

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ  
INSTITUTO DE TECNOLOGIA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA

GABRIEL FELIPE DA SILVA BARROS

METASUPERFÍCIES DIELÉTRICAS BASEADAS EM QUADRÚMEROS COM  
MODO DIPOLO TOROIDAL

TD 05/2025

UFPA / ITEC / PPGEE  
Campus Universitário do Guamá  
Belém-Pará-Brasil

2025

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ  
INSTITUTO DE TECNOLOGIA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA

GABRIEL FELIPE DA SILVA BARROS

METASUPERFÍCIES DIELÉTRICAS BASEADAS EM QUADRÚMEROS COM  
MODO DIPOLO TOROIDAL

Tese submetida à Banca Examinadora do  
Programa de Pós-Graduação em Engenharia  
elétrica da UFPA para obtenção do título de  
Doutor em Engenharia Elétrica na Área de  
Eletromagnetismo Aplicado.

UFPA / ITEC / PPGEE  
Campus Universitário do Guamá  
Belém-Pará-Brasil

2025

**Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP) de acordo com ISBD  
Sistema de Bibliotecas da Universidade Federal do Pará  
Gerada automaticamente pelo módulo Ficat, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)**

---

F313m Felipe Da Silva Barros, Gabriel.  
METASUPERFÍCIES DIELÉTRICAS BASEADAS EM  
QUADRÚMEROS COM MODO DIPOLO TOROIDAL / Gabriel  
Felipe Da Silva Barros, . — 2025.  
83 f. : il. color.

Orientador(a): Prof. Dr. Victor Alexandrovich Dmitriev  
Tese (Doutorado) - Universidade Federal do Pará, Instituto de  
Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica,  
Belém, 2025.

1. Modo Toroidal; Metasuperfície; GHz. I. Título.

CDD 621.3

---



UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ  
INSTITUTO DE TECNOLOGIA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA

**“METASUPERFÍCIES DIELÉTRICAS BASEADAS EM QUADRÚMEROS COM  
MODO DIPOLO TOROIDAL”**

AUTOR: **GABRIEL FELIPE DA SILVA BARROS**

TESE DE DOUTORADO SUBMETIDA À BANCA EXAMINADORA APROVADA PELO COLEGIADO DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA, SENDO JULGADA ADEQUADA PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM ENGENHARIA ELÉTRICA NA ÁREA DE TELECOMUNICAÇÕES.

APROVADA EM: 26/03/2025

**BANCA EXAMINADORA:**

---

**Prof. Dr. Victor Alexandrovich Dmitriev**  
(Orientador – PPGEE/ITEC/UFPA)

---

**Prof. Dr. Rodrigo Melo e Silva de Oliveira**  
(Avaliador Interno - PPGEE/ITEC/UFPA)

---

**Prof. Dr. Nilton Rodolfo Nascimento Melo Rodrigues**  
(Avaliador Externo ao Programa - FEEB/ITEC/UFPA)

---

**Prof. Dr. Cristiano Braga de Oliveira**  
(Avaliador Externo - IFRR)

---

**Prof. Dr. Licínio Dimitri Sá de Alcântara**  
(Avaliador Externo - UFRA)

**VISTO:**

---

**Prof. Dr. Diego Lisboa Cardoso**  
(Coordenador do PPGEE/ITEC/UFPA)

# Dedicatória

*Dedico este trabalho, primeiramente, a Deus, por ter me dado a oportunidade de crescer e conhecer pessoas excepcionais ao longo dos meus dias.*

*Aos meus pais, Paulino Santos Barros e Diana Claudia da Silva Barros, que sempre me ajudaram nessa caminhada e são minha inspiração de vida. Sem eles, eu não teria conseguido chegar até aqui.*

*Aos meus primos, especialmente a Mateus Sadraque, grande atleta, excelente aluno e filho exemplar, que nos deixou de forma repentina, deixando um vazio imenso em nossos corações. Sua partida precoce trouxe profunda saudade a todos que tiveram o privilégio de conhecê-lo, e sua memória permanecerá viva em nossas vidas e em nosso carinho eterno.*

*À Prof. Rose, cuja presença e exemplo sempre foram fontes de inspiração. Seu apoio e dedicação em minha caminhada acadêmica foram essenciais para que eu chegasse até aqui. Sou profundamente grato por sua influência positiva e por tudo o que aprendi com você.*

# Agradecimentos

Agradeço a Deus pela oportunidade de concluir mais uma etapa da minha vida.

Aos meus pais, Paulino Santos Barros e Diana Cláudia da Silva Barros, por acreditarem em mim e investirem na minha educação.

À minha irmã Acsa Gabriely, que me apoiou em diversos momentos da minha trajetória.

À Gislene Rose, por estar presente tanto nos bons quanto nos maus momentos durante os anos de pós-graduação. Agradeço por todo o apoio recebido.

A Marcos Nascimento e Matheus Nascimento, pelos inúmeros momentos de alegria e diversão durante os anos de estudo intenso.

Aos meus avós, Domingos Alfredo e Maria José, que me acolheram em sua casa desde o ensino fundamental, proporcionando um ambiente de estudo e apoio.

Às minhas amigas de natação, Juciane e Victoria, pela companhia e pelos desafios enfrentados com sucesso.

A todos os meus familiares.

À literata L.R.G., pessoa iluminada, resiliente e de elegância reservada, cuja visão de vida e trajetória inspiram profundamente nos estudos, na vida profissional e como ser humano.

À família EETEPA da Escola Albertina Leitão, que me acolheu nos últimos dois anos, contribuindo significativamente para o crescimento da minha carreira profissional.

Ao Sr. Rubens Borges, diretor da EETEPA/SIP Albertina Leitão, pelo apoio incondicional e pela confiança depositada em mim ao longo de minha jornada. Sua liderança e visão foram essenciais para o meu crescimento, tanto profissional quanto pessoal. Agradeço pela constante motivação e pelo ambiente educacional enriquecedor que o senhor proporciona, o que me permitiu alcançar este importante marco de concluir meu doutorado.

À Sra. Suziane Silva, vice-diretora da EETEPA/SIP Albertina Leitão, pelo apoio constante e pela orientação valiosa durante toda a minha trajetória acadêmica. Sua dedicação, empenho e palavras de encorajamento foram fundamentais para que eu superasse os desafios e alcançasse o sucesso. Agradeço pela confiança e por sempre acreditar em meu potencial, o que me motivou a seguir firme em busca dos meus objetivos.

A todos os professores, funcionários e colaboradores da EETEPA/SIP Albertina Leitão.

Ao meu estagiário Heitor Ribeiro, por me auxiliar nesta reta final.

Aos amigos do grupo Mestre dos Quarks, pelos calorosos debates sobre Física e Educação.

Aos meus amigos professores Marcos Simões e Alcino Júnior, por se mostrarem verdadeiros companheiros ao longo da minha caminhada.

À Universidade Federal do Pará.

Ao professor Dr. Victor Dmitriev, meu orientador, por me oferecer a oportunidade de atuar no laboratório de nanofotônica e nanoeletrônica e por sempre me ajudar em tudo o que esteve ao seu alcance, especialmente durante os períodos críticos da pandemia de Covid-19.

À dona Arlete, que sempre esteve conosco no laboratório, oferecendo ajuda e conselhos valiosos.

Aos professores Rodrigo Melo, Marcelino, Marcos Costa e João Crisóstomo, pelos conhecimentos transmitidos ao longo da pós-graduação.

Aos colegas de pós-graduação que contribuíram para o nosso crescimento mútuo.

A todos os integrantes do laboratório de nanofotônica e nanoeletrônica da UFPA, em especial ao Sílvio, pelos ensinamentos compartilhados e pela ajuda nas atividades acadêmicas.

Aos colegas Gianni Portela, Daimam Zimmer, Leno Martins, Carlos Rafael, Marcelino Lopes, Leonardo Marcelino, Samara da Silva, Cristiano Braga, Francisco Nobre, Geraldo Melo, Thiago Oliveira, Augusto Costa, e Rodrigo Paiva, que sempre estiveram dispostos a ajudar no que fosse necessário no laboratório. Agradeço a todos.

Todos tiveram grande relevância nesta caminhada.

*“Então Samuel pegou uma pedra, ergueu-a entre Mispa e Sem,  
e deu-lhe o nome de Ebenézer, dizendo: Até aqui nos ajudou o Senhor.”  
(1 Samuel 7:12)*

# Resumo

Neste trabalho, propomos e investigamos uma nova metasuperfície plana, baseada em discos dielétricos. A célula unitária dessa metasuperfície é composta por um quadrúmero de discos, ou seja, um agrupamento de quatro discos que possibilita a excitação de modos quase escuros, caracterizados por uma emissão de radiação muito reduzida, associada às ressonâncias de dipolo toroidal. Esses quadrúmeros são organizados em agrupamentos maiores, denominados supercélulas, projetadas com a mais alta simetria geométrica possível, correspondente ao grupo de simetria  $C_{4v}$ . Para tornar acessíveis os modos toroidais na metasuperfície, utilizamos a teoria da representação de grupos e o método de combinação linear adaptada à simetria, demonstrando que é necessário, primeiramente, quebrar a simetria do quadrúmero e, posteriormente, a simetria da supercélula. Apresentamos e discutimos, de forma detalhada, diferentes mecanismos para a redução de simetria, processo pelo qual se modifica a simetria geométrica da estrutura para ativar modos eletromagnéticos específicos. Quando a simetria da supercélula, originalmente do tipo  $C_{4v}$ , é reduzida para o grupo  $C_s$ , a metasuperfície passa a apresentar, simultaneamente, ressonâncias toroidais e antitoroidais, estas últimas associadas a distribuições de campo com topologia oposta à dos dipolos toroidais convencionais. As previsões teóricas foram validadas por meio de simulações eletromagnéticas de campo completo *full-wave*, considerando a incidência de uma onda plana sobre a estrutura, confirmando o comportamento esperado. Por fim, discutimos as potenciais aplicações das estruturas analisadas, destacando seu uso em dispositivos ópticos avançados e sistemas fotônicos.

PALAVRAS-CHAVE: Modo Toroidal; Metasuperfície; GHz.

# Abstract

In this work, we propose and investigate a new planar metasurface based on dielectric disks. The unit cell of this metasurface is composed of a quadrumer of disks, that is, a grouping of four disks that enables the excitation of quasi-dark modes, characterized by very low radiation emission, associated with toroidal dipole resonances. These quadrumers are arranged into larger groupings, called supercells, designed with the highest possible geometrical symmetry, corresponding to the  $C_{4v}$  symmetry group. To make the toroidal modes accessible in the metasurface, we employed group representation theory and the symmetry-adapted linear combination (SALC) method, demonstrating that it is necessary, first, to break the symmetry of the quadrumer and, subsequently, the symmetry of the supercell. We present and discuss in detail different mechanisms for symmetry reduction, a process by which the geometrical symmetry of the structure is modified to activate specific electromagnetic modes. When the supercell symmetry, originally of the  $C_{4v}$  type, is reduced to the  $C_s$  group, the metasurface starts to exhibit both toroidal and antitoroidal resonances, the latter associated with field distributions of opposite topology to those of conventional toroidal dipoles. The theoretical predictions were validated through full-wave electromagnetic simulations, considering the incidence of plane waves on the structure, confirming the expected behavior. Finally, we discuss potential applications for the analyzed structures, highlighting their use in advanced optical devices and photonic systems.

KEYWORDS: Toroidal; metasuperficie; GHz.

# Lista de ilustrações

|          |   |    |
|----------|---|----|
| Figura 1 | – Três famílias de multipolos dinâmicos. Representação artística de configurações de carga e padrões de radiação de campo distante de energia elétrica, magnética, e multipolos toroidais. Adaptada [25]. . . . .   | 27 |
| Figura 2 | – Esquemas idealizados de a) modo escuro TO, grupo magnético $C_{4v}$ ; b) modo ATO escuro, grupo magnético $C_{4v}$ , setas circulares azuis mostram o fluxo do campo magnético em quadrúmero. . . . .   | 30 |
| Figura 3 | – Vista artística das metamoléculas compostas por oligômeros de disco totalmente dielétricos. Da esquerda para a direita: exemplos de trímeros, quadrúmeros, pentâmers e hexâmers. Normalmente a onda plana incidente com campo elétrico direcionado a um dos eixos de simetria dos oligômeros que é empregada para excitar Ressonâncias dipolares toroidais. Quando as respostas dipolares toroidais são excitadas, o campo magnético (setas vermelhas) forma um circuito fechado que penetra todas as ressonadores dielétricos, gerando assim um momento de dipolo toroidal fora do plano (setas amarelas)[45]. . . . .   | 31 |
| Figura 4 | – Resposta toroidal da caixa do trímero. a) Vista esquemática da metasuperfície na qual as metamoléculas são compostas por discos em forma de trímero. b) Parâmetros geométricos de uma célula unitária na metasuperfície em (a), onde $r = 150$ nm, $d = 250$ nm, $P = 1000$ nm e altura do disco $h = 250$ nm. Campo elétrico do onda plana normalmente incidente é ao longo do eixo $y$ . O trímero apresenta simetria $C_3$ em relação ao eixo $z$ fora do plano. c) Espectro de transmissão de a metasuperfície do trímero. A ressonância do dipolo toroidal é marcada com cor sombreada. d) Resultados da expansão multipolar e espectro de transmissão detalhado da região sombreada em (c). Seis termos estão envolvidos: dipolo elétrico (ED), dipolo toroidal (TD), dipolo magnético (MD), quadrupolo elétrico (EQ), quadrupolo (MQ) e octopolo elétrico (EO). e,f) Distribuição do campo magnético e do campo elétrico respectivamente, calculados no mergulho de transmissão em (d). Setas em (e) indicam vetores de campo magnético[45]. . . . . | 31 |

|           |   |    |
|-----------|---|----|
| Figura 5  | – Momento dipolar elétrico exato com contribuições correspondentes do dipolo elétrico LWA e momentos de dipolo toroidal de um único trímico para sua (a) irradiação lateral e (b) frontal por um onda linearmente polarizada. A designação dos vetores $k$ e $E$ do onda incidente e uma aparência do modo próprio toroidal do trímico são dadas nas inserções. No modo próprio, setas vermelhas e pretas correspondem ao fluxo de correntes de polarização elétrica e respectivamente, a seta amarela em negrito indica o dipolo toroidal momento $T$ , e as setas azuis em negrito indicam o dipolo magnético momentos $m$ de discos individuais. A posição do modo próprio no escala de comprimento de onda é marcada por uma cruz vermelha. Parâmetros do trímico são: $\epsilon_d = 22$ , $h_d/D = 0,45$ e $a_t/D = 1,125$ [46]. . . . . | 32 |
| Figura 6  | – Esquema das metamoléculas cíclicas em estudo para $N = 3,4$ . Em todos os casos, hastes polaritônicas idênticas e infinitamente longas de seção transversal circular e um raio $R = 8$ m estão localizados em os vértices de polígonos regulares. O material da haste é $\text{LiTaO}_3$ com permissividade $\epsilon_r = 41$ em torno de 2 THz[47]. . . . .  | 33 |
| Figura 7  | – Uma vista esquemática de dois projetos de um metasuperfície dielétrica composta de (a) trímicos e (b) trímicos gêmeos, e (c) um esboço da célula unitária com um trímico[48]. . . . .   | 34 |
| Figura 8  | – Evolução dos espectros de transmissão em função do comprimento de onda normalizado para a metasuperfície composta por células unitárias quadradas ( $p \times p$ ) com (a), (b) trímicos não perturbados e (c), (d) trímicos perturbados por deslocamento de um disco particular à uma distância $\Delta H_t$ ao longo do eixo $y$ [48]. . . . .  | 35 |
| Figura 9  | – As distribuições de campo magnético para as três primeiras ressonâncias de Mie do dielétrico toro. (a) Ressonância dipolar magnética; (b) Ressonância magnética quadrupolar; (c) TDR. O topo e painéis de botões representam os valores absolutos e vetor de direção do campo magnético, respectivamente. A seta em (a) indica o vetor de onda incidente. Aqui, os diagramas de campo em (a-c) estão no plano $x$ - $y$ (isto é, plano $z = 0$ )[49]. . . . .   | 36 |
| Figura 10 | – (a) Esquema da metasuperfície consistindo de uma matriz de cilindros de silício sobre um substrato de vidro e a configuração de onda plana incidente. (b) Esquema de uma célula unitária e parâmetros geométricos. (c) Vista superior de uma célula unitária e parâmetros geométricos[51]. . . . .  | 36 |

|  |    |
|--|----|
| Figura 11 – Malha de elementos finitos aplicada à célula unitária, destacando-se na caixa de ar, as regiões de PML, substrato e portas. b) Vista dos discos dielétricos que estão imersos em diferentes meios em a). c) e d) Mapas de cores e vetores dos autocampos $\vec{E}$ e $\vec{H}$ calculados para o modo toroidal suportado pela estrutura, respectivamente. . . . .  | 40 |
| Figura 12 – Esquema da metasuperfície dielétrica investigada composta de Quadrúmeros. A supercélula unitária que consiste em quatro Quadrúmeros é delineada por um contorno quadrado pontilhado preto. . . . .   | 41 |
| Figura 13 – Célula unitária do quadrúmero com elementos de simetria . . . . .  | 43 |
| Figura 14 – Redução da simetria $C_{4v}$ a $C_s$ . Exemplos de perturbações em quadrúmeros: a) preservando o plano $\sigma_{d2}$ , b) preservando no plano $\sigma_{v1}$ , os discos perturbados são marcados por círculos pontilhados; c) preservando o plano $\sigma_{d2}$ , d) preservando o plano $\sigma_{v1}$ , em c) e d) perturbações são realizadas por deslocamento dos discos representados por setas. Em a) e c) perturbações são efetuadas por um ressonador, em b) e d) por dois ressonadores. . . . .                 | 45 |
| Figura 15 – Exemplos de geometrias que proporcionam tentativas de diferentes simetrias da supercélulas unitárias em um arranjo com quadrúmeros: a) Quadrúmeros não perturbados, grupo $C_{4v}$ . Perturbação por um ressonador: b) grupo $C_{4v}$ , c) $C_{4v}$ , d) $C_{2v}^v$ , e) $C_{2v}^d$ , f) $C_2$ , g) $C_{v1}^s$ , h) $C_{d2}^s$ , i) $C_1$ . Discos perturbados são indicados por círculos preenchidos, as linhas denotam planos de simetria, pontos no centro da unidade supercélulas indicam eixos de simetria. . . . . | 47 |
| Figura 16 – Supercélula unitária com quadrúmeros descritos pelo grupo $C_s^{v1}$ , plano de simetria $\sigma_{v1}$ , para a excitação de a) modo TO, b) Modo ATO. Os círculos preenchidos denotam discos perturbados, os símbolos $\odot$ e $\otimes$ em quadrúmeros mostram a orientação de momento toroidal $T$ , para cima e para baixo, respectivamente. $H_x$ e $H_y$ é a orientação do campo magnético da onda plana incidente. . . . .  | 48 |
| Figura 17 – Supercélula unitária com quadrúmeros descritos por grupo $C_s^{d2}$ , plano de simetria $\sigma_{d2}$ , para a excitação de a) modo TO, b) Modo ATO. Os círculos preenchidos denotam discos perturbados, $\odot$ e $\otimes$ em quadrúmeros mostram a orientação do momento toroidal $T$ , para cima e para baixo, respectivamente. $H_{d1}$ é a orientação do campo magnético da onda plana incidente. . . . .  | 49 |

|  |    |
|--|----|
| Figura 18 – a) Espectro de transmissão da metasuperfície com supercélula e quadrúmero não perturbado. b) A estrutura do dark TO e c) do modo dark ATO, calculado em simulações pelas autofrequência . Os parâmetros materiais e geométricos das metasuperfícies são $\varepsilon_d = 24,5$ , $\varepsilon_s = 1,3$ , $h_d/D = 0,633$ , $a_d/D = 1,4$ , $p/D = 3,333$ . . . . .   | 52 |
| Figura 19 – Evolução do fator de qualidade (curva azul) e comprimento de onda ressonante normalizado (curva vermelha) do modo TO conforme as funções do parâmetro de simetria para perturbação por disco único (círculos e quadrados vazios) e dois discos (cheios círculos e quadrados) de quadrúmeros. a) Perturbação por deslocamento, é o caso mostrado na 14c. b) Perturbação por permissividade $\theta_\varepsilon = (\varepsilon_d + \Delta\varepsilon)/\varepsilon_d$ c) perturbação por altura $\theta_h = (h_d + \Delta h)/h_d$ , ambos os casos de perturbação da Fig. 14a e Fig. 14b. . . . . | 53 |
| Figura 20 – a) Espectro de transmissão da metasuperfície com unidade da supercélula mostrada na Fig. 16 excitada pelo campo $H_x$ (curvas azuis) e campo $H_y$ (curvas vermelhas), onde os quadrúmeros são perturbados por um deslocamento do ressonador; b)-i) mapas coloridos apresentando as campos elétricos e magnéticos normalizados do modo TO nos planos $z = 0$ , $z = h_d/2$ , $z = h_s/2$ e $z = h_s$ . . . . .   | 56 |
| Figura 21 – a) Espectro de transmissão da metasuperfície com supercélula unitária mostrada na Fig. 16 excitada pelo campo $H_x$ (azul curvas) e campo $H_y$ (curvas vermelhas), os quadrúmeros são perturbados alterando a altura de um ressonador; b) mapas coloridos apresentando os campos elétricos e magnéticos normalizados do modo ATO nos planos $z = 0$ , $z = h_d/2$ , $z = h_s/2$ e $z = h_s$ . . . . .   | 57 |
| Figura 22 – a) Espectro de transmissão da metasuperfície com supercélula unitária mostrada na Fig. 17 excitada pelo campo $H_{d1}$ (azul curvas) e campo $H_{d2}$ (curvas vermelhas), os quadrúmeros são perturbados alterando a altura de um ressonador; b) mapas coloridos apresentando os campos elétricos e magnéticos normalizados do modo TO nos planos $z = 0$ , $z = h_d/2$ , $z = h_s/2$ e $z = h_s$ . . . . .  | 58 |
| Figura 23 – a) Espectro de transmissão da metasuperfície com supercélula unitária mostrada na Fig. 17 excitada pelo campo $H_{d1}$ (azul curvas) e campo $H_{d2}$ (curvas vermelhas), os quadrúmeros são perturbados alterando a altura de um ressonador; b)mapas coloridos apresentando os campos elétricos e magnéticos normalizados do modo ATO nos planos $z = 0$ , $z = h_d/2$ , $z = h_s/2$ e $z = h_s$ . . . . .  | 59 |
| Figura 24 – Base do dipolo magnético para o método SALC. . . . .   | 74 |
| Figura 25 – Decomposição do grupo C4v. . . . .   | 77 |

Figura 26 – (a) Espectros de transmitância e reflectância na vizinhança da ressonância do modo TO estudada na figura 20(a). (b) Decomposição multipolar em coordenadas cartesianas e poder de espalhamento relativo dos momentos dipolar e quadripolar, mostrando a predominância do momento dipolar toroidal. . . . . 83

# Lista de tabelas

|          |   |    |
|----------|---|----|
| Tabela 1 | – Automodos do quadrúmero com simetria $C_{4v}$ em termos de vetores $m_i$ (Fig. 26) e estrutura calculada com campo magnético. . . . . | 75 |
| Tabela 2 | – IRREPs do grupo $C_{4v}$ , grupos magnéticos e ordem do modo. . . . .   | 76 |
| Tabela 3 | – IRREPs do grupo $C_{2v}$ , grupos magnéticos e ordem do modo. . . . .   | 80 |
| Tabela 4 | – IRREPs do grupo $C_s^{v1}$ , grupos magnéticos e ordem do modo. . . . .   | 80 |
| Tabela 5 | – IRREPs do grupo $C_s^{d2}$ , grupos magnéticos e ordem do modo. . . . .   | 81 |
| Tabela 6 | – Tabela de degeneração de simetria do grupo $C_{4v}$ [76]. . . . .   | 81 |

# Lista de abreviaturas e siglas

|        |   |
|--------|---|
| 2D     | Bidimensional   |
| 3D     | Tridimensional  |
| TO     | <i>Transverse Oscillation</i> , modo toroidal   |
| ATO    | <i>Anti-Transverse Oscillation</i> , modo antitoroidal  |
| COMSOL | <i>COMSOL Multiphysics</i> , software de simulação numérica baseado no Método dos Elementos Finitos |
| SALC   | <i>Symmetry Adapted Linear Combination</i> , combinação linear adaptada à simetria                  |
| EM     | Eletromagnetismo  |
| FEM    | <i>Finite Element Method</i> (Método dos Elementos Finitos)   |
| GHz    | Gigahertz   |
| IRREP  | <i>Irreducible Representation</i> (Representação Irreduzível)                                       |
| RF     | <i>Radio Frequency</i> , módulo do COMSOL dedicado a simulações de radio-frequência e óptica        |
| SI     | Sistema Internacional de Unidades   |
| TE     | <i>Transverse Electric</i> , modo com campo elétrico transversal à direção de propagação            |
| THz    | Terahertz   |
| TM     | <i>Transverse Magnetic</i> , modo com campo magnético transversal à direção de propagação           |
| MEF    | Método de Elementos Finitos   |

# Lista de símbolos

|                         |  |
|-------------------------|--|
| $e$                     | Elemento identidade do grupo de simetria                                       |
| $C_2$                   | Operação de rotação de $180^\circ$ em torno do eixo principal                  |
| $\sigma_1, \sigma_2$    | Planos de reflexão do grupo $C_{2v}$   |
| $\sigma_v, \sigma_d$    | Planos de simetria vertical e diagonal, respectivamente                        |
| $C_{4v}$                | Grupo pontual de simetria com simetria quádrupla e planos verticais            |
| $C_{2v}$                | Grupo pontual de simetria com rotação de $180^\circ$ e dois planos de simetria |
| $C_s$                   | Grupo pontual com apenas um plano de simetria                                  |
| $C_1$                   | Grupo pontual trivial, contendo apenas a identidade                            |
| $A_1, A_2, B_1, B_2, E$ | Representações irreduzíveis (IRREPs) dos grupos de simetria                    |
| $p_x, p_y, p_z$         | Componentes cartesianas do momento de dipolo elétrico                          |
| $m_x, m_y, m_z$         | Componentes cartesianas do momento de dipolo magnético                         |
| $Q_{ij}$                | Componentes do tensor quadrupolar elétrico em coordenadas cartesianas          |
| $M_{ij}$                | Componentes do tensor quadrupolar magnético em coordenadas cartesianas         |
| $T_x, T_y, T_z$         | Componentes cartesianas do momento toroidal                                    |
| $\epsilon_0$            | Permissividade elétrica do vácuo   |
| $c$                     | Velocidade da luz no vácuo   |
| $\omega$                | Frequência angular   |
| $\mathbf{J}$            | Densidade de corrente elétrica   |
| $\mathbf{r}$            | Vetor posição no espaço  |
| $\mathbf{R}$            | Vetor de referência no centro da célula unitária                               |
| $V$                     | Volume da célula unitária  |
| $\mathbf{E}$            | Vetor campo elétrico   |
| $\mathbf{H}$            | Vetor campo magnético  |

|               |                                  |
|---------------|----------------------------------|
| $\mathbf{k}$  | Vetor de onda                    |
| $\lambda$     | Comprimento de onda              |
| $\omega$      | Frequência angular               |
| $c$           | Velocidade da luz no vácuo       |
| $\mathbf{m}$  | Momento de dipolo magnético      |
| $\mathbf{T}$  | Momento de dipolo toroidal       |
| $\mathbf{P}$  | Momento de dipolo elétrico       |
| $\mathbf{J}$  | Corrente de polarização          |
| $D$           | Diâmetro do disco                |
| $r_d$         | Raio do disco                    |
| $h_d$         | Altura do disco                  |
| $\epsilon_d$  | Permissividade relativa do disco |
| $n$           | Índice de refração               |
| $p$           | Período da célula unitária       |
| $\theta$      | Parâmetro de assimetria          |
| $\tan \sigma$ | Tangente de perdas do disco      |

