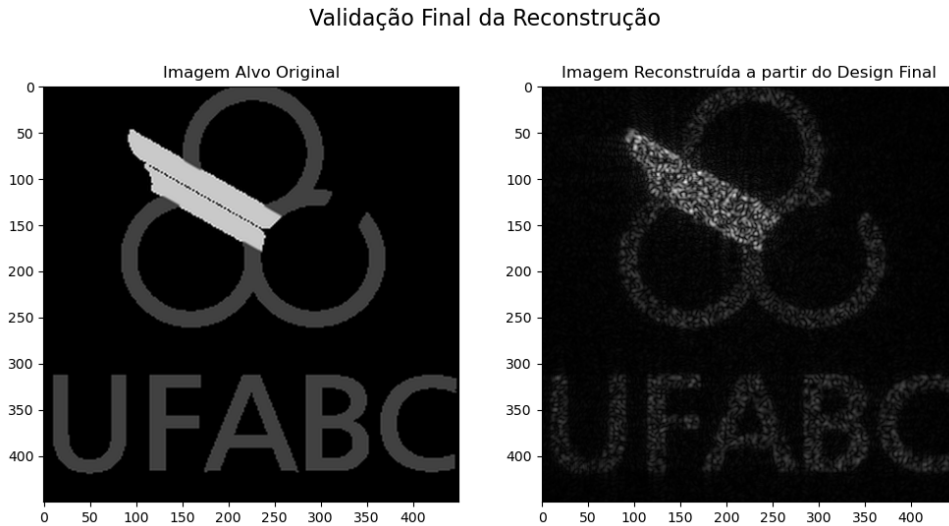


Figure 8: À esquerda: Imagem alvo; À direita: Imagem reconstruída

É necessário explicitar que os resultados do casamento de fase foram advindos da quarta biblioteca de meta-átomos, porém todas foram testadas e seus respectivos resultados foram similares. Logo, pela ausência de resultados com diferenças significativas, foram inseridos apenas os resultados de uma biblioteca.

2.4 Análise de Polarização Cruzada

A polarização cruzada pode ser um obstáculo para a eficiência de uma metassuperfície real, pois, idealmente, em uma metassuperfície multiplexada por polarização busca-se incidir uma polarização x e y onde as polarizações se mantenham ao passar pelas portas. Em outras palavras, espera-se que ao emitir uma polarização x, quando for transmitida, ela não se transforme em polarização y. Esse fenômeno chama-se polarização cruzada e, para estudar esses efeitos, foi desenvolvido um algoritmo que extrai os S parâmetros dos meta-átomos e atribui duas novas colunas que se referem ao XPR (*Cross polarization ratio*) e PCE (*Polarization Conversion Efficiency*):

- **PCE:** Essa técnica é calculada a partir da seguinte fórmula

$$\text{PCE} = \frac{\sum |S_{\text{crosspol}}|^2}{\sum |S_{\text{copol}}|^2 + \sum |S_{\text{crosspol}}|^2}$$

Para a aplicação desejada, busca-se um PCE próximo de zero, o que indica uma conversão de polarização insignificante e, portanto, um baixo nível de *crosstalk* entre os canais..

- **XPR:** Esta métrica expressa, em decibéis (dB), a razão entre a potência co-polar e a de polarização cruzada:

$$\text{XPR}_{\text{dB}} = 10 \log_{10} \left(\frac{\sum |S_{\text{copol}}|^2}{\sum |S_{\text{crosspol}}|^2} \right)$$

Valores de $\text{XPR} \geq 20$ dB indicam que a potência co-polar é pelo menos 100 vezes superior à da polarização cruzada, representando uma excelente pureza de polarização. Valores próximos de 0 dB indicam *crosstalk* severo, e valores negativos indicam que o dispositivo atua como um conversor de polarização.

Para verificação de congruência nos cálculos do XPR, foi gerado um gráfico que avalia o comportamento do XPR, em dB, para uma faixa de frequências, (figura 9)

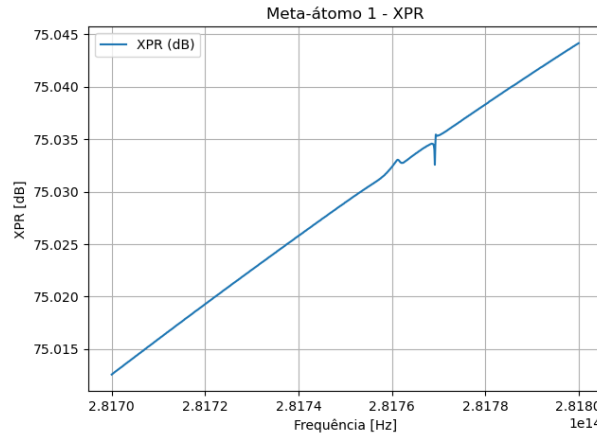


Figure 9: Comportamento do XPR de um meta-átomo em função da frequência.

O gráfico demonstra que, para este meta-átomo específico, a pureza da polarização melhora com o aumento da frequência, indicado pela tendência crescente do XPR. É notável que em toda a faixa de frequências analisada, o XPR se mantém em níveis extremamente altos, atingindo cerca de 75 dB. Este valor indica que a potência transmitida na polarização correta é ordens de magnitude maior que a potência convertida, validando o excelente desempenho deste meta-átomo em suprimir a polarização cruzada.

