

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

ESCOLA POLITÉCNICA

RODRIGO ANJOS DE SOUZA

Metodologias de detecção de gases em baixas concentrações por meio de sensores de atraso de fase em micro-ondas

São Paulo

2025

RODRIGO ANJOS DE SOUZA

Metodologias de detecção de gases em baixas concentrações por meio de sensores de atraso de fase em micro-ondas

Exame de qualificação apresentado à Escola Politécnica da Universidade de São Paulo como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia Elétrica

Área de Concentração: Microeletrônica

Orientadora: Profa. Dra. Fatima Salete Correra

Coorientadora: Profa. Dra. Elisabete Galeazzo

São Paulo

2025

LISTA DE FIGURAS

<u>Figura 1 - Diagrama Black-Box do Sistema</u>	16
Figura 2 - Diagrama Transparent-Box do Sistema.....	16
Figura 3 - Diagrama Equacional do Sistema.....	17
Figura 4 - Diagrama Construtivo do Sistema.....	19
Figura 5 - Métodos construtivos de linhas planares.....	20
Figura 6 - Topologias de estruturas de atraso de fase.....	20
Figura 7 - Fenômeno de Polarização.....	24
Figura 8 - Geometria equivalente de uma linha de microfita quasi-TEM.....	32
Figura 9 - Configuração de linha de microfita simulada no programa COMSOL Multiphysics ©.....	34
Figura 10 - Energia armazenada em cada plano de integração.....	35
Figura 11 - Configuração da simulação SPICE no software Keysight ADS.....	40
Figura 12 - Resultados da simulação de ponto de operação.....	41
Figura 13 - Linha de microfita proposta.....	45
Figura 14 - Parâmetros de Espalhamento da linha proposta.....	46
Figura 15 - Linha de microfita proposta.....	48
Figura 16 - Parâmetros de Espalhamento da linha proposta.....	49
Figura 17 - Parâmetros de Espalhamento da linha proposta.....	50

Figura 18 - Sensibilidade esperada das linhas.....	51
Figura 19 - Fabricação de linhas de transmissão por meio de microfresamento.....	52
Figura 20 - Câmara de ensaios fabricada.....	53
Figura 21 - Meandro de Microfita.....	54
Figura 22 - Comparação entre simulações e protótipo construído.....	55
Figura 23 - Linha de Transmissão + Divisor/Combinador de Wilkinson.....	56
Figura 24 - Comparação entre simulações e protótipo construído.....	57
Figura 25 - Diagrama P&ID da bancada de gases (configuração #1).....	59
Figura 26 - Diagrama P&ID da bancada de gases (configuração #2).....	60
Figura 27 - Configuração da Bancada de Testes de Micro-ondas.....	61
Figura 28 - Configuração dos Experimentos realizados.....	62
Figura 29 - Exemplo de arquivo gerado pelo programa de controle dos MFCs.....	63
Figura 30 - Exemplo de arquivo gerado pelo programa de controle do VNA.....	64
Figura 31 - Design da câmara de medição construída.....	64
Figura 32 - Exemplo de arquivo gerado pelo programa de medição de T e RH.....	65
Figura 33 - Configuração da Bancada de Testes de Micro-ondas.....	66
Figura 34 - Configuração da Bancada de Testes de Micro-ondas.....	67
Figura 35 - Configuração da Bancada de Testes de Micro-ondas.....	68

LISTA DE TABELAS

<u>Tabela 1 - Comparativo dos cálculos de permissividade para Água.....</u>	30
Tabela 2 - Comparativo dos cálculos de permissividade para Acetona.....	30
Tabela 3 - Comparaçao dos métodos de cálculo de Permissividade Efetiva (ϵ_{eff})....	35
Tabela 4 - Avaliação de atraso de fase para atmosfera com H ₂ O.....	42
Tabela 5 - Avaliação de atraso de fase para atmosfera com Acetona.....	43
Tabela 6 - Avaliação de variação de tensão para atmosfera com H ₂ O.....	46
Tabela 7 - Avaliação de variação de tensão para atmosfera com Acetona.....	46

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ADS	Advanced Design Systems
CC	Corrente Contínua
CNC	Computer Numeric Control
CRDS	Cavity Ring-Down Spectroscopy
CS	Capacitive Sensors
CST	Computer Simulation Technologies
DM1	Diabetes Melito Tipo 1
DUT	Device Under Test
EM-3D	Eletromagnético Tridimensional
EM	Eletromagnético
ECS	Electro-Chemical Sensors
EWM	ElectroMagnetic Waves
GO	Graphene Oxide
LoD	Limit of Detection
MFC	Mass Flow Controller
MOF	Metal Oxide Framework
MoM	Method of Moments
MOS	Metal Oxide Semiconductor
MUT	Material Under Test

PCI	Placa de Circuito Impresso
PDMS	Poli-dimetil-siloxano
QCM	Quartz Crystal Microbalance
quasi-TEM	Quasi Transverse Eletromagnetic Field
RF	Radio Frequency
SP	Scattering Parameters
SPICE	Simulation Program with Integrated Circuit Emphasis
TEM	Transverse Eletromagnetic Field
VNA	Vector Network Analyzer
VOC	Volatile Organic Compound

LISTA DE SÍMBOLOS



Sumário

1. Contextualização.....	4
1.1. Introdução e Justificativa.....	4
1.2. Estado da Arte.....	5
1.3. Proposta de Pesquisa.....	9
1.4. Objetivos.....	10
2. Metodologia.....	11
2.1. Estudo bibliográfico de metodologias de espectroscopia em micro-ondas e suas estruturas de micro-ondas associadas.....	11
2.2. Estudo bibliográfico do fenômeno de polarização dielétrica.....	12
2.3. Avaliação e seleção dos programas mais adequados para simulações computacionais EM-3D de circuitos de micro-ondas para o processo de transdução proposto.....	12
2.4. Estudo e definição de especificações e proposição de novas configurações para o sistema de transdução de micro-ondas.....	12
2.5. Projeto dos circuitos que compõem o sensor.....	13
2.6. Simulações computacionais EM-3D dos circuitos projetados e otimização de seus parâmetros.....	13
2.7. Fabricação dos circuitos projetados.....	13
2.8. Caracterização elétrica do sensor projetado.....	13
2.9. Análises comparativas de resultados.....	14
3. Estágio atual de desenvolvimento da pesquisa.....	14
3.1. Especificação do Sistema.....	15

3.1.1. Definição de estrutura e métricas gerais do sistema.....	16
3.1.2. Definição de estruturas específicas do sistema.....	19
3.2. Análise Diferencial do Sistema.....	22
3.2.1. Permissividade Efetiva e Permissividade do MUT.....	32
3.2.2. Diferença de Fase dos Sinais e Permissividade Efetiva.....	37
3.2.3. Tensão após combinador e Diferença de Fase dos Sinais.....	38
3.2.4. Simulações de Linhas de Transmissão.....	41
3.2.5. Design e Simulação de sistema de conversão Concentração-Fase	43
3.2.6. Design e Simulação de sistema de conversão Fase-Amplitude....	47
3.3. Fabricação de Protótipos.....	51
3.4. Ensaios com Gases.....	59
3.4.1. Bancada de Gases.....	59
3.4.2. Bancada de Testes de Micro-ondas.....	61
4. Resultados.....	63
4.1. Conversor fase-amplitude.....	66
5. Discussão.....	69
6. Cronograma de Execução.....	69
7. Desenvolvimento de Atividades.....	70
7.1. Atividades Concluídas.....	70
7.2. Atividades em andamento.....	70
7.3. Atividades Futuras.....	70
8. SUMÁRIO ESTRUTURADO DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO.....	71
9. Referências Bibliográficas.....	71

1. CONTEXTUALIZAÇÃO

1. 1. INTRODUÇÃO E JUSTIFICATIVA

[QUAL O CONTEXTO DA PESQUISA SENDO REALIZADA?]

O desenvolvimento e aprimoramento de técnicas de medição de variáveis físicas permitiram o controle e a melhor compreensão de fenômenos naturais de interesse, constituindo um fator fundamental para a estruturação da sociedade moderna. Tais técnicas são frequentemente viabilizadas por meio de sensores, dispositivos de transdução que convertem fenômenos físicos em sinais elétricos passíveis de quantificação.

Considerando a ampla gama de aplicações dos sensores modernos, este trabalho no estudo e na proposição de metodologias de sensoriamento voltadas à medicina moderna. Tradicionalmente, o método mais efetivo de se verificar o estado clínico de um paciente é por meio de exames de sangue ou de imagem, os quais utilizam meios físico-químicos para determinar de modo minimamente assertivo o estado de um indivíduo.

Contudo, além do custo elevado, esses métodos são frequentemente centralizados em regiões com alto índice de desenvolvimento, capazes de fornecer a infraestrutura e corpo de profissionais capacitados para operação. Adicionalmente, em muitas ocasiões, é necessário monitorar continuamente o estado de um paciente, principalmente nos casos de doenças crônicas.

Deste modo, boa parte do desenvolvimento moderno da medicina tem se voltado para soluções de fabricação mais viável economicamente, que possam ser implementadas de maneira descentralizada e que monitorem continuamente, mesmo que com menor acurácia, parâmetros de um paciente que possam ser utilizados para inferência de seu estado clínico.

Um exemplo de destaque da medicina moderna é o advento de relógios e pulseiras “inteligentes”, capazes de medir parâmetros simples como frequência cardíaca, pressão arterial, temperatura corporal, etc. Apesar de simples, tais dados podem ajudar na inferência de complicações cardiovasculares entre outras doenças crônicas associadas.

1. 2. ESTADO DA ARTE

[NO QUE CONSTITUI O ESTADO DA ARTE?]

Quaisquer substâncias secretadas pelo corpo são associadas a ciclos metabólicos e, em muitas ocasiões podem ser utilizadas como marcadores para detecção e acompanhamento de doenças crônicas e agudas. Para este projeto de pesquisa em particular, a substância secretada de interesse será a acetona, considerada um biomarcador [1] para a síndrome metabólica de resistência à insulina (Diabetes Melito Tipo 1 – DM1).

Em mamíferos, a produção e consequente difusão no plasma sanguíneo de acetona como parte do ciclo metabólico de gliconeogênese é amplamente conhecida [2], [3], [4], [5]. Adicionalmente, devido às propriedades físico-químicas desse composto, há grande correlação entre a concentração de acetona medida no ar exalado por um paciente e aquele presente em seu sangue [6], [7].

Apesar de a correlação física, química e biológica entre a concentração de acetona no ar exalado e o ciclo de gliconeogênese ser conhecida desde a metade do século XX, poucos estudos até então tinham sido realizados para averiguar de modo quantitativo as proporções existentes.

Tal cenário mudou no início do século XXI, com um aumento nas publicações do tópico, das quais destacam-se [8], [9], [10], [11], [12], [13], [14]. Em geral, os estudos realizados tinham por objetivo a determinação das concentrações de acetona efetivamente exaladas para grupos de controle e grupos com DM1. Estas foram estimadas por [15] como uma faixa de 0,3 a 0,9 ppm para o primeiro grupo, enquanto no segundo esperam-se níveis acima de 1,8 ppm.

Devido à finalidade investigativa das publicações mencionadas [8], [9], [10], [11], [12], [13], [14], todas apresentam resultados advindos de técnicas de análise química tradicional, tais como a cromatografia com espectrometria de massas (GC-MS), a voltametría cíclica (CV), a espectrometria de massas com tubo de fluxo de íons selecionados (SIFT-MS), e a espectroscopia de decaimento em cavidade (CRDS).

Após esta etapa inicial, muitos autores se voltaram em publicações mais recentes à proposição de sistemas de monitoramento contínuo e portátil. Devido à necessidade de equipamentos de medição menos robustos e com menor custo, diversos métodos de detecção estabelecidos utilizados para medição de outros gases na indústria foram modificados para suprir a demanda.

Apesar da maioria das publicações apresentarem transdutores baseados em na mudança de resistividade de óxidos de metais semicondutores (MOX), estudos recentes demonstraram a viabilidade de técnicas baseadas na transdução por micro-ondas para detecção de gases voláteis [16-19] e de acetona [20-22]. Essa categoria de sensores apresenta uma série de vantagens em relação às outras metodologias existentes [18], desde a alta sensibilidade, resposta rápida e a capacidade de operar sem contato direto com a amostra [??], o que os torna promissores para o diagnóstico precoce de doenças por meio da análise do ar exalado.

Em [20], um capacitor interdigitado com ressonância em 8,6 GHz foi recoberto com uma camada sensível de copolímero de ftalocianina a fim de se obter seletividade à acetona gasosa. Na presença de VOCs a frequência de ressonância do sensor deslocava-se, indicando qual a concentração com base na magnitude do desvio. Segundo os autores, a solução proposta foi capaz de apresentar uma sensibilidade média de aproximadamente 14 MHz/ppm para a faixa de 0 a 200 ppm de acetona.

Pouco tempo depois, o mesmo grupo propôs em [22] a utilização de uma camada de óxido de grafeno (GO) como elemento de adsorção e seletividade para acetona. Neste estudo, a estrutura de micro-ondas proposta é um par de linhas acoopladas, cujo coeficiente de acoplamento se alterna na medida em que os gases são adsorvidos pela camada sensível. Apesar de o sensor proposto apresentar resposta para outros gases voláteis como etanol, metanol e 2-propanol, sua resposta para acetona é ordens de grandeza maior. Novamente os autores realizaram testes em atmosfera com concentração de acetona variando de 0 a 200 ppm, com uma sensibilidade média de 0,13 °/ppm.

Enquanto isso, em [23] os autores reportam a construção de um ressoador de micro-ondas com uma camada de poli-dimetil-siloxano (PDMS), um elastômero poroso capaz de agir como um agente adsorvedor de moléculas de gases. Neste trabalho os autores foram capazes de medir o deslocamento da frequência de ressonância do ressoador quando exposto a nitrogênio e a atmosferas com distintas concentrações de acetona. Dentre os resultados obtidos, destaca-se a sensibilidade de quase 0,218 kHz/ppm e um limite de detecção de 150 ppm.

[QUAL A SÍNTESE DE TRABALHOS REALIZADOS ATÉ O ESTADO DA ARTE?]

Levando em consideração a revisão de literatura realizada, fica evidente que a fabricação de sensores de acetona operando na faixa de micro-ondas é factível, sendo os sensores capazes de detectar níveis de acetona equivalentes ao exalado pelo hálito humano, tornando-se uma alternativa promissora em relação aos sensores MOX tradicionais, para fins de avaliação diagnóstica. Destaca-se que, em sua grande maioria, os trabalhos que apresentam soluções baseadas em óxidos semicondutores requerem a operação dos sensores em elevadas temperaturas, da ordem de 400 °C.

[QUAIS AS PREOCUPAÇÕES A SEREM SOLUCIONADAS PELOS AUTORES?]

Independentemente da técnica a ser escolhida, a literatura destaca que alguns parâmetros dos sensores devem ser priorizados para a detecção de acetona exalado por indivíduos. Além dos mais clássicos, tais como a sensibilidade e a selectividade às espécies de interesse, os sensores devem apresentar baixo limite de detecção, suficiente para possibilitar a distinção entre concentrações de acetona de pacientes saudáveis e aqueles portadores da síndrome de resistência à insulina.

1. 3. PROPOSTA DE PESQUISA

[QUAL A PROPOSTA DE PESQUISA A SER DESENVOLVIDA NESTE TRABALHO?]

Apesar dos resultados promissores reportados na literatura, ficam evidentes as problemáticas e deficiências dos detectores disponíveis. Sensores baseados na mudança de permissividade apresentam uma resposta altamente linearizada e operam em condições ambientes. Adicionalmente, devido à versatilidade desta metodologia de transdução, ficam disponíveis uma ampla gama de materiais adsorvedores capazes de aumentar a sensibilidade e a seletividade deste tipo de sensor [??].