# Sumário

|         |   |    |
|---------|---|----|
| 1       | INTRODUÇÃO . . . . .  | 22 |
| 2       | REVISÃO DA LITERATURA . . . . .   | 24 |
| 2.1     | EQUAÇÕES DE MAXWELL . . . . .   | 24 |
| 2.2     | MODO TOROIDAL . . . . .   | 26 |
| 2.3     | ALGUMAS APLICAÇÕES DE MODOS TOROIDAIS PRESENTES<br>NA LITERATURA . . . . .  | 29 |
| 3       | METODOLOGIA . . . . .   | 37 |
| 3.1     | Descrição do dispositivo no software COMSOL Multiphysics . . . . .  | 37 |
| 3.2     | Descrição da metasuperfície . . . . .   | 39 |
| 3.3     | Disco dielétrico isolado com ressonância de dipolo magnético . . . . .  | 40 |
| 3.4     | Quadrúmero formado por discos dielétricos e sua excitação . . . . .   | 41 |
| 3.5     | Aplicação do Método SALC e da Teoria de Grupos na Identificação<br>de Modos Toroidais . . . . .                       | 42 |
| 3.6     | Possíveis simetrias para excitação do modo toroidal em uma célula<br>unitária . . . . .                               | 44 |
| 3.6.1   | Exemplos de perturbações nos quadrúmeros para excitar o modo toroidal . . . . .                                       | 44 |
| 3.6.1.1 | Primeiro tipo de perturbação para excitar o modo toroidal . . . . .   | 44 |
| 3.6.1.2 | Segundo tipo de perturbação para excitar o modo toroidal . . . . .  | 46 |
| 3.7     | Possíveis simetrias e geometrias das supercélulas para excitação do<br>modo toroidal . . . . .                        | 46 |
| 3.8     | Unidade de supercélula com simetrias $C_s^v$ e $C_s^d$ . . . . .  | 48 |
| 4       | RESULTADOS NUMÉRICOS . . . . .  | 50 |
| 4.1     | Automodos toroidais em quadrúmeros não perturbados . . . . .  | 51 |
| 4.2     | Análise de perturbações . . . . .   | 52 |
| 4.3     | Análise da estrutura de campo dos modos TO e ATO em arrays<br>com simetria da supercélula $C_s^v$ e $C_s^d$ . . . . . | 54 |
| 4.4     | Discussão . . . . .   | 55 |
|         | Conclusão . . . . .   | 61 |
|         | Referências . . . . .   | 64 |

|     |  |    |
|-----|--|----|
|     | APÊNDICE A – MÉTODO SALC E AUTOMODOS DO QUADRÚ-<br>MERO. . . . . | 74 |
|     | APÊNDICE B – TABELA DE IRREPS DO GRUPO C <sub>4v</sub> . . . . . | 76 |
|     | APÊNDICE C – ÁRVORE DE GRUPO DO GRUPO C <sub>4v</sub> . . . . .  | 77 |
|     | APÊNDICE D – TABELAS DA TEORIA DE GRUPOS . . . . .               | 78 |
| D.1 | Teoria de grupos . . . . .                                       | 78 |
| D.2 | O Subgrupo C <sub>4v</sub> . . . . .                             | 79 |
| D.3 | Teoria de grupos magnéticos . . . . .                            | 80 |
|     | APÊNDICE E – DECOMPOSIÇÃO MULTIPOLAR DO MODO TO . . . . .        | 82 |

# 1 INTRODUÇÃO

Os metamateriais possuem uma estrutura tridimensional, podendo apresentar ou não características periódicas, e podem ser artificiais e/ou dielétricos. Esses materiais têm sido amplamente investigados nas últimas décadas, principalmente devido à sua interação com ondas eletromagnéticas. Essa interação resulta em efeitos que não são observados em materiais naturais [1]. A interação dos metamateriais com campos elétricos e magnéticos é intrínseca e particular, sendo que suas características ressonantes podem ser controladas pela geometria das células unitárias que formam a estrutura.

Os metamateriais podem apresentar aplicações aprimoradas em funções de dispositivos já existentes, tais como antenas, absorvedores, superlentes, sistemas de *cloaking*, redução de espalhamento e captação de energia [2]-[10]. No entanto, apesar da ampla aplicabilidade dessas tecnologias, ainda persistem limitações relacionadas à fabricação tridimensional, especialmente em escalas reduzidas, como as micro e nanométricas.

As metasuperfícies, por sua vez, correspondem às versões bidimensionais dos metamateriais, sendo compostas por elementos artificiais de dimensões subcomprimento de onda e espessura reduzida, o que lhes confere a capacidade de manipular ondas eletromagnéticas [11]. Essa característica é de grande relevância para aplicações em nanoeletrônica e nanofotônica, particularmente na fabricação de dispositivos ópticos, pois possibilita um controle mais preciso sobre a interação da luz com o material. Atualmente, o estudo das metasuperfícies apresenta um crescimento acelerado e, aliado à exploração de novos materiais, tem viabilizado o desenvolvimento de tecnologias aplicáveis em áreas interdisciplinares.

As metasuperfícies oferecem benefícios específicos, destacando-se pelo peso reduzido e pela facilidade de fabricação. A interação das ondas eletromagnéticas na superfície desses materiais pode ser controlada por meio da manipulação das células unitárias dispostas na estrutura, cuja impedância desempenha um papel fundamental no controle da fase ou da velocidade de grupo. Além da manipulação de ondas sobre a superfície, diversos estudos em andamento investigam a possibilidade de controlar ondas planas em espaço livre [12].

No Capítulo 2, é apresentada uma revisão da literatura sobre os modos de dipolo toroidal e sua ativação, além da análise de sistemas simétricos e de sua influência nesse processo. São discutidos os tipos de ressonâncias associadas a modos coletivos, a estrutura de análise composta por supercélulas e trabalhos recentes relacionados, amplamente disponíveis na literatura.

No Capítulo 3, descrevem-se os parâmetros utilizados na modelagem geométrica da estrutura, bem como sua implementação no software *COMSOL Multiphysics*. São abordadas

as condições de contorno, os tipos de incidência, as portas excitadas e a utilização da *Perfectly Matched Layer* (PML), que tem a função de absorver as ondas incidentes e refletidas nas bordas da simulação, minimizando efeitos de reflexão que poderiam distorcer os resultados. Também são descritas as características da metasuperfície e realizadas análises envolvendo uma e quatro estruturas em disco, destacando-se a aplicação da teoria de grupos na estrutura em estudo.

Por fim, no Capítulo 4, apresentam-se os resultados numéricos obtidos a partir das perturbações introduzidas na estrutura. Foram investigados os automodos toroidais que podem existir em uma metasuperfície composta por quadrúmeros não perturbada, o desenvolvimento do fator- $Q$  à medida que ocorre o aumento da assimetria na estrutura, o coeficiente de transmissão e os mapas de distribuição dos campos elétrico e magnético em diferentes regiões próximas ao centro dos discos dielétricos.

## 2 REVISÃO DA LITERATURA

### 2.1 EQUAÇÕES DE MAXWELL

As equações de Maxwell constituem a base essencial da teoria eletromagnética, uma vez que descrevem a interação e a propagação dos campos elétrico e magnético no espaço e no tempo. Elas são expressas por [13]:

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0}, \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad (2.2)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2.3)$$

e

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J} + \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (2.4)$$

em que  $\vec{E}$  é o vetor campo elétrico,  $\varepsilon_0$  representa a permissividade elétrica do vácuo,  $\rho$  é a densidade volumétrica de carga elétrica,  $\vec{B}$  é o vetor densidade fluxo magnético,  $t$  é o tempo,  $\mu_0$  é a permeabilidade magnética do vácuo e  $\vec{J}$  é a densidade de corrente elétrica.

Ao considerar materiais sujeitos à polarização elétrica ( $\vec{P}$ ) e magnetização ( $\vec{M}$ ), torna-se conveniente reescrever o conjunto de equações utilizando as equações constitutivas [14], as quais são expressas por:

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} \quad (2.5)$$

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H} \quad (2.6)$$

sendo  $\vec{D}$  o vetor densidade de fluxo elétrico e  $\vec{H}$  o vetor intensidade de campo magnético.

Ao considerar um sistema periódico, isto é, ao assumir que as propriedades físicas se repetem em intervalos regulares, é possível introduzir o conceito de onda plana e a transformada de Fourier para descrever um modo harmônico nas equações de Maxwell. Em termos matemáticos, isso é representado por

$$\vec{F}(\vec{r}, t) = \text{Re}\{\mathbf{F}(\vec{r})e^{i\omega t}\}, \quad (2.7)$$

em que  $\vec{F}$  denota os campos elétrico ou magnético,  $\mathbf{F}(\vec{r})$  é o fasor de  $\vec{F}$ ,  $\vec{r}$  é o vetor posição e  $\omega$  é a frequência angular. Com isso, as intensidades dos campos elétrico  $\vec{E}$  e magnético  $\vec{H}$  podem ser expressas da seguinte forma:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \text{Re}\{\mathbf{E}(\vec{r}) e^{i\omega t}\} \quad (2.8)$$

e

$$\vec{H}(\vec{r}, t) = \text{Re}\{\mathbf{H}(\vec{r}) e^{i\omega t}\}. \quad (2.9)$$

Ao substituir (2.8) em (2.5), encontra-se:

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = \varepsilon_0 \text{Re}\{\mathbf{E}(\vec{r}) e^{i\omega t}\}. \quad (2.10)$$

Dessa forma, em um sistema livre de fontes ( $\vec{J} = 0$  e  $\rho = 0$ ), (2.1)–(2.4) podem ser reescritas em suas formas harmônicas, ou seja,

$$\nabla \cdot \mathbf{H}(\vec{r}) = 0, \quad (2.11)$$

$$\nabla \cdot [\varepsilon(\vec{r}) \mathbf{E}(\vec{r})] = 0, \quad (2.12)$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(\vec{r}) + i\omega\mu_0 \mathbf{H}(\vec{r}) = 0 \quad (2.13)$$

e

$$\nabla \times \mathbf{H}(\vec{r}) - i\omega\varepsilon_0 \mathbf{E}(\vec{r}) = 0. \quad (2.14)$$

Assim, é possível determinar a função de onda, essencial para entender a propagação e o confinamento de ondas eletromagnéticas em sistemas periódicos [14], cuja equação é dada por

$$\nabla \times \left( \frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \nabla \times \mathbf{H}(\vec{r}) \right) = \left( \frac{\omega}{c} \right)^2 \mathbf{H}(\vec{r}) \quad (2.15)$$

na qual,

$$c = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}} \quad (2.16)$$

é a velocidade da luz no espaço livre.

## 2.2 MODO TOROIDAL

Os modos toroidais constituem padrões específicos de oscilação, ressonância ou distribuição de campo que ocorrem em sistemas físicos com simetria toroidal, ou seja, em estruturas com a forma de um toro, uma superfície tridimensional assemelhada a um anel. Tais modos se caracterizam pela circulação fechada de correntes elétricas ou campos magnéticos ao longo do contorno do toro, originando configurações de campo peculiares, distintas das configurações dipolares ou multipolares convencionais [15].

O modo toroidal se destaca por apresentar uma topologia de campo magnético ou elétrico confinada no interior da estrutura toroidal, resultando em momentos toroidais, definidos como quantidades vetoriais associadas à circulação de corrente ou campo. Diferentemente dos momentos dipolares, os momentos toroidais exibem baixa irradiação para o meio externo, o que os torna relevantes em aplicações que demandam controle rigoroso da emissão de radiação eletromagnética, como em metamateriais, antenas compactas e dispositivos de ressonância de alta qualidade (*high-Q*) [16].

Esses modos se manifestam em diversas áreas da física, destacando-se Na óptica e fotônica, em metassuperfícies dielétricas e ressonadores, onde distribuições específicas de corrente deslocada e de campo elétrico ou magnético originam ressonâncias toroidais.

As propriedades desejadas para nano e microssistemas de óptica plana são, em geral, definidas com base na amplitude, polarização e fase da luz refletida e transmitida. Avanços teóricos e experimentais recentes têm evidenciado o grande potencial de sistemas formados por elementos subcomprimento de onda, organizados em matrizes periódicas de materiais dielétricos, para viabilizar funcionalidades ópticas específicas [17].

A estrutura local dos campos eletromagnéticos, que é determinada pela disposição dos elementos constituintes, define as propriedades globais desses sistemas. Nos últimos anos, componentes de óptica plana baseados em modos toroidais têm sido amplamente investigados, destacando-se como alternativas promissoras para o controle avançado da propagação e manipulação da luz em dispositivos fotônicos integrados.

Os modos toroidais constituem uma classe especial de excitações, distintas dos modos multipolares elétricos e magnéticos convencionais [18, 21]. Em sistemas com elevada simetria, esses modos são frequentemente protegidos pela simetria de seus estados fundamentais também denominados modos escuros ou presos, como observado na Fig. 1. Dessa forma, ao contrário dos modos brilhantes, os modos toroidais não podem ser diretamente excitados por ondas planas normalmente incidentes. No entanto, sua excitação pode ser viabilizada por meio da quebra de simetria na matriz da célula unitária, que corresponde à célula fundamental da estrutura analisada [22, 24].

A quebra de simetria necessária é alcançada por meio de perturbações nas metamoléculas das células unitárias, o que habilita o modo de acoplamento com a onda incidente.

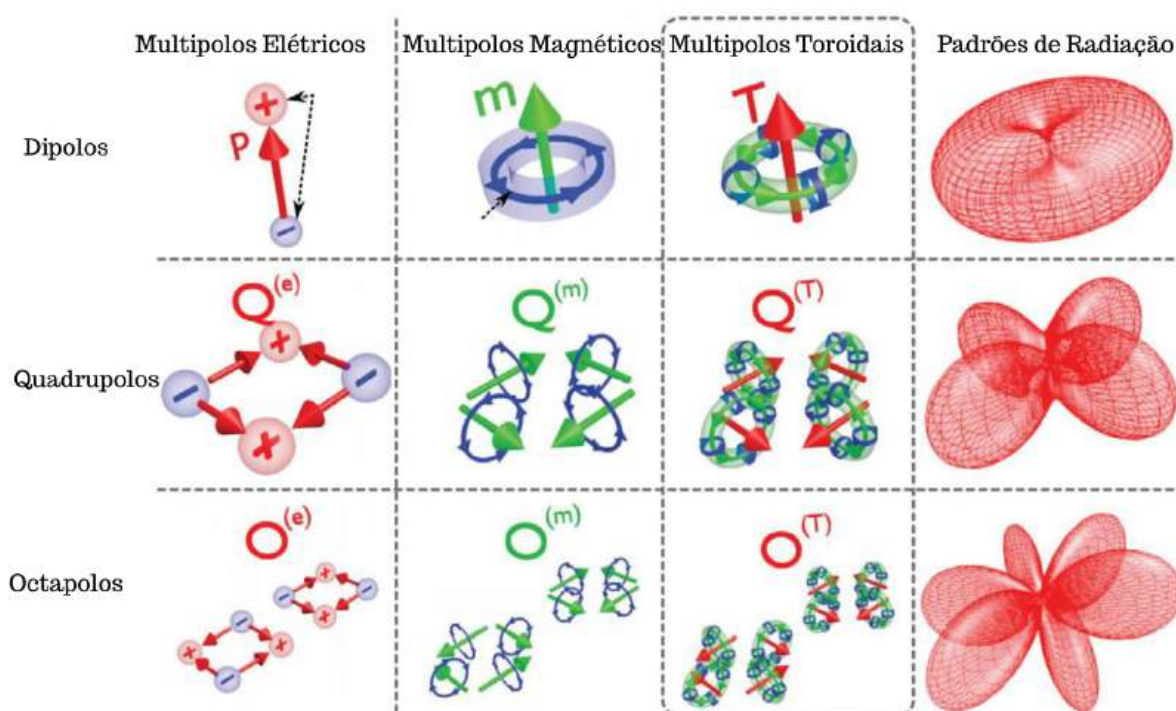


Figura 1 – Três famílias de multipolos dinâmicos. Representação artística de configurações de carga e padrões de radiação de campo distante de energia elétrica, magnética, e multipolos toroidais. Adaptada [25].

Quando as perturbações são pequenas, ressonâncias muito nítidas se manifestam nos espectros de transmissão e reflexão da metasuperfície. Os modos toroidais são protegidos por simetria em todos os dielétricos das metasuperfícies, ao contrário de suas contrapartes metálicas, que fornecem um fator de qualidade aprimorado (fator  $Q$ ) das ressonâncias e um confinamento de campo próximo muito alto devido às baixas perdas inerentes em materiais dielétricos. Essa interação luz-matéria aprimorada, devido à luz localizada nos elementos ressonantes com modos toroidais, levou à demonstração de inúmeras aplicações, entre as quais sensores altamente eficientes [26]-[28], filtros e interruptores de banda estreita [29], moduladores, emissores e lasers [30]-[31], fotodetectores [32] e componentes não lineares [20]. Além disso, a característica do perfil do campo eletromagnético do modo dipolo toroidal também pode ser explorada em sistemas de nano-lasing direcional [33] e divisão de feixe de polarização dependente do ângulo [34].

O elemento de construção das metasuperfícies na presente pesquisa é um ressonador dielétrico de alta permissividade. Juntamente com o método de elementos finitos, uma abordagem analítica de expansão de multipolos é amplamente utilizada para definir as ressonâncias em tais partículas [35]-[36]. Os modos toroidais podem ser excitados em uma única partícula [37]-[38], dímeros [39], trímeros [40], quadrúmeros [41]-[43], pentâmeros e hexâmeros [44], e também em aglomerados rombóides [24].

Realizações experimentais das ressonâncias do modo toroidal são apresentadas em

[34], [38], [40], [52], [53]. Foi revelado recentemente que, junto com os modos coletivos chamados de modos toroidais de ordem (TO), modos de ordem antitoroidal (ATO) podem existir em metasuperfícies dielétricas compostas por grupos de trímeros baseados em discos dielétricos de alto índice de permissividade [52], [53]. Em arrays com TO, todos os momentos toroidais dos discos dielétricos são orientados em paralelo, enquanto, no caso de ATO, eles estão alinhados de forma antiparalela em discos vizinhos. Nota-se também as peculiaridades dos modos toroidais em sistemas mais complexos, como matrizes hexagonais, que são discutidas em [55]. Segundo Dmitriev (2021), na pesquisa *Symmetry analysis of trimer-based all-dielectric metasurfaces with toroidal dipole modes* [56], demonstrou-se que, em tais metasuperfícies, é possível controlar a polarização dos modos TO e ATO. A excitação do modo toroidal em grupos compostos por várias partículas é analisada por diferentes métodos numéricos.

As características dos campos eletromagnéticos podem ser obtidas por técnicas semi-analíticas, como o método de expansão multipolar completo, que inclui os modos toroidais [18]. Alguns modelos aproximados, nos quais os processos são descritos por simples equações diferenciais ou algébricas, foram desenvolvidos, o que será evidenciado nos próximos capítulos. Dentre eles, pode-se citar o modelo de acoplamento de osciladores harmônicos [57]-[66] e o método de circuitos elétricos RLC [67], [68]. Outra abordagem apropriada é a teoria dos modos acoplados temporais (TCMT) [69]-[71].

Entre as abordagens analíticas e numéricas, o método da teoria de grupos foi de grande relevância para a análise dos resultados obtidos com o estudo dos quadrúmeros [72]-[76]. A partir das propriedades de transformação de uma base eletromagnética sob simetrias das partículas, pode-se determinar os modos naturais (autoondas), que são modos de vibração natural da estrutura das partículas e seus comportamentos coletivos responsáveis pelas características ressonantes de toda a metasuperfície. Esses métodos incluem um conjunto de representações estudadas na teoria de grupos [77] e [78]. Os métodos teóricos de grupos permitem definir regras de seleção para a existência de modos em metasuperfícies [79]. Em [55], uma nova abordagem para tais sistemas baseados em grupos magnéticos é apresentada. Quando as metasuperfícies são modeladas no modo discreto de aproximação dipolar, o método de combinações lineares adaptado à simetria (SALC) pode ser uma ferramenta poderosa [64] e [65]. Este método combina os modos individuais de partículas, formando um agrupamento de células unitárias usando representações irreduzíveis (IRREPs) do grupo de simetria correspondente.

Diversos estudos investigaram os modos toroidais em arranjos compostos por quatro elementos dielétricos, organizados em configurações denominadas *quadrúmeros*. Teoricamente, foi demonstrado que a ressonância associada ao modo dipolar toroidal pode apresentar um alto fator  $Q$ , sendo excitada por uma onda linearmente polarizada, incidente normalmente sobre uma metasuperfície baseada em *quadrúmeros* [41, 44, 80, 83]. Isso foi

confirmado por experimentos em [41]-[43]. No entanto, alguns aspectos do problema da excitação de metasuperfícies de quadrúmeros e sua análise detalhada estão ausentes na literatura.

Foi demonstrado recentemente [41], [42], que em um arranjo geométrico com quadrúmeros é possível obter o modo de regime TO. Mostraremos que o modo ATO também pode se manifestar nessas metasuperfícies, projetando adequadamente mais configurações complexas baseadas em simetria e fazendo algumas considerações, além de observar de forma analítica as ferramentas acima mencionadas. Os modos TO e ATO podem ser observados em uma visão idealizada na Fig. 2.

De fato, uma combinação de quatro quadrúmeros em uma supercélula permite modelar qualquer simetria relacionada ao grupo  $C_{4v}$  e todos os seus subgrupos, tanto teoricamente quanto na geração dos possíveis automodos de supercélulas, incluindo TO e ATO. Assim, o principal problema deste trabalho é a investigação de tais modos nesta nova classe de metasuperfícies dielétricas. Vamos discutir diferentes métodos para a excitação desses modos. O problema será resolvido de forma sistemática, incluindo uma discussão detalhada sobre a estrutura do campo eletromagnético próximo nas metasuperfícies e suas possíveis aplicações. Todos os resultados teóricos são validados por análise de autofrequência e por simulações numéricas de onda completa.

## 2.3 ALGUMAS APLICAÇÕES DE MODOS TOROIDAIS PRESENTES NA LITERATURA

Pode-se observar no trabalho "*Toroidal Dipole Resonances in All-Dielectric Oligomer Metasurfaces*" [45], de 2019, apresentado nas Fig. 3 e Fig. 4, grandes contribuições para a área, uma vez que a pesquisa sobre superfícies totalmente dielétricas e suas metamoléculas compostas por oligômeros em forma de disco, como trímeros, quadrúmeros e hexâmeros, propõe o suporte a dipolos toroidais. A região investigada abrange o infravermelho.

Este trabalho estuda estruturas metálicas com projetos específicos, amplamente adotados para obter respostas toroidais. No entanto, as aplicações dessas estruturas são frequentemente limitadas pela significativa perda intrínseca, especialmente em frequências ópticas. A pesquisa proposta amplia a diversidade de sistemas ópticos totalmente dielétricos, incluindo ressonâncias dipolares toroidais.

No trabalho "*Toroidic and Antitoroidic Orders in Hexagonal Arrays of Dielectric Trimers: Magnetic Group Approach*" [46], observado na Fig.5, investigam-se ressonâncias de dipolo toroidal protegidas por simetria, bem como as condições para sua excitação em um novo tipo de metamaterial eletromagnético. Esses metamateriais consistem em

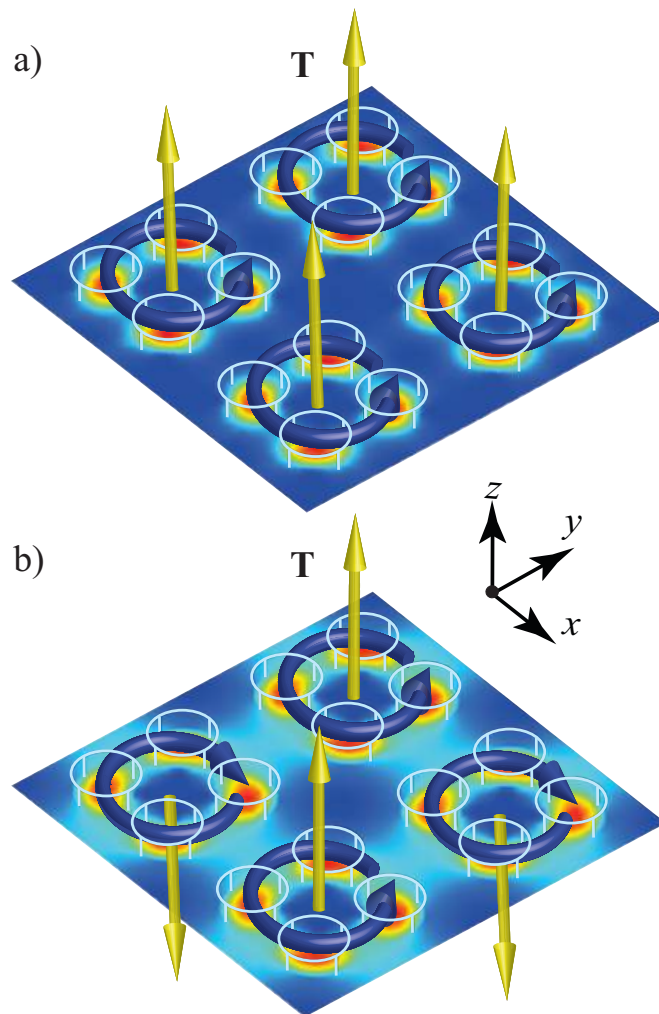


Figura 2 – Esquemas idealizados de a) modo escuro TO, grupo magnético  $C_{4v}$ ; b) modo ATO escuro, grupo magnético  $C_{4v}$ , setas circulares azuis mostram o fluxo do campo magnético em quadrúmero.

matrizes periódicas planares, totalmente dielétricas, compostas por discos dispostos sobre um substrato dielétrico. Os blocos elementares dessas matrizes são trímeros organizados em supercélulas unitárias hexagonais, cuja simetria geométrica máxima é  $C_{6v}$ .