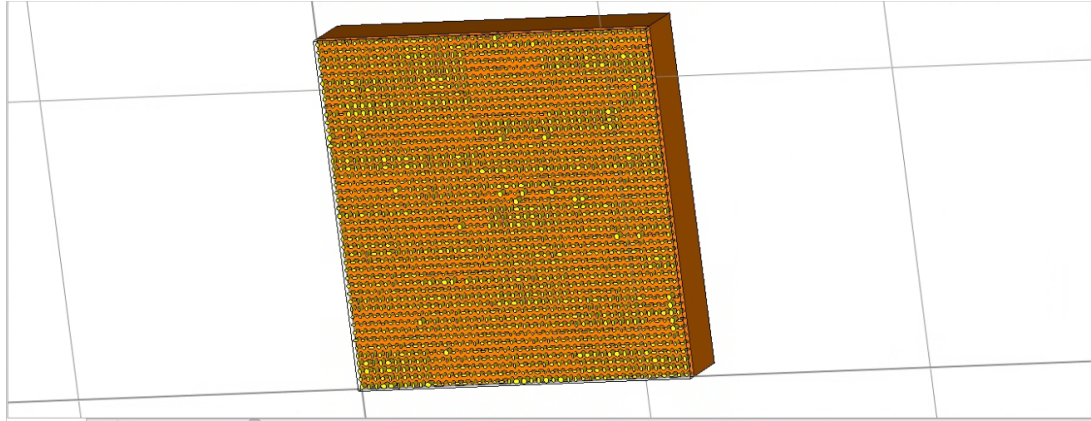


Figure 10: Modelo da metassuperfície proposta a partir da biblioteca resultante da simulação 4. A estrutura é composta por 2025 meta átomos (45×45) distintos, cada um definido a partir do algoritmo de casamento de fase.

2.5 Testes para simular a metassuperfície final

Com o objetivo de simular a metassuperfície resultante dos processos de otimização e análise de erros explicados nas seções acima,

foi desenvolvido um *macro* no CST Studio Suite, ou seja, um comando capaz de replicar a estrutura dos meta átomos um número determinado de vezes, atribuindo a cada um os valores de semi-eixos obtidos por meio da importação de um arquivo de texto. Com essa ferramenta, foi possível projetar a metassuperfície demonstrada na imagem abaixo:

Entretanto, ainda não foram realizadas as simulações eletromagnéticas dessa estrutura devido a problemas em configurar adequadamente o *software* para essa tarefa.

3 Próximos Objetivos

Para avançar com o projeto, definem-se as seguintes tarefas, com prioridades:

- Leitura integral do capítulo 8 do livro "Introduction to Fourier Optics", de Joseph W. Goodman, referente a holografia e apresentação desse conteúdo para os integrantes do grupo;
- Aplicação preliminar de algoritmos de otimização via surrogates;
- Aprofundar os estudos sobre operações em banda;
- Modelar as supercélulas e as metassuperfícies otimizadas e simular suas propriedades eletromagnéticas;
- Criação de bibliotecas de meta átomos melhores, para servirem de banco de dados para os modelos computacionais;
- Testar novos materiais e geometrias para os nanopilares cilíndricos elípticos;

4 Conclusão

Tendo em vista o exposto, o trabalho desenvolvido ao longo das últimas semanas possibilitou foi possível compreender em profundidade os fundamentos dos algoritmos de Gerchberg–Saxton e do método do espectro angular, bem como revisar os princípios das grades de Dammann e o contexto atual da holografia baseada em metassuperfícies. Essa base teórica foi essencial para a validação e calibração dos algoritmos utilizados ao longo do projeto.

No âmbito computacional, foram analisadas seis bibliotecas distintas de meta-átomos, essas bibliotecas variam em termos de parâmetros geométricos, condições de contorno e propriedades materiais. Ao comparar os *heatmaps* obtidos dessas bibliotecas, os resultados evidenciam uma alta coerência com a literatura, indicando que as simulações estão fisicamente consistentes. O algoritmo de casamento de fase foi desenvolvido com sucesso e apresentou erros médios de fase e amplitude coerentes com os valores encontrados no material complementar do artigo [5], além de alcançar uma correlação de Pearson de aproximadamente 0.8 na reconstrução da polarização x.

O progresso alcançado valida a metodologia proposta e estabelece uma base sólida para as próximas etapas do projeto, que incluem a revisão completa do conceito de holografia e sua modelagem matemática, implementação de técnicas de otimização baseadas em *surrogate models* e a simulação integral ou parcial da metassuperfície reconstruída. Dessa forma, pretende-se concluir a reconstrução do artigo de referência e, a partir disso, desenvolver novas abordagens que ampliem suas propostas originais.

References

- [1] R. W. Gerchberg and W. O. Saxton. “A Practical Algorithm for the Determination of Phase from Image and Diffraction Plane Pictures”. In: *Optik* 35.2 (1972).
- [2] H. Dammann and K. Görtler. “High-efficiency in-line multiple imaging by means of multiple phase holograms”. In: *Optics Communications* 3.5 (1971), pp. 312–315.
- [3] Lingling Huang, Shuang Zhang, and Thomas Zentgraf. “Metasurface holography: from fundamentals to applications”. In: *Nanophotonics* (2018). DOI: 10.1515/nanoph-2017-011.
- [4] Joseph W. Goodman. *Introduction to Fourier Optics*. New York: McGraw-Hill, 1968.
- [5] Shuhan Guo et al. “Polarization-controlled metasurface for simultaneous holographic display and three-dimensional depth perception”. In: *Nanophotonics* (2025). DOI: 10.1515/nanoph-2024-0509.