Deste modo, a proposta da presente pesquisa é entender e explorar os mecanismos de transdução em micro-ondas que podem ser utilizados para medição de concentrações diminutas de acetona em atmosfera ambiente, bem como possíveis caminhos de otimização para sensores atuais.

1. 4. OBJETIVOS

[QUAL O OBJETIVO PRINCIPAL DESTE TRABALHO?]

O objetivo e escopo principal deste trabalho é a exploração de estruturas de micro-ondas aplicadas à caracterização de atmosferas gasosas. Como resultado, pretende-se propor, projetar, fabricar e caracterizar um sensor operando em frequências de micro-ondas para detecção de acetona, realizando-se experimentos para determinar a resposta do sensor e sua sensibilidade e limites na detecção de acetona. Adicionalmente, também serão aplicados nanomateriais às estruturas de micro-ondas a fim de se otimizar a seletividade e sensibilidade às espécies de interesse.

Adotou-se como opção de projeto desenvolver o sensor em tecnologia MIC (*Microwave Integrated Circuits*), empregando linhas de transmissão planares, de modo a obter um sensor compacto e de baixo custo.

[QUAIS OS OBJETIVOS PRIMÁRIOS E SECUNDÁRIOS SINTETIZADOS?]

Para realização da pesquisa proposta foram definidos objetivos secundários, descritos sucintamente a seguir:

- a) Estudo dos mecanismos elétricos representados pela permissividade elétrica complexa de um meio.
- b) Desenvolver estruturas de micro-ondas em linhas de microfita que permitam analisar atmosferas gasosas com baixas concentrações do gás de interesse.
- c) Propor novas configurações de transdutores de micro-ondas para aumento de sensibilidade e acurácia.
- d) Especificar e projetar elementos sensores e detectores com as novas configurações propostas.
- e) Construir sistema de detecção projetado.
- f) Caracterizar sensores projetados nas faixas de frequências de operação delimitadas, fazendo-se medidas de parâmetro de espalhamento e de impedâncias dos elementos.
- g) Comparar os resultados experimentais dos sistemas de transdução construídos com resultados de simulações computacionais EM-3D, discutindo-se os méritos e limitações da metodologia escolhida e das configurações propostas.

2. METODOLOGIA

[QUAIS ETAPAS FORAM PLANEJADAS PARA SE ATINGIR OS OBJETIVOS PROPOSTOS?]

A fim de se alcançar os objetivos descritos anteriormente, foram planejadas as seguintes etapas, com base nas quais o trabalho será conduzido:

2. 1. ESTUDO BIBLIOGRÁFICO DE METODOLOGIAS EM MICRO-ONDAS E SUAS ESTRUTURAS ASSOCIADAS

O estudo bibliográfico das metodologias compreende uma revisão da teoria de circuitos de micro-ondas, dando-se ênfase em estruturas de divisão de potência; estruturas de casamento de impedância; e estruturas de detecção. Ao mesmo tempo, essa etapa prevê a realização de uma pesquisa de estruturas de micro-ondas aplicadas à caracterização elétrica de gases reportadas na literatura técnica e de seus resultados experimentais.

2. 2. ESTUDO BIBLIOGRÁFICO DO FENÔMENO DE POLARIZAÇÃO DIELÉTRICA

O estudo bibliográfico do fenômeno de polarização dielétrica compreende uma revisão da teoria eletromagnética, dando-se ênfase aos fenômenos de polarização, relaxamento e outros associados. Ao mesmo tempo, essa etapa prevê a realização de uma pesquisa de modelos matemáticos de polarização dielétrica aplicada aos gases de interesse; e de outros materiais associados que possam ser de utilidade reportados na literatura técnica e de seus resultados experimentais.

2. 3. AVALIAÇÃO E SELEÇÃO DOS PROGRAMAS MAIS ADEQUADOS PARA SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS EM-3D DE CIRCUITOS DE MICRO-ONDAS PARA O PROCESSO DE TRANSDUÇÃO PROPOSTO

A avaliação de programas de simulação computacional EM-3D consiste no estudo dos recursos oferecidos pelos mesmos, avaliando-se suas funcionalidades e

limitações para simulações de circuitos de micro-ondas. Com base nesse estudo, são selecionados os programas mais adequados para a execução de simulações. Dentre os mesmos estão Advanced Design System ® (ADS), da Agilent Technologies; CST Studio Suite ®, da Computer Simulation Technology (CST); e COMSOL Multiphysics ®.

2. 4. ESTUDO E DEFINIÇÃO DE ESPECIFICAÇÕES E PROPOSIÇÃO DE NOVAS CONFIGURAÇÕES PARA O SISTEMA DE TRANSDUÇÃO DE MICRO-ONDAS

Nesta etapa serão definidas as especificações dos circuitos de micro-ondas a serem utilizados no processo de transdução e, com base nessas especificações, serão propostas novas configurações que conduzam ao aumento de sensibilidade e acurácia do dispositivo.

2. 5. PROJETO DOS CIRCUITOS QUE COMPÕEM O SENSOR

Estando definidas as especificações do sistema de transdução e escolhida sua topologia, nesta etapa é realizado o projeto dos diversos circuitos que formam o sensor, incluindo os circuitos planares de micro-ondas cujo desempenho será afetado pela presença de acetona no ambiente que os circunda, e o projeto de circuitos que disponibilizem um sinal de corrente contínua (CC) de saída proporcional à concentração de acetona detectada.

2. 6. SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS EM-3D DOS CIRCUITOS PROJETADOS E OTIMIZAÇÃO DE SEUS PARÂMETROS

Nesta etapa são realizadas simulações EM-3D do sistema de transdução projetado, comparando-se seu desempenho com as especificações que se pretende

atingir. Com base nessa comparação, o dispositivo então é computacionalmente otimizado a fim de que seu desempenho simulado aproxime do desejado.

2. 7. FABRICAÇÃO DOS CIRCUITOS PROJETADOS

A etapa de fabricação das estruturas propostas será realizada utilizando-se técnicas de usinagem CNC.

2. 8. CARACTERIZAÇÃO ELÉTRICA DO SENSOR PROJETADO

Feita a construção dos dispositivos, prevê-se uma etapa de caracterização dos parâmetros de interesse. Serão realizadas medidas de parâmetros de espalhamento para verificar o desempenho dos circuitos de micro-ondas projetadas. Será caracterizado o sensor como um todo, na presença de diferentes concentrações de acetona.

2. 9. ANÁLISES COMPARATIVAS DE RESULTADOS

Com a disponibilidade de resultados experimentais e de resultados de simulações computacionais EM-3D, são propostas duas análises comparativas com o intuito de se validar o desempenho das novas configurações de sensores planares de micro-ondas e de se discutir vantagens e limitações dessas configurações e da metodologia de projeto empregado.

A primeira análise consiste em uma comparação entre características experimentais dos sensores fabricados e resultados de simulações computacionais EM-3D, com discussão do procedimento de projeto utilizado. A segunda análise constitui-se em uma comparação entre características experimentais dos sensores

fabricados nesta pesquisa e características de sensores planares de micro-ondas reportados na literatura, com discussão das configurações propostas.

3. ESTÁGIO ATUAL DE DESENVOLVIMENTO DA PESQUISA

A pesquisa de mestrado encontra-se em estágio avançado, tendo sido realizados estudos preliminares abrangendo não só a teoria construtiva de estruturas de micro-ondas, como também a teoria física a respeito da polarizabilidade dielétrica e outras condições de contorno importantes para a definição da permissividade de um material. Simultaneamente, foi realizada uma pesquisa sobre as estruturas de micro-ondas utilizadas atualmente para a transdução da permissividade.

Com os estudos preliminares em mão, foram propostas novas configurações de estruturas de transdução que permitam a detecção de atmosferas gasosas com baixas concentrações de analito, primariamente visando otimizar a sensibilidade e acurácia. Outros fatores que afetam os limites de detecção e a repetibilidade do sistema de transdução também foram avaliados. O desempenho das configurações de transdução foi avaliado por meio de simulações computacionais eletromagnéticas tridimensionais (EM-3D), determinando-se parâmetros dos circuitos como ganho, faixa de operação de permissividade, coeficiente de transmissão/reflexão, etc.

Por fim, configurações do dispositivo otimizados que apresentaram resultados simulados mais satisfatórios foram construídos e caracterizados eletricamente, incluindo as medidas de ganho e coeficiente de transmissão/reflexão, para que os resultados obtidos possam ser comparados àqueles obtidos em simulação e àqueles apresentados em outros trabalhos.

As atividades desenvolvidas são descritas a seguir.

3. 1. ESPECIFICAÇÃO DO SISTEMA

[QUAL A METODOLOGIA SERÁ SEGUIDA PELO PROJETO?]

Para auxílio na definição dos requisitos do sistema, foram construídos os diagramas Black Box, Transparent Box e Funcional. O primeiro, deles é uma representação simplificada do sistema, e tem por objetivo identificar quais partes do sistema são escopo da pesquisa a ser realizada.

O modelo Transparent Box, por sua vez, adiciona complexidade em cima do modelo anterior ao elaborar quais são as macro tarefas a serem realizadas pelo sistema, explicitando quais as ações a serem tomadas, considerando-se entradas e saídas arbitrárias.

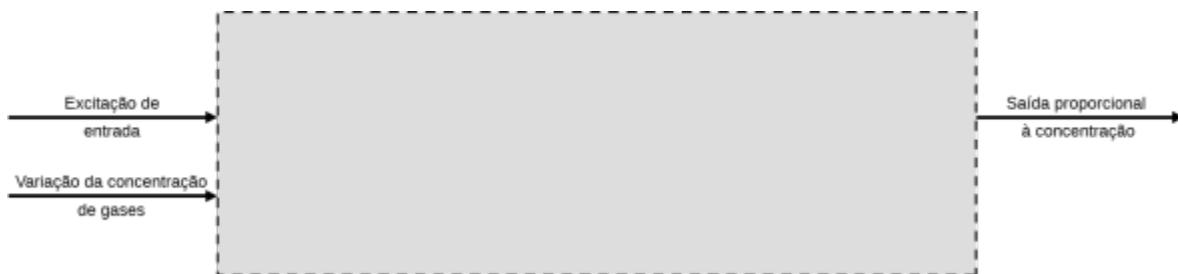
Por fim, o diagrama funcional nos dá uma compreensão melhor de quais blocos funcionais deverão ser implementados na prática, os quais realizarão as “tarefas” mais básicas do sistema.

3. 1. 1. DEFINIÇÃO DE ESTRUTURA E MÉTRICAS GERAIS DO SISTEMA

[EM TERMOS GERAIS QUAIS OS PRINCÍPIOS A SEREM UTILIZADOS NO SISTEMA PROPOSTO]

Em termos gerais, o sistema de transdução proposto almeja a medição de um sinal de saída que seja proporcional à concentração de gases presente numa atmosfera gasosa sob análise (MUT).

Figura 1 - Diagrama Black-Box do Sistema

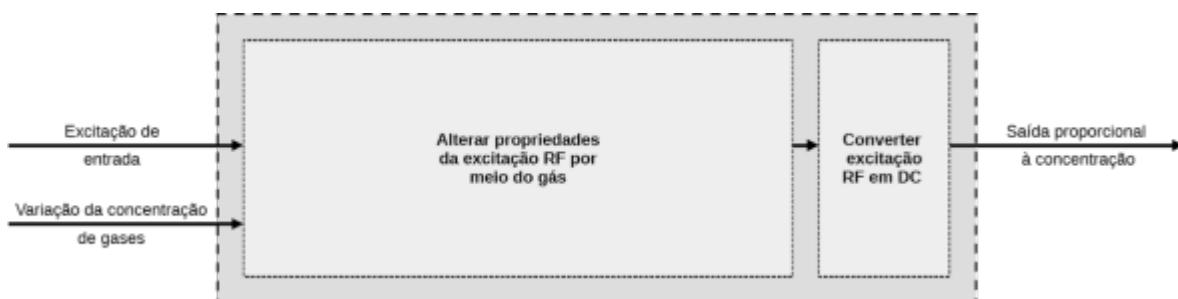


Fonte: Figura do autor.

O diagrama funcional simplificado da Figura 1 mostra quais as entradas e saídas do sistema, direcionando os esforços de pesquisa com clareza. Nessa figura, a excitação de entrada é o sinal de micro-ondas, e o sinal de saída uma tensão contínua, relacionada à concentração de gás injetado no sensor.

Para realizar tal medição, dentre as diversas metodologias propostas na literatura, propõe-se um sistema que faz uso da mudança da velocidade de propagação de uma onda eletromagnética em um meio gasoso para estimar qual a permissividade elétrica da atmosfera em análise, como ilustrado na Figura 2. Este método, apesar de ser menos sensível na maioria dos casos, produz um sensor que pode ser utilizado em banda larga, o que potencialmente auxiliar na seletividade para a acetona.

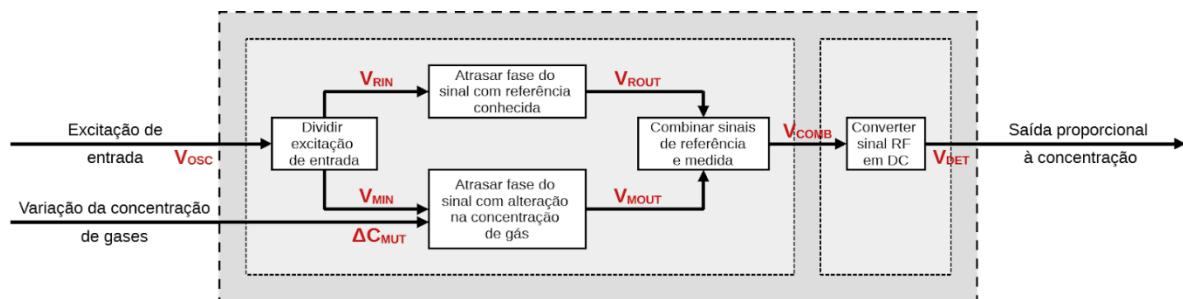
Figura 2 - Diagrama Transparent-Box do Sistema



Fonte: Figura do autor.

O diagrama equacional do sistema da Figura 3 apresenta os blocos que constituem o sensor projetado, e que devem ser individualmente projetados para atender às especificações.

Figura 3 - Diagrama Equacional do Sistema



Fonte: Figura do autor.

As condições de contorno que esclarecem sob quais condições físicas tais medidas deverão ocorrer, são dadas pelos distúrbios aos quais as entradas do sistema podem ser submetidas. As condições mais importantes consideradas são:

- Atmosfera sob análise
 - Concentração da atmosfera sob análise: **0.01% (100 ppm) → 10%**
 - Temperatura da atmosfera sob análise: **23 °C → 25 °C**
- Excitação de Entrada
 - Frequência da excitação de entrada: **4 GHz → 6 GHz**
 - Potência da excitação de entrada: **0 dBm**
- Materiais sensíveis para deposição no sensor:
 - Nanotubos de carbono
 - Grafeno

Adicionalmente, de acordo com a revisão bibliográfica realizada, destacam-se algumas das métricas associadas ao desempenho do sensor de gases com maior importância:

- Sensibilidade ($\frac{\partial V_{DET}}{\partial C_{MUT}}$)
- Seletividade ($\frac{\partial V_{DET}}{\partial C_x}, x \neq MUT$)
- Limite de Detecção ($\min(\Delta C_{MUT})/\Delta V_{DET} \neq 0$)

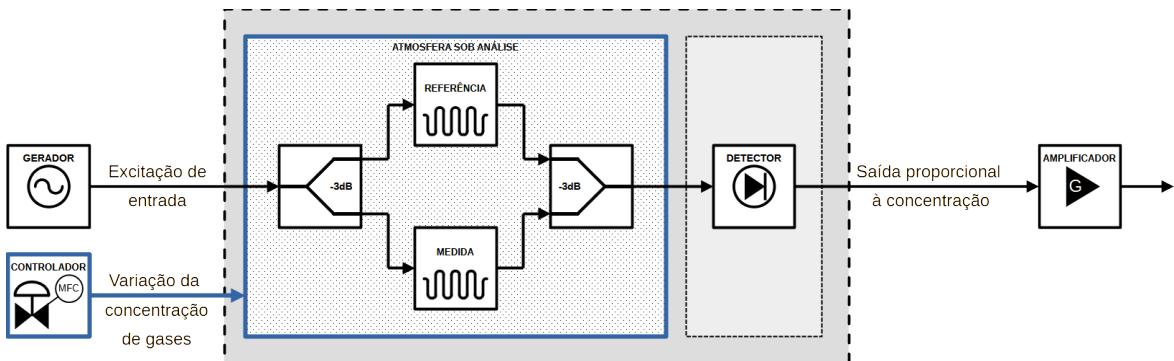
3. 1. 2. DEFINIÇÃO DE ESTRUTURAS ESPECÍFICAS DO SISTEMA

[COMO SE PRETENDE CONSTRUIR O SISTEMA PARA QUE AS MÉTRICAS SEJAM ALCANÇADAS?]