A análise emprega a teoria da representação de grupos associada à teoria dos grupos magnéticos, configurando uma abordagem inovadora para esse tipo de problema. Verifica-se que, para acessar os supermodos toroidais da matriz, é necessário romper a simetria da supercélula unitária em duas etapas: inicialmente, reduz-se a simetria  $C_{3v}$  do trímero e, em seguida, a simetria  $C_{6v}$  da própria supercélula.

O estudo reúne resultados teóricos e experimentais relacionados à excitação do modo toroidal. Os metamateriais propostos apresentam potencial para proporcionar uma interação luz-matéria aprimorada, devido ao confinamento espacial e temporal da luz em sistemas ressonantes com altos fatores de qualidade.

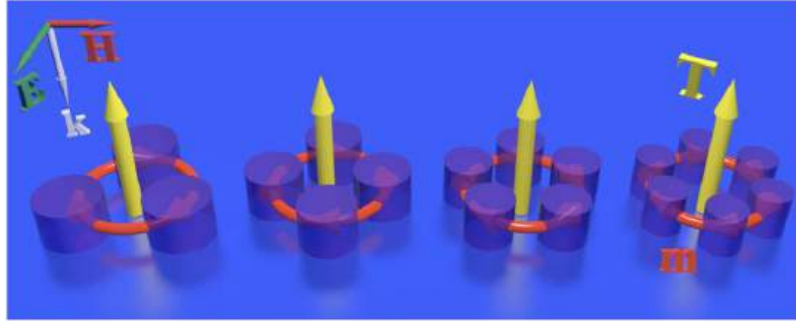


Figura 3 – Vista artística das metamoléculas compostas por oligômeros de disco totalmente dielétricos. Da esquerda para a direita: exemplos de trímeros, quadrúmeros, pentâmeros e hexâmeros. Normalmente a onda plana incidente com campo elétrico direcionado a um dos eixos de simetria dos oligômeros que é empregada para excitar Ressonâncias dipolares toroidais. Quando as respostas dipolares toroidais são excitadas, o campo magnético (setas vermelhas) forma um circuito fechado que penetra todas as ressonadores dielétricos, gerando assim um momento de dipolo toroidal fora do plano (setas amarelas)[45].

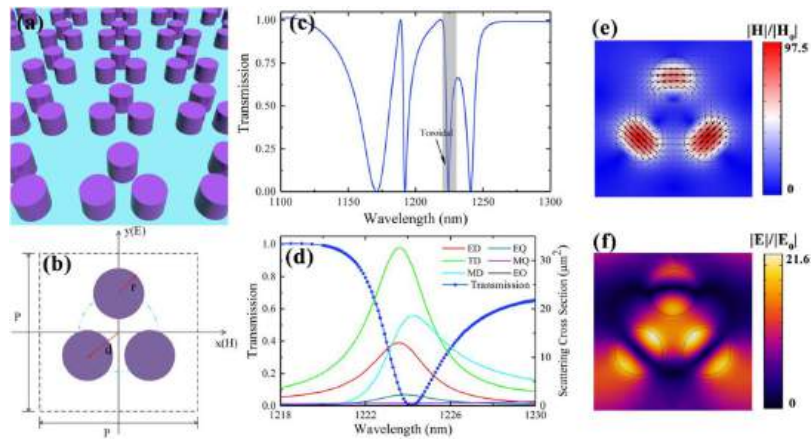


Figura 4 – Resposta toroidal da caixa do trímero. a) Vista esquemática da metasuperfície na qual as metamoléculas são compostas por discos em forma de trímero. b) Parâmetros geométricos de uma célula unitária na metasuperfície em (a), onde  $r = 150$  nm,  $d = 250$  nm,  $P = 1000$  nm e altura do disco  $h = 250$  nm. Campo elétrico do onda plana normalmente incidente é ao longo do eixo  $y$ . O trímero apresenta simetria  $C_3$  em relação ao eixo  $z$  fora do plano. c) Espectro de transmissão de a metasuperfície do trímero. A ressonância do dipolo toroidal é marcada com cor sombreada. d) Resultados da expansão multipolar e espectro de transmissão detalhado da região sombreada em (c). Seis termos estão envolvidos: dipolo elétrico (ED), dipolo toroidal (TD), dipolo magnético (MD), quadrupolo elétrico (EQ), quadrupolo (MQ) e octopolo elétrico (EO). e,f) Distribuição do campo magnético e do campo elétrico respectivamente, calculados no mergulho de transmissão em (d). Setas em (e) indicam vetores de campo magnético[45].

Na literatura, destaca-se o trabalho “*Toroidal Eigenmodes in All-Dielectric Metamolecules*” [47], no qual se realiza uma investigação completa dos modos ressonantes eletromagnéticos suportados por sistemas de hastes posicionadas nos vértices de polígo-

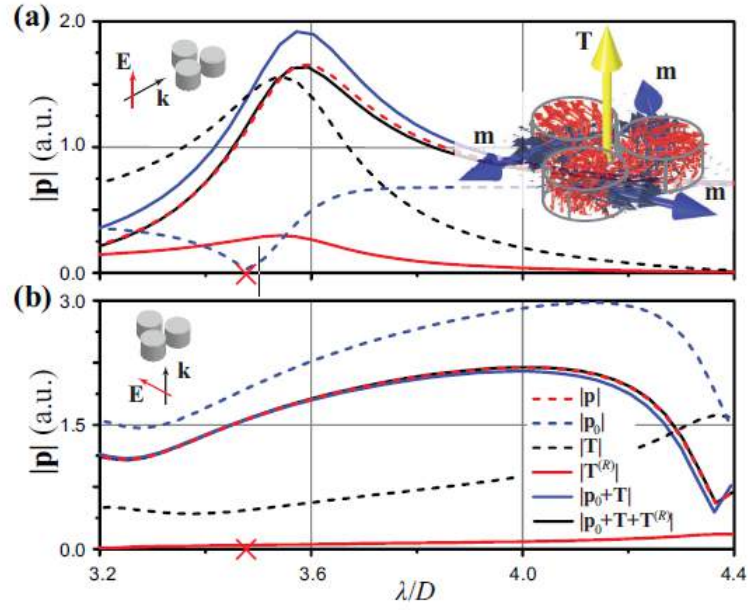


Figura 5 – Momento dipolar elétrico exato com contribuições correspondentes do dipolo elétrico LWA e momentos de dipolo toroidal de um único trímtero para sua (a) irradiação lateral e (b) frontal por um onda linearmente polarizada. A designação dos vetores  $k$  e  $E$  do onda incidente e uma aparência do modo próprio toroidal do trímtero são dadas nas inserções. No modo próprio, setas vermelhas e pretas correspondem ao fluxo de correntes de polarização elétrica e respectivamente, a seta amarela em negrito indica o dipolo toroidal momento  $T$ , e as setas azuis em negrito indicam o dipolo magnético momentos  $m$  de discos individuais. A posição do modo próprio no escala de comprimento de onda é marcada por uma cruz vermelha. Parâmetros do trímtero são:  $\epsilon_d = 22$ ,  $h_d/D = 0,45$  e em  $a_t/D = 1,125$ [46].

nos canônicos, conforme ilustrado na Fig. 6. Esses sistemas de bastonetes, que formam metamoléculas cíclicas totalmente dielétricas, demonstram a capacidade de sustentar o modo dipolo toroidal não convencional, caracterizado pela excitação de modos dipolares magnéticos em cada haste.

Além dos modos toroidais, o estudo identifica modos coletivos espectralmente adjacentes. A evolução das frequências ressonantes em função da separação entre as hastes é analisada, revelando oscilações em torno da ressonância dipolar magnética de uma haste isolada. Essa característica decorre da natureza fortemente acoplada dos modos constituintes. Ressalta-se que a faixa espectral investigada corresponde à região de radiação terahertz.

No trabalho “*Symmetry Analysis of Trimer-Based All-Dielectric Metasurfaces with Toroidal Dipole Modes*” [48], publicado em 2021, são discutidas as condições de simetria necessárias para a excitação de modos de dipolo toroidal protegidos pela simetria, organizados em metasuperfícies totalmente dielétricas compostas por trímteros ou aglomerados de discos dielétricos em trímteros duplos, como ilustrado na Fig. 7 e Fig. 8. Essas metasu-

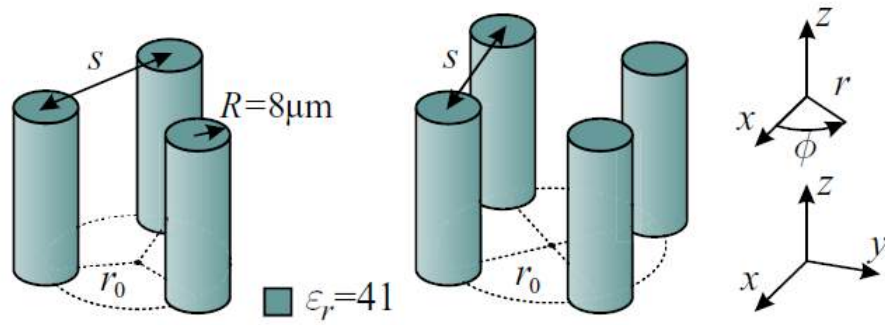


Figura 6 – Esquema das metamoléculas cíclicas em estudo para  $N = 3, 4$ . Em todos os casos, hastes polaritônicas idênticas e infinitamente longas de seção transversal circular e um raio  $R = 8 \mu\text{m}$  estão localizados em os vértices de polígonos regulares. O material da haste é  $\text{LiTaO}_3$  com permissividade  $\epsilon_r = 41$  em torno de 2 THz [47].

perfícies promovem maior interação luz-matéria, devido ao confinamento espacial da luz em sistemas ressonantes com elevado fator de qualidade.

Para descrever as características dos modos toroidais presentes nos aglomerados de discos, empregaram-se a aproximação dos momentos de dipolo magnético, a teoria de representação de grupos, combinada com a representação linear adaptada à simetria, e a teoria de circuitos. Os resultados teóricos foram validados por meio de simulações numéricas de onda completa e experimentos na faixa de micro-ondas.

O estudo demonstrou que o modo dipolo toroidal manifesta-se como um estado quase escuro no trímero, podendo ser excitado na metasuperfície pelo campo de uma onda polarizada, desde que a simetria do trímero seja devidamente reduzida. Na metasuperfície, as propriedades desse modo são determinadas, principalmente, pelos parâmetros de um único trímero e não resultam da periodicidade da matriz. O acoplamento entre os modos dipolares toroidais dos trímeros pode ocorrer nas formas de ligação e anti-ligação, resultando em diferentes ordens do momento de dipolo toroidal líquido.

Por fim, o trabalho apresenta uma comparação entre os resultados numéricos e experimentais, evidenciando boa concordância entre ambos.

Ao analisar a publicação “*Toroidal dipole resonances by a sub-wavelength all-dielectric torus*” [49] de 2022, verifica-se que, embora as ressonâncias de dipolo toroidal (TDRs) baseadas em metamoléculas artificiais tenham sido amplamente relatadas, os TDRs suportados por uma única partícula dielétrica permanecem pouco explorados, como evidenciado na Fig. 9. No trabalho citado, demonstra-se que um toro totalmente dielétrico de subcomprimento de onda é capaz de sustentar um TDR dominante. Observa-se que o campo magnético apresenta um considerável aprimoramento, assumindo uma configuração semelhante a um vórtice no interior do toro, o que confirma a excitação toroidal.

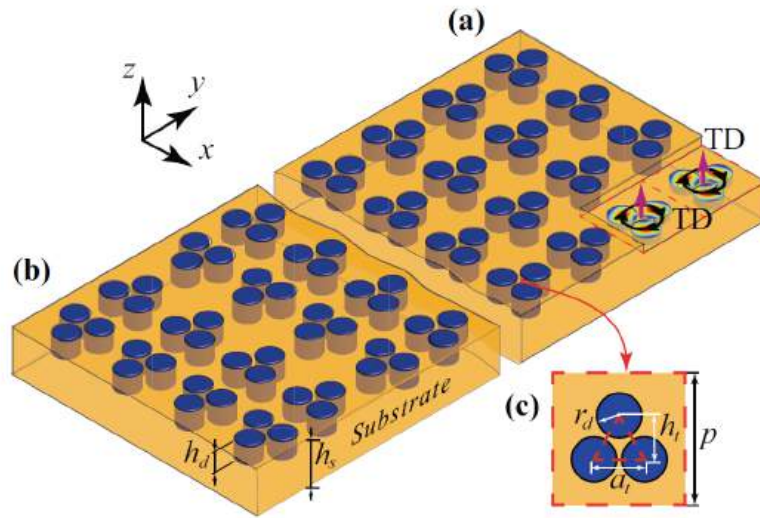


Figura 7 – Uma vista esquemática de dois projetos de uma metasuperfície dielétrica composta de (a) trímeros e (b) trímeros gêmeos, e (c) um esboço da célula unitária com um trímero[48].

O estudo discute a influência dos parâmetros geométricos, da permissividade dielétrica e da polarização na evolução dos TDRs. Verifica-se que a excitação toroidal ocorre predominantemente sob polarização TM, enquanto o estado anápolo manifesta-se sob polarização TE. Este trabalho propõe, assim, uma nova abordagem para a excitação de modos toroidais, utilizando um ressonador dielétrico simples.

Por conseguinte, ao analisar o trabalho “*Ultra-high Q-factor toroidal dipole resonance and magnetic dipole quasi-bound state in the continuum in an all-dielectric hollow metasurface*” [51], identifica-se uma análise numérica realizada pelos autores de uma metasuperfície oca totalmente dielétrica, operando na região do infravermelho, composta por cilindros de silício com duas cavidades retangulares assimétricas. O estudo demonstra a ocorrência de uma ressonância de Fano acentuada, com profundidade de modulação próxima do total, excitada por um estado quasi-bound no contínuo, cujo fator de qualidade ( $Q$ ) pode alcançar 8428 quando  $\sigma = 40$  nm, conforme descrito na Fig. 10.

Por meio de técnicas numéricas, as duas ressonâncias de Fano observadas são caracterizadas pelas respostas do dipolo toroidal e do dipolo magnético (MD), respectivamente. Destaca-se que o fator- $Q$  do modo MD pode atingir o valor de 17106. Além disso, o trabalho investiga a dependência dos espectros de transmissão em função de diferentes parâmetros geométricos. Em razão de suas estreitas larguras de linha e do forte confinamento do campo próximo, a estrutura proposta apresenta potencial aplicação como sensor de índice de refração, alcançando uma sensibilidade máxima ( $S$ ) de 160 nm e um valor máximo de mérito de  $575 RIU^{-1}$ .

Os autores concluem que a estrutura apresentada oferece excelentes perspectivas para aplicações nas áreas biomédica, agrícola e de detecção química.

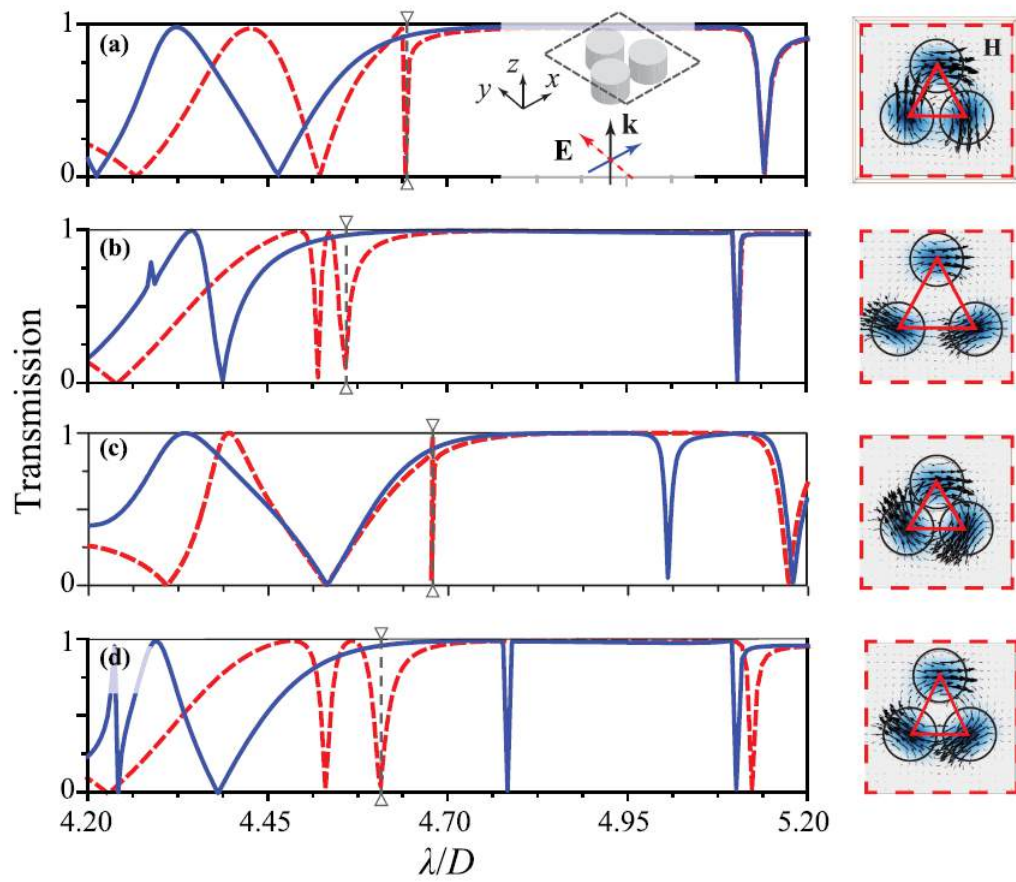


Figura 8 – Evolução dos espectros de transmissão em função do comprimento de onda normalizado para a metassuperfície composta por células unitárias quadradas ( $p \times p$ ) com (a), (b) trímeros não perturbados e (c), (d) trímeros perturbados por deslocamento de um disco particular à uma distância  $\Delta H_t$  ao longo do eixo  $y$ [48].

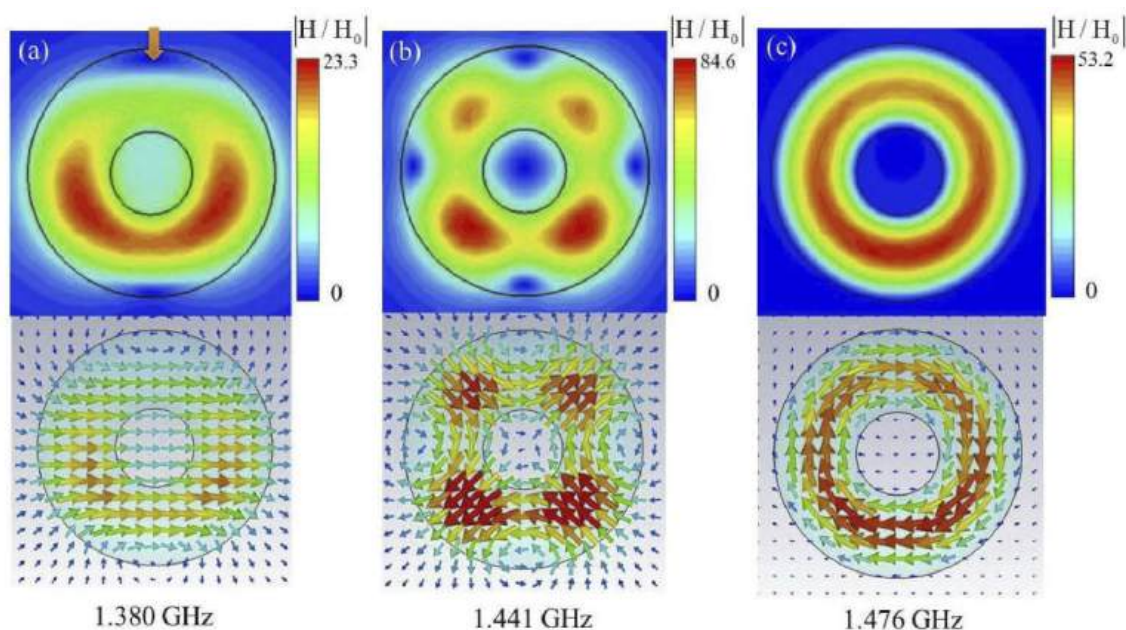


Figura 9 – As distribuições de campo magnético para as três primeiras ressonâncias de Mie do dielétrico toro. (a) Ressonância dipolar magnética; (b) Ressonância magnética quadrupolar; (c) TDR. O topo e painéis de botões representam os valores absolutos e vetor de aração do campo magnético, respectivamente. A seta em (a) indica o vetor de onda incidente. Aqui, os diagramas de campo em (a-c) estão no plano x-y (isto é, plano  $z = 0$ ) [49].

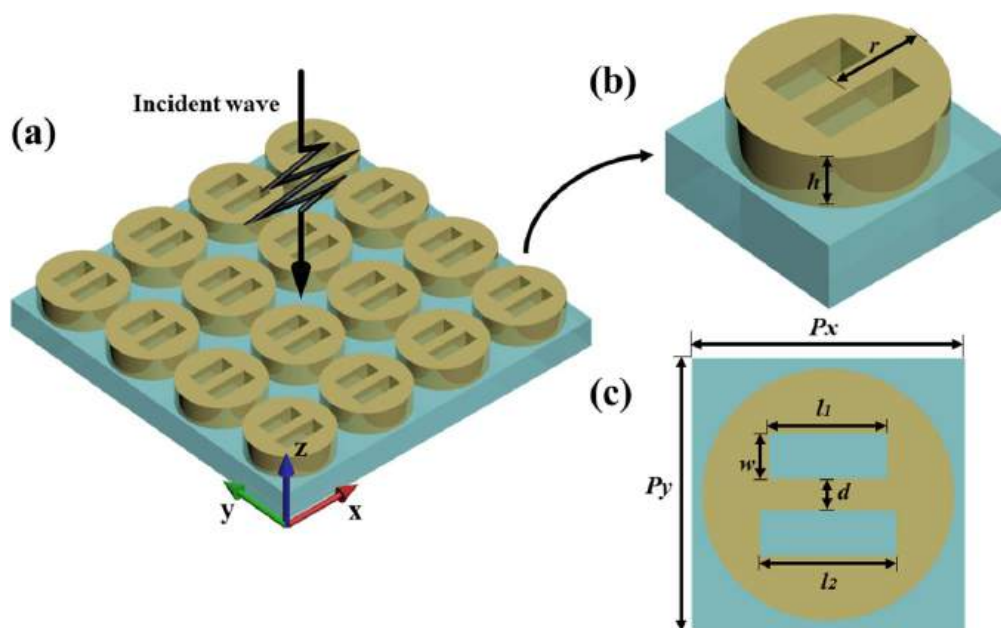


Figura 10 – (a) Esquema da metasuperfície consistindo de uma matriz de cilindros ocos de silício sobre um substrato de vidro e a configuração de onda plana incidente. (b) Esquema de uma célula unitária e parâmetros geométricos. (c) Vista superior de uma célula unitária e parâmetros geométricos [51].

## 3 METODOLOGIA

Apresenta-se, nesta seção, um estudo teórico acerca da disposição dos discos e da modelagem do quadrúmero, definindo-se os parâmetros necessários para o desenvolvimento do dispositivo.

### 3.1 Descrição do dispositivo no software COMSOL Multiphysics

O estudo teórico foi realizado por meio de simulações no software COMSOL Multiphysics, versão 5.5 [81], que utiliza o método dos elementos finitos (*FEM – Finite Element Method*) para analisar e resolver problemas complexos em diversas áreas da engenharia e ciências aplicadas [82]. Este software permite modelar fenômenos físicos, como transferência de calor, eletromagnetismo, mecânica estrutural e dinâmica de fluidos, oferecendo uma abordagem precisa para entender e prever o comportamento de sistemas reais. Nesse contexto, foi possível modelar a estrutura pesquisada e definir parâmetros reais que simulam um ambiente controlado.

O método dos elementos finitos é uma abordagem numérica utilizada para resolver equações diferenciais parciais de forma precisa. Sua essência consiste em dividir um sistema contínuo, como uma estrutura mecânica ou um campo elétrico, em pequenas partes chamadas de elementos finitos. Em cada um desses elementos, o comportamento físico é representado por funções matemáticas, permitindo uma solução aproximada para problemas complexos que seriam praticamente impossíveis de resolver com métodos analíticos tradicionais.

Para simular como os campos eletromagnéticos afetam a resposta óptica das metasuperfícies irradiadas por uma onda plana linearmente polarizada, foi utilizado o módulo *RF* do COMSOL Multiphysics. Este módulo é um solucionador eletromagnético baseado no método dos elementos finitos, que permite modelar, resolver e analisar problemas envolvendo a propagação de ondas eletromagnéticas em diferentes tipos de materiais e estruturas.

Após a modelagem das geometrias-base para o projeto, conforme observado na Fig. 11, foram inseridos todos os parâmetros físicos relevantes, incluindo propriedades dielétricas dos materiais, frequência de operação e direção de propagação das ondas. Além disso, cada subdomínio (ou seja, cada região diferente do modelo) recebeu sua definição de material, associando propriedades como permissividade e permeabilidade relativas.

Para representar corretamente a natureza periódica das metasuperfícies, foram aplicadas condições de fronteira específicas. Nas paredes laterais das células unitárias,

utilizou-se a condição *Periodic Condition - Floquet periodicity*, que impõe continuidade de fase e amplitude entre as bordas opostas do domínio. Isso permite simular um arranjo periódico bidimensional infinito a partir de uma única célula unitária, replicando o comportamento real da estrutura sem a necessidade de modelar todo o conjunto físico.

Nas faces superior e inferior do domínio, foram aplicadas as condições *Scattering Boundary Condition - No incident field*, que simulam fronteiras abertas para as ondas eletromagnéticas, permitindo que as ondas irradiadas se propaguem livremente para fora do domínio simulado, minimizando reflexões artificiais. Essa configuração garante uma representação precisa da interação das ondas com a estrutura, sem a interferência de bordas físicas artificiais.