Como já abordado em seções anteriores, a proposta da pesquisa é calcada na utilização de linhas de transmissão planares como elementos sensores na caracterização eletromagnética de atmosferas gasosas de interesse, não só devido à sua versatilidade construtiva, mas também devido ao seu tamanho e custo reduzidos.

Para concretização do diagrama funcional elaborado na Figura 3, foi concebido o sistema da Figura 4, no qual são esclarecidas quais as estruturas de micro-ondas a serem projetadas, simuladas, construídas e caracterizadas.

Figura 4 - Diagrama Construtivo do Sistema



Fonte: Figura do autor.

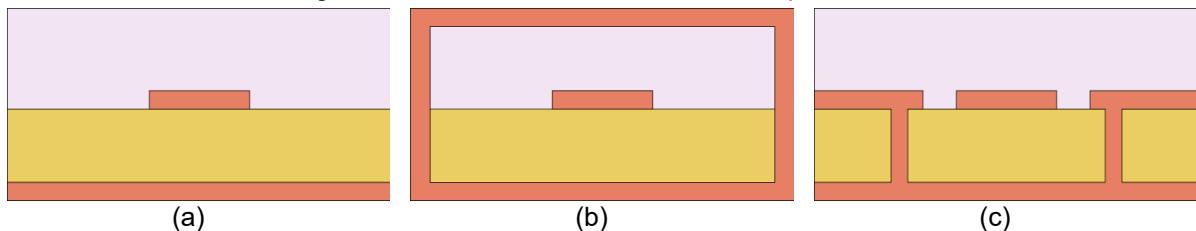
No sistema proposto, um sinal harmônico de RF na faixa de micro-ondas com potência e frequência escolhidos de maneira arbitrária é gerado por uma fonte apropriada; e injetado em uma linha de referência e uma linha sensível por meio de um divisor de potência. A diferença de fase entre as linhas de referência e de medição é então transformada em uma variação da amplitude por meio da combinação dos sinais no combinador de potência. Por fim, a onda na saída do combinador é então retificada por um detector, fornecendo uma tensão DC que é proporcional à amplitude da tensão de saída, e amplificada até um nível adequado por meio de um estágio amplificador de saída.

Note-se que tanto a geração de excitação senoidal na entrada do sistema, quanto a amplificação do sinal de saída do sistema não fazem parte do escopo do projeto. Logo, cada um desses blocos será realizado por equipamentos externos.

Outra ressalva a ser realizada diz respeito à grande gama de **metodologias construtivas** e topologias das estruturas que compõe os blocos construtivos salientados na Figura 4. Linhas de transmissão planares podem ser de diversos tipos (Figura 5), como: linha de microfita (*microstrip line*); linha de microfita coberta (*embedded microstrip line*); guia de ondas coplanar (*coplanar waveguide*); etc. Cada método

de linha de transmissão planar apresenta uma série de vantagens e desvantagens devido à configuração de campo imposta pela disposição de condutores e dielétricos.

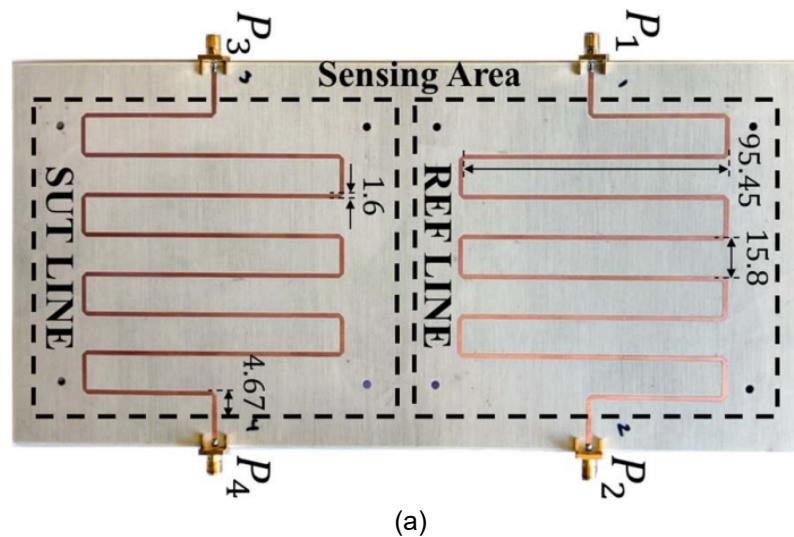
Figura 5 - Métodos construtivos de linhas planares

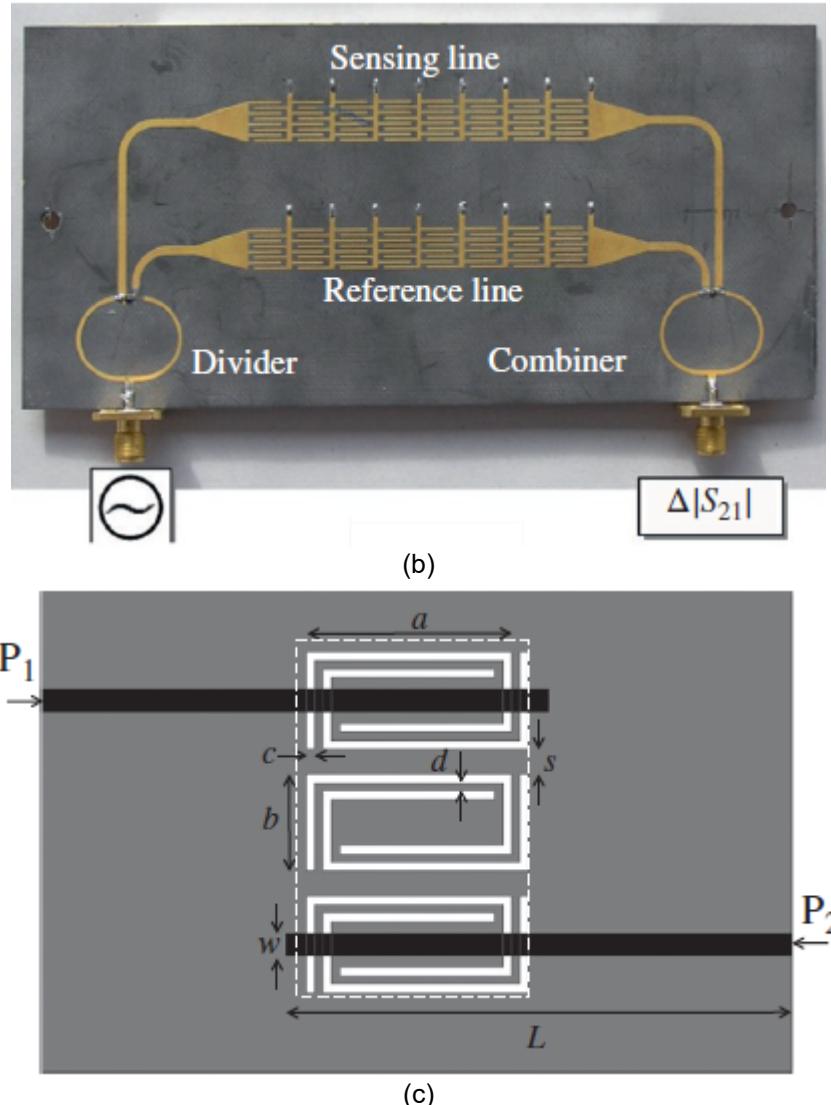


Fonte: Figura do autor. (a) Linha de microfita. (b) Linha de microfita coberta. (c) Guia de ondas coplanar aterrado

Por sua vez, cada bloco funcional que compõe as partes do circuito (Figura 4) possui diversas **realizações**.

Figura 6 - Topologias de estruturas de atraso de fase





Fonte: (a) Linha de transmissão de meandro utilizada por [24]. (b) Linha de transmissão CRLH reportada em [25]. Linha de transmissão EIW reportada em [26](c).

Na Figura 6, por exemplo, são mostradas algumas realizações para estruturas utilizadas em sensores baseados no distúrbio do atraso de fase. Diversos autores fazem uso de linhas de meandro simples, tais como em [27-28]. Por outro lado, outros estudos reportam a utilização de linhas de transmissão CRLH (*Composite Right/Left Handed*) [25], [27], [28], e linhas de transmissão de onda eletro indutiva (EIW) [26], para aumento substancial da sensibilidade do sensor para uma mesma área de sensoriamento.

3. 2. ANÁLISE DIFERENCIAL DO SISTEMA

[O QUE É E QUAL SERÁ A UTILIDADE DA ANÁLISE DIFERENCIAL DO SISTEMA?]

Como mencionado anteriormente, o processo de transdução escolhido para este trabalho é a variação do atraso de fase (θ) da linha de sensoriamento, que deverá refletir uma mudança na concentração de um composto gasoso (C_{MUT}). Contudo, a relação entre a mudança de fase e a mudança de concentração depende de diversos fatores. Deste modo, assim como realizado em [29], optou-se por analisar cada etapa do processo de transdução por meio da análise de equações parciais, denominada neste trabalho como uma análise diferencial do sistema.

[QUAL A DESCRIÇÃO DE CADA ITEM QUE DESCREVE A DINÂMICA DO SISTEMA?]

De acordo com a definição do problema e escopo do projeto, objetivo final almejado é a maximização da sensibilidade da resposta, ou seja, a maximização da variação da saída do sistema (∂V_{DET}) com relação à variação da concentração de gases presentes na atmosfera (∂C_{MUT}). Fazendo uso da equação acima, percebe-se que tal relação depende de:

- Como a variação da concentração de gás na atmosfera influencia na permissividade relativa equivalente da mistura de gases presentes ($\frac{\partial \varepsilon_{MUT}}{\partial C_{MUT}}$);
- Como a variação da permissividade da mistura de gases ($\partial \varepsilon_{MUT}$) influencia na variação da permissividade efetiva ($\partial \varepsilon_{eff}$) do meio guiado ($\frac{\partial \varepsilon_{eff}}{\partial \varepsilon_{MUT}}$).
- Como a variação da permissividade efetiva do meio guiado influencia na variação do atraso de fase (θ) ao qual a excitação de entrada da estrutura de medição é submetida ($\frac{\partial \theta}{\partial \varepsilon_{eff}}$)

- Como a variação da fase da estrutura de medição influencia na variação da tensão resultante após a combinação das ondas na estrutura de medição e da estrutura de referência ($\frac{\partial |V_{COMB}|}{\partial \theta}$).

- Como a variação da tensão após a estrutura de soma de ondas guiadas influencia na variação da tensão detectada pela estrutura de conversão RF para CC ($\frac{\partial V_{DET}}{\partial |V_{COMB}|}$).

[QUAL É A RELAÇÃO QUE DESCREVE O COMPORTAMENTO DINÂMICO DO SISTEMA?]

Todas as relações descritas anteriormente podem ser summarizadas por meio de uma única equação composta por derivadas parciais (Eq. 1), as quais descrevem cada ponto de interesse a ser abordado pelo projeto de pesquisa em questão.

$$(Eq. 1) \quad \frac{\partial V_{DET}}{\partial C_{MUT}} = \frac{\partial \epsilon_{MUT}}{\partial C_{MUT}} \cdot \frac{\partial \epsilon_{eff}}{\partial \epsilon_{MUT}} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial \epsilon_{eff}} \cdot \frac{\partial |V_{COMB}|}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial V_{DET}}{\partial |V_{COMB}|}$$

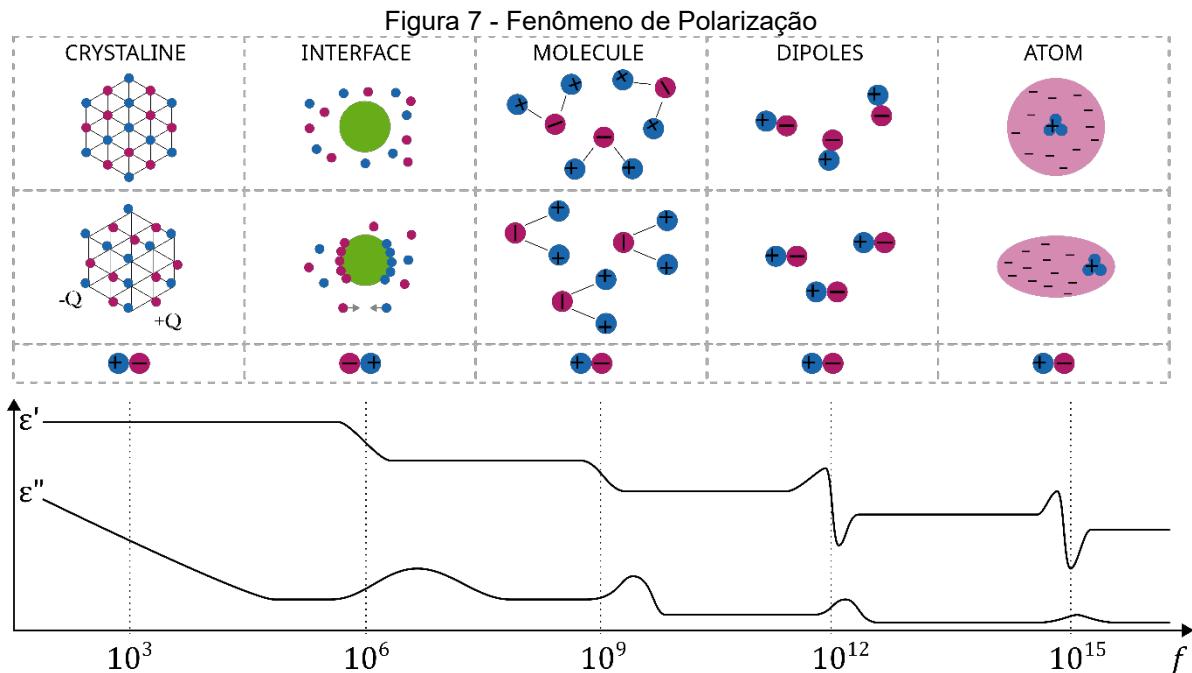
Uma discussão mais aprofundada de cada fenômeno é realizada nos próximos parágrafos, elaborando de forma quantitativa cada etapa do processo de transdução.

Permissividade e Concentração do MUT

[O QUE É, FUNDAMENTALMENTE, A PERMISSIVIDADE ELÉTRICA?]

Quando se aplica um campo elétrico a qualquer material, suas estruturas internas reagem, sofrendo deformações. Se essa excitação externa é periódica, apenas algumas das estruturas que compõem o material reagem ao campo imposto. Frequências maiores, com comprimentos de onda menores excitam estruturas me-

nores. A Figura 7 ilustra os fenômenos de polarização e sua influência sobre a permissividade elétrica em função da frequência do sinal de RF a que o material é exposto.



Fonte: Figura do autor. Inspirada por [30].

Fundamentalmente, a permissividade elétrica é uma propriedade macroscópica dos materiais, que quantifica a capacidade que têm de armazenar energia elétrica. A permissividade é uma grandeza de natureza complexa, cuja parte imaginária é associada às perdas durante o processo de polarização; e a parte real é associada à proporção de energia armazenada quando excitado por um campo externo.

O mecanismo de armazenamento de energia se dá por meio da deformação/indução de dipolos dentro do material em diversas escalas, a depender da frequência. Como pode se verificar na Figura 7, frequências menores interagem basicamente com estruturas maiores, alterando estruturas cristalinas e entre moléculas. Por

outro lado, frequências de excitação maiores, com comprimentos de onda menores, passam desapercebidas por tais macroestruturas, e excitam primariamente ligações entre átomos e, no extremo, as próprias estruturas dentro de cada átomo.

A teoria relevante para descrição da permissividade e essencialmente, do fenômeno de polarização é baseada nos trabalhos realizados por Claussius-Mossoti [31], cuja equação de mesmo nome relaciona a polarizabilidade molar (Π) [cm^3/mol] de um material, à sua permissividade real (ϵ') e sua polarizabilidade molecular (α_{MUT}) [cm^3].

$$(\text{Eq. 2}) \Pi_{MUT} = \frac{\epsilon' - 1}{\epsilon' + 2} \cdot [V]_{MUT} = \frac{4\pi}{3} N_A \cdot \alpha_{MUT},$$

onde N_A é o número de Avogadro [$1/\text{mol}$] e $[V]$ o volume molar ocupado pelo material [cm^3/mol].

Dadas as hipóteses utilizadas na construção da equação de Claussius-Mossoti, ao longo dos anos inúmeros autores realizaram modificações à sua estrutura, ampliando sua utilização e acurácia.

[O QUE SÃO AS LEIS DE MISTURA DE GASES?]

Quando tratamos de materiais compostos por mais de uma substância, o cálculo da permissividade efetiva da mistura torna-se desafiador. Em primeira análise, o cálculo da polarizabilidade efetiva da mistura (Π_{MIX}) pode ser simplificado a uma simples ponderação linear em relação ao volume ocupado por cada substância dentro do material. Contudo, é importante ressaltar que com exceção de mistura de gases apolares, há interação entre os dipolos formados por cada substância.

Deste modo, há um grande número de abordagens e de equações que buscam modelar o comportamento dielétrico de um material com base em seus componentes individuais. Teorias tais como as de Silberstein [32] e Landau-Lifshitz-Loyenga (LLL) [33], [34] fazem parte de um conjunto de trabalhos que modela o comportamento da mistura como uma Lei de Potência entre as permissividades da mistura e de seus componentes (Eq. 3).

$$(Eq. 3) \quad \varepsilon_{mix}^{\beta} = x_A \cdot \varepsilon_A^{\beta} + x_B \cdot \varepsilon_B^{\beta},$$

onde ε_{mix} , ε_A e ε_B são as permissividades da mistura e de cada material que a compõe (A e B); x_A e x_B são as frações molares de cada componente; e β é o coeficiente da lei de potência.

Em geral, as formulações de Silberstein ($\beta=1$) e LLL ($\beta=1/3$) são utilizadas sob hipótese de que não há interação entre as moléculas de A e B e, portanto, não há depolarização induzida. Adicionalmente, ambas as formulações perdem acurácia frente a componentes cujas permissividades possuem magnitudes distintas [35].

Por outro lado, os trabalhos realizados por Maxwell Garnett [6-7], Bruggeman [38], Polder-Van Santeen [39], Loor [40], Böttcher [41] buscam otimizar os modelos de mistura ao fazerem considerações a respeito do formato das inclusões de uma substância dentro de um material (considerando-as esféricas em geral). Estas formulações foram posteriormente unificadas na “Lei de Mistura Unificada”, descrita por Sihvola [42].

$$(Eq. 4) \quad \frac{\varepsilon_{mix} - \varepsilon_h}{\varepsilon_{mix} + 2\varepsilon_h + v(\varepsilon_{mix} - \varepsilon_h)} = \sum_{i=1}^N f_i \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_h}{\varepsilon_i + 2\varepsilon_h + v(\varepsilon_{mix} - \varepsilon_h)}$$

No caso da formulação de Bruggeman, não há distinção entre o meio isotrópico h e as inclusões i de N substâncias diferentes. De modo a que,

$$(Eq. 5) \sum_{i=1}^N f_i \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_{mix}}{\varepsilon_i + 2\varepsilon_{mix}} = 0, \text{ para } \sum_{i=1}^N f_i = 1$$

Em ambos os casos é esperado que as inclusões de permissividade ε_i sejam de formato esférico e estejam rodeadas por uma substância isotrópica de permissividade ε_h . Contudo, apesar de realizarem ajustes no campo local por meio de informações a respeito do formato das inclusões, ainda não há interações entre as substâncias que compõe o material.

[QUAL A LEI DE MISTURA DE GASES QUE SERÁ ADOTADA NESTE TRABALHO?]

No caso específico do trabalho em questão, duas situações são de interesse: a mistura de gases úmidos (vapor de água) e a mistura de gases com solventes apolares, tais como acetona. Para ambos os cenários, a permissividade das misturas pode ser aproximada pelas equações de Maxwell-Garnett ou pela equação de Clausius-Mossoti, as quais serão comparadas ao final.

Ao se substituir a polarizabilidade induzida (α) da equação de Claussius-Mossoti (2) pela somatória de todas as polarizabilidades induzidas (α_i) das i substâncias que compõe a mistura de gases de interesse, tem-se que [43]:

$$(Eq. 6) \Pi_{MIX} = \frac{\varepsilon_{MIX} - 1}{\varepsilon_{MIX} + 2} \cdot [V_{MIX}] = \sum_i^N \frac{\varepsilon_i - 1}{\varepsilon_i + 2} \cdot [V_i] \cdot \frac{N_i}{N_{MIX}}, \text{ para } N_{MIX} = \sum_i^N N_i$$

Deste modo,

$$(Eq. 7) \frac{\varepsilon_{MIX} - 1}{\varepsilon_{MIX} + 2} \cdot [V_{MIX}] = \Pi_{MIX} = \sum_i^N x_i \cdot \Pi_i,$$

onde N_i é o número de moléculas do i -ésimo componente em N_{MIX} é o número de moléculas total da mistura.

Ressalta-se que na expressão acima são utilizadas as polarizabilidades molares de cada substância que compõe o material em vez de suas permissividades. Tal

opção foi realizada por dois motivos. Primeiramente, as polarizabilidades molares de compostos “puros” tais como O₂, N₂ e Ar são amplamente catalogadas [44], [45], [46], em contraste às suas permissividades [47]. O segundo motivo pelo qual se deu preferência ao tratamento com as polarizabilidades molares é a facilidade de se estender o tratamento da polarizabilidade molar para gases não ideais e gases polares, tais como a água.

O tratamento da mistura de gases considerando sua compressibilidade surge a partir dos trabalhos realizados por Buckingham-Pople em [48], [49], [50], no qual a análise da polarizabilidade molar é sistematizada por uma expansão de Virial em termos do volume molar, de modo a que:

$$(Eq. 8) \Pi = \frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} \cdot [V] = A + \frac{B}{[V]} + \frac{C}{[V]^2} + \dots$$

Por meio dessa expansão de potências do volume molar [V], fenômenos de compressão dos gases podem ser levados em consideração por meio dos coeficientes de Virial **A**, **B** e **C** [51], [52], [53], [54].

Adicionalmente, para misturas que envolvem gases polares, tais como a água, o cálculo da polarizabilidade molar é modificado, refletindo os avanços na teoria de polarização feita de Debye [41], [55]. Nela, entende-se que a polarização molar (Π) não só é composta pela polarizabilidade molecular como visto na equação de Clausius-Mossoti (2), mas também por uma componente referente ao momento de dipolo (μ) inerente à molécula. Deste modo,

$$(Eq. 9) \Pi_{polar} = \frac{4\pi}{3} \cdot N_A \cdot \left(\alpha + \frac{\mu^2}{3kT} \right), \text{ ou } \Pi_{polar} = A + \frac{B}{T},$$

onde T é a temperatura [K] e k a constante de Boltzman.

Devido em parte à sua simplicidade, a teoria formulada por Debye é valida apenas para gases polares em baixa concentração. Mesmo com tais considerações, as formulações de trabalhos como os de Vega-Maza [56], Cuccaro [57] e Huang [58], fazem uso de tais equações e apresentam alto grau de concordância com os valores reportados na literatura.

Os valores utilizados para das constantes de Debye A e B, foram extraídos de tabelas tais como as reportadas por [59], [60].

[QUAL A CONCLUSÃO DA RELAÇÃO ENTRE CONCENTRAÇÃO DE GASES E PERMISSIVIDADE EM LINHAS DE TRANSMISSÃO?]

Dado tal contexto, fica claro que a permissividade de um material não depende só das moléculas que o compõe, mas também de como estão dispostas e ligadas entre si. Assim como nos trabalhos realizados em [56], [57], [58], será utilizada uma formulação para a permissividade baseada no cálculo da polarizabilidade molar da mistura (Π_{MIX}) e da densidade molar (ρ_{MIX}).

Como será explorado melhor na seção de montagens experimentais, o vapor de água deionizada será utilizada como padrão para calibração do dispositivo, permitindo que inferências com acurácia satisfatória da permissividade de compostos tais como acetona sejam feitas.

Para misturas que contém umidade, será utilizada a seguinte formulação:

$$(Eq. 10) \quad \varepsilon_{MIX} = \frac{2 \cdot \rho_{MIX} \cdot \Pi_{MIX} + 1}{1 - \rho_{MIX} \cdot \Pi_{MIX}},$$

onde

$$(Eq. 11) \quad \rho_{MIX} = \frac{1}{[V_{MIX}]} = \frac{P/RT}{(1 + B_{MIX} \cdot P/RT)} \text{ e } \Pi_{MIX} = \sum_i^{air} x_i \cdot \Pi_i + x_w \cdot \left(A_w + \frac{B_w}{T} \right)$$

Por sua vez, para a Acetona, que é um composto apolar, não se faz necessária a utilização da equação de Debye, simplificando a formulação para:

$$(Eq. 12) \quad \varepsilon_{MIX} = \frac{2 \cdot \rho_{MIX} \cdot \Pi_{MIX} + 1}{1 - \rho_{MIX} \cdot \Pi_{MIX}},$$

onde

$$(Eq. 13) \quad \rho_{MIX} = \frac{1}{[V_{MIX}]} = \frac{P/RT}{(1 + B_{MIX} \cdot P/RT)} \text{ e } \Pi_{MIX} = \sum_i^{air} x_i \cdot \Pi_i + x_{acetone} \cdot \Pi_{acetone}$$

Com base nas formulações acima, foram construídas tabelas (Tabela 1 e Tabela 2) que permitem entender as dimensões das grandezas a serem medidas durante os experimentos realizados. Para determinar a faixa de permissividade a ser estudada, foi utilizada a (Eq. 14), que estabelece a relação entre a fração molar (utilizada na estimativa da permissividade) e a saturação relativa de ar com vapores de compostos voláteis.

$$(Eq. 14) \quad r_{mol}(T) = \frac{n_x}{n_{air} + n_x} = \frac{\frac{p_x V}{RT}}{\frac{p_{air} V}{RT} + \frac{p_x V}{RT}} = \frac{p_x}{p_{air} + p_x} = \frac{p_x}{P_{amb}} = \frac{\frac{RS_x(T)}{100} \cdot p_{xs}(T)}{P_{amb}}$$

Para o caso de água, a saturação relativa é equivalente à umidade relativa. Para uma umidade relativa de 10% (25°C), por exemplo, espera-se que haja uma proporção molar de 0,31% (3,127 ppm) de moléculas de água e 99.69% de moléculas que compõe o “ar”. Por sua vez, com a mesma saturação relativa de acetona, espera-se uma proporção molar de 0,30% (3,026 ppm) de moléculas de acetona.

Nas tabelas 1 e 2 são mostrados os cálculos da permissividade para água deionizada e acetona pura.

Tabela 1 - Comparativo dos cálculos de permissividade para Água

RH [%]	X _{H₂O} [mol/mol] (Eq. 14)	X _{AIR} [mol/mol]	ε _{MAXWELL_GARNET} (Eq. 4)	ε _{POLARIZABILITY MIXING} (Eq. 7)	ε _{VIRIAL MIXING} (Eq. 10)
0,000	0,000000	1,000000	1,000538	1,000538	1,000538
0,100	0,000031	0,999969	1,000628	1,000628	1,000628
1,000	0,000313	0,999687	1,001442	1,001441	1,001442
10,000	0,003127	0,996873	1,009601	1,009597	1,009601
100,000	0,031271	0,968729	1,093697	1,093665	1,093665

Tabela 2 - Comparativo dos cálculos de permissividade para Acetona

RS [%]	X _{ACETONA} [ppm] (Eq. 14)	X _{AIR} [ppm]	ε _{MAXWELL_GARNET} (Eq. 4)	ε _{POLARIZABILITY MIXING} (Eq. 7)
0,000	0,000000	1,000000	1,000538	1,000538
0,100	0,000304	0,999696	1,001329	1,001329
1,000	0,003038	0,996962	1,008473	1,008470
10,000	0,030383	0,969617	1,081820	1,081795
100,000	0,303830	0,696170	2,075300	2,074984

Note-se que uma variação de 0 a 100% de umidade relativa acarreta a alteração da fração molar de aproximadamente 3,1 % de H₂O em ar ambiente. Ou seja, a cada mil moléculas de ar saturado com umidade, apenas 31 moléculas são de água. Por sua vez, a mesma variação de saturação relativa para acetona produz dispersões muito maiores (30 %).

Apesar da diferença entre as permissividades de ambas as substâncias ($ε_{H_2O} = 78,3$; $ε_{ACETONA} = 20,7$), percebe-se que a permissividade equivalente do meio é sempre maior para a presença de acetona.

Apesar de nas tabelas 1 e 2 não ser tão claro, por meio de uma análise das tabelas completas com cálculos para saturações de água deionizada e de acetona (APÊNDICE A) pode-se inferir que a utilização de misturas utilizando os coeficientes de Debye e de Virial só possuem diferença significativa para misturas em elevadas temperaturas ou elevadas concentrações. Em ambas as situações, a formulação de Virial é mais precisa por melhor equacionar as interações moleculares.

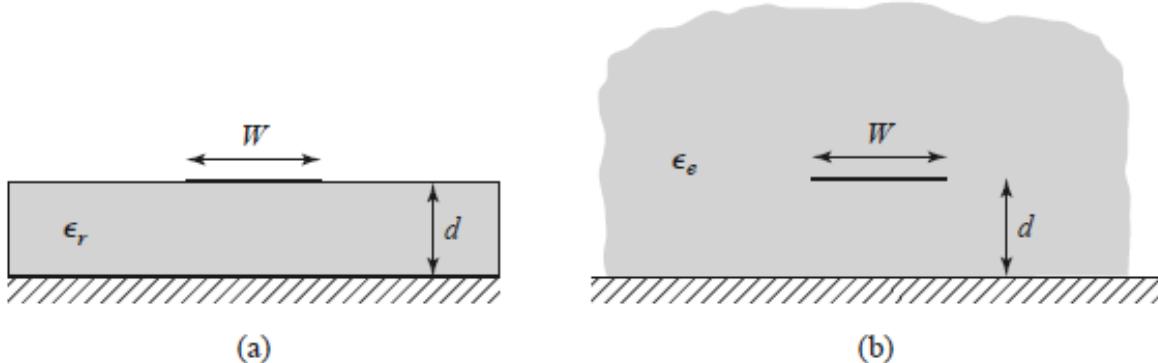
3.2.1. PERMISSIVIDADE EFETIVA E PERMISSIVIDADE DO MUT

[COMO PODEMOS DEFINIR A PERMISSIVIDADE EFETIVA DE UM GUIA DE ONDA?]