Para introduzir a onda plana incidente no domínio, foram utilizadas portas do tipo *Port Periodic*. Essas portas atuam como superfícies de excitação e absorção de ondas, sendo configuradas com o modo fundamental de propagação e definidas para trabalhar em conjunto com as condições de periodicidade impostas nas laterais. A *Port Periodic* é configurada para emitir uma onda plana linearmente polarizada em direção à metasuperfície, além de absorver as ondas transmitidas e refletidas, permitindo a análise precisa dos parâmetros ópticos resultantes, como transmissão, reflexão e absorção.

Essas configurações, em conjunto, permitem uma modelagem eficiente e realista do comportamento eletromagnético de metasuperfícies periódicas irradiadas por ondas planas no regime óptico, garantindo resultados numericamente robustos e fisicamente coerentes.

Além disso, os subdomínios definidos entre as faces superior, inferior e as portas formam regiões conhecidas como *Perfectly Matched Layer* (PML) [50], responsáveis por absorver o modo excitado pela porta fonte e quaisquer modos de ordem superior gerados pela estrutura periódica, além de atenuar ondas à medida que se propagam na direção da PML.

A PML é empregada para absorver ondas eletromagnéticas nas bordas do domínio de simulação, evitando reflexões artificiais e permitindo que o modelo represente com precisão um espaço aberto. Em problemas eletromagnéticos, como a propagação de ondas em antenas, guias de onda e radares, as ondas podem se espalhar indefinidamente. Contudo, em softwares de simulação, o domínio precisa ser finito. Se as bordas desse domínio forem tratadas como limites comuns, as ondas refletirão, interferindo nos resultados.

Após a definição dos domínios e condições de contorno, utilizamos o menu *Mesh* para criar as malhas de elementos finitos e discretizar os modelos de forma automática pelo software COMSOL Multiphysics. Em nossas simulações, foi utilizado o método de *Physics-controlled mesh* (os discos do quadrúmero foram as estruturas mais refinadas, com o objetivo de melhorar a precisão dos cálculos). As portas periódicas utilizadas em nossas simulações são necessárias para a obtenção dos modos de ressonância nos quadrúmeros,

sendo isso feito por meio dos estudos de *Eigenfrequency* para seleção dos modos ressonantes e de *Frequency Domain* para os espectros. Além disso, as distribuições ressonantes dos campos eletromagnéticos dentro das células unitárias são obtidas nos gráficos *3D*.

Seguimos as seguintes etapas na modelagem da estrutura até a obtenção dos resultados provenientes das simulações, sendo estas constituídas por:

1. Definição geométrica do dispositivo;
2. Seleção dos parâmetros físicos do dispositivo;
3. Estabelecimento das condições de contorno do problema;
4. Geração da malha de elementos finitos;
5. Pós-processamento dos resultados.

## 3.2 Descrição da metasuperfície

O layout da metasuperfície estudada é apresentado na Fig. 12. O elemento básico da matriz periódica é um disco dielétrico, caracterizado por seu raio  $r_d$ , altura  $h_d$  e permissividade relativa  $\epsilon_d$ . Quatro desses discos, dispostos em uma geometria quadrada, formam uma unidade de quadrúmeros, considerada uma supercélula, com a distância entre discos adjacentes igual a  $a_d$  e período  $p$ . Quatro quadrúmeros, também dispostos em geometria quadrada, constituem a supercélula unitária da metasuperfície, cuja altura é o dobro da da célula unitária do quadrúmero, conforme mostrado na Fig. 12. A metasuperfície é incorporada a um substrato de baixa permissividade, com altura  $h_s$  e permissividade relativa  $\epsilon_s$ . A matriz é infinita no plano  $xy$ .

A metasuperfície é excitada por uma onda incidente normal ( $\mathbf{k} = \{0, 0, -k_z\}$ ), linearmente polarizada, com  $k_z = 2\pi/\lambda$ , onde  $\lambda = 2\pi c/\omega$  é o comprimento de onda,  $c$  é a velocidade da luz no espaço livre e  $\omega$  é a frequência angular.

Em geral, a excitação de um sistema ressonante pode ser fornecida por diferentes componentes do campo eletromagnético da onda incidente. Na teoria dos ressonadores dielétricos, assume-se geralmente que o momento de dipolo magnético é definido por correntes de deslocamento circulares produzidas pelo campo elétrico  $\vec{E}$  da onda incidente. No entanto, para os nossos propósitos, é conveniente considerar a excitação pelo campo magnético incidente  $\vec{H}$ . No regime linear, o momento de dipolo  $m$  é proporcional ao campo magnético  $\vec{H}$ , ou seja,  $m = \alpha\vec{H}$ , onde  $\alpha$  é a polarizabilidade magnética.

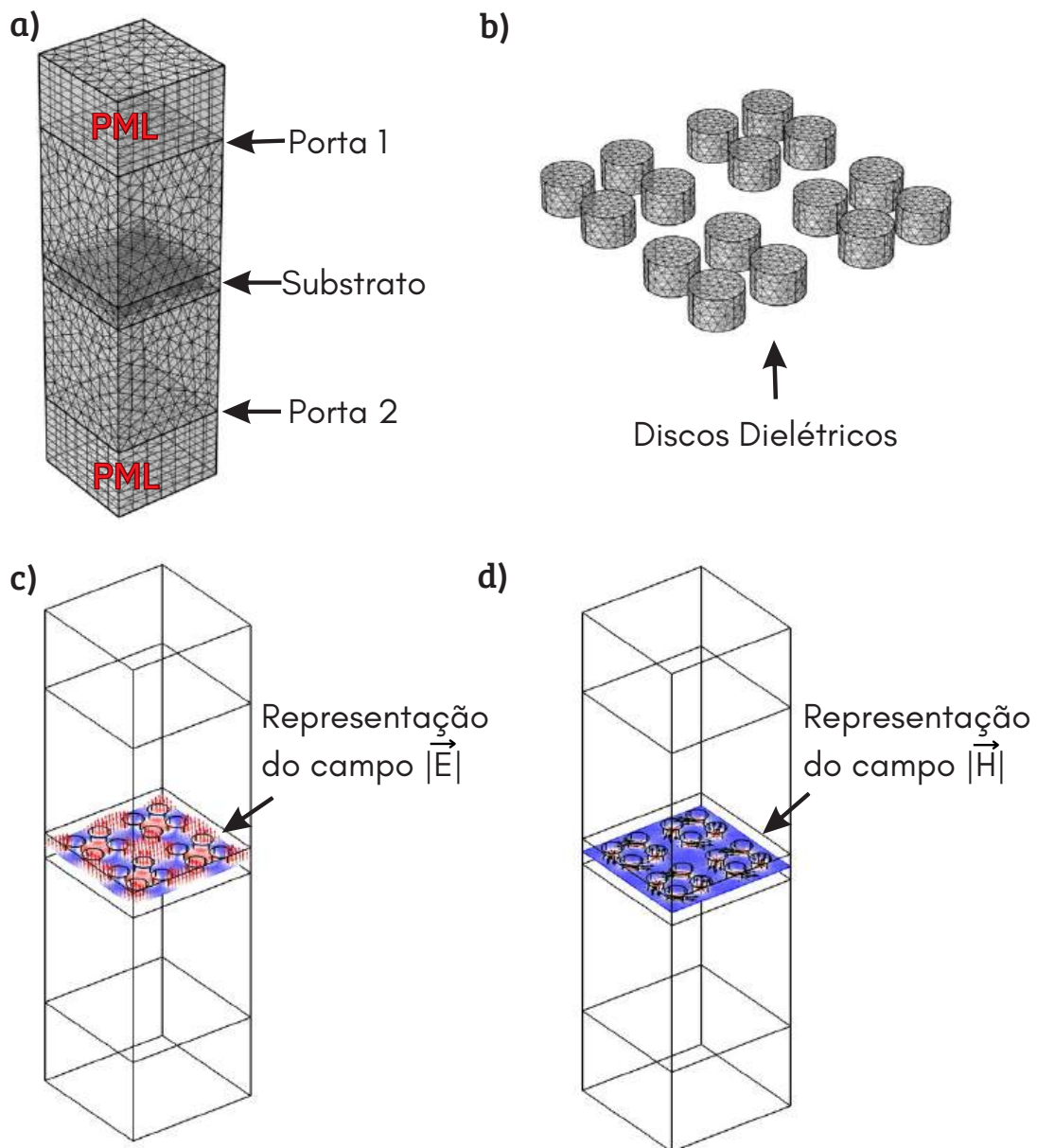


Figura 11 – Malha de elementos finitos aplicada à célula unitária, destacando-se na caixa de ar, as regiões de PML, substrato e portas. b) Vista dos discos dielétricos que estão imersos em diferentes meios em a). c) e d) Mapas de cores e vetores dos autocampos  $\vec{E}$  e  $\vec{H}$  calculados para o modo toroidal suportado pela estrutura, respectivamente.

### 3.3 Disco dielétrico isolado com ressonância de dipolo magnético

O elemento básico da metasuperfície estudada é um ressonador em formato de disco dielétrico, com subcomprimento de onda. A simetria do disco no plano é representada pelo grupo  $C_{\infty v}$ , conforme a notação de Schönflies [80]. A ressonância do disco é definida pela estrutura do modo toroidal no quadrúmero, ou seja, o requisito principal para o elemento do disco é a presença da ressonância do dipolo magnético no plano  $xy$ .

Para obter uma resposta forte e bem localizada, a permissividade do material do

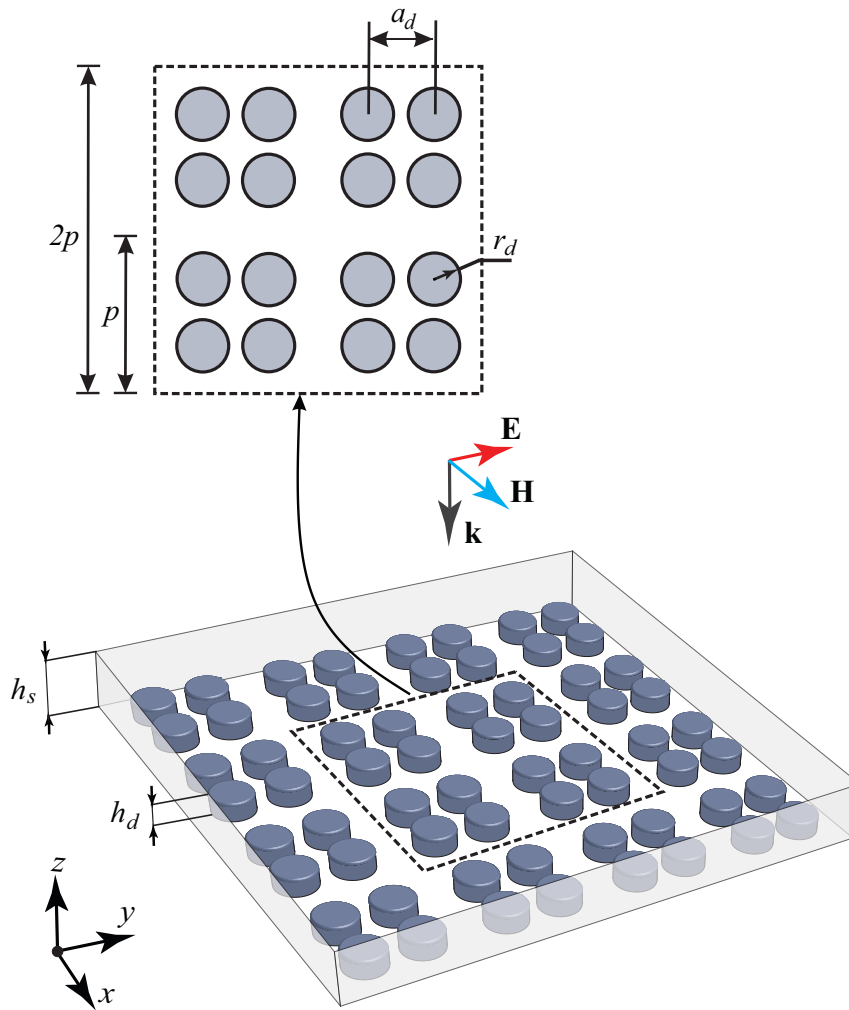


Figura 12 – Esquema da metasuperfície dielétrica investigada composta de Quadrúmeros. A supercélula unitária que consiste em quatro Quadrúmeros é delineada por um contorno quadrado pontilhado preto.

ressonador deve ser suficientemente alta. Para uma permissividade selecionada e uma dada frequência, a ressonância do dipolo magnético corresponde às soluções de Mie, que podem ser ajustadas adequadamente por meio da escolha das dimensões do ressonador [54].

### 3.4 Quadrúmero formado por discos dielétricos e sua excitação

A unidade estrutural responsável pela ressonância do modo toroidal é um quadrúmero, composto por quatro discos dielétricos dispostos nos vértices de um quadrado. O plano de simetria do quadrúmero não perturbado é representado pelo grupo  $C_{4v}$ . Os elementos de simetria do quadrúmero são ilustrados na Fig. 13.

Observa-se que os automodos na estrutura da rede consistem em uma rede quadrada com orifícios de ar, investigada pelo método de diferenças finitas no domínio do tempo em [84]. Para analisar o conteúdo dos automodos dos quadrúmeros com simetria  $C_{4v}$ ,

utilizamos o método SALC. A base do dipolo magnético para esse método é apresentada na Fig. 24 do Apêndice A. Na Tabela I, fornecemos uma representação esquemática dos possíveis automodos calculados pelo método SALC, juntamente com os perfis de campo da estrutura, obtidos através do módulo RF do software COMSOL Multiphysics.

O modo toroidal pertence ao IRREP  $A_1$  da Tabela II no Apêndice B. Ele pode ser imaginado como uma composição, similar a um quebra-cabeça, dos dipolos magnéticos dos quatro discos, conforme mostrado na primeira linha da Tabela I. O momento toroidal  $T$  do quadrúmero é orientado na direção  $z$ . A Tabela I mostra como o método SALC pode simplificar a identificação dos modos toroidais, prevendo um espectro rico de estruturas.

### 3.5 Aplicação do Método SALC e da Teoria de Grupos na Identificação de Modos Toroidais

Neste trabalho, a teoria de grupos e o método das combinações lineares adaptadas à simetria (Symmetry-Adapted Linear Combination SALC) foram aplicados de forma sistemática para a identificação e caracterização dos modos toroidais na metasuperfície proposta. A abordagem parte do reconhecimento de que os modos eletromagnéticos suportados por uma estrutura periódica estão diretamente relacionados às propriedades simétricas de sua configuração geométrica, sendo classificados de acordo com as representações irreduzíveis (IRREPs) do grupo de simetria da supercélula [59, 60].

Inicialmente, foi realizada a caracterização do grupo de simetria da supercélula, identificado como  $C_{4v}$ . A partir dessa simetria, foram determinadas as representações irreduzíveis correspondentes aos possíveis modos ressonantes. Cada modo transforma-se segundo uma dessas representações, e, portanto, sua ocorrência ou supressão está condicionada pela simetria da estrutura. Os modos toroidais, por exemplo, pertencem ao IRREP  $A_1$ , enquanto outros modos dipolares e quadrupolares se associam a diferentes representações, como  $A_2$ ,  $B_1$ ,  $B_2$  e  $E$  [61].

Para identificar explicitamente os modos toroidais, o método SALC foi empregado na construção de combinações lineares dos momentos dipolares magnéticos localizados em cada disco do quadrúmero. Cada um dos quatro discos foi associado a um vetor de momento dipolar magnético  $m_i$ , formando a base inicial do sistema. Em seguida, as operações de simetria do grupo  $C_{4v}$  foram aplicadas sobre essa base, permitindo a construção das combinações SALC correspondentes a cada IRREP.

Dentre as combinações obtidas, a relacionada ao IRREP  $A_1$  revelou-se compatível com o padrão de excitação característico do dipolo toroidal. Nesta configuração, os momentos  $m_i$  organizam-se de forma circular no plano, criando um momento de corrente que circula em torno do centro do quadrúmero exatamente a distribuição topológica

associada ao dipolo toroidal [62].

Entretanto, na configuração inicial com simetria  $C_{4v}$ , esses modos toroidais são opticamente inativos, ou seja, não acoplados a ondas externas devido às restrições impostas pela simetria. Para viabilizar a excitação desses modos, foi necessário reduzir a simetria da estrutura. Esse processo ocorreu em duas etapas: primeiramente, a simetria interna do quadrúmero foi quebrada, modificando-se dimensões ou posições relativas dos discos; em seguida, a simetria da supercélula foi reduzida de  $C_{4v}$  para  $C_s$ . Essa dupla quebra de simetria possibilitou a ativação simultânea de ressonâncias toroidais e antitoroidais, estas últimas associadas a distribuições de campo com topologia oposta às dos modos toroidais convencionais.

As previsões obtidas com a aplicação da teoria de grupos e do método SALC foram posteriormente validadas por meio de simulações eletromagnéticas de campo completo (full-wave), realizadas no software COMSOL Multiphysics [81]. Os resultados confirmaram a presença dos modos toroidais previstos, evidenciada tanto pelos espectros de transmitância e refletância quanto pelas distribuições espaciais dos campos eletromagnéticos simulados. Adicionalmente, a decomposição multipolar foi aplicada para quantificar a contribuição dos diferentes momentos multipolares, confirmando o caráter toroidal dominante nas ressonâncias identificadas [63].

Essa metodologia integrada, baseada na teoria de grupos, no método SALC e na validação numérica via simulação, oferece uma abordagem robusta e reproduzível para a identificação e ativação de modos quase escuros em metassuperfícies, sendo de grande relevância para o desenvolvimento de dispositivos fotônicos avançados.

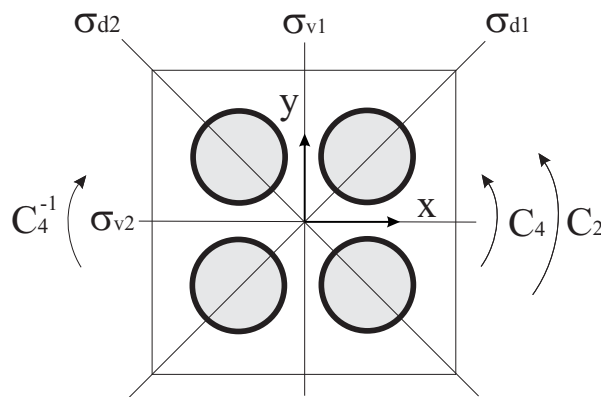


Figura 13 – Célula unitária do quadrúmero com elementos de simetria

## 3.6 Possíveis simetrias para excitação do modo toroidal em uma célula unitária

O maior grupo de simetria geométrica da célula unitária do quadrúmero, apresentado na Fig. 13, é  $C_{4v}$ . Seus subgrupos são mostrados na Fig. 24 do Apêndice C. A partir dessa simetria  $C_{4v}$ , discutiremos as possibilidades de excitação do modo dipolo toroidal.

A simetria magnética no plano do campo  $\mathbf{H}$  é  $C_{2v}(C_s)$  [77] (ver Apêndice D). A simetria resultante do sistema (geometria da célula unitária +  $\mathbf{H}$ ) é definida pela interseção dos grupos correspondentes, ou seja,  $C_{4v} \cap C_{2v}(C_s) = C_s$ . O grupo  $C_s$  contém apenas um plano de simetria.

### 3.6.1 Exemplos de perturbações nos quadrúmeros para excitar o modo toroidal

Na simetria do quadrúmero  $C_{4v}$ , o modo toroidal é escuro, ou seja, não pode ser excitado por uma onda plana com incidência normal (ver Tabela II no Apêndice B). Uma forma de acessar esse modo é observar a redução da simetria  $C_{4v}$ . Entre todos os subgrupos de  $C_{4v}$ , apenas  $C_s$  e  $C_1$  podem proporcionar o efeito desejado. Excluimos a consideração do grupo  $C_1$ , ou seja, não analisamos quadrúmeros perturbados sem qualquer simetria, pois, nesse caso, qualquer controle da excitação do modo toroidal estaria perdido. Portanto, em todos os casos de quebra de simetria do quadrúmero, um de seus quatro planos de simetria deve ser preservado. Geometricamente, para alcançar a simetria  $C_s$ , pode-se considerar várias variantes de pré-perturbação, aplicando-as a um dos planos verticais de simetria  $\sigma_{v1}$  ou  $\sigma_{v2}$ , ou a uma das diagonais  $\sigma_{d1}$  ou  $\sigma_{d2}$ . A seguir, discutimos alguns aspectos dessa redução de simetria.

#### 3.6.1.1 Primeiro tipo de perturbação para excitar o modo toroidal

A quebra de simetria de  $C_{4v}$  para  $C_s$  pode ser alcançada alterando os parâmetros (permissividade  $\varepsilon_d$ , raio  $r_d$ , ou altura  $h_d$ ) de um (ou dois) dos ressonadores, ou seja, ajustando a frequência de ressonância do ressonador, mas preservando a geometria 2D (no plano  $xy$ ) da célula unitária, sem modificar as posições dos quatro ressonadores individuais (veja exemplos na Fig. 14a,b).

Em termos de teoria de circuitos, todo ressonador de disco pode ser descrito como uma conexão em série de elementos  $\mathcal{R}$ ,  $\mathcal{L}$  e  $\mathcal{C}$ . Considerando um quadrúmero como uma combinação em série de quatro circuitos  $\mathcal{R}\mathcal{L}\mathcal{C}$  transformados em um anel, pode-se avaliar a frequência de ressonância do quadrúmero utilizando a equação [53].

$$\text{Im}(Z_1 + Z_2 + Z_3 + Z_4) = 0, \quad (3.1)$$

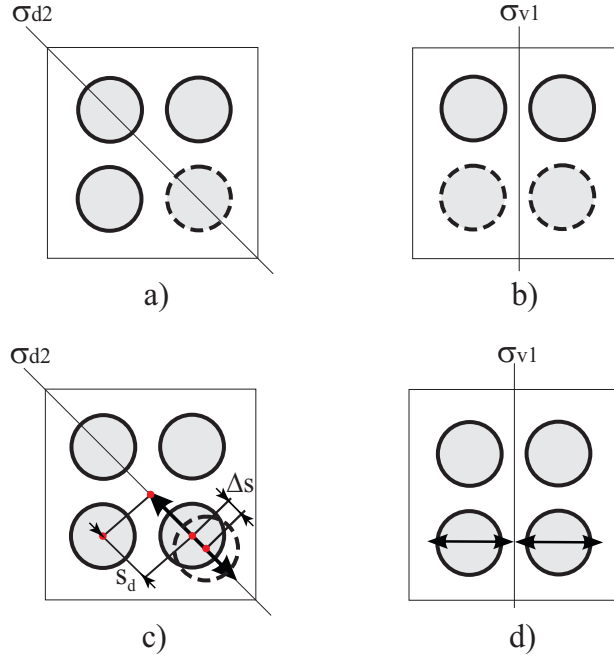


Figura 14 – Redução da simetria  $C_{4v}$  a  $C_s$ . Exemplos de perturbações em quadrúmeros: a) preservando o plano  $\sigma_{d2}$ , b) preservando no plano  $\sigma_{v1}$ , os discos perturbados são marcados por círculos pontilhados; c) preservando o plano  $\sigma_{d2}$ , d) preservando o plano  $\sigma_{v1}$ , em c) e d) perturbações são realizadas por deslocamento dos discos representados por setas. Em a) e c) perturbações são efetuadas por um ressonador, em b) e d) por dois ressonadores.

Onde  $Z_i$  ( $i = 1, 2, 3, 4$ ) é a impedância do enésimo ressonador. Em caso de perturbação de um dos ressonadores (ou seja,  $Z_1 = Z_2 = Z_3 \neq Z_4$ ), pode-se utilizar a expansão de Taylor para uma definição analítica da frequência de ressonância (fórmula  $\omega \approx 2 \cdot 1.841 c(Dn_d)^{-1}$  [53], onde  $D = 2r_d$  é o diâmetro do disco e  $n = \sqrt{\varepsilon_d}$  é seu índice de refração). Em aproximação linear, o deslocamento de frequência  $\Delta\omega$  do quadrúmero pode ser escrito da seguinte forma:

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_0} = -\frac{1}{4}\beta\frac{\Delta D}{D}, \quad (3.2)$$

Onde  $\omega_0$  é a frequência de ressonância sem perturbação do quadrúmero com modo toroidal,  $\Delta D$  é a perturbação do diâmetro do disco e  $\beta$  é uma constante. O coeficiente  $1/4$  na Eq. 3.2 se deve à perturbação de apenas um dos quatro ressonadores.

Uma fórmula análoga pode ser escrita para o caso de perturbação pelo índice permissivo  $n_d$  e pela altura do ressonador  $h_d$ , considerando que a frequência de ressonância do ressonador em disco é inversamente proporcional ao seu volume e, conseqüentemente, à sua altura.

No caso de perturbação por dois discos, observa-se que:

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_0} = -\frac{1}{2}\beta\frac{\Delta D}{D}, \quad (3.3)$$

O deslocamento de frequência é dobrado em comparação com o caso de um disco, conforme indicado na Eq. 3.2. A partir dos resultados numéricos observados nas Fig. 19b,c, obtém-se  $\beta = 0.4$  para a perturbação pela permissividade do disco e  $\beta = 0.5$  para a perturbação pela altura do disco.

### 3.6.1.2 Segundo tipo de perturbação para excitar o modo toroidal

O segundo método consiste em alterar a geometria da célula unitária deslocando um ou dois ressonadores, mas preservando os parâmetros individuais dos demais, ou seja, preservando suas frequências de ressonância (ver exemplos na Fig. 14c,d). A transição do quadrúmero de  $C_{4v}$  para simetria  $C_s$  leva a uma mudança na magnitude da interação dos modos de dipolo toroidal devido ao menor/maior distanciamento entre discos adjacentes, ou seja, devido à aproximação ou separação dos discos. Esse tipo de perturbação pode ser analisado qualitativamente. Nos quadrúmeros não perturbados, podemos considerar que o ressonador contendo o modo toroidal é um ressonador em forma de anel, onde seu comprimento  $L_0$  define o acoplamento dos ressonadores e, conseqüentemente, a frequência de ressonância  $\omega_0$ . Se  $L_0$  for alterado pela deformação do círculo devido à perturbação do quadrúmero, o acoplamento dos ressonadores também será alterado. Portanto, para uma pequena perturbação, pode-se definir a mudança relativa da frequência de ressonância  $\Delta\omega/\omega_0$  como aproximadamente proporcional à variação relativa do comprimento  $\Delta L/L_0$ . Em termos de perturbação  $\Delta s/s_d$ , onde  $\Delta s$  é o deslocamento do centro do disco e  $s_d$  é a distância entre o centro do disco não perturbado e o centro da célula unitária do quadrúmero (como definido na Fig. 14c), tem-se:

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_0} = \gamma\frac{\Delta s}{s_d}, \quad (3.4)$$

onde  $\gamma$  é uma constante. A partir dos resultados numéricos fornecidos na Fig. 19, estima-se que  $\gamma = 0,01$ . Uma análise numérica detalhada desses casos será apresentada nas seções posteriores. Observe que, na prática, uma combinação dos dois mecanismos discutidos acima para a quebra de simetria também pode ser aplicada à estrutura.