Como descrito na sessão anterior, a definição de permissividade de um material é definida na presença de um campo elétrico (E) uniforme, o qual induz os fenômenos de polarização. No caso de linha de transmissão de microfita utilizada no sensor desta pesquisa, a maior parcela do campo eletromagnético guiado pela estrutura propaga-se no interior do substrato. No entanto, uma parte desse campo irradia para fora do substrato e propaga-se no meio que circunda a microfita da linha de transmissão. Desta forma, a propagação do campo eletromagnético em linhas de microfita ocorre em um meio misto. Esse modo de propagação é denominado quase-TEM, apresentando uma permissividade elétrica efetiva que é função da permissividade do substrato em que foi fabricada a linha de microfita e da permissividade do meio que a envolve.

A permissividade efetiva da linha de microfita foi equacionada considerando a linha de microfita recoberta por ambiente de ar, com permissividade elétrica ϵ_0 . Aplicando-se uma transformação a geometria da linha de microfita apresentada na Figura 8 (a) foi mapeada em outro plano, gerando a geometria da Figura 8 (b), na qual o campo eletromagnético propaga-se um meio homogêneo com permissividade elétrica efetiva ϵ_e . Esse procedimento gerou equações sem solução analítica para o cálculo de ϵ_e , que foram aproximadas por equações simplificadas e de fácil utilização, obtidas por técnicas de ajuste de curva.

Figura 8 - Geometria equivalente de uma linha de microfita quasi-TEM.



Fonte: Ilustrações retiradas de [61]. (a) Geometria original. (b) Geometria equivalente, com substrato dielétrico de permissividade relativa ϵ_r , substituído por um meio homogêneo de permissividade efetiva ϵ_e equivalente.

[COMO TAIAS RELAÇÕES PODEM SER DESCRIPTAS PARA LINHAS DE TRANSMISSÃO PLANARES?]

Diversos autores [62], [63], [64], propuseram equações de projeto que são capazes de determinar a permissividade efetiva por meio de parâmetros físicos do substrato e da geometria da linha. Apesar das equações propostas serem precisas, muitas vezes sensores de micro-ondas fazem uso de linhas de transmissão não convencionais, tais como linhas artificiais. Métodos numéricos baseados no atraso de fase ou nos parâmetros de espalhamento de uma linha são muitas vezes instáveis ou não intuitivos [29], [65], [66], [67]. Devido a tais necessidades, ganham importância métodos numéricos que possam calcular a mudança da permissividade efetiva da linha por meio de resultados de simulações e que sejam intuitivos.

A metodologia escolhida para tal faz uso da energia elétrica armazenada (W_e), gerada pela propagação de uma onda (E, H) [61] em um meio qualquer de permissividade ϵ .

(Eq. 15)

$$W_e = \frac{\epsilon}{4} \cdot \int_V |E|^2 dv$$

Segundo a definição de permissividade efetiva, a energia armazenada na geometria equivalente deve ser idêntica à soma das energias armazenadas no substrato e no entorno de uma linha de transmissão. Deste modo, considerando que a linha de transmissão é rodeada de uma substância qualquer (MUT) com permissividade ϵ_{MUT} e volume V_{MUT} , tem-se que:

$$(Eq. 16) \quad W_{eff} = W_{tot} = W_{sub} + W_{MUT} \quad e \quad V_{eff} = V_{tot} = V_{sub} + V_{MUT}$$

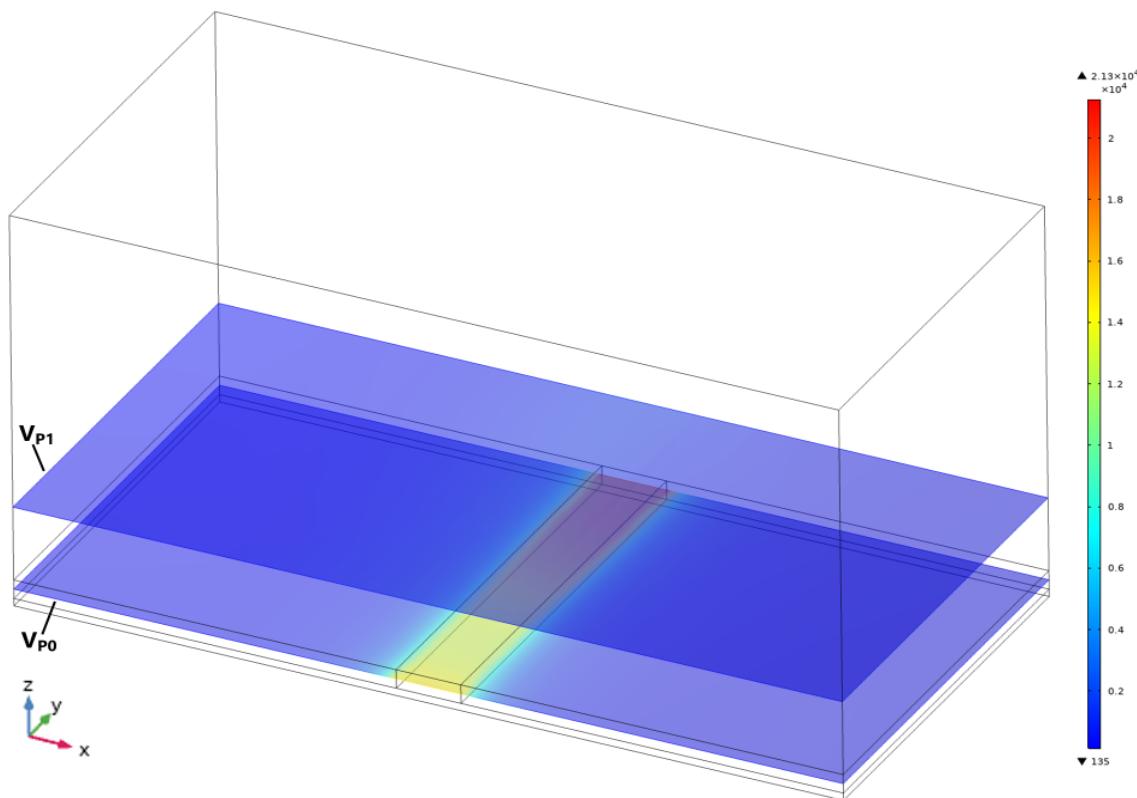
Então, por meio das equações anteriores conclui-se que a razão entre a soma das energias no substrato e no MUT e a soma ponderada das energias pela permissividade de cada volume é igual à permissividade efetiva da linha de transmissão.

$$(Eq. 17) \quad \epsilon_{eff} = \frac{W_{sub} + W_{MUT}}{W_{sub}/\epsilon_{sub} + W_{MUT}/\epsilon_{MUT}}$$

Para validar o resultado descrito na foram realizadas simulações eletromagnéticas tridimensionais (EM-3D) com o intuito de se calcular o valor da energia armazenada no substrato e no dielétrico acima da linha. O programa utilizado para tais simulações foi o COMSOL Multiphysics, mais especificamente o módulo de simulações eletromagnéticas EWM, que permite a criação de estruturas tridimensionais arbitrárias e operações matemáticas complexas nos resultados obtidos.

Figura 9 - Configuração de linha de microfita simulada no programa COMSOL Multiphysics ©

Linha de microfita configurada com $W = 0.950 \text{ mm}$; $H = 0.508 \text{ mm}$; e $L = 10.00 \text{ mm}$



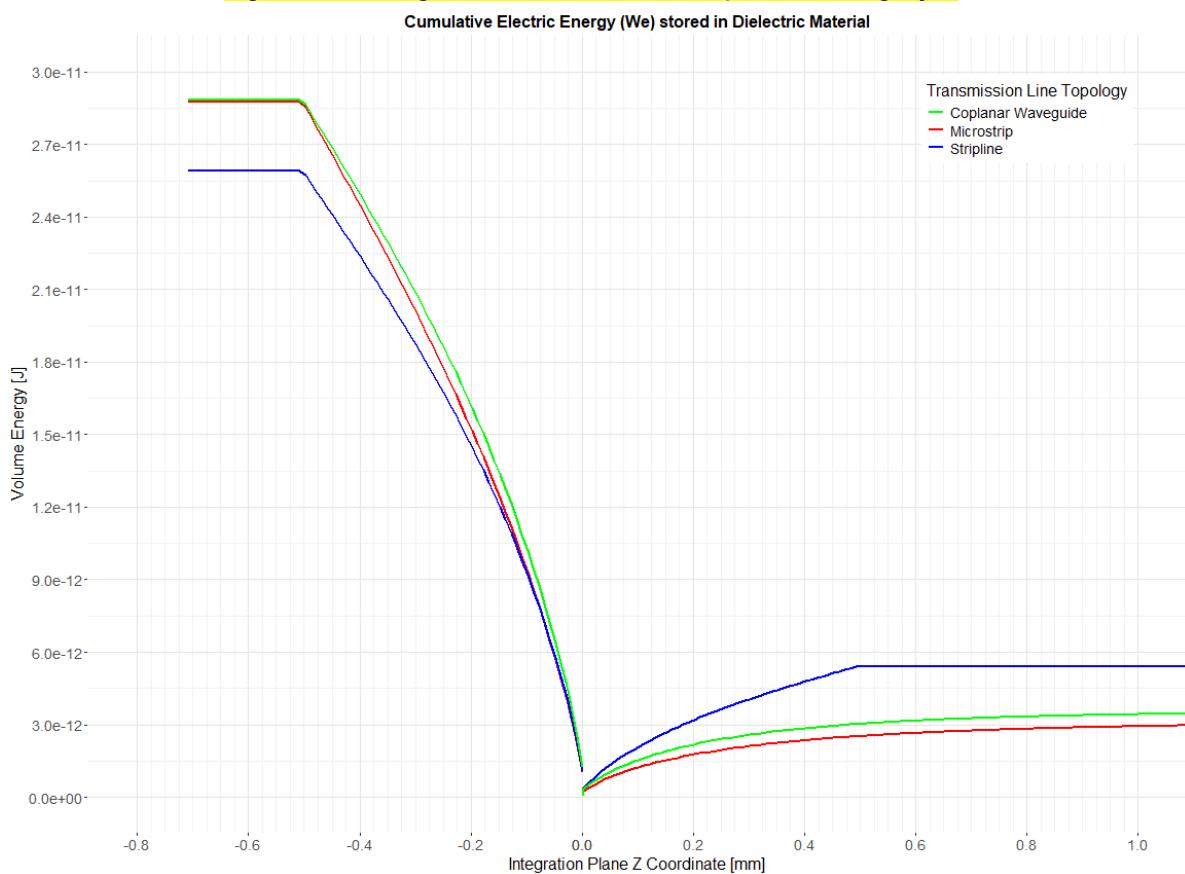
Fonte: Figura do autor.

Na figura Figura 9 encontra-se a configuração da linha de microfita utilizada na simulação. Para calcular a energia armazenada nos volumes de interesse primeiro dividiu-se o volume total da simulação (V) em secções paralelas à linha de microfita (V_{pi}). A energia de cada plano foi calculada (W_{pi}) e a somatória das energias em cada plano fornece qual a energia armazenada no volume de interesse (W_{SUB} , W_{MUT}).

$$(Eq. 18) \quad W_{\square} = \oint_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \frac{\epsilon}{4} \cdot \iint_{V_p} |E|^2 dv \right\} dz$$

Tal abordagem foi utilizada para melhor compreensão da habilidade que a estrutura de micro-ondas possui de confinar a energia dos campos passantes.

Figura 10 - Energia armazenada em cada plano de integração



Fonte: Figura do autor.

Na Figura 10 são plotados por meio do programa de análise matemática e estatística R, os resultados das simulações realizadas. Na figura os valores da distribuição cumulativa da energia ao longo do eixo z são medidos para as estruturas de microfita (vermelho), guia coplanar aterrada (verde) e stripline (azul). Com tais resultados em mãos, fica mais evidente a proporção de energia armazenada em cada estrutura. As linhas de microfita e das guias coplanares armazenam mais energia no substrato proporcionalmente às striplines, indicando que são menos sensíveis à presença de materiais de teste acima da linha.

Uma forma possível de se validar os resultados obtidos por simulação é realizar o cálculo da permissividade efetiva de cada estrutura e comparar com os resultados obtidos por equações de projeto já validadas no mundo real.

Tabela 3 - Comparação dos métodos de cálculo de Permissividade Efetiva (ϵ_{eff})

(Eq. 17)	ADS LineCalc (trocar Sierra Circuits por referência do Gupta)
Microstrip	
Stripline	
Coplanar Waveguide	

De forma mais genérica, para uma linha de transmissão qualquer, cujos campos passam por N materiais distintos (independentemente de localização):

$$(Eq. 19) \quad \epsilon_{eff} = \frac{\sum_N (W_i)}{\sum_N (W_i / \epsilon_i)}$$

A equação acima é válida, à priori, para qualquer configuração de linha de transmissão (ver APÊNDICE A).

[QUAL A CONCLUSÃO DA RELAÇÃO ENTRE CONCENTRAÇÃO DE GASES E PERMISSIVIDADE EM LINHAS DE TRANSMISSÃO PLANARES?]

Com isso, temos uma relação matemática clara que relaciona a permissividade relativa de materiais próximos à linha de transmissão e sua permissividade efetiva. Supondo o caso simples dado pela (Eq. 17), a sensibilidade de uma linha de transmissão para qualquer variação da permissividade de um material MUT é dada pela razão entre o quadrado da intensidade de campo (E) no volume do MUT e no volume total analisado.

$$(Eq. 20) \quad S_{MUT} = \frac{\partial \epsilon_{eff}}{\partial \epsilon_{MUT}} = \frac{\partial}{\partial \epsilon_{MUT}} \cdot \left(\frac{\frac{\epsilon_{SUB}}{4} \cdot \int_{V_{SUB}} |E|^2 dv + \frac{\epsilon_{MUT}}{4} \cdot \int_{V_{MUT}} |E|^2 dv}{\int_{V_{TOT}} |E|^2 dv} \right) = \frac{\int_{V_{MUT}} |E|^2 dv}{\int_{V_{TOT}} |E|^2 dv}$$

Tomando-se a equação acima, para aumentar a sensibilidade da linha de transmissão à variação da permissividade do MUT, devem ser escolhidas topologias que maximizem a intensidade do campo no volume do MUT.

3.2.2. DIFERENÇA DE FASE DOS SINAIS E PERMISSIVIDADE EFETIVA

[COMO A PERMISSIVIDADE EFETIVA AFETA O ATRASO DE FASE DE UMA ONDA QUE PASSA EM UM GUIA PLANAR?]

Em um regime de propagação Transversal Eletromagnética (TEM) ideal, os campos Elétrico e Magnético são transversais à direção de propagação da onda. Em uma linha de transmissão de comprimento l , a propagação de um campo de frequência ω , é dado por [61]:

$$(Eq. 21) \quad \frac{\Delta\theta}{l} = \beta = \frac{\omega \sqrt{\epsilon_r \mu_r}}{c}$$

Em uma linha de transmissão planar real os campos induzidos são obrigados a passar tanto pelo substrato, quanto pelo meio acima do substrato. Apesar de grande parte dos campos eletromagnéticos serem transversais à direção de propagação, uma pequena porção é paralela à propagação. Nesse caso, diz-se que a propagação é quasi-TEM, e a expressão anterior sofre pequenas modificações.

$$(Eq. 22) \quad \frac{\Delta\theta}{l} = \beta = \frac{\omega \sqrt{\epsilon_{eff} \mu_{eff}}}{c}$$

Deste modo, a mudança no atraso de fase devido à alteração da permissividade efetiva é proporcional à sua raiz quadrada; e sua sensibilidade proporcional ao inverso da raiz.

$$(Eq. 23) \quad S_{eff} = \frac{\partial \Delta\theta}{\partial \epsilon_{eff}} = \frac{\partial}{\partial \epsilon_{eff}} \cdot \left(\frac{l \cdot \omega \cdot \sqrt{\mu_{eff} \epsilon_{eff}}}{c} \right) = \left(\frac{l \cdot \omega}{2c} \cdot \sqrt{\frac{\mu_{eff}}{\epsilon_{eff}}} \right) = \left(\frac{l \cdot \omega}{2c} \cdot \eta \right)$$

[QUAL A CONCLUSÃO DA RELAÇÃO ENTRE PERMISSIVIDADE EFETIVA E O ATRASO DE FASE?]

Segundo a equação de sensibilidade (Eq. 23), é possível identificar algumas formas de otimização de sensores de micro-ondas previamente reportadas na literatura recente [29]. Técnicas de aumento do comprimento da linha (l) e a utilização de frequências (ω) mais elevadas são as mais comuns. Contudo, além delas, percebe-se que a utilização de substratos de baixa permissividade também auxilia na sensibilidade do transdutor, não só aumentando a sensibilidade do atraso de fase; mas também no aumento das linhas de campo que passam pelo MUT.

3. 2. 3. TENSÃO APÓS COMBINADOR E DIFERENÇA DE FASE DOS SINAIS

Como mencionado no início do texto a técnica de medição da variação da concentração do MUT se baseia na transdução do atraso de fase nas linhas de transmissão do sensor. Para tal, uma das possíveis estruturas a ser utilizada é a de divisão/combinação de potência, que efetivamente transforma uma diferença de fase em amplitude de onda, a ser medida em estágios subsequentes do sistema.

[O QUE É UM COMBINADOR DE POTÊNCIA?]

Tanto combinadores quanto divisores de potência são, em essência, a mesma estrutura, exceto pela da direção do fluxo de potência. Portanto, serão tratados aqui de forma intercambiável.

As estruturas mais básicas e fundamentais possuem três ou quatro portas, pelas quais realiza-se a soma das potências injetadas. Algumas das estruturas mais utilizadas são a de Wilkinson, Junção T e Híbridos de 90° ou 180° (ver APÊNDICE C). Geralmente, são definidas pelas matrizes de parâmetros de espalhamento (SP),

por meio das quais se estabelece a relação entre as tensões das portas. Em um combinador de Wilkinson, por exemplo, a matriz de espalhamento é dada por:

$$(Eq. 24) \quad S_{WILK} = -1/\sqrt{2} \cdot \begin{bmatrix} 0 & j & j \\ j & 0 & 0 \\ j & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

[COMO A DIFERENÇA DE FASE DOS SINAIS DE ENTRADA AFETA NO COMPORTAMENTO DO COMBINADOR?]

Tal distribuição nos informa que a tensão que aparece nas portas 2 e 3 não só são iguais entre si, como também possuem um atraso de fase relativo de 90° ($-j$) e ganho de $1/\sqrt{2}$ em relação à tensão injetada na porta 1. Além disso, é possível afirmar que a tensão na saída do combinador é igual à soma ponderada (pelos parâmetros de espalhamento) das tensões nas outras portas.

$$(Eq. 25) \quad V_1 = V_2 \cdot S_{21} + V_3 \cdot S_{31}$$

Como no sistema de transdução proposto serão utilizadas estruturas de divisão e combinação, as tensões V_2 e V_3 podem ser consideradas iguais, de modo a que:

$$(Eq. 26) \quad V_{comb} = \frac{V}{\sqrt{2}} \cdot (e^{j\theta_2} + e^{j\theta_3}) \rightarrow |V_{comb}| = \frac{V}{\sqrt{2}} \cdot |e^{j\theta_2} + e^{j\theta_3}| = \sqrt{2}V \cdot \left| \cos\left(\frac{\Delta\theta}{2}\right) \right|$$

Como é de se esperar, quando os sinais nas portas 2 e 3 estão em fase, $\Delta\theta$ é nulo e a tensão na saída do combinador V_{comb} é máxima e igual a $\sqrt{2}V$; enquanto que quando em oposição de fase a tensão na saída do combinador é nula.

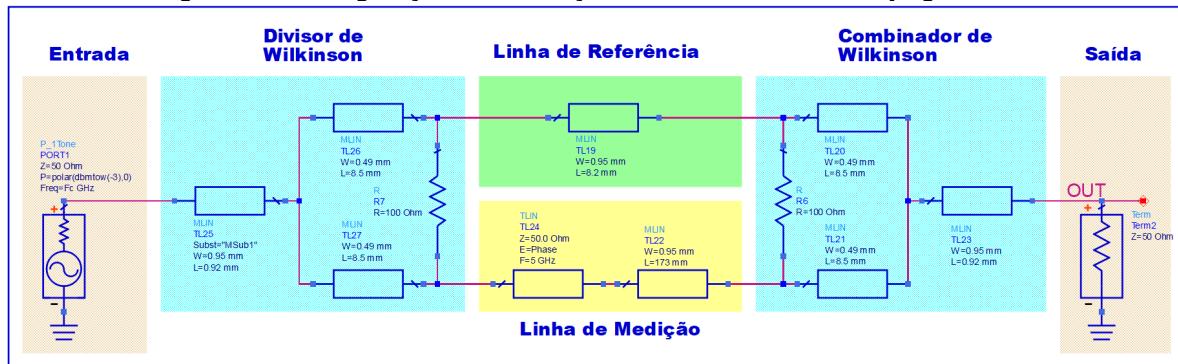
Com a tensão do combinador em mãos, fica claro que a sensibilidade da tensão combinada V_{comb} para a diferença de fase $\Delta\theta$ entre as linhas de referência e de transdução segue o mesmo padrão senoidal defasado de 90° .

$$(Eq. 27) \quad \frac{\partial V_{comb}}{\partial \Delta\theta} = \frac{\partial}{\partial \Delta\theta} \left(\sqrt{2}V \cdot \cos\left(\frac{\Delta\theta}{2}\right) \right) = -\frac{\sqrt{2}}{2}V \cdot \sin\left(\frac{\Delta\theta}{2}\right)$$

Com base na (Eq. 27) conclui-se que a região de operação de maior sensibilidade ocorre em torno de $\Delta\theta=180^\circ$.

Uma simulação SPICE (Figura 11) utilizando o software Advanced Design System (ADS) mostra que de fato, esse é o caso.

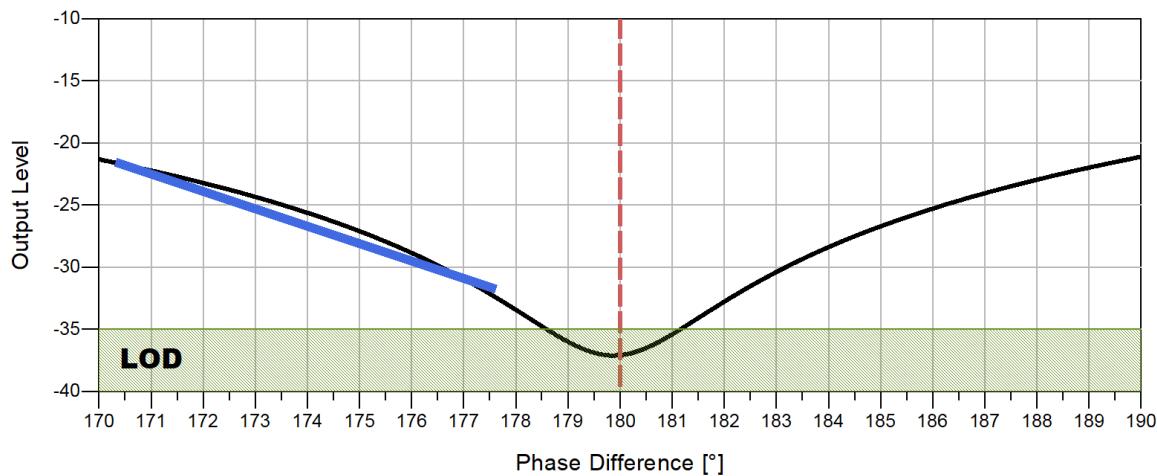
Figura 11 - Configuração da simulação SPICE no software Keysight ADS



Fonte: Figura do autor.

Apesar de matematicamente ótimo, um ponto de operação escolhido muito próximo de $\Delta\theta=180^\circ$ é suscetível a pelo menos dois problemas (Figura 12).

Figura 12 - Resultados da simulação de ponto de operação



Fonte: Figura do autor.

Primeiramente, como $\Delta\theta=180^\circ$ é o ponto de mínimo, os resultados obtidos podem se aproximar dos limites de detecção do sistema (LoD), o que prejudicaria a

medição como um todo. Adicionalmente, como as respostas para defasagens positivas e negativas em torno de $\Delta\theta=180^\circ$ passam pelos mesmos valores de amplitude, é impossível distinguir qual o valor exato da defasagem e portanto da permissividade.

3. 2. 4. SIMULAÇÕES DE LINHAS DE TRANSMISSÃO

Na seção anterior, foram utilizados programas de simulação eletromagnética tridimensionais (EM-3D) para validação e compreensão dos aspectos que compõe a análise diferencial do sistema proposto. Nesta seção serão utilizados os algoritmos de método dos momentos (MoM) e de elementos finitos (FEM) do ADS para simulação de circuitos planares de micro-ondas, utilizadas para uma abordagem orientada a projeto, validando numericamente o design proposto em uma série de etapas.

[NO QUE CONSISTIU O TRABALHO REALIZADO NA ÁREA DE SIMULAÇÃO DE ESTRUTURAS DE MICRO-ONDAS?]

Em cada etapa descrita a seguir foi utilizada a (Eq. 1) como guia para avaliação do desempenho esperado do sensor proposto. Na primeira etapa, foi realizado um estudo apenas da linha de transmissão, sem quaisquer estruturas de divisão e/ou combinação associadas, visando compreensão do atraso de fase nominal da linha proposta. Numa segunda etapa, foram adicionados o divisor e combinador de Wilkinson para conversão de diferença de fase em amplitude. Por fim, foi adicionado um detector ao sistema, transformando a amplitude RF em uma amplitude retificada CC, a qual pode ser medida por multímetro de bancada.

3.2.5. DESIGN E SIMULAÇÃO DE SISTEMA DE CONVERSÃO CONCENTRAÇÃO-FASE

Inicialmente optou-se pela realização das linhas de sensoriamento por meio de estruturas de microfita devido a sua facilidade construtiva e de análise. Nesta etapa, o parâmetro de projeto a ser avaliado é o comprimento da linha de sensoriamento responsável pela mudança da sensibilidade da variação de fase em relação à permissividade elétrica do MUT. Para estimar a permissividade da atmosfera gasosa (ar seco em H₂O e ar seco em Acetona) foi utilizada a (Eq. 4) como já foi validado pela Tabela 1 e (Eq. 4). Para transformação da permissividade do MUT em permissividade efetiva utilizou-se a (Eq. 17), considerando os resultados obtidos para a configuração de microfita descrita na e no APÊNDICE C. Com a permissividade efetiva em mãos, a diferença de fase é calculada por meio da (Eq. 22), para uma frequência nominal de $f=5\text{ GHz}$ e comprimentos arbitrários. Nas tabelas 1 e 5, são mostrados os resultados da mudança de fase relativa à atmosfera com ar seco para comprimentos de 250, 500, 750 e 1000.

Tabela 4 - Avaliação de atraso de fase para atmosfera com H₂O

RH [%]	EMUT (Eq. 4)	ϵ_{EFF} (Eq. 17)	$\Delta\theta_{REL}$ ($l=250\text{ mm}$)	$\Delta\theta_{REL}$ ($l=500\text{ mm}$)	$\Delta\theta_{REL}$ ($l=750\text{ mm}$)	$\Delta\theta_{REL}$ ($l=1000\text{ mm}$)
0,000	1,000538	3,355825	0,000	0,000	0,000	0,000
0,100	1,000628	3,355853	0,011	0,022	0,034	0,045
1,000	1,001441	3,356099	0,112	0,224	0,337	0,449
10,000	1,009597	3,358571	1,125	2,249	3,374	4,499
100,000	1,093665	3,384048	11,539	23,077	34,616	46,155

Tabela 5 - Avaliação de atraso de fase para atmosfera com Acetona

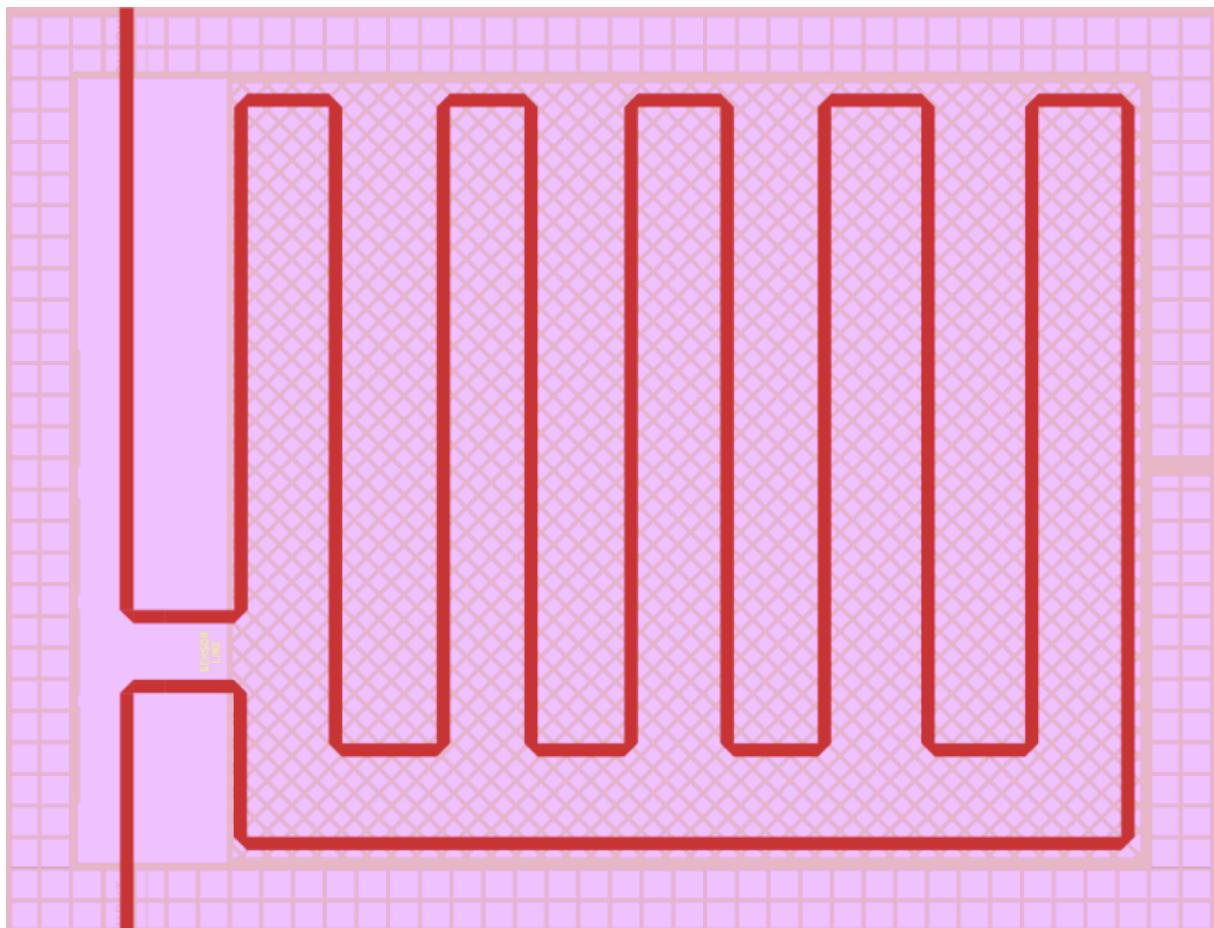
RS [%]	E_{MUT} (Eq. 4)	ϵ_{EFF} (Eq. 17)	$\Delta\theta_{REL}$ ($l=250\text{ mm}$)	$\Delta\theta_{REL}$ ($l=500\text{ mm}$)	$\Delta\theta_{REL}$ ($l=750\text{ mm}$)	$\Delta\theta_{REL}$ ($l=1000\text{ mm}$)
0.0	1,000538	3,355825	0,000	0,000	0,000	0,000
0.1	1,001329	3,356065	0,098	0,197	0,295	0,393
1.0	1,008470	3,358229	0,985	1,969	2,954	3,939
10.0	1,081795	3,380451	10,071	20,141	30,212	40,283
100.0	2,074984	3,681445	130,317	260,635	390,952	521,269

Com base nos resultados das tabelas anteriores, percebe-se que são necessárias linhas de transmissão razoavelmente compridas para que hajam mudanças de permissividade consideráveis, mesmo para o caso da acetona, que apresenta maior variação de fase. Como a construção de placas de circuito impresso (PCI) da ordem de dezenas de centímetro é inviável, algumas metodologias de redução de tamanho são necessárias. A mais popular é a utilização de linhas de meandro, ocupando de modo efetivo toda a área de uma PCI.