## 3.7 Possíveis simetrias e geometrias das supercélulas para excitação do modo toroidal

O maior grupo de simetria geométrica da supercélula unitária apresentada na Fig. 13, composta por quatro quadrúmeros, é o  $C_{4v}$ . Todos os subgrupos de  $C_{4v}$  são exibidos na Fig. 25, localizada no Apêndice C.

Exemplos de geometrias das supercélulas unitárias correspondentes ao grupo  $C_{4v}$  e aos seus subgrupos são apresentados na Fig. 15. Ressalta-se que, para algumas simetrias, as geometrias mostradas não são únicas. Em todos os exemplos ilustrados na Fig. 15, a perturbação da célula unitária da rede quadrada é realizada por apenas um disco (ver Fig. 14a,c). No entanto, também se pode considerar perturbações da célula unitária por dois discos, como ilustrado nas Fig. 14b,d.

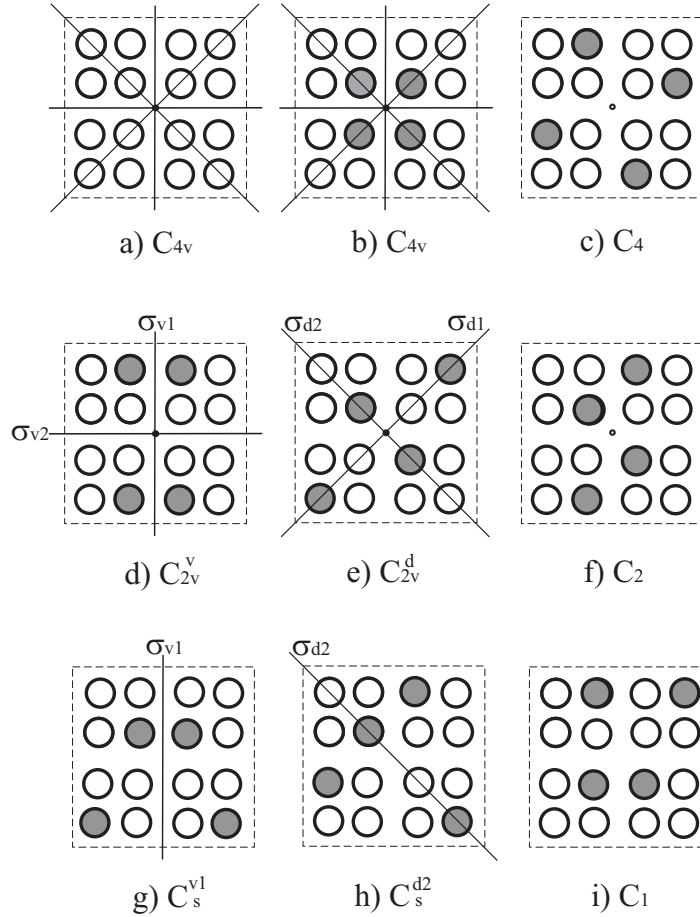


Figura 15 – Exemplos de geometrias que proporcionam tentativas de diferentes simetrias da supercélulas unitárias em um arranjo com quadrúmeros: a) Quadrúmeros não perturbados, grupo  $C_{4v}$ . Perturbação por um ressonador: b) grupo  $C_{4v}$ , c)  $C_{4v}$ , d)  $C_{2v}^v$ , e)  $C_{2v}^d$ , f)  $C_2$ , g)  $C_s^{v1}$ , h)  $C_s^{d2}$ , i)  $C_1$ . Discos perturbados são indicados por círculos preenchidos, as linhas denotam planos de simetria, pontos no centro da unidade supercélulas indicam eixos de simetria.

Agora, investigamos o problema das possíveis simetrias de supercélulas para os modos toroidais. Para simplificar a descrição do problema, não trabalharemos em termos de simetria dos momentos de dipolo magnético  $m_i$ , como no caso da célula unitária na seção anterior, mas em termos de simetria dos momentos toroidais  $T$  [77]. Vamos mostrar que algumas das supercélulas na Fig. 15 permitem a excitação dos modos TO e ATO.

Para que o campo  $\mathbf{T}$  seja excitado, a simetria espacial de seu campo associado deve ser compatível com a simetria do campo excitante  $\mathbf{H}$ . A simetria espacial no plano

do campo magnético  $\vec{H}$  da onda incidente corresponde ao grupo  $C_{2v}(C_s)$  [77]. A maior simetria espacial possível dos campos em uma supercélula quadrada é  $(C_{4v} + \mathcal{T}C_{4v})$ , a qual inclui o operador de reversão temporal  $\mathcal{T}$ . De acordo com o princípio de sobreposição de simetrias de Curie [80], a simetria máxima que o campo associado ao modo toroidal, gerado pelo campo  $\vec{H}$ , pode apresentar é dada pela interseção  $(C_{4v} + \mathcal{T}C_{4v}) \cap C_{2v}(C_s) = C_{2v}(C_s)$ , ou seja, a simetria do modo toroidal excitado coincide com a simetria do próprio campo excitante  $\mathbf{H}$ .

No entanto, ao analisar a Fig. 2, observa-se que tanto os modos TO quanto ATO possuem simetria de rotação dupla  $C_2$ . Por outro lado, o grupo  $C_{2v}(C_s)$  contém o elemento  $\mathcal{T}C_2$ , sendo esses dois elementos incompatíveis. Assim, os únicos elementos permitidos para a simetria do momento  $\mathbf{T}$ , no ambiente de uma supercélula quadrada, são  $\sigma$  e  $\mathcal{T}\sigma$ , cujos grupos correspondentes são  $C_s$  e  $C_s(C_1)$ . Na simetria  $C_{4v}$ , existem dois planos verticais  $\sigma_v$  e dois planos diagonais  $\sigma_d$ , sendo que qualquer um desses planos pode estar presente na simetria de  $\mathbf{T}$ .

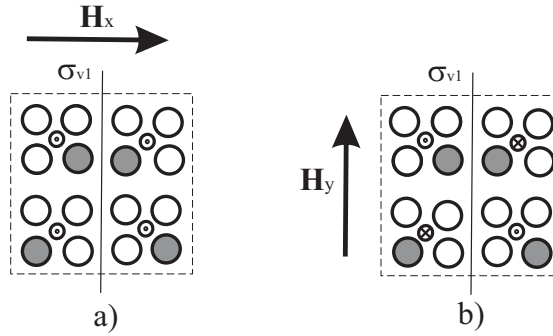


Figura 16 – Supercélula unitária com quadrúmeros descritos pelo grupo  $C_s^{v1}$ , plano de simetria  $\sigma_{v1}$ , para a excitação de a) modo TO, b) Modo ATO. Os círculos preenchidos denotam discos perturbados, os símbolos  $\odot$  e  $\otimes$  em quadrúmeros mostram a orientação de momento toroidal  $T$ , para cima e para baixo, respectivamente.  $H_x$  e  $H_y$  é a orientação do campo magnético da onda plana incidente.

### 3.8 Unidade de supercélula com simetrias $C_s^v$ e $C_s^d$

Analisando a degeneração de simetria apresentada na Tabela VI do Apêndice D, pode-se observar que o modo TO escuro, que pertence ao IRREP  $A_1$  na simetria  $C_{4v}$ , após a redução da simetria da supercélula, degenera no modo TO brilhante, que é modo de IRREP  $A$  de  $C_s^d$ , ou em modo brilhante TO de IRREP  $A$  dos  $C_s^v$ . O modo escuro ATO, pertencente ao IRREP  $B_2$  em simetria  $C_{4v}$ , após a redução da simetria, degenera em modo ATO brilhante de IRREP  $B$  de  $C_s^v$  ou em modo brilhante ATO pertencente ao IRREP  $A$  de  $C_s^d$ . Em outras palavras, as simetrias  $C_s^v$  e  $C_s^d$  permitem a excitação tanto dos modos

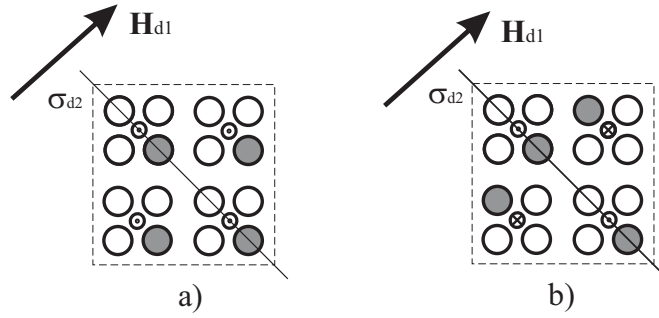


Figura 17 – Supercélula unitária com quadrúmeros descritos por grupo  $C_s^{d2}$ , plano de simetria  $\sigma_{d2}$ , para a excitação de a) modo TO, b) Modo ATO. Os círculos preenchidos denotam discos perturbados,  $\odot$  e  $\otimes$  em quadrúmeros mostram a orientação do momento toroidal  $T$ , para cima e para baixo, respectivamente.  $H_{d1}$  é a orientação do campo magnético da onda plana incidente.

TO quanto dos modos ATO. Isso é demonstrado nas Tabelas IV e V do Apêndice D. Exemplos de tais geometrias são apresentados nas Fig. 16 e Fig. 17.

Deve-se enfatizar que as regras de seleção fornecem restrições estritas em relação aos modos proibidos (modos protegidos pela simetria), mas não garantem a excitação dos modos permitidos. Ou seja, elas fornecem informações necessárias, mas não condições suficientes para a excitação de tais modos. Sua excitação depende ainda dos parâmetros físicos e geométricos da estrutura. Para identificar a ordem do modo sem cálculos numéricos, observando as supercélulas das Fig. 16 e Fig. 17, a simples regra geral sugerida em [77] pode ser usada. Usando essa regra, pode-se mostrar que as simetrias das supercélulas  $C_s$  permitem a excitação dos modos TO e ATO.

## 4 RESULTADOS NUMÉRICOS

Neste trabalho, investigamos novos arrays baseados em quadrúmeros, utilizando a aproximação dos momentos de dipolo magnético, métodos teóricos de grupo, teoria de representação de grupos, o Método SALC e a teoria de circuitos. Propomos uma nova abordagem para metasuperfícies dielétricas, com supercélulas unitárias formadas por quatro quadrúmeros dispostos em um arranjo quadrado. De maneira geral, discutimos as condições para a excitação do modo toroidal e propomos maneiras de acessar esses modos por meio de uma onda incidente normalmente com polarização linear.

Nesta seção, apresentamos os resultados obtidos por simulações numéricas utilizando o software comercial *COMSOL Multiphysics*<sup>®</sup>, que emprega um solucionador de campos eletromagnéticos baseado no método dos elementos finitos (*Finite Element Method*). As condições de contorno aplicadas aos quatro lados laterais das supercélulas unitárias são do tipo *Floquet*. As condições de contorno *Floquet* são utilizadas para modelar estruturas periódicas, permitindo que as bordas de uma célula unitária sejam tratadas como se estivessem conectadas a outras células idênticas, simulando, assim, um arranjo periódico infinito. Essa abordagem é essencial para representar corretamente a propagação de ondas em estruturas periódicas, como as metasuperfícies, no plano  $xy$ .

Investigamos as metasuperfícies com foco nas frequências em torno de 20 GHz, uma vez que essa faixa de frequência pode ser reproduzida experimentalmente em trabalhos futuros. Ela se encontra na região de micro-ondas da banda-K, que tem atraído grande atenção devido às suas aplicações em comunicações 5G. Além disso, essa faixa de frequência oferece uma ampla gama de experimentos que podem ser facilmente realizados.

Para os cálculos numéricos, o dielétrico escolhido é caracterizado pela permissividade relativa  $\varepsilon_d = 24,5$ . O diâmetro do disco é  $D = 2r_d = 3$  mm, e sua altura é  $h_d = 1,9$  mm. Esses valores e dimensões são típicos de ressonadores cerâmicos comercialmente disponíveis no mercado. A frequência de ressonância do modo dipolo magnético do disco isolado, com esses parâmetros, ocorre para  $\lambda/D = 4,56$ , o que corresponde a uma frequência de  $f = 21,89$  GHz.

A distância entre os centros de dois discos adjacentes é  $a_d = 4,2$  mm, e o lado da célula unitária quadrada é  $p = 10$  mm. O período da supercélula é  $2p$ . Para fins experimentais, os discos são imersos em um estrato com baixa permissividade,  $\varepsilon_s = 1,3$  (por exemplo, espuma de baixa permissividade), cuja espessura é  $h_s = 4$  mm, conforme ilustrado na Fig. 12.

Salienta-se que a análise foi realizada considerando materiais sem perdas, uma vez que o foco da pesquisa está nas propriedades fundamentais dos modos TO/ATO e na

validade das regras para sua excitação no quadrúmero investigado. Como consequência, os fatores  $Q$  calculados na Fig. 19 tendem ao infinito no ponto em que a simetria é restaurada, devido às perdas radiativas extremamente pequenas do sistema.

Entretanto, em um cenário real, o fator  $Q$  máximo alcançável é limitado por mecanismos de perda não radiativa, como absorção e imperfeições de fabricação. Vale ressaltar que o material cerâmico utilizado nos ressonadores, que compõem o bloco de construção das metasuperfícies propostas, apresenta uma absorção muito baixa, caracterizada por uma tangente de perda  $\tan \delta < 10^{-4}$  no espectro de micro-ondas investigado (Exxelia, série E7000).

Uma investigação detalhada dos efeitos das perdas nos fatores  $Q$  das ressonâncias quase-escuras TO/ATO será apresentada posteriormente.

## 4.1 Automodos toroidais em quadrúmeros não perturbados

Em primeiro lugar, foram calculados os automodos toroidais que podem existir em uma metasuperfície de referência composta por quadrúmeros e supercélulas sem perturbações, ou seja, em um arranjo com simetria  $C_{4v}$  tanto para o quadrúmero quanto para a supercélula. As perdas de material nos discos e no substrato foram desconsideradas nessas simulações.

Em cada quadrúmero, o campo magnético gera um padrão circular no plano  $xy$ , resultando em um momento de dipolo toroidal  $\mathbf{T}$  orientado ao longo do eixo  $z$ . Foram analisados dois automodos específicos, correspondentes às orientações paralela e antiparalela dos momentos de dipolo toroidal, conforme ilustrado nas Fig. 18b,c, calculados por meio da análise de autofrequência no módulo RF do COMSOL. O espectro de transmissão da metasuperfície foi obtido por simulações de onda completa (full-wave) e está apresentado na Fig. 18a. Os resultados são expressos em termos do comprimento de onda ressonante  $\lambda$  normalizado pelo diâmetro  $D$ . O comprimento de onda ressonante do modo TO é  $\lambda/D = 4,90$  ( $f = 20,39$  GHz), enquanto o do modo ATO é  $\lambda/D = 5,43$  ( $f = 18,39$  GHz).

As soluções de autofrequência confirmam que, no arranjo periódico do quadrúmero estudado, coexistem os modos TO e ATO. A frequência de ressonância do modo ATO é inferior à do modo TO. No entanto, a elevada simetria da estrutura impõe restrições específicas à matriz do campo eletromagnético, resultando em um espectro de transmissão limpo, sem manifestação observável dos modos TO/ATO.

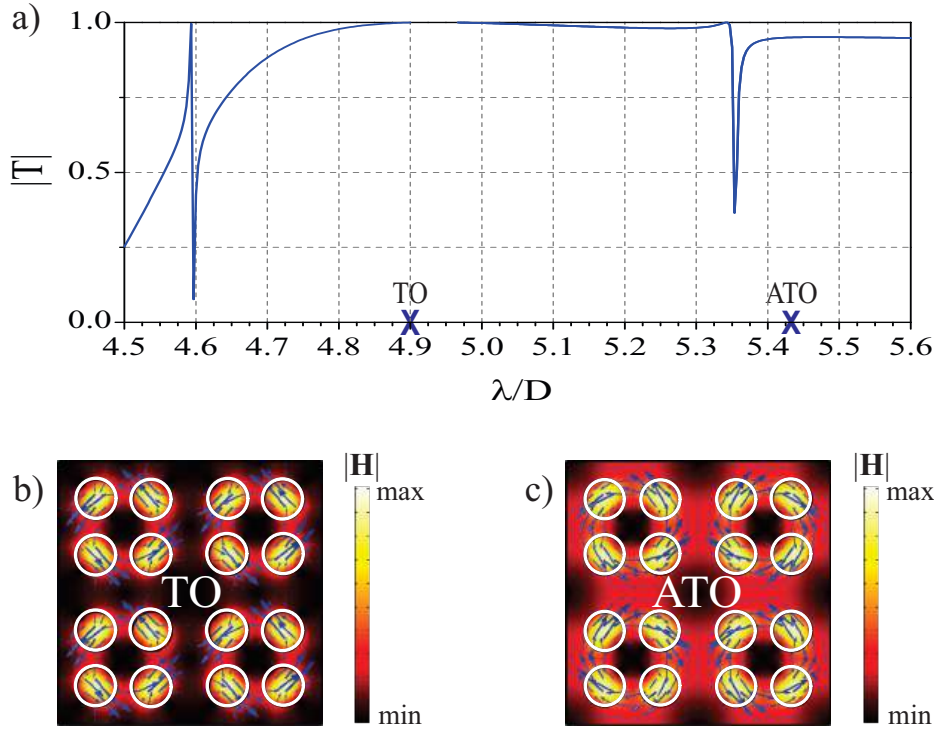


Figura 18 – a) Espectro de transmissão da metasuperfície com supercélula e quadrúmero não perturbado. b) A estrutura do dark TO e c) do modo dark ATO, calculado em simulações pelas autofrequência. Os parâmetros materiais e geométricos das metasuperfícies são  $\varepsilon_d = 24,5$ ,  $\varepsilon_s = 1,3$ ,  $h_d/D = 0,633$ ,  $a_d/D = 1,4$ ,  $p/D = 3,333$ .

## 4.2 Análise de perturbações

Em seguida, investigou-se o efeito da introdução de perturbações nas metasuperfícies, conforme discutido nas estruturas apresentadas na Fig. 14. A quebra da simetria  $C_{4v}$  transforma os modos TO e ATO, originalmente escuros, em modos quase escuros, resultando, portanto, em fatores  $Q$  finitos. Esses valores diminuem de acordo com a lei do inverso do quadrado à medida que o parâmetro de assimetria aumenta [69], como demonstrado pelos resultados na Fig. 19.

Observa-se que o comprimento de onda ressonante se desloca para valores mais altos no caso de um aumento de  $h_d$  ou  $\varepsilon_d$ , uma vez que o volume elétrico do disco cresce em ambos os casos. Por outro lado, o comprimento de onda ressonante diminui para deslocamentos positivos  $s_d > 0$  (como ilustrado na Fig. 19a), os quais aumentam o comprimento de acoplamento entre os discos no quadrúmero.

Para pequenos valores do parâmetro de assimetria, essas dependências apresentam um comportamento aproximadamente linear. Além disso, verifica-se que a variação no comprimento de onda é praticamente o dobro no caso em que duas perturbações são aplicadas aos discos (ver Fig. 19b e 19c), o que está em concordância com as análises apresentadas no Capítulo 3.

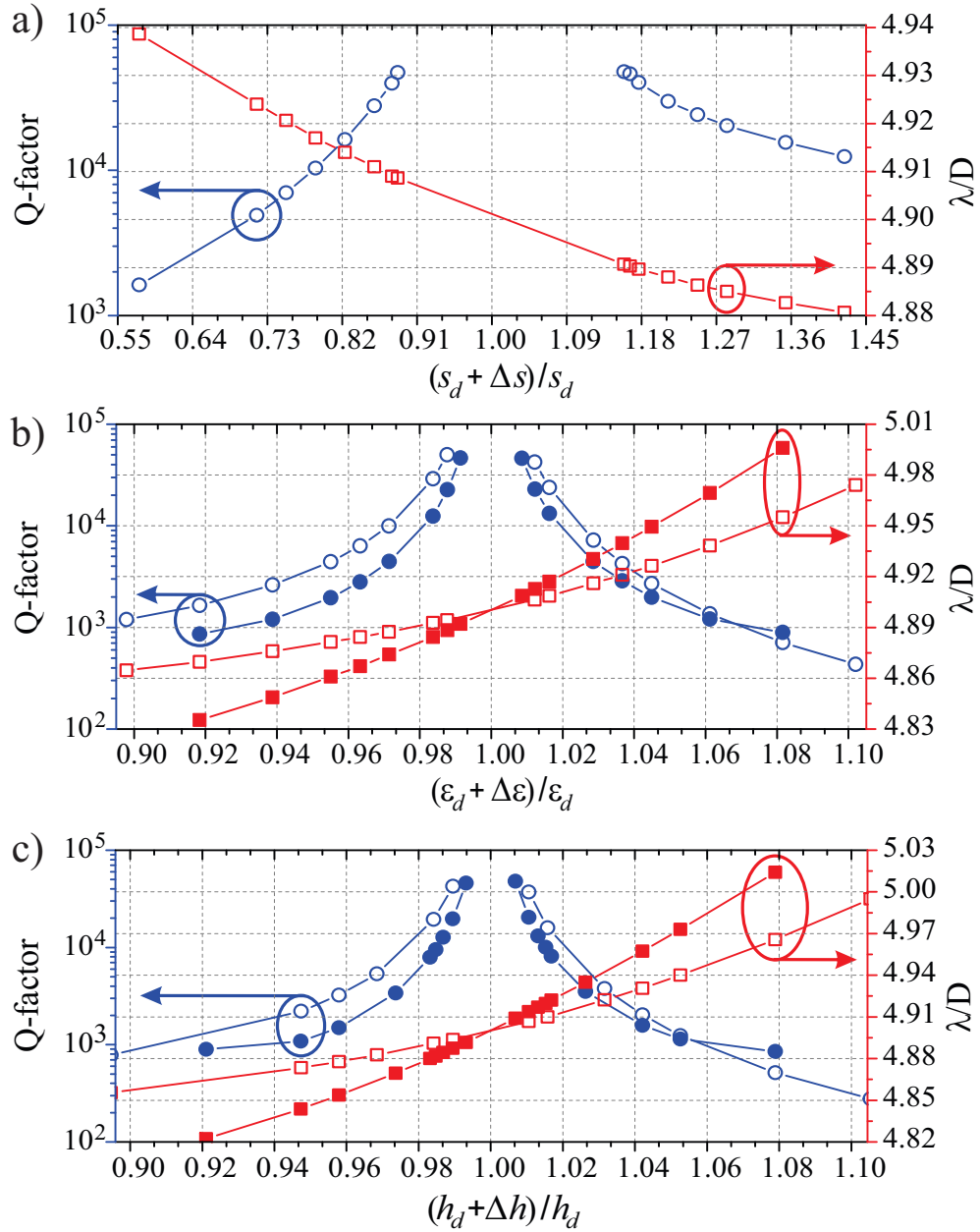


Figura 19 – Evolução do fator de qualidade (curva azul) e comprimento de onda ressonante normalizado (curva vermelha) do modo TO conforme as funções do parâmetro de simetria para perturbação por disco único (círculos e quadrados vazios) e dois discos (cheios círculos e quadrados) de quadrúmeros. a) Perturbação por deslocamento, é o caso mostrado na 14c. b) Perturbação por permissividade  $\theta_\varepsilon = (\varepsilon_d + \Delta\varepsilon)/\varepsilon_d$  c) perturbação por altura  $\theta_h = (h_d + \Delta h)/h_d$ , ambos os casos de perturbação da Fig. 14a e Fig. 14b.

A seguir, investigaram-se diferentes exemplos de metasuperfícies que suportam modos TO e ATO, com base nas estruturas apresentadas nas Fig. 16 e 17. É interessante notar que a estrutura da Fig. 16, que possui um plano vertical de simetria  $\sigma_{v1}$ , permite o acoplamento ao modo TO quando submetida a um campo magnético incidente polarizado na direção  $x$ , ou seja, com componente  $H_x$ . No entanto, quando o campo é na direção  $H_y$ , o modo ATO é excitado na mesma estrutura.

Duas outras variantes estruturais, contendo planos de simetria, são mostradas na Fig. 17. Nesses casos, a simetria permanece  $C_s$ , mas com a orientação diagonal do plano de simetria  $\sigma_{d2}$ . Nessas configurações, os modos TO e ATO podem ser excitados sob a mesma orientação do campo magnético incidente,  $H_{d1}$ , mas em geometrias distintas da estrutura. Observa-se, ainda, que o campo magnético ortogonal  $H_{d2}$  não excita essas supercélulas.

Os resultados apresentados estão em concordância com a análise teórica de grupo, baseada na degeneração de simetria apresentada na Tabela VI, bem como nas Tabelas IV e V. Dessa forma, conclui-se que as orientações vertical e diagonal dos planos de simetria resultam em comportamentos fundamentalmente distintos na excitação dos modos TO e ATO.

### 4.3 Análise da estrutura de campo dos modos TO e ATO em arrays com simetria da supercélula $C_s^v$ e $C_s^d$

Os mapas de cores apresentados nas Figs. 20–23 mostram a magnitude total dos campos elétrico  $|\mathbf{E}|$  e magnético  $|\mathbf{H}|$ , normalizados pelas amplitudes da onda incidente  $|\mathbf{E}_0|$  e  $|\mathbf{H}_0|$ , respectivamente, no interior da supercélula unitária das metasuperfícies, considerando diferentes planos a partir do plano médio dos discos ( $z = 0$ ). Deve-se enfatizar que os resultados de intensificação de campo mostrados nessas figuras, expressos pelos fatores  $|\mathbf{E}|/|\mathbf{E}_0|$  e  $|\mathbf{H}|/|\mathbf{H}_0|$ , não fornecem informações sobre as fases dos campos na supercélula, as quais são significativamente distintas entre os modos TO e ATO (vide comparação entre a Fig. 2a e a Fig. 2b).

Os modos ressonantes TO e ATO apresentam distribuições espaciais características dos campos elétrico e magnético no plano  $xy$ . Observa-se a alternância de regiões com alta intensidade de campo (pontos quentes) e baixa intensidade de campo (pontos frios). Essas distribuições complexas resultam em um grande contraste de cores, influenciado tanto pela orientação do plano de simetria quanto pela geometria da célula unitária.

Os mapas apresentados nas Figs. 20 e 21, correspondentes ao plano vertical de simetria, e nas Figs. 22 e 23, associadas à simetria diagonal, mostram padrões semelhantes. No entanto, verificam-se diferenças na estrutura fina dos campos próximos, atribuídas às diferentes posições dos discos perturbados.