No projeto realizado inicialmente (Figura 13), foi realizado o design de uma linha de microfita com aproximadamente 675 mm, equivalente a uma mudança de fase de aproximadamente $0,03^\circ$ para 0.1% de concentração de H_2O . O espaçamento entre as linhas que compõe o meandro foi escolhido como maior que cinco vezes a altura do dielétrico do substrato para evitar acoplamentos consideráveis entre as linhas. No total, o sensor proposto ocupa uma área de 86 mm x 66 mm, equivalente a 5676 mm². Adicionalmente, a PCI será mantida dentro de uma caixa metalizada, utilizada não só como barreira contra interferências eletromagnéticas externas que possam ser acoplados ao sensor, mas também como um recipiente vedado para manutenção das atmosferas de teste. Mais informações a respeito da construção do sensor serão dados na seção de Fabricação de Protótipos.

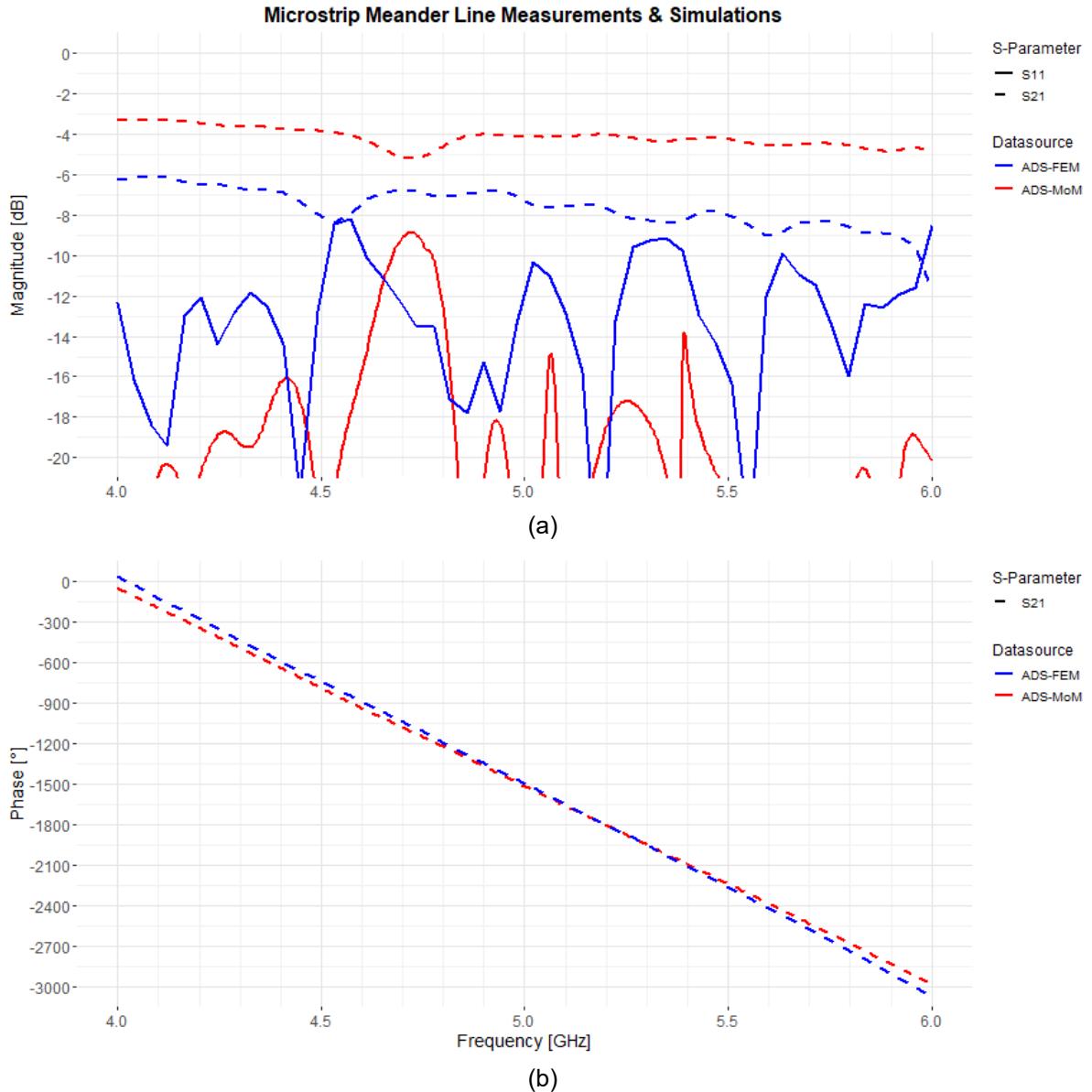
Para verificar a validade do design realizado (Figura 13), foram feitas simulações no ADS MoM e FEM. Na Figura 14 são mostrados os parâmetros de espalhamento de transmissão e reflexão.

Figura 13 - Simulação de leiaute no ADS da linha de transdução proposta



Fonte: Figura do autor.

Figura 14 - Parâmetros de Espalhamento da linha proposta



Fonte: Figura do autor. (a) Magnitudes dos parâmetros S11 e S21 em linha sólida e pontilhada respectivamente. (b) Fase do parâmetro S21. Em ambas figuras simulações no MoM estão em vermelho e simulações no FEM em azul.

A perda de transmissão para linha de 675 mm calculada por meio da ferramenta LineCalc (quasi-estáticas) resulta em 3.566 dB. Por sua vez para simulações no MoM a mesma perda foi de aproximadamente 4 dB; e para o algoritmo de FEM de quase 7 dB. Tais discrepâncias são esperadas, uma vez que o método dos mo-

mentos aproxima as equações de Maxwell por meio das funções de Green e do método de Garlekin, enquanto o método dos elementos finitos resolve as equações completas de Maxwell. Com exceção das frequências no entorno de 4.5 GHz, todo o intervalo apresentou desempenho satisfatório.

3.2.6. DESIGN E SIMULAÇÃO DE SISTEMA DE CONVERSÃO FASE-AMPLITUDE

Numa segunda etapa, as estruturas de divisão e combinação de potência foram adicionadas à simulação (Figura 15), transformando a diferença de fase entre as linhas de referência e sensoriamento em uma tensão harmônica (V_{COMB}), cuja amplitude é proporcional à diferença de fase, de acordo com a (Eq. 26).

Nesta ocasião, a adição das estruturas de Wilkinson reduziu o comprimento da linha de sensoriamento para aproximadamente 612 mm, enquanto uma linha de referência de 10 mm foi criada.

Tabela 6 - Avaliação de variação de tensão para atmosfera com H₂O

RH [%]	ϵ_{MUT} (Eq. 4)	ϵ_{EFF} (Eq. 17)	θ_{MEAS} ($l=10\text{ mm}$)	θ_{REF} ($l=612\text{ mm}$)	$\Delta\theta_{REL}$	V_{COMB} ($f=5.0\text{ GHz}$)	ΔV_{COMB} ($f=5.0\text{ GHz}$)
0,000	1,000538	3,355825	109,990	6731,361	141,372	0,330748	0,000000
0,100	1,000628	3,355853	109,990	6731,389	141,399	0,330526	0,000222
1,000	1,001441	3,356099	109,994	6731,636	141,642	0,328522	0,002226
10,000	1,009597	3,358571	110,035	6734,114	144,080	0,308355	0,022393
100,000	1,093665	3,384048	110,451	6759,608	169,157	0,094485	0,236263

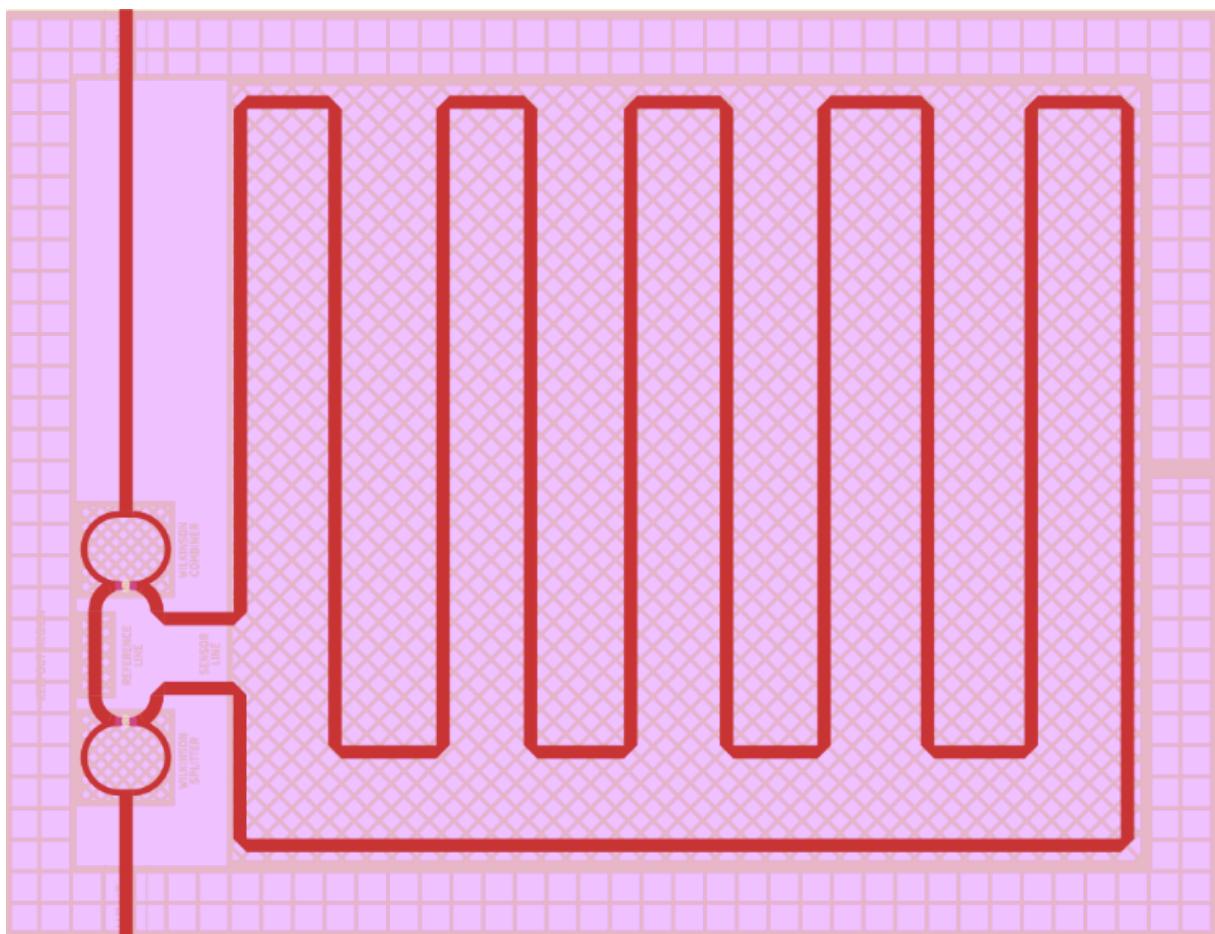
Tabela 7 - Avaliação de variação de tensão para atmosfera com Acetona

RS [%]	ϵ_{MUT} (Eq. 4)	ϵ_{EFF} (Eq. 17)	θ_{MEAS} ($l=10\text{ mm}$)	θ_{REF} ($l=612\text{ mm}$)	$\Delta\theta_{REL}$	V_{COMB} ($f=5.0\text{ GHz}$)	ΔV_{COMB} ($f=5.0\text{ GHz}$)
0.0	1,000538	3,355825	109,990	6731,361	141,372	0,330748	0,000000
0.1	1,001329	3,356065	109,993	6731,602	141,608	0,328799	0,001949
1.0	1,008470	3,358229	110,029	6733,772	143,743	0,311150	0,019598
10.0	1,081795	3,380451	110,392	6756,014	165,622	0,125145	0,205603
100.0	2,074984	3,681445	115,202	7050,378	95,176	0,674459	-0,343711

Por meio das tabelas 6 e 7, espera-se que a diferença de fase inicial seja ao redor de 140° em 5 GHz. Para uma tensão de entrada de 1 V pode-se esperar uma resposta estimada de 0.22 mV para uma variação de 0.1% de umidade relativa e uma resposta de 1.9 mV para uma variação de 0.1% de saturação de acetona.

Novamente, foram realizadas simulações no simulador ADS (Figura 15) para averiguar se os modelos numéricos seguem o comportamento esperado pela teoria.

Figura 15 - Simulação de leiaute no ADS para transdutor proposto

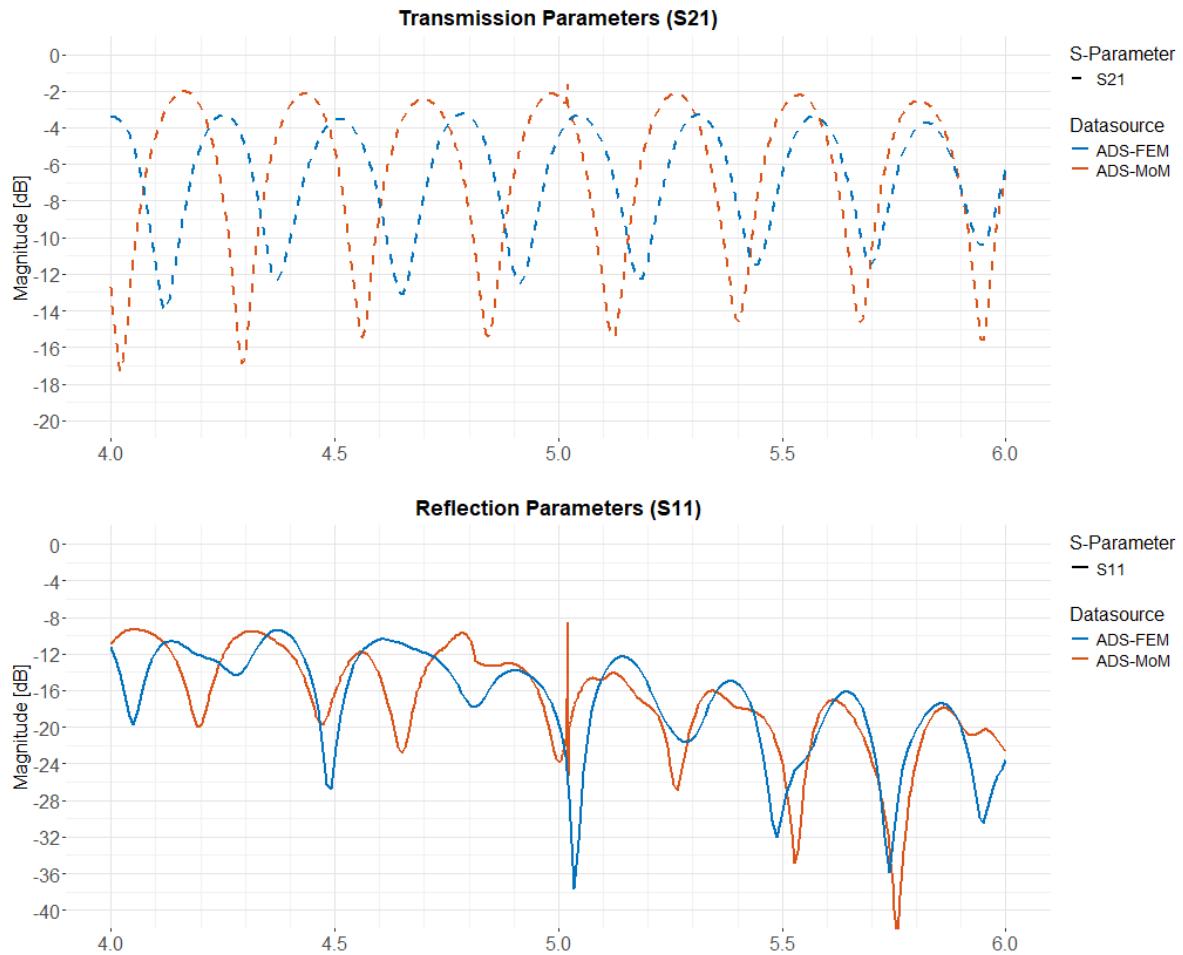


Fonte: Figura do autor.