A intensidade dos campos nos pontos quentes pode exceder significativamente a da onda incidente. O contraste entre os campos nas regiões de pontos quentes e frios depende diretamente do fator  $Q$  da ressonância do modo toroidal e, conseqüentemente, do valor do parâmetro de assimetria. Nos resultados apresentados, esses parâmetros foram  $\theta_s = 0,57$  e  $\theta_h = 1,05$  para os casos investigados nas Figs. 20 e 21, respectivamente.

Os pontos quentes de campo magnético nas regiões entre os discos em uma célula

unitária são intensificados devido à superposição dos campos gerados pelos quadrúmeros vizinhos. Por sua vez, o campo elétrico se concentra na região central de cada quadrúmero. Nota-se também uma diferença na distribuição ao longo de  $z$  dos campos para os modos TO e ATO. A máxima intensidade do campo magnético ocorre no plano intermediário dos discos, em  $z = 0$ , para ambos os modos.

No caso do modo ATO, o máximo do campo elétrico encontra-se deslocado em uma camada situada em  $\Delta z = (h_z/2\nabla \cdot h_s)$  acima dos discos. A análise revela, ainda, que em função da orientação antiparalela dos momentos toroidais  $\mathbf{T}$  o modo ATO apresenta, em geral, um fator  $Q$  mais elevado e, conseqüentemente, menores perdas radiativas em comparação com o modo TO.

## 4.4 Discussão

Uma grande variedade de propriedades de materiais em moléculas e na física do estado sólido é determinada pela possibilidade de átomos simples se combinarem em estruturas mais complexas. No caso em questão, é possível fazer uma analogia com esses sistemas, onde a complexidade átomo-molécula-supermolécula se expande, levando ao surgimento de novas propriedades nos cristais e sistemas de estado sólido. O aumento da complexidade na sequência disco-quadrúmero-supercélula de quatro quadrúmeros também gera esse efeito.

Partindo da ressonância dipolar magnética de um disco dielétrico isolado (átomo), foi mostrado que uma combinação simples de discos interativos dispostos em um arranjo quadrado (quadrúmero) pode gerar o modo TO. No entanto, uma estrutura complexa composta por quatro quadrúmeros (supermolécula) com simetria  $C_s$  pode gerar, além do modo TO, também o modo ATO, com uma estrutura de campo próximo substancialmente diferente.

Em trabalhos anteriores [65] e [55], observou-se que a combinação de seis trímeros organizados em uma estrutura hexagonal também pode levar à excitação dos modos TO e ATO. Os resultados teóricos nesses artigos foram validados por experimentos.

A análise apresentada mostra que uma simples alteração na posição de alguns discos, na modificação de seus parâmetros ou na polarização do campo incidente pode transformar o modo TO no modo ATO, resultando em uma estrutura de campo próximo distinta.

Essa diferença nas propriedades dos modos TO e ATO pode ser utilizada para produzir componentes ópticos com novas funcionalidades, conforme sugerido em [55]. Portanto, trata-se de um método altamente flexível para o design de metasuperfícies, permitindo alcançar diferentes modos toroidais e outros modos além deles.

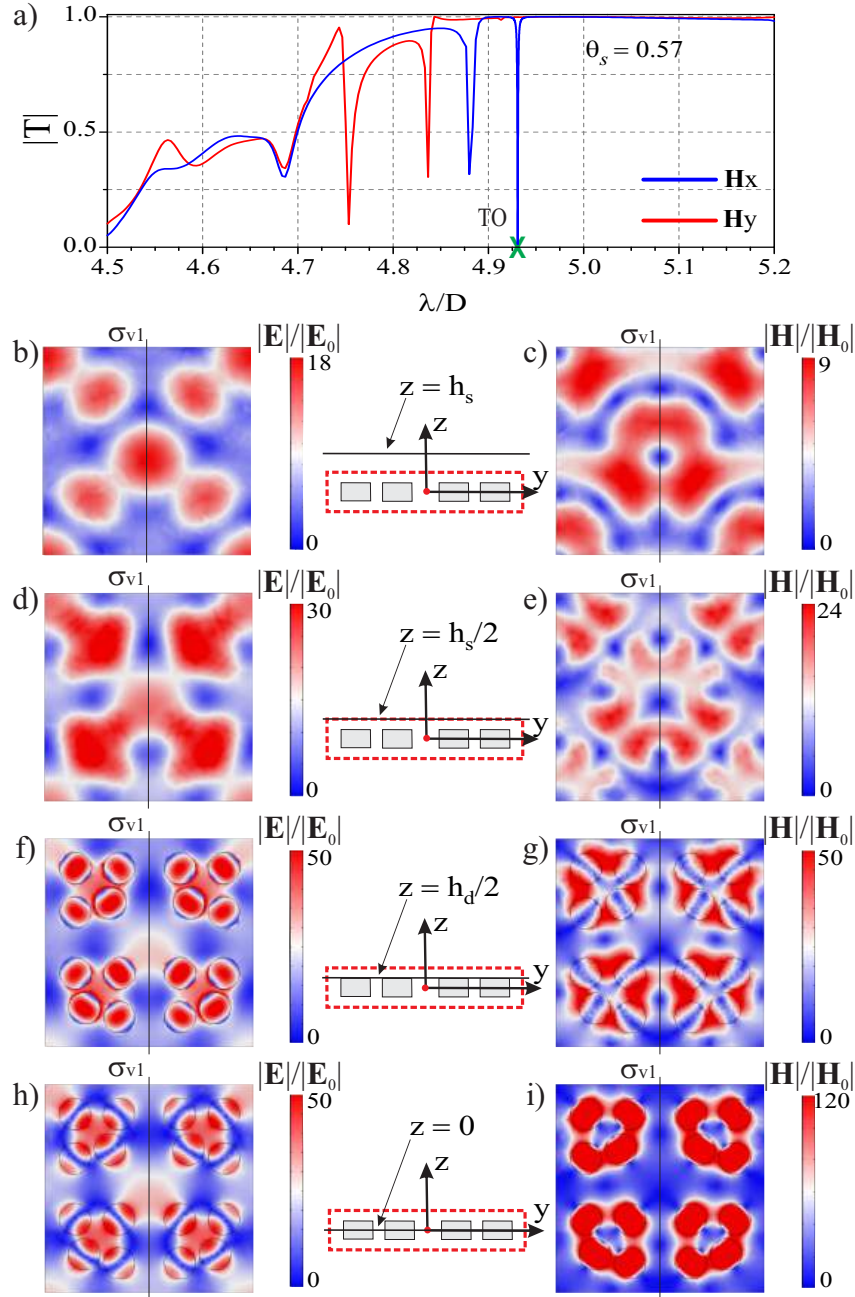


Figura 20 – a) Espectro de transmissão da metasuperfície com unidade da supercélula mostrada na Fig. 16 excitada pelo campo  $H_x$  (curvas azuis) e campo  $H_y$  (curvas vermelhas), onde os quadrúmeros são perturbados por um deslocamento do ressonador; b)-i) mapas coloridos apresentando as campos elétricos e magnéticos normalizados do modo TO nos planos  $z = 0$ ,  $z = h_d/2$ ,  $z = h_s/2$  e  $z = h_s$ .

Uma das vantagens dos modos toroidais, em relação às ressonâncias fundamentais de ressonadores dielétricos individuais, é a localização dos pontos de máxima intensidade dos campos elétricos e magnéticos fora dos ressonadores. Outra vantagem é o elevado número de parâmetros independentes disponíveis no sistema, os quais podem ser explorados para controlar suas propriedades.

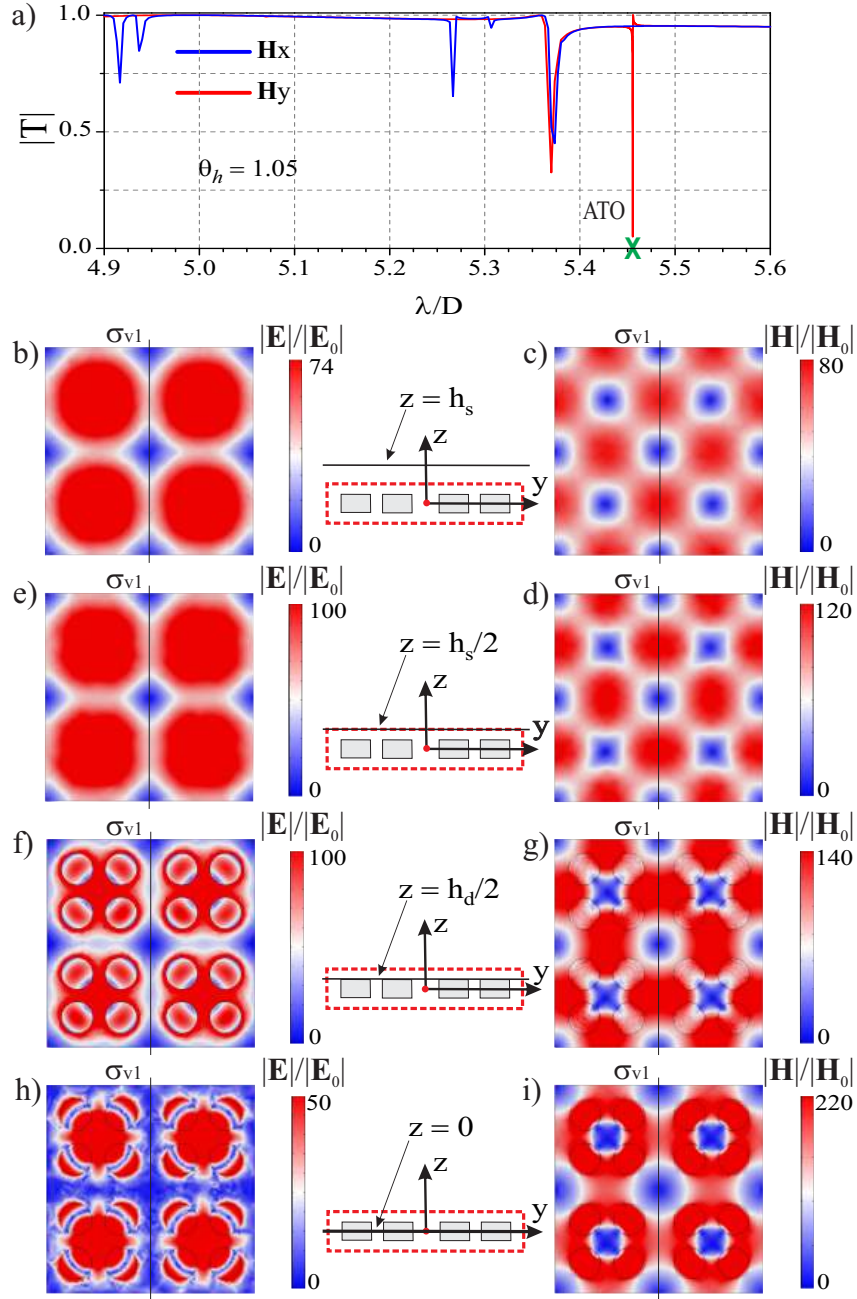


Figura 21 – a) Espectro de transmissão da metasuperfície com supercélula unitária mostrada na Fig. 16 excitada pelo campo  $H_x$  (azul curvas) e campo  $H_y$  (curvas vermelhas), os quadrúmeros são perturbados alterando a altura de um ressonador; b) mapas coloridos apresentando os campos elétricos e magnéticos normalizados do modo ATO nos planos  $z = 0$ ,  $z = h_d/2$ ,  $z = h_s/2$  e  $z = h_s$ .

O espaço multidimensional de parâmetros facilita o processo de otimização dessas metasuperfícies, permitindo a obtenção de ressonâncias com alto fator de qualidade ( $Q$ ). Conseqüentemente, isso promove um forte aprimoramento do campo local e da interação luz-matéria, tornando essas estruturas adequadas para aplicações em filtragem, detecção, fenômenos não lineares e *lasers*. As metasuperfícies discutidas, que apresentam ressonâncias do tipo *TO* e *ATO*, podem, por exemplo, funcionar como filtros com forte dependência da

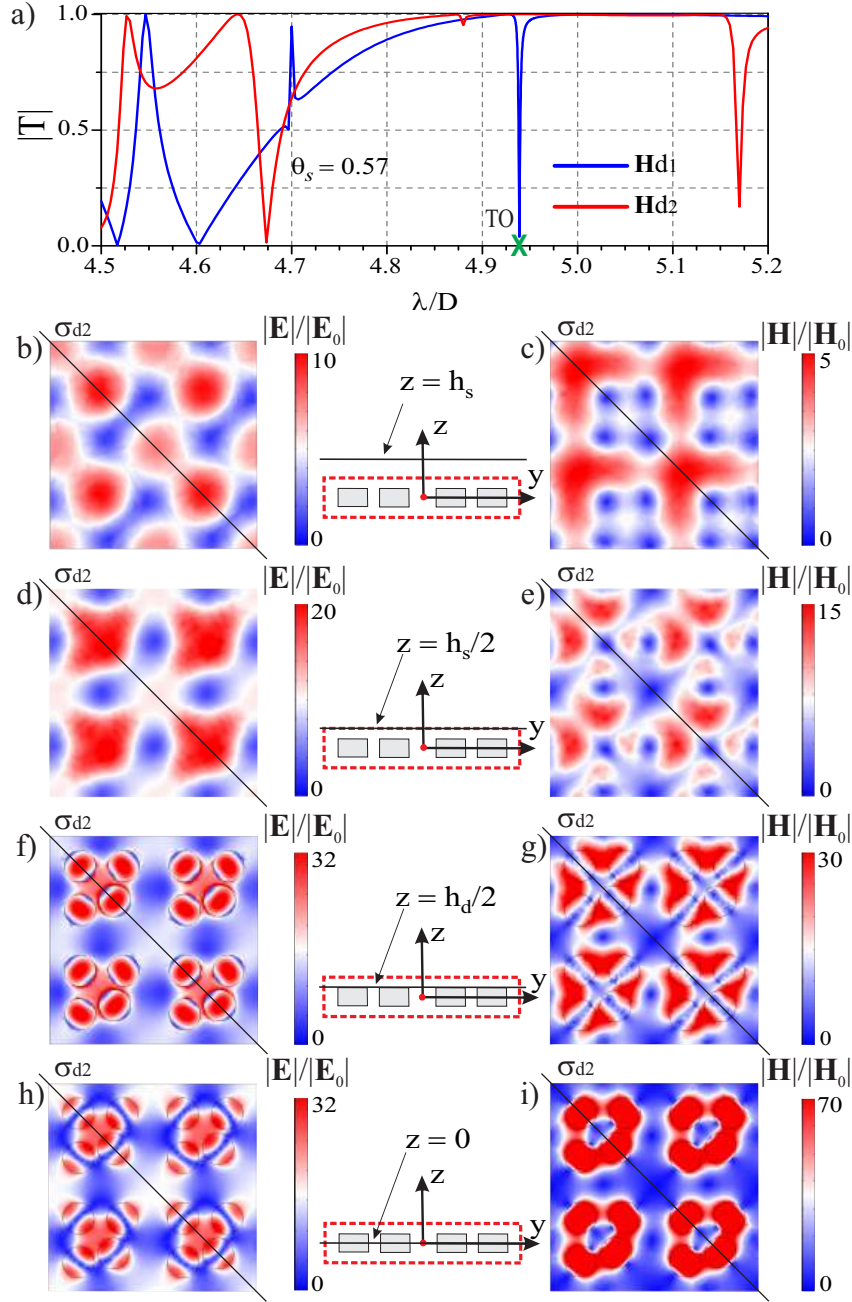


Figura 22 – a) Espectro de transmissão da metasuperfície com supercélula unitária mostrada na Fig. 17 excitada pelo campo  $H_{d1}$  (azul curvas) e campo  $H_{d2}$  (curvas vermelhas), os quadrúmeros são perturbados alterando a altura de um ressonador; b) mapas coloridos apresentando os campos elétricos e magnéticos normalizados do modo TO nos planos  $z = 0$ ,  $z = h_d/2$ ,  $z = h_s/2$  e  $z = h_s$ .

polarização.

Adicionalmente, pode-se sugerir outras aplicações potenciais para metasuperfícies compostas por quadrúmeros na região do infravermelho. Caso o índice de refração dos discos, de valor 3.5, seja suficientemente elevado para sustentar modos TO/ATO em metasuperfícies fabricadas a partir de  $Si$ ,  $Ge$  ou  $GaAs$ , essas estruturas poderão ser utilizadas para a geração de segunda e terceira harmônicas, ou ainda para aumentar a

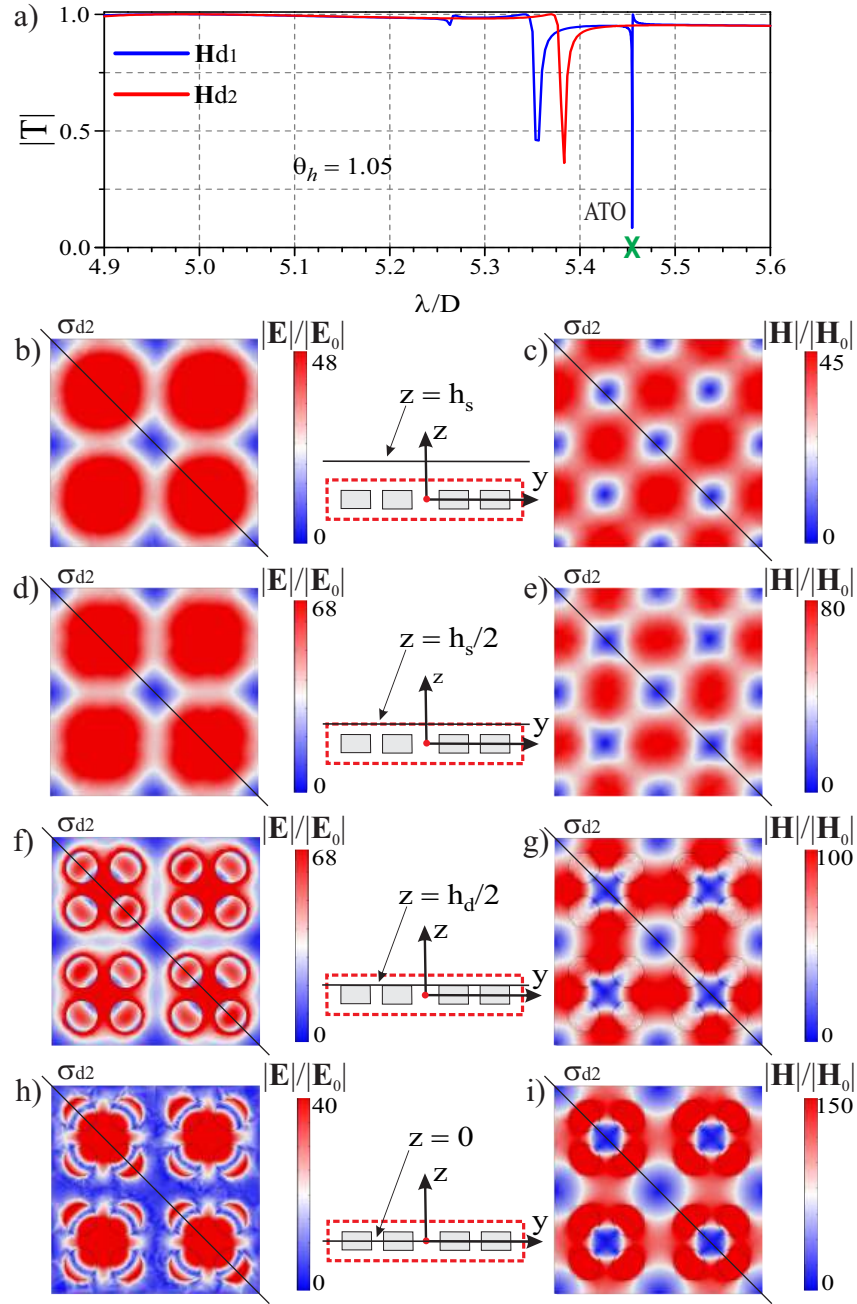


Figura 23 – a) Espectro de transmissão da metasuperfície com supercélula unitária mostrada na Fig. 17 excitada pelo campo  $H_{d1}$  (azul curvas) e campo  $H_{d2}$  (curvas vermelhas), os quadrúmeros são perturbados alterando a altura de um ressonador; b) mapas coloridos apresentando os campos elétricos e magnéticos normalizados do modo ATO nos planos  $z = 0$ ,  $z = h_d/2$ ,  $z = h_s/2$  e  $z = h_s$ .

emissão de luz por meio da integração de pontos quânticos nos discos.

Nossa análise mostrou que, para o mesmo valor de perturbação, o modo ATO apresenta um fator  $Q$  significativamente maior em comparação com o modo TO. Além disso, a distribuição do campo elétrico deste modo é preservada no espaço acima da metasuperfície. Nessa região, caracterizada por alta intensidade de campo elétrico (ver Fig. 21 e Fig. 23), é possível posicionar uma sobreposição planar com elementos ativos ou

não lineares, aproveitando a interação luz-matéria, que é intensificada. Essa configuração também pode ser utilizada para sintonizar "externamente" a frequência de ressonância do modo ATO ou, em uma abordagem complementar, para detecção refratométrica.

# Conclusão

Sugerimos e investigamos uma nova classe de metasuperfícies dielétricas, nas quais cada supercélula dessas estruturas periódicas é composta por quatro quadrúmeros. Cada quadrúmero é constituído por quatro discos dielétricos de alta permissividade, dispostos de maneira a conferir à estrutura uma série de propriedades eletromagnéticas distintas. Durante o estudo, demonstramos que essas metasuperfícies têm a capacidade de suportar dois modos simétricos fundamentais: o modo TO e o modo ATO.

A caracterização desses modos foi realizada por meio de uma abordagem teórica, utilizando a teoria de grupos magnéticos para definir as simetrias possíveis das supercélulas. Esta análise permitiu compreender como as simetrias geométricas específicas influenciam as interações entre as ondas eletromagnéticas e as metasuperfícies, possibilitando a excitação dos modos TO e ATO. A teoria de grupos foi essencial para a identificação das operações simétricas nas supercélulas, oferecendo uma estrutura matemática robusta para descrever a excitação desses modos e permitindo prever as geometrias mais eficazes para essa excitação.

Para investigar as propriedades dessas estruturas, empregamos o método de combinação linear adaptado à simetria, com o objetivo de definir os automodos possíveis em um quadrúmero quadrado. Este método foi fundamental para entender como o modo ressonante dipolar magnético pode ser manipulado, aproveitando as simetrias geométricas específicas do quadrúmero. Como parte do desenvolvimento teórico, discutimos diferentes técnicas de excitação dos modos TO e ATO, com destaque para o papel da quebra de simetria nas supercélulas, que é um fator crucial para a geração desses modos. A teoria de circuitos foi aplicada para modelar essas excitações, fornecendo uma visão aprofundada sobre as interações eletromagnéticas nas metasuperfícies.

Além da parte teórica, as abordagens desenvolvidas foram validadas por meio de simulações numéricas de onda completa (*Full-Wave*), que se mostraram consistentes com as previsões feitas pelo modelo teórico. Os resultados das simulações confirmaram que, utilizando a simetria geométrica  $C_s$ , é possível excitar os modos TO e ATO nas metasuperfícies propostas, o que valida a eficácia dos métodos teóricos empregados. As simulações numéricas também possibilitaram uma análise detalhada das características de dispersão dessas metasuperfícies, oferecendo insights adicionais sobre o comportamento dinâmico dos campos eletromagnéticos em presença dessas estruturas.

As metasuperfícies dielétricas compostas por quadrúmeros, como demonstrado neste trabalho, possuem um alto potencial para aplicações práticas. As estruturas propostas são caracterizadas por uma interação luz-matéria aprimorada, resultante no confinamento temporal da luz dentro das supercélulas. Esse confinamento pode levar a efeitos ópticos

inéditos, como ressonâncias aprimoradas e aumento da eficiência de conversão de energia. Como resultado, essas metasuperfícies podem ser aplicadas em uma ampla gama de tecnologias emergentes, como sensores químicos e biológicos, dispositivos emissores de luz, e no desenvolvimento de novas tecnologias de laser, especialmente aquelas voltadas para sistemas de alta precisão e sensibilidade.

Portanto, o trabalho realizado neste estudo abre novos caminhos para o design de metasuperfícies dielétricas com propriedades ópticas controláveis e específicas. A análise dos modos TO e ATO, com base em simetrias geométricas bem definidas, proporciona uma plataforma sólida para o desenvolvimento de novos dispositivos optoeletrônicos, além de contribuir significativamente para a compreensão fundamental de como a simetria pode influenciar as propriedades de metasuperfícies. As perspectivas futuras incluem a exploração de outras simetrias geométricas, bem como a aplicação prática dessas estruturas em diversas áreas da tecnologia, incluindo telecomunicações, óptica não linear e fotônica em geral.

## Trabalhos futuros

Como proposta para trabalhos futuros, sugerimos:

- Otimização geométrica e análise numérica de materiais dielétricos, que possam trabalhar na região THz;
- Desenvolvimento da teoria de modos acoplados temporal para o estudo de modos toroidais em metamateriais;
- Combinação de metamateriais com materiais 2D (e.g. grafeno, fosforeno) para 23 ativação de modos escuros, sem a necessidade de quebra de simetria;
- Tentar validar experimentalmente os dispositivos apresentados neste trabalho.

## Frutos deste trabalho

O presente trabalho gerou:

✓ Publicação de Artigo

- DMITRIEV, V.; ZOGRAFOPOULOS, D.; SANTOS, S. D. S.; DA SILVA BARROS, G. F. Flat metasurfaces with square supercells of 2x2 dielectric disk quadrupoles: tailoring the fine structure of toroidal mode local field. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1088/1361-6463/ac5190>

Journal of Physics D: Applied Physics (Qualis A2) Fator de Impacto 3.1

## Referências

- [1] SINGH, S.; WANG, C.; TONG, L.; ZHANG, Z. Metamaterial electromagnetic wave absorbers and devices: Design and 3D microarchitecture. *Journal of Materials Science & Technology*, v. 96, p. 14–22, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2021.07.055>. Citado na página 22.
- [2] ALICI, K. B.; ÖZBAY, E. Radiation properties of a split ring resonator and monopole composite. *Physica Status Solidi (B): Basic Research*, v. 244, n. 4, p. 11921196, 2007. DOI: <https://doi.org/10.1002/pssb.200674505>. Citado na página 22.
- [3] ENOCH, S.; TAYEB, G.; SABOUROUX, P.; GUÉRIN, N.; VINCENT, P. A metamaterial for directive emission. *Physical Review Letters*, v. 89, n. 21, p. 213902, 18 nov. 2002. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.89.213902>. Nenhuma citação no texto.
- [4] LANDY, S. A.; SAJUYIGBE, N. I.; MOCK, S.; SMITH, D. R.; PADILLA, W. J. Perfect metamaterial absorber. *Physical Review Letters*, v. 100, n. 20, p. 207402, 2008. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.207402>. Nenhuma citação no texto.
- [5] LI, W.; VALENTINE, J. Metamaterial perfect absorber based hot electron photodetection. *Nano Letters*, v. 14, n. 6, p. 3510-3514, 2014. DOI: <https://doi.org/10.1021/nl501090w>. Nenhuma citação no texto.
- [6] HAO, J.; WANG, J.; LIU, X.; PADILLA, W. J.; ZHOU, L.; QIU, M. High performance optical absorber based on a plasmonic metamaterial. *Applied Physics Letters*, v. 96, n. 25, p. 251104, 2010. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.3442904>. Nenhuma citação no texto.
- [7] PENDRY, J. B. Negative refraction makes a perfect lens. *Physical Review Letters*, v. 85, n. 18, p. 39663969, 2000. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.85.3966>. Nenhuma citação no texto.
- [8] FANG, N.; LEE, H.; SUN, C.; ZHANG, X. Sub-diffraction-limited optical imaging with a silver superlens. *Science*, v. 308, n. 5721, p. 534537, 2005. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.1108759>. Nenhuma citação no texto.
- [9] SCHURIG, D.; MOCK, J. J.; JUSTICE, B. J.; CUMMER, S. A.; PENDRY, J. B.; STARR, A. F.; SMITH, D. R. Metamaterial electromagnetic cloak at microwave frequencies. *Science*, v. 314, n. 5801, p. 977-980, 2006. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.1133628>. Nenhuma citação no texto.

- [10] MODI, A. Y.; BALANIS, C. A.; BIRTCHER, C. R.; SHAMAN, H. N. Novel design of ultrabroadband radar cross section reduction surfaces using artificial magnetic conductors. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, v. 65, n. 10, p. 54065417, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1109/TAP.2017.2734069>.
- [11] LI, A.; SINGH, S.; SIEVENPIPER, D. Metasurfaces and their applications. *Nanophotonics*, v. 7, n. 6, p. 9891011, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1515/nanoph-2017-0120>. Citado na página 22.
- [12] ACHOURI, K.; LAVIGNE, G.; SALEM, M. A.; CALOZ, C. Metasurface spatial processor for electromagnetic remote control. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, v. 64, n. 5, p. 17591767, 2016. DOI: <https://doi.org/10.1109/TAP.2016.2537369>. Citado na página 22.
- [13] GRIFFITHS, D. J. *Introdução à Eletrodinâmica*. São Paulo: Pearson Education do Brasil, 1999. Citado na página 22.
- [14] JOANNOPOULOS, J. D.; JOHNSON, S. G.; WINN, J. N.; MEADE, R. D. *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light*. [S.l.]: Princeton University Press, 2008. Citado na página 24.
- [15] AHMADIVAND, A.; GERISLIOGLU, B.; AHUJA, R.; MISHRA, Y. K. Toroidal metaphotonics and metadevices. *Laser & Photonics Reviews*, v. 14, n. 11, p. 1900326, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1002/lpor.201900326>. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 25.
- [16] PAVLOV, N.; STENISHCHEV, I.; OSPANOVA, A.; BELOV, P.; KAPITANOVA, P.; BASHARIN, A. Toroidal dipole mode observation in situ. *physica status solidi (b)*, v. 257, n. 3, p. 1900406, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1002/pssb.201900406>. Citado na página 26.
- [17] QIU, C.-W.; ZHANG, T.; HU, G.; KIVSHAR, Y. Quo vadis, metasurfaces?. *Nano Letters*, v. 21, n. 13, p. 54615474, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.1c00828>. Citado na página 26.
- [18] DUBOVİK, V. M.; TUGUSHEV, V. V. Toroid moments in electrodynamics and solid-state physics. *Physics Reports*, v. 187, n. 4, p. 145202, 1990. DOI: [https://doi.org/10.1016/0370-1573\(90\)90042-Z](https://doi.org/10.1016/0370-1573(90)90042-Z). Citado na página 26.  
Citado 2 vezes nas páginas 26 e 28.
- [19] PAPASIMAKIS, N.; FEDOTOV, V. A.; SAVINOV, V.; RAYBOULD, T. A.; ZHELUDEV, N. I. Electromagnetic toroidal excitations in matter and free space. *Nature Materials*, v. 15, n. 3, p. 263271, 2016. DOI: <https://doi.org/10.1038/nmat4563>. Nenhuma citação no texto.

- [20] TALEBI, N.; GUO, S.; VAN AKEN, P. A. Theory and applications of toroidal moments in electrodynamics: their emergence, characteristics, and technological relevance. *Nanophotonics*, v. 7, n. 1, p. 93110, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1515/nanoph-2017-0017>. Citado na página 27.
- [21] GUPTA, M.; SINGH, R. Toroidal metasurfaces in a 2D flatland. *Reviews in Physics*, v. 5, p. 100040, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.revip.2020.100040>. Citado na página 26.
- [22] KHARDIKOV, V. V.; IARKO, E. O.; PROSVIRNIN, S. L. A giant red shift and enhancement of the light confinement in a planar array of dielectric bars. *Journal of Optics*, v. 14, n. 3, p. 035103, 2012. DOI: <https://doi.org/10.1088/2040-8978/14/3/035103>. Citado na página 26.
- [23] HE, Y.; WANG, Z.; LIU, H.; LI, L.; ZHOU, T.; LIU, H.; ZHANG, W.; CHEN, H.; LIU, Y. Toroidal dipole bound states in the continuum. *Physical Review B*, v. 98, n. 16, p. 161112, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.161112>. Nenhuma citação no texto.
- [24] KUPRIANOV, A. S.; XU, Y.; SAYANSKIY, A.; DMITRIEV, V.; KIVSHAR, Y. S.; TUZ, V. R. Metasurface engineering through bound states in the continuum. *Physical Review Applied*, v. 12, n. 1, p. 014024, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevApplied.12.014024>. Citado 2 vezes nas páginas 26 e 27.
- [25] BASHARIN, A. A.; KAFESAKI, M.; ECONOMOU, E. N.; SOUKOULIS, C. M.; FEDOTOV, V. A.; SAVINOV, V.; ZHELUDEV, N. I. Dielectric metamaterials with toroidal dipolar response. *Physical Review X*, v. 5, n. 1, p. 011036, 2015. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevX.5.011036>. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 27.
- [26] GUPTA, M.; SRIVASTAVA, Y. K.; MANJAPPA, M.; SINGH, R. "Sensing with toroidal metamaterial". *Applied Physics Letters*, v. 110, n. 12, p. 121108, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4978672>. Citado na página 27.
- [27] CHEN, X.; FAN, W.; YAN, H. Toroidal dipole bound states in the continuum metasurfaces for terahertz nanofilm sensing. *Optics Express*, v. 28, n. 11, p. 17102-17112, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1364/OE.394416>. Nenhuma citação no texto.
- [28] JEONG, J.; GOLDFLAM, M. D.; CAMPIONE, S.; BRISCOE, J. L.; VABISHCHEVICH, P. P.; NOGAN, J.; SINCLAIR, M. B.; LUK, T. S.; BRENER, I. "High Quality Factor Toroidal Resonances in Dielectric Metasurfaces". *ACS Photonics*, v. 7, n. 7, p. 16991707, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1021/acsp Photonics.0c00179>. Citado na página 27.

- [29] GUPTA, M.; SRIVASTAVA, Y. K.; SINGH, R. A toroidal metamaterial switch. *Advanced Materials*, v. 30, n. 4, p. 1704845, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1002/adma.201704845>. Citado na página 27.
- [30] HUANG, Y. W.; CHEN, W. T.; WU, P. C.; FEDOTOV, V. A.; ZHELUDEV, N. I.; TSAI, D. P. Toroidal lasing spaser. *Scientific Reports*, v. 3, n. 1, p. 1237, 2013. DOI: <https://doi.org/10.1038/srep01237>. Citado na página 27.
- [31] GAILEVICIUS, D.; PADOLSKYTE, V.; JUODKAZIS, S.; MALINAUSKAS, M. Nanoscale Horizons 2019 Outstanding Paper Awards. *Nanoscale Horizons*, 2019. Citado na página 27.
- [32] AHMADIVAND, A.; GERISLIOGLU, B.; RAMEZANI, Z. "Generation of magnetoelectric photocurrents using toroidal resonances: a new class of infrared plasmonic photodetectors". *Nanoscale*, v. 11, n. 27, p. 1310813116, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1039/C9NR04312H>. Citado na página 27.
- [33] GONGORA, J. S. T.; MIROSHNICHENKO, A. E.; KIVSHAR, Y. S.; FRATALOCCHI, A. Anapole nanolasers for mode-locking and ultrafast pulse generation. *Nature Communications*, v. 8, n. 1, p. 15535, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1038/ncomms15535>. Citado na página 27.
- [34] ZOGRAFOPOULOS, D. C.; ALGORRI, J. F.; FUSCALDO, W.; LÓPEZ-HIGUERA, J. M.; VERGAZ, R.; SÁNCHEZ-PENA, J. M.; KAROLOS, I.-A.; BECCHERELLI, R.; TSIUKAS, V. E.; YIOULTSIS, T. V.; KRIEZIS, E. E. All-Dielectric Toroidal Metasurfaces for AngularDependent Resonant Polarization Beam Splitting. *Advanced Optical Materials*, v. 9, n. 10, p. 2002143, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1002/adom.202002143>. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 28.
- [35] AFANASIEV, G. N.; DUBOVNIK, V. M. Some remarkable charge-current configurations. *Physics of Particles and Nuclei*, v. 29, n. 4, p. 891-945, 1998. Citado na página 27.
- [36] GURVITZ, E. A.; LADUTENKO, K. S.; DERGACHEV, P. A.; EVLYUKHIN, A. B.; MIROSHNICHENKO, A. E.; SHALIN, A. S. The high-order toroidal moments and anapole states in all-dielectric photonics. *Laser Photonics Reviews*, v. 13, n. 5, p. 1800266, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1002/lpor.201800266>. Citado na página 27.
- [37] ALGORRI, J. F.; ZOGRAFOPOULOS, D. C.; FERRARO, A.; GARCÍA-CÁMARA, B.; VERGAZ, R.; BECCHERELLI, R.; SÁNCHEZ-PENA, J. M. Anapole modes in hollow nanocuboid dielectric metasurfaces for refractometric sensing. *Nanomaterials*, v. 9, n. 1, p. 30, 2018. DOI: <https://doi.org/10.3390/nano9010030>. Citado na página 27.

- [38] ZOGRAFOPOULOS, D. C.; FERRARO, A.; ALGORRI, J. F.; MARTÍN-MATEOS, P.; GARCÍA-CÁMARA, B.; MORENO-OYERVIDES, A.; KROZER, V.; ACEDO, P.; VERGAZ, R.; SÁNCHEZ-PENA, J. M.; BECCHERELLI, R. All-dielectric silicon metasurface with strong subterahertz toroidal dipole resonance. *Advanced Optical Materials*, v. 7, n. 19, p. 1900777, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1002/adom.201900777>. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 28.
- [39] ZHANG, Y.; LIU, W.; LI, Z.; LI, Z.; CHENG, H.; CHEN, S.; TIAN, J. High-quality-factor multiple Fano resonances for refractive index sensing. *Optics Letters*, v. 43, n. 8, p. 1842-1845, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1364/OL.43.001842>. Citado na página 27.
- [40] XU, S.; SAYANSKIY, A.; KUPRIANOV, A. S.; TUZ, V. R.; KAPITANOVA, P.; SUN, H. B.; HAN, W.; KIVSHAR, Y. S. Experimental observation of toroidal dipole modes in alldielectric metasurfaces. *Advanced Optical Materials*, v. 7, n. 4, p. 1801166, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1002/adom.201801166>. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 28.
- [41] TUZ, V. R.; KHARDIKOV, V. V.; KIVSHAR, Y. S. "All-dielectric resonant metasurfaces with a strong toroidal response". *ACS Photonics*, v. 5, n. 5, p. 18711876, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1021/acsp Photonics.8b00098>. Citado 3 vezes nas páginas 27, 28 e 29.
- [42] SAYANSKIY, A.; DANAEIFAR, M.; KAPITANOVA, P.; MIROSHNICHENKO, A. E. All-dielectric metalattice with enhanced toroidal dipole response. *Advanced Optical Materials*, v. 6, n. 19, p. 1800302, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1002/adom.201800302>. Citado na página 29.
- [43] ZHANG, Z.; YANG, Q.; GONG, M.; LONG, Z. "Toroidal dipolar bound state in the continuum and antiferromagnetic in asymmetric metasurface". *Journal of Physics D: Applied Physics*, v. 53, n. 7, p. 075106, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1088/1361-6463/ab5983>. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 29.
- [44] ZHANG, G.; LAN, C.; GAO, R.; WEN, Y.; ZHOU, J. Toroidal dipole resonances in alldielectric oligomer metasurfaces. *Advanced Theory and Simulations*, v. 2, n. 10, p. 1900123, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1002/adts.201900123>. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 28.
- [45] ZHANG, G.; LAN, C.; GAO, R.; WEN, Y.; ZHOU, J. Toroidal dipole resonances in alldielectric oligomer metasurfaces. *Advanced Theory and Simulations*, v. 2, n. 10, p. 1900123, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1002/adts.201900123>. Citado 3 vezes nas páginas 11, 29 e 31.

- [46] DMITRIEV, V.; SANTOS, S. D. S.; EVLYUKHIN, A. B.; KUPRIANOV, A. S.; TUZ, V. R. Toroidic and antitoroidic orders in hexagonal arrays of dielectric trimers: magnetic group approach. *Physical Review B*, v. 103, n. 16, p. 165402, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.165402>. Citado 3 vezes nas páginas 12, 29 e 32.
- [47] TASOLAMPROU, A. C.; TSILIPAKOS, O.; KAFESAKI, M.; SOUKOULIS, C. M.; ECONOMOU, E. N. Toroidal eigenmodes in all-dielectric metamolecules. *Physical Review B*, v. 94, n. 20, p. 205433, 2016. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.205433>. Citado 3 vezes nas páginas 12, 31 e 33.
- [48] DMITRIEV, V.; KUPRIANOV, A. S.; SANTOS, S. D. S.; TUZ, V. R. "Symmetry analysis of trimer-based all-dielectric metasurfaces with toroidal dipole modes". *Journal of Physics D: Applied Physics*, v. 54, n. 11, p. 115107, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1088/1361-6463/abccf1>. Citado 4 vezes nas páginas 12, 32, 34 e 35.
- [49] LIU, L.; GE, L. "Toroidal dipole resonances by a sub-wavelength all-dielectric torus". *Optics Express*, v. 30, n. 5, p. 7491-7500, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1364/OE.451499>. Citado 3 vezes nas páginas 12, 33 e 36.
- [50] BERENGER, J. P. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *Journal of Computational Physics*, v. 114, n. 2, p. 185-200, 1994. DOI: [10.1006/jcph.1994.1159](https://doi.org/10.1006/jcph.1994.1159). Citado na página 38.
- [51] SONG, S.; YU, S.; LI, H.; ZHAO, T. "Ultra-high Q-factor toroidal dipole resonance and magnetic dipole quasi-bound state in the continuum in an all-dielectric hollow metasurface". *Laser Physics*, v. 32, n. 2, p. 025403, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1088/1555-6611/ac46cf>. Citado 3 vezes nas páginas 12, 34 e 36.
- [52] TUZ, V. R.; DMITRIEV, V.; EVLYUKHIN, A. B. "Antitoroidic and toroidic orders in all-dielectric metasurfaces for optical near-field manipulation". *ACS Applied Nano Materials*, v. 3, n. 11, p. 11315-11325, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1021/acsanm.0c02421>. Citado na página 28.
- [53] DMITRIEV, V.; SANTOS, S. D. S.; EVLYUKHIN, A. B.; KUPRIANOV, A. S.; TUZ, V. R. Toroidic and antitoroidic orders in hexagonal arrays of dielectric trimers: magnetic group approach. *Physical Review B*, v. 103, n. 16, p. 165402, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.165402>. Citado 3 vezes nas páginas 28, 44 e 45.
- [54] BOHREN, C. F.; HUFFMAN, D. R. *Absorption and scattering of light by small particles*. New York: John Wiley Sons, 2008. Citado na página 41.

- [55] DMITRIEV, V.; SANTOS, S. D. S.; EVLYUKHIN, A. B.; KUPRIANOV, A. S.; TUZ, V. R. Toroidic and antitoroidic orders in hexagonal arrays of dielectric trimers: Magnetic group approach. *Physical Review B*, v. 103, n. 16, p. 165402, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.165402>. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 55.
- [56] DMITRIEV, V.; SANTOS, S. D. S.; KUPRIANOV, A. S.; TUZ, V. R. Transition between toroidic orders in dielectric metasurfaces by polarization of the incident wave. *Optics Letters*, v. 46, n. 12, p. 29642967, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1364/OL.428529>. Citado na página 28.
- [57] JOE, Y. S.; SATANIN, A. M.; KIM, C. S. Classical analogy of Fano resonances. *Physica Scripta*, v. 74, n. 2, p. 259266, 2006. DOI: <https://doi.org/10.1088/0031-8949/74/2/020>. Citado na página 28.
- [58] SATPATHY, S.; ROY, A.; MOHAPATRA, A. Fano interference in classical oscillators. *European Journal of Physics*, v. 33, n. 4, p. 863, 2012. DOI: <https://doi.org/10.1088/0143-0807/33/4/863>. Nenhuma citação no texto.
- [59] DRESSELHAUS, M. S.; DRESSELHAUS, G.; JORIO, A. *Group Theory: Application to the Physics of Condensed Matter*. Springer, 2007. Citado na página 42.
- [60] EVLYUKHIN, Andrey B.; et al. Multipolar optical responses of dielectric metasurfaces: From dipolar to toroidal excitations. *ACS Photonics*, v. 3, n. 2, p. 173-178, 2016. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevX.5.011036>. Citado na página 42.
- [61] SAKODA, K. *Optical Properties of Photonic Crystals*. 2. ed. Springer, 2005. Citado na página 42.
- [62] KAELBERER, T.; FEDOTOV, V. A.; PAPASIMAKIS, N.; TSAI, D.-P.; ZHELUDEV, N. I. Toroidal dipolar response in a metamaterial. *Science*, v. 330, n. 6010, p. 1510-1512, 2010. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.1197172>. Citado na página 43.
- [63] ALAEE, R.; ROCKSTUHL, C.; FERNANDEZ-CORBATON, I. Electromagnetic multipole theory for optical nanomaterials. *Reports on Progress in Physics*, v. 81, n. 2, p. 026401, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1088/1367-2630/14/9/093033>. Citado na página 43.
- [64] DMITRIEV, V.; ZOGRAFOPOULOS, D. C.; MATOS, L. P. Analysis of Symmetric Electromagnetic Components Using Magnetic Group Theory. *Symmetry*, v. 15, n. 2, p. 415, 2023. DOI: <https://doi.org/10.3390/sym15020415>. Citado na página 28.

- [65] DMITRIEV, V.; KUPRIIANOV, A. S.; SANTOS, S. D. S.; TUZ, V. R. Symmetry analysis of trimer-based all-dielectric metasurfaces with toroidal dipole modes. *Journal of Physics D: Applied Physics*, v. 54, n. 11, p. 115107, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1088/1361-6463/abccf1>. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 55.
- [66] GALLINET, B. Model of Coupled Oscillators for Fano Resonances. In: KAMENETSKII, E.; SADREEV, A.; MIROSHNICHENKO, A. (Eds.). *Fano Resonances in Optics and Microwaves*. Springer Series in Optical Sciences, v. 219, cap. 6, p. 109136. Springer, Cham, 2018.
- [67] LV, B.; LI, R.; FU, J.; WU, Q.; ZHANG, K.; CHEN, W.; WANG, Z.; MA, R. Analysis and modeling of Fano resonances using equivalent circuit elements. *Scientific Reports*, v. 6, n. 1, p. 31884, 2016. DOI: <https://doi.org/10.1038/srep31884>. Citado na página 28.  
Citado na página 28.
- [68] HARDEN, J.; JOSHI, A.; SERNA, J. D. Demonstration of double EIT using coupled harmonic oscillators and RLC circuits. *European Journal of Physics*, v. 32, n. 2, p. 541, 2011. DOI: <https://doi.org/10.1088/0143-0807/32/2/014>. Citado na página 28.
- [69] FANG, Y.; RUAN, Z. Fano Resonances in Optics and Microwaves. In: KAMENETSKII, E.; SADREEV, A.; MIROSHNICHENKO, A. (Eds.). *Fano Resonances in Optics and Microwaves*. Springer Series in Optical Sciences, v. 219. Cham: Springer, 2018. Cap. 7, p. 157-183. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 52.
- [70] FAN, S.; SUH, W.; JOANNOPOULOS, J. D. Temporal coupled-mode theory for the Fano resonance in optical resonators. *Journal of the Optical Society of America A*, v. 20, n. 3, p. 569-572, 2003. DOI: <https://doi.org/10.1364/JOSAA.20.000569>. Nenhuma citação no texto.
- [71] DOU SOUZA, M. C.; REZENDE, G. F.; BAREA, L. A.; WIEDERHECKER, G. S.; FRATESCHI, N. C. Modeling quasi-dark states with temporal coupled-mode theory. *Optics Express*, v. 24, n. 17, p. 18960-18972, 2016. DOI: <https://doi.org/10.1364/OE.24.018960>. Citado na página 28.
- [72] PADILLA, W. J. Group theoretical description of artificial electromagnetic metamaterials. *Optics Express*, v. 15, n. 4, p. 1639-1646, 2007. DOI: <https://doi.org/10.1364/OE.15.001639>. Citado na página 28.
- [73] DMITRIEV, V. Symmetry properties of electromagnetic planar arrays: Long-wave approximation and normal incidence. *Metamaterials*, v. 5, n. 2-3, p. 141-148, 2011.

- DOI: <https://doi.org/10.1016/j.metmat.2011.04.003>. Nenhuma citação no texto.
- [74] DMITRIEV, V. Symmetry properties of electromagnetic planar arrays in transfer matrix description. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, v. 61, n. 1, p. 185-194, 2012. DOI: <https://doi.org/10.1109/TAP.2012.2220316>. Nenhuma citação no texto.
- [75] HOPKINS, B.; PODDUBNY, A. N.; MIROSHNICHENKO, A. E.; KIVSHAR, Y. S. Revisiting the physics of Fano resonances for nanoparticle oligomers. *Physical Review A: Atomic, Molecular, and Optical Physics*, v. 88, n. 5, p. 053819, 2013. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.88.053819>. Nenhuma citação no texto.
- [76] YU, P.; KUPRIIANOV, A. S.; DMITRIEV, V.; TUZ, V. R. All-dielectric metasurfaces with trapped modes: group theoretical description. *Journal of Applied Physics*, v. 125, n. 14, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.5087054>. Citado 3 vezes nas páginas 16, 28 e 81.
- [77] HAMERMESH, M.; MULLIN, A. A. *Group Theory and its Applications to Physical Problems*. New York: Dover Publications Inc., 1962. Citado 6 vezes nas páginas 28, 44, 47, 48, 49 e 80.
- [78] BRADLEY, C. J.; CRACKNELL, A. P. *The Mathematical Theory of Symmetry in Solids: Representation Theory for Point Groups and Space Groups*. Oxford Classic Texts in the Physical Sciences. New York: Oxford University Press Inc., 2009. Citado na página 28.
- [79] OVERVIG, A. C.; MALEK, S. C.; CARTER, M. J.; SHRESTHA, S.; YU, N. Selection rules for quasibound states in the continuum. *Physical Review B*, v. 102, n. 3, p. 035434, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.035434>. Citado na página 28.
- [80] BASHARIN, A. A.; KAFESAKI, M.; ECONOMOU, E. N.; SOUKOULIS, C. M.; FEDOTOV, V. A.; SAVINOV, V.; ZHELUDEV, N. I. Dielectric metamaterials with toroidal dipolar response. *Physical Review X*, v. 5, n. 1, p. 011036, 2015. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevX.5.011036>. Citado 4 vezes nas páginas 28, 40, 48 e 77.
- [81] COMSOL INC. COMSOL Multiphysics® v6.1: software de simulação multifísica por elementos finitos. Burlington, MA, USA: COMSOL Inc., 2022. Disponível em: <https://www.comsol.com>. Acesso em: 10 abr. 2025. Citado 2 vezes nas páginas 37 e 43.

- [82] ZIENKIEWICZ, O. C.; TAYLOR, R. L. *The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals*. 7. ed. Oxford: Elsevier, 2013. Citado na página 37.
- [83] TASOLAMPROU, A. C.; TSILIPAKOS, O.; KAFESAKI, M.; SOUKOULIS, C. M.; ECONOMOU, E. N. Toroidal eigenmodes in all-dielectric metamolecules. *Physical Review B*, v. 94, n. 20, p. 205433, 2016. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.205433>. Citado na página 28.
- [84] BARYBIN, A. A.; DMITRIEV, V. A. *Modern electrodynamics and coupled-mode theory: application to guided-wave optics*. Princeton: Rinton Press, 2002. Citado na página 42.
- [85] ZOGRAFOPOULOS, D. C.; ALGORRI, J. F.; FUSCALDO, W.; LÓPEZ-HIGUERA, J. M.; VERGAZ, R.; SÁNCHEZ-PENA, J. M.; KAROLOS, I.-A.; BECCHERELLI, R.; TSIΟΥKAS, V. E.; YIOULTSIS, T. V.; KRIEZIS, E. E. All-dielectric toroidal metasurfaces for angular-dependent resonant polarization beam splitting. *Advanced Optical Materials*, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1002/adom.202002143>. Citado na página 84.
- [86] AFANASIEV, G. N.; DUBOVİK, V. M. Some remarkable charge-current configurations. *Physics of Particles and Nuclei*, v. 29, n. 4, p. 891-945, 1998. Citado na página 84.
- [87] GURVITZ, E. A.; LADUTENKO, K. S.; DERGACHEV, P. A.; EVLYUKHIN, A. B.; MIROSHNICHENKO, A. E.; SHALIN, A. S. The high-order toroidal moments and anapole states in all-dielectric photonics. *Laser Photonics Reviews*, v. 13, n. 5, p. 1800266, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1002/lpor.201800266>. Citado na página 83.
- [88] JACKSON, J. D. *Classical Electrodynamics*. 3. ed. New York: Wiley, 1999. Citado na página 82.
- [89] EVLYUKHIN, A. B. et al. Multipole analysis of light scattering by arbitrary-shaped nanoparticles on a plane surface. *ACS Photonics*, v. 3, n. 7, p. 13311340, 2016. DOI: <https://doi.org/10.1021/acsp Photonics.6b00202>. Citado na página 82.
- [90] BASSALO, J. M. F.; CATTANI, M. S. D. *Teoria de Grupos*. São Paulo: Editora Unesp, 2008. Citado na página 78.
- [91] NAZARENO, H. N.; BRITO, P. E. de; GOMES FILHO, M. S. *Tópicos de Mecânica Clássica e Teoria de Grupos*. São Paulo: Editora Unesp, 2008. Citado na página 78.