Como pode ser visto na Figura 16, a presença de uma linha de referência com um comprimento l_1 e uma linha de medição com comprimento $l_2 \gg l_1$ resulta em diversos pontos de interferência construtiva e destrutiva ao longo das frequências

entre 4 GHz a 6 GHz. A distância entre dois pontos de interferência destrutiva adjacentes é dado pela razão entre os comprimentos das linhas [??].

Figura 16 - Parâmetros de espalhamento do transdutor de fase para amplitude

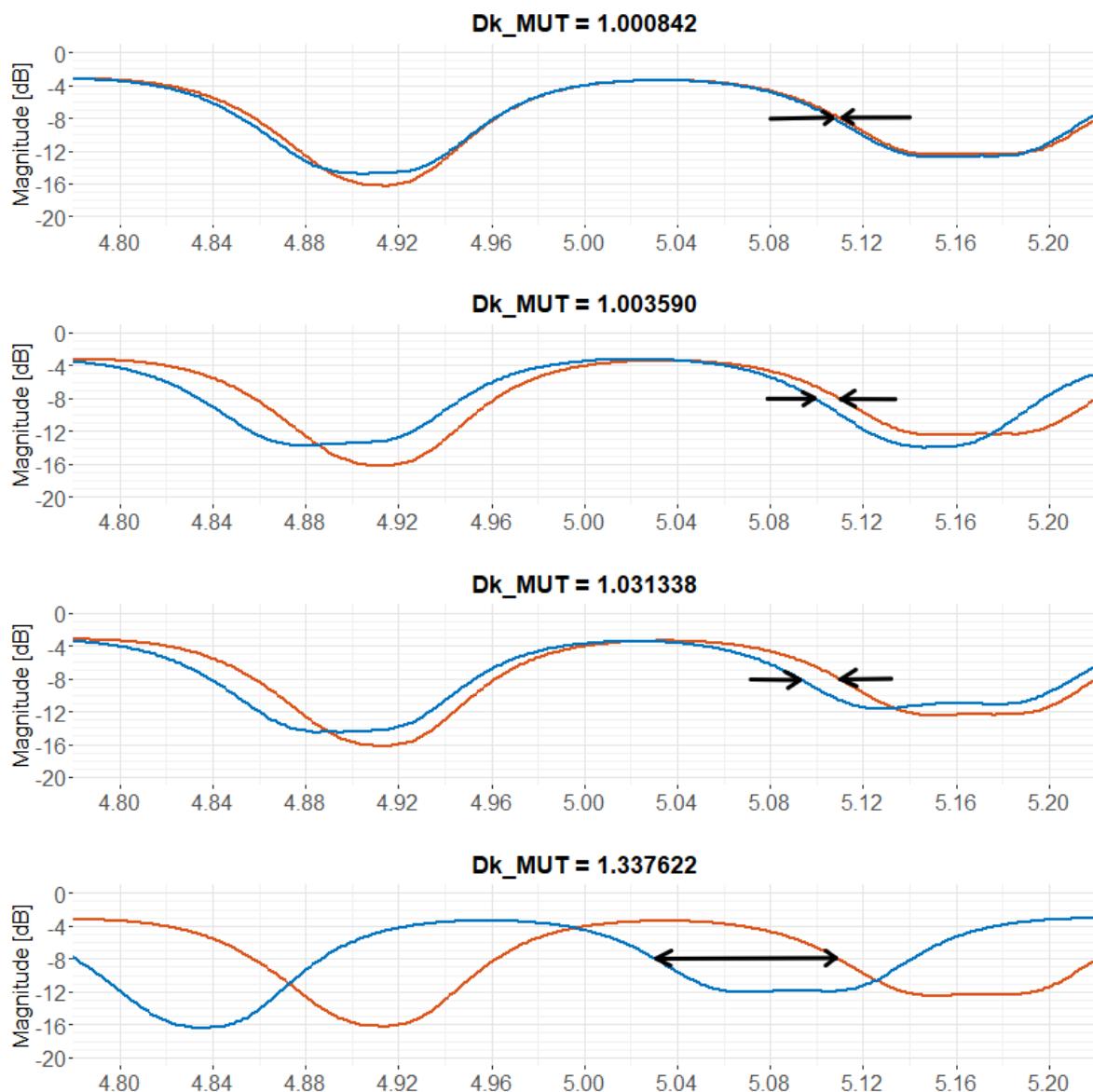


Fonte: Figura do autor. Magnitudes dos parâmetros S11 e S21 em linha sólida e pontilhada respectivamente. Simulações no MoM estão em laranja e simulações no FEM em azul.

Novamente, a diferença entre as simulações no MoM e no FEM são condizentes com os resultados anteriores: perdas maiores e um deslocamento da fase da linha de sensoriamento, identificado na Figura 16 como um deslocamento dos nós de interferência construtiva e destrutiva em frequência.

Enquanto nos resultados apresentados pela Figura 16 a atmosfera gasosa é o ar seco ($\epsilon_{MUT}=1,000538$), na Figura 17 são mostrados os resultados de simulações FEM de diversas simulações com permissividades da atmosfera que seriam encontradas pelas concentrações de umidade descritas na Tabela 6.

Figura 17 - Resposta do transdutor para variações de permissividade atmosférica

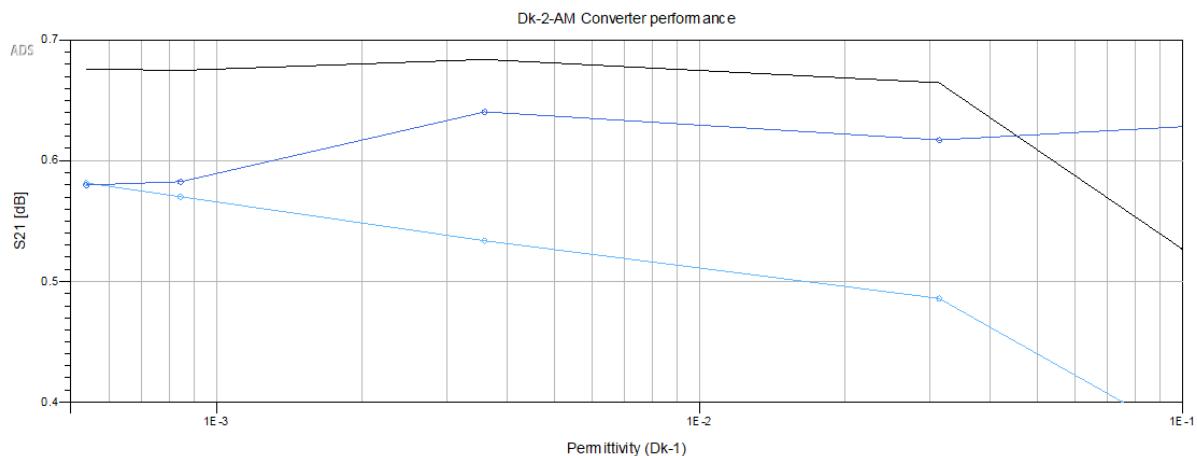


Fonte: Figura do autor. Resposta esperada do sistema de transdução para diversas condições de atmosfera de teste.

Por meio dos resultados acima, pode-se identificar que há uma variação pequena da resposta em 5 GHz (apenas xx para uma variação de 0.1% de umidade), indicando que a frequência escolhida não possui alta sensibilidade. Contudo, ao escohermos frequências mais distantes do pico de resposta construtiva entre as linhas, a variação da resposta melhora significativamente, produzindo resultados mais condizentes com os esperados pela Tabela 6.

Na Figura 18, foram selecionadas três frequências arbitrárias (4.96 GHz, 5.00 GHz e 5.10 GHz) para comparar a sensibilidade das linhas na faixa de permissividades avaliadas.

Figura 18 - Sensibilidade esperada das linhas



Fonte: Figura do autor.

[rodar simulação com frequência fixa e Dk variando]

3. 3. FABRICAÇÃO DE PROTÓTIPOS

[PORQUE FORAM PRODUZIDOS PROTÓTIPOS?]

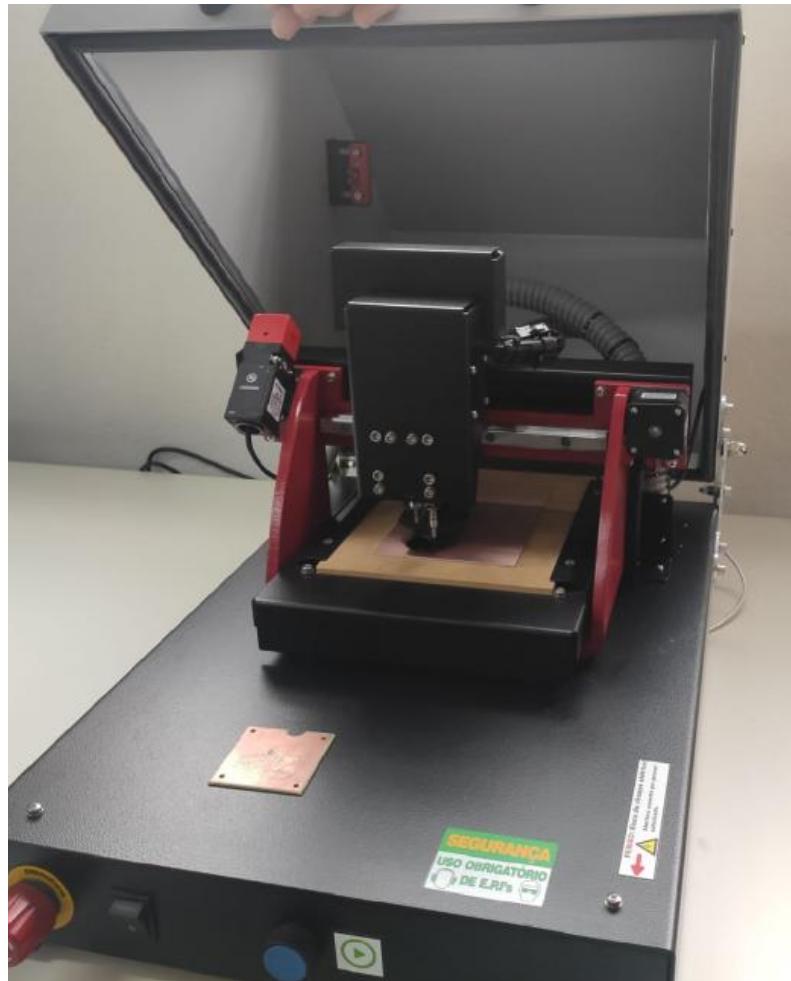
Ao longo da pesquisa realizada foram produzidos protótipos de estruturas de micro-ondas para validação da teoria estudada e do design de sensor de gases proposto. Até o momento foram produzidos e utilizados dois protótipos, cada qual utilizado em uma etapa distinta dos ensaios realizados.

[QUAIS PROTÓTIPOS FORAM PRODUZIDOS E PARA QUAL PROPÓSITO?]

Como mencionado anteriormente, foi utilizado o substrato Kappa 438 da Rogers Corporation, com espessura de 20 mils (0.504 mm); permissividade $\epsilon_s = 4.10 \pm 0.08$, e tangente de perdas $\delta = 0.005$ em 10 GHz; com uma camada de 17 μm de cobre em ambas as superfícies. Para realizar a interface entre os cabos vindos dos equipamentos e os circuitos projetados, foram utilizados conectores SMA (*SubMiniature version A*), cujas faixas de operação se estendem até 12 GHz segundo o fabricante.

A fabricação dos protótipos foi realizada por meio de microfresamento CNC (Figura 19) realizado nas dependências do prédio de engenharia elétrica da POLI.

Figura 19 - Fabricação de linhas de transmissão por meio de microfresamento



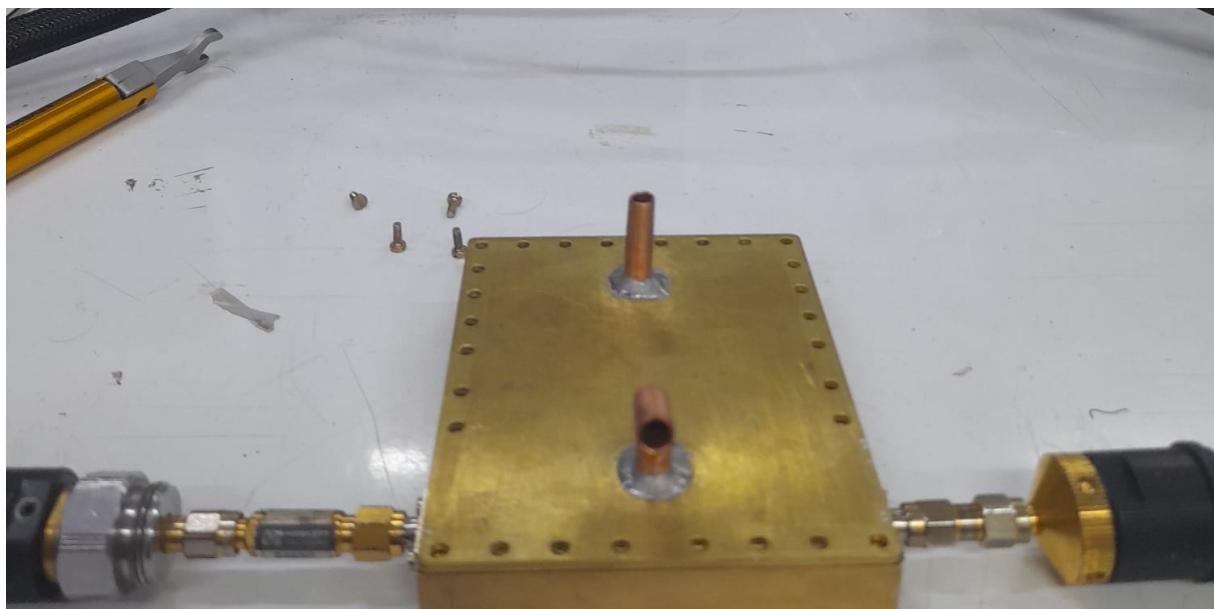
Fonte: Figura do autor.

Em todas as estruturas produzidas foi realizado procedimento de niquelação para evitar a formação de camadas de óxido que possam interferir nas medições em altas concentrações de vapores de líquidos dispersos na atmosfera. Na receita de niquelação implementada foi utilizada uma densidade de corrente de 10 mA/cm^2 por 45 minutos para deposição.

Adicionalmente, para realizar os ensaios com gases propostos, foi projetado e construída uma câmara de ensaios, Figura 20. A câmara foi usinada de um bloco sólido de latão e furos de fixação foram adicionados para garantir bom aterramento

das estruturas e vedação para os ensaios. Além disso, foram utilizados tubos de cobre soldados ao latão para permitir a passagem de misturas de gases. Entrada e