# APÊNDICE A – Método SALC e automodos do quadrúmero.

Na Fig. 26, é apresentada a base de dipolo magnético para o método SALC. Os automodos de quadrúmeros com simetria  $C_{4v}$ , expressos em termos dos vetores  $m_i$ , estão listados na Tabela I. A estrutura 2D calculada do campo magnético na região do plano  $xy$  para esses modos também é exibida na mesma Tabela.

Os vetores  $m_i$  são vetores axiais e, portanto, suas componentes são antiparalelas aos planos de simetria. Isso pode ser observado na Tabela I. Note-se que o modo toroidal pertence ao IRREP  $A_1$ , e sua frequência de ressonância é um número real puro, assim como as frequências de ressonância dos modos descritos pelos IRREPs  $A_2$ ,  $B_1$  e  $B_2$ . Isso implica que os automodos correspondentes são escuros.

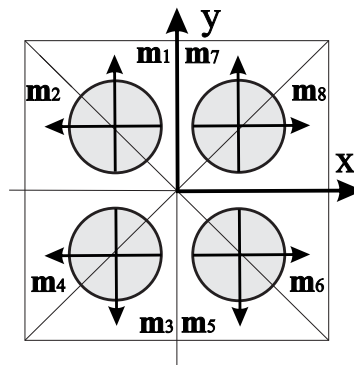
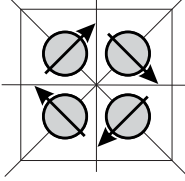
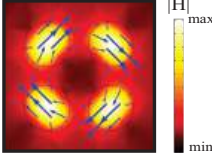
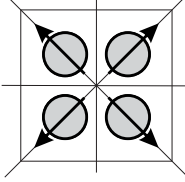
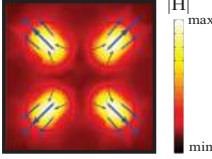
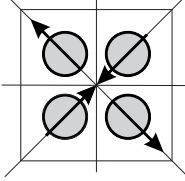
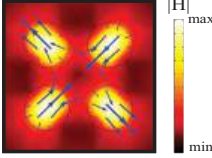
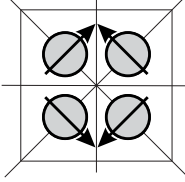
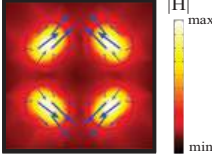
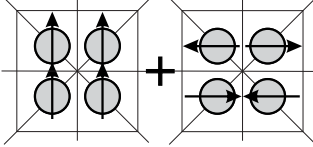
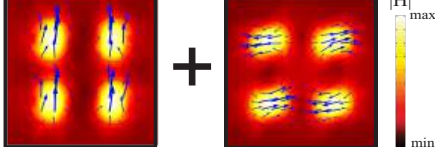
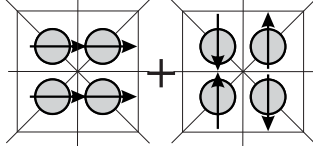
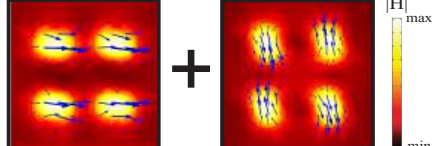


Figura 24 – Base do dipolo magnético para o método SALC.

Ao contrário dos modos pertencentes a IRREPs 1D, o IRREP 2D  $E$  apresenta dois automodos degenerados  $E_{1j}$  ( $j = 1, 2$ ) e  $E_{2j}$  ( $j = 1, 2$ ), correspondentes à primeira e segunda linhas do IRREP, respectivamente. Cada automodo degenerado pode ser decomposto em uma soma de um modo dipolar e um quadrupolar (ver segunda coluna da Tabela I). As partes reais das frequências de ressonância calculadas para a constituição do dipolo e quadrupolo são ligeiramente diferentes, embora, idealmente, no caso de um quadrúmero isolado, elas devam ser iguais. A diferença é de cerca de 0.5%. Essa diferença pode ser explicada pelo uso de limites periódicos no quadrúmero no cálculo numérico apresentado na terceira coluna da Tabela I. No entanto, os modos dipolar e quadrupolar possuem partes imaginárias muito distintas de suas frequências de ressonância e, conseqüentemente, fatores  $Q$  bastante diferentes.

Tabela 1 – Autômodos do quadrúmero com simetria  $C_{4v}$  em termos de vetores  $m_i$  (Fig. 26) e estrutura calculada com campo magnético.

| IRREP  | Imagem dos Autômodos  | Altofrequências Analisadas  | Descrição  |
|--|---|---|--|
| $A_1$  |    | $f=20.39$ GHz<br>                               | Modo Toroidal<br>$\frac{1}{2\sqrt{2}}[(m_1 - m_2) - (m_3 - m_4) + (m_5 - m_6) - (m_7 - m_8)]$  |
| $A_2$  |    | $f=22.42$ GHz<br>                               | Modo Radial<br>$\frac{1}{2\sqrt{2}}[(m_1 + m_2) + (m_3 + m_4) + (m_5 + m_6) + (m_7 + m_8)]$  |
| $B_1$  |   | $f=20.49$ GHz<br>                              | Modo Quadrupolo $Q_1$<br>$\frac{1}{2\sqrt{2}}[(m_1 - m_2) + (m_3 - m_4) + (m_5 - m_6) + (m_7 - m_8)]$  |
| $B_2$  |  | $f=22.31$ GHz<br>                             | Modo Quadrupolo $Q_2$<br>$\frac{1}{2\sqrt{2}}[(m_1 + m_2) - (m_3 + m_4) + (m_5 + m_6) - (m_7 + m_8)]$  |
| $E$ , primeira linha:<br>$E_{11}$ and $E_{12}$ |  | $f=21.84+1.026i$ GHz $f=21.75+0.006i$ GHz<br> | Dipolo $D_y$ and Quadrupolo $Q_x$<br>$\frac{1}{2}[(m_1 - m_3) - (m_5 - m_7)]$<br>$\frac{1}{2}[(m_2 - m_4) - (m_6 - m_8)]$  |
| $E$ , segunda linha:<br>$E_{21}$ and $E_{22}$  |  | $f=21.84+1.029i$ GHz $f=21.75+0.006i$ GHz<br> | Dipolo $D_x$ and Quadrupolo $Q_y$<br>Dipolo $D_x$ and Quadrupolo $Q_y$<br>$\frac{1}{2}[-(m_2 + m_4) + (m_6 + m_8)]$<br>$\frac{1}{2}[-(m_1 + m_3) + (m_5 + m_7)]$ |

# APÊNDICE B – Tabela de IRREPs do grupo $C_{4v}$

Na Tabela II, apresentamos os IRREPs do grupo  $C_{4v}$ , os grupos magnéticos correspondentes e a associação dos modos escuros TO e ATO para IRREPs.

Tabela 2 – IRREPs do grupo  $C_{4v}$ , grupos magnéticos e ordem do modo.

| $C_{4v}$ | e  | $C_2$  | $C_4$   | $C_4^{-1}$                                      | $\sigma_{v1}$<br>( $y = 0$ )                    | $\sigma_{v2}$<br>( $x = 0$ )                    | $\sigma_{d1}$                                  | $\sigma_{d2}$                                    | Magnético grupo  | Ordem do modo |
|----------|--|--|---|---|---|---|--|--|------------------|---------------|
| $A_1$    | 1  | 1  | 1   | 1   | 1   | 1   | 1  | 1  | $C_{4v}$         | escuro TO     |
| $A_2$    | 1  | 1  | 1   | 1   | -1  | -1  | -1   | -1   |                  |               |
| $B_1$    | 1  | 1  | -1  | -1  | 1   | 1   | -1   | -1   |                  |               |
| $B_2$    | 1  | 1  | -1  | -1  | -1  | -1  | 1  | 1  | $C_{4v}(C_{2v})$ | escuro ATO    |
| $E$      | $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$ |                  |               |

# APÊNDICE C – Árvore de grupo do grupo $C_{4v}$

Na Fig. 25, a decomposição do grupo  $C_{4v}$  é mostrado [80].

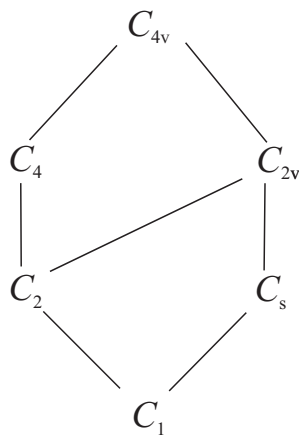


Figura 25 – Decomposição do grupo  $C_{4v}$ .

# APÊNDICE D – Tabelas da teoria de grupos

Neste Apêndice, apresentamos algumas informações e questões relacionadas com a teoria de grupos, que são mencionadas no texto principal.

## D.1 Teoria de grupos

A Teoria de Grupos é uma área da álgebra abstrata que estuda de estruturas algébricas denominadas grupos [90] e [91]. Um grupo pode ser definido como um conjunto não vazio  $G$  que realiza uma operação binária  $*$  associando a cada par de elementos  $(a, b) \in G \times G$  um elemento  $c \in G$ , satisfazendo as seguintes propriedades:

- **Fechamento:** para quaisquer  $a, b \in G$ , o resultado da operação  $a * b$  pertence a  $G$ ;
- **Associatividade:** para quaisquer  $a, b, c \in G$ , tem-se  $(a * b) * c = a * (b * c)$ ;
- **Elemento identidade:** existe um elemento  $e \in G$  tal que, para todo  $a \in G$ ,  $e * a = a * e = a$ ;
- **Elemento inverso:** para todo  $a \in G$ , existe um elemento  $a^{-1} \in G$  tal que  $a * a^{-1} = a^{-1} * a = e$ .

Essas propriedades garantem uma estrutura coerente, capaz de descrever simetrias e transformações invariantes em diversos contextos matemáticos e físicos. Grupos podem ser classificados de diversas formas, como finitos ou infinitos, abelianos (quando a operação é comutativa) não abelianos, simples ou compostos.

Na física e na engenharia, a teoria de grupos é amplamente utilizada para descrever simetrias presentes em sistemas naturais e artificiais. Por meio da identificação das simetrias de um sistema, é possível determinar suas propriedades invariantes e, conseqüentemente, simplificar a análise de fenômenos físicos. Essa aplicação é notável na mecânica quântica, na cristalografia, na eletrodinâmica e no estudo de materiais com propriedades específicas, como cristais fotônicos e metamateriais.

Além das simetrias espaciais, a teoria de grupos também é aplicada no tratamento de simetrias internas, como aquelas relacionadas às propriedades de partículas elementares. A classificação dos grupos de simetria permite prever o comportamento de sistemas sob transformações específicas, identificar modos normais de vibração, calcular espectros de energia e interpretar propriedades óticas e eletromagnéticas de estruturas.

Nas representações de grupos, particularmente as representações matriciais, permitem aplicar a teoria de forma algébrica e computacional. Essas representações são fundamentais para o estudo de sistemas que exibem simetrias complexas, como os modos ressonantes em cavidades, as soluções de equações diferenciais parciais e os padrões de radiação em sistemas ópticos e de micro-ondas.

Dessa forma, a teoria de grupos constitui uma ferramenta teórica e prática indispensável para a modelagem, análise e interpretação de sistemas simétricos em engenharia, física, matemática e ciência dos materiais.

## D.2 O Subgrupo $C_{4v}$

O subgrupo  $C_{4v}$  é um exemplo clássico de grupo de simetria pontual, frequentemente associado a sistemas com geometria quadrada e simetria axial. Este grupo pertence à classe dos grupos de simetria de ponto, que descrevem as simetrias de um objeto físico em torno de um ponto fixo. A notação  $C_{4v}$  indica que o grupo possui um eixo principal de rotação de ordem 4 (ou seja, uma rotação de  $90^\circ$ ) acompanhado por simetrias de reflexão em planos verticais e horizontais.

Formalmente, o grupo  $C_{4v}$  é formado por oito elementos de simetria, correspondentes a operações de simetria que preservam a forma e as propriedades de sistemas quadrados. As operações de simetria são:

- $E$ : a operação identidade;
- $C_4$ : rotação de  $90^\circ$  no sentido anti-horário;
- $C_4^2$ : rotação de  $180^\circ$ ;
- $C_4^3$ : rotação de  $270^\circ$ ;
- $\sigma_v$  e  $\sigma'_v$ : reflexões em dois planos verticais, normalmente alinhados com os eixos cartesianos  $x$  e  $y$ ;
- $\sigma_d$  e  $\sigma'_d$ : reflexões em dois planos diagonais, formando ângulos de  $45^\circ$  com os eixos cartesianos.

A tabela de classes de conjugação e a tabela de caracteres do grupo  $C_{4v}$  são ferramentas fundamentais para o estudo de suas representações. Essas tabelas permitem decompor funções e soluções de sistemas físicos de acordo com as simetrias que o grupo apresenta, facilitando a análise dos modos normais de vibração, padrões de campos eletromagnéticos e soluções de problemas com condições de contorno simétricas.

Tabela 3 – IRREPs do grupo  $C_{2v}$ , grupos magnéticos e ordem do modo.

| $C_{2v}$ | $e$ | $C_2$ | $\sigma_1$ | $\sigma_2$ | Grupo magnético | Ordem do modo |
|----------|-----|-------|------------|------------|-----------------|---------------|
| $A_1$    | 1   | 1     | 1          | 1          | $C_{2v}$        | escuro TO     |
| $A_2$    | 1   | 1     | -1         | -1         | $C_{2v}(C_2)$   | escuro ATO    |
| $B_1$    | 1   | -1    | 1          | -1         | $C_{2v}(C_s)$   |               |
| $B_2$    | 1   | -1    | -1         | 1          | $C_{2v}(C_s)$   |               |

O subgrupo  $C_{4v}$  tem uma aplicação significativa na física, especialmente na espectroscopia e no estudo das estruturas cristalinas tetragonais. Ele também é fundamental na análise de cavidades ressonantes e guias de onda com seções transversais quadradas. Na engenharia elétrica e óptica, o grupo  $C_{4v}$  é utilizado para classificar modos ressonantes e modos propagantes em sistemas com simetria quadrada, como ressonadores dielétricos e cavidades metálicas.

Além disso, a utilização de grupos como o  $C_{4v}$  possibilita a exploração de propriedades como degenerescência e seleção de modos, o que é essencial no desenvolvimento de dispositivos fotônicos e antenas direcionais. Nestes dispositivos, a distribuição espacial de campos ou correntes deve respeitar simetrias específicas para garantir um funcionamento eficiente e adequado.

### D.3 Teoria de grupos magnéticos

Em nossa análise, utilizamos o método baseado em teoria de grupos magnéticos [77]. Em particular, o campo magnético  $\mathbf{H}$  pode ser descrito pela simetria magnética 2D (no plano  $xy$ ), ou seja, pelo grupo  $C_{2v}(C_s)$  que contém os seguintes elementos e antielementos: o elemento unitário  $e$ , o antieixo  $TC_2$  ao longo do eixo  $z$ , o plano vertical  $\sigma_1$  perpendicular ao vetor  $\mathbf{H}$  (plano  $x = 0$ ), o antiplano vertical  $T\sigma_2$ , paralelo ao vetor  $\mathbf{H}$  (plano  $y = 0$ ). No grupo  $C_{2v}(C_s)$ , a reversão do tempo operador  $T$  é combinado com os elementos geométricos de simetria  $C_2$  e  $\sigma_2$ .

Nas Tabelas III, IV e V, os IRREPs dos grupos  $C_{2v}$ ,  $C_s^{v1}$  e  $C_s^{d2}$ , os grupos magnéticos correspondentes e ordens de modo são dadas. Na Tabela VI a simetria tabela de degeneração do grupo  $C_{4v}$  em seus subgrupos é presente.

Tabela 4 – IRREPs do grupo  $C_s^{v1}$ , grupos magnéticos e ordem do modo.

| $C_s^{v1}$ | $e$ | $\sigma_{v1}(x = 0)$ | Grupo magnético | Ordem do modo |
|------------|-----|----------------------|-----------------|---------------|
| $A$        | 1   | 1                    | $\mathbf{C}_s$  | brilhante TO  |
| $B$        | 1   | -1                   | $C_s(C_1)$      | brilhante ATO |

Tabela 5 – IRREPs do grupo  $C_s^{d2}$ , grupos magnéticos e ordem do modo.

| $C_s^{d2}$ | $e$ | $\sigma_{d2}$ | Grupo magnético | Ordem do modo               |
|------------|-----|---------------|-----------------|-----------------------------|
| $A$        | 1   | 1             | $\mathbf{C}_s$  | brilhante TO, brilhante ATO |
| $B$        | 1   | -1            | $C_s(C_1)$      |                             |

Tabela 6 – Tabela de degeneração de simetria do grupo  $C_{4v}$  [76].

| $C_{4v}$ | $C_{2v}^v$ | $C_{2v}^d$ | $C_s^v$ | $C_s^d$ |
|----------|------------|------------|---------|---------|
| $A_1$    | $A_1$      | $A_1$      | $A$     | $A$     |
| $A_2$    | $A_2$      | $A_2$      | $B$     | $B$     |
| $B_1$    | $A_1$      | $A_2$      | $A$     | $B$     |
| $B_2$    | $A_2$      | $A_1$      | $B$     | $A$     |
| $E$      | $B_1, B_2$ | $B_1, B_2$ | $A, B$  | $A, B$  |

# APÊNDICE E – Decomposição Multipolar do modo TO

A decomposição multipolar é uma técnica fundamental na análise da resposta eletromagnética de estruturas, permitindo descrever a distribuição espacial das correntes e cargas em termos de momentos multipolares. No contexto da engenharia de materiais e metamateriais, essa abordagem é crucial para interpretar modos de ressonância, radiação e mecanismos de acoplamento [88, 89].

No COMSOL Multiphysics, é possível calcular os momentos multipolares diretamente a partir das distribuições de densidade de corrente elétrica induzida  $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ , obtidas por simulações no domínio da frequência.

A fim de fornecer insights adicionais sobre a natureza dipolar toroidal das ressonâncias investigadas, realizamos a decomposição multipolar em coordenadas cartesianas para o caso representativo da ressonância TO, investigada na Figura 20(a).

Primeiramente, foi realizada uma simulação de elementos finitos para a onda incidente em torno da ressonância TO, que fornece os espectros de transmitância de potência ( $T = |t^2|$ ) e refletância ( $R = |r^2|$ ) apresentados na Figura 26(a), onde  $r$  é o coeficiente de reflexão do campo complexo. Como nenhuma perda é considerada neste caso e dado que a difração diferente de zero é desprezível, assume-se que  $R \simeq 1 - T$ .

$$J(r) = j\omega(\varepsilon_{r,m} - \varepsilon_0)E(r) \quad (\text{E.1})$$

onde  $\omega$  é a frequência angular e  $\varepsilon_m = \varepsilon_{r,m}\varepsilon_0$  são as permissividades dos materiais dielétricos, sendo  $m$  referente aos ressonadores cerâmicos ou ao substrato de espuma.

Assim, os momentos dipolares para os modos cartesianos elétrico, magnético e toroidal são calculados como:

$$p = \frac{1}{j\omega} \int_V J(r) dr \quad (\text{E.2})$$

$$m = \frac{1}{2c_0} \int_V [\mathbf{r} \times \mathbf{J}(r)] dr \quad (\text{E.3})$$

$$t = \frac{1}{10c_0} \int_V [(\mathbf{r} \cdot \mathbf{J}(r))\mathbf{r} - 2r^2\mathbf{J}(r)] dr \quad (\text{E.4})$$

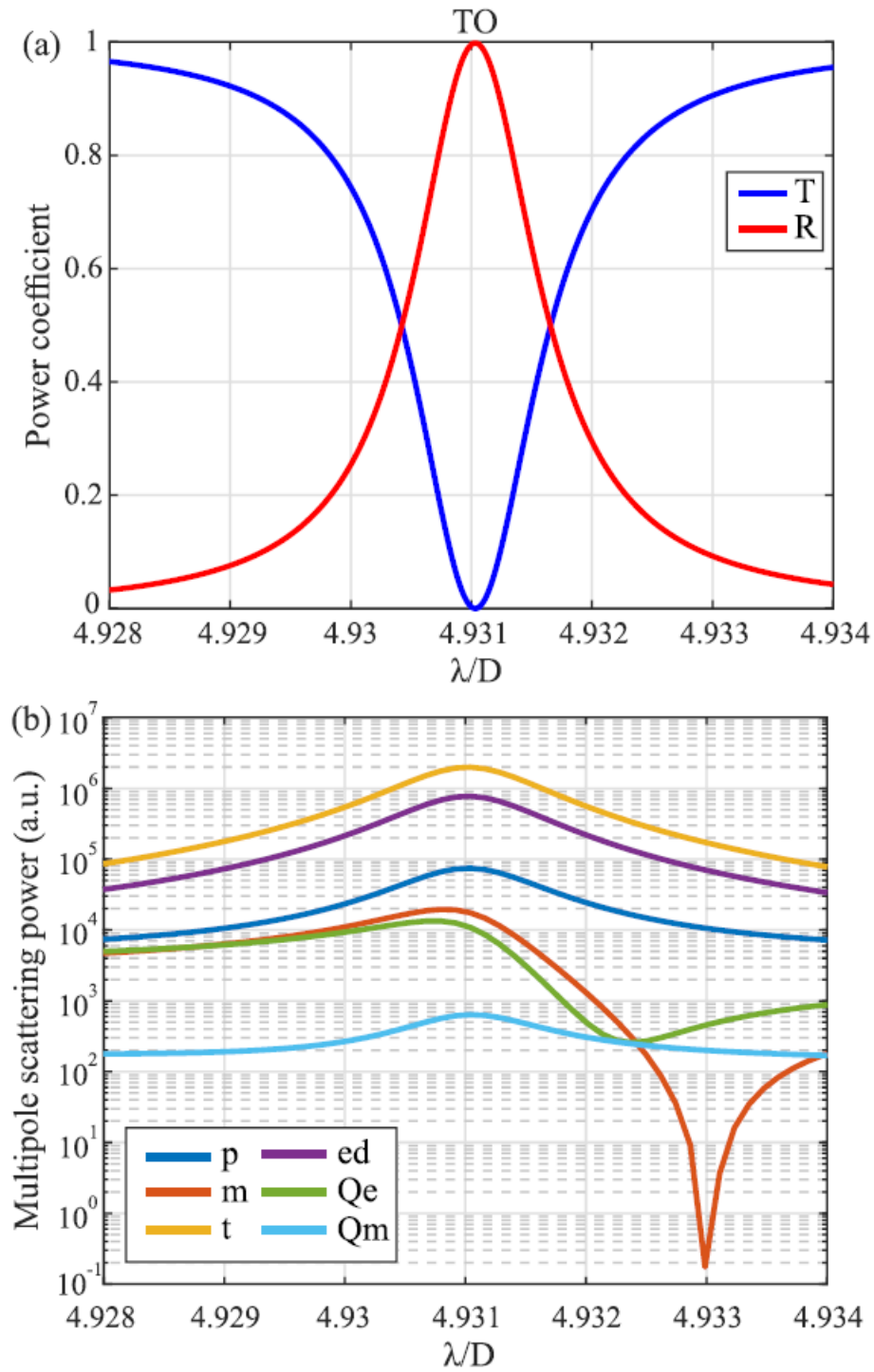


Figura 26 – (a) Espectros de transmitância e reflectância na vizinhança da ressonância do modo TO estudada na figura 20(a). (b) Decomposição multipolar em coordenadas cartesianas e poder de espalhamento relativo dos momentos dipolar e quadripolar, mostrando a predominância do momento dipolar toroidal.

onde  $c_0$  é a velocidade da luz no vácuo e a integração é realizada sobre o volume da célula unitária da metasuperfície. No cálculo dos momentos multipolares, correções de raios médios também foram aplicadas [87]. O poder de espalhamento correspondente a cada momento é dado por:

$$C_p^{\text{sca}} = \frac{k_4 0}{6\pi\epsilon_0^2} |p|^2 \quad (\text{E.5})$$

$$C_t^{\text{sca}} = \frac{k_6 0}{6\pi\epsilon_0^2} |t|^2 \quad (\text{E.6})$$

$$C_{ed}^{\text{sca}} = \frac{k_4 0}{6\pi\epsilon_0^2} |p - jk_B t|^2 \quad (\text{E.7})$$

$$C_{md}^{\text{sca}} = \frac{k_4 0}{6\pi\epsilon_0^2} |m|^2 \quad (\text{E.8})$$

onde  $p$ ,  $t$ ,  $ed$  e  $md$  se referem aos dipolos cartesianos elétrico, toroidal, elétrico total e magnético, respectivamente, e  $k_0$  é o número de onda da onda plana incidente. As definições para os quadropolos  $Q_e$  elétrico e  $Q_m$  magnético, bem como as correções de raios médios, são omitidas por brevidade. Todos os detalhes podem ser encontrados em [85] e [86].

Os resultados sobre os poderes de espalhamento relativos dos vários momentos multipolares são resumidos na figura 26(b). O espalhamento do momento dipolar toroidal ( $t$ ) domina claramente, e sua contribuição leva a um alto espalhamento do momento dipolar elétrico total ( $ed$ ). O poder de espalhamento de todos os outros multipolos é mais de uma ordem de magnitude menor em comparação ao do dipolo toroidal. Foi confirmado ainda que o poder de espalhamento do dipolo toroidal deriva quase exclusivamente de seu componente  $z$ , o que está em total acordo com a representação idealista do modo TO na 2(a). Portanto, a análise de decomposição multipolar fornece mais evidências sobre a natureza do dipolo toroidal das ressonâncias quase escuras investigadas.

Para calcular esses momentos no COMSOL Multiphysics:

- Realize uma simulação no domínio da frequência para extrair a densidade de corrente complexa  $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ .
- Use a funcionalidade **Component Coupling Integration** para definir integrais sobre o volume da estrutura.
- Implemente as expressões  $\mathbf{p}$  a  $\mathbf{T}$  como variáveis auxiliares ou integrais definidas pelo usuário.
- As integrais podem ser configuradas diretamente nas interfaces **Definitions > Component Couplings > Integration** e **Definitions > Variables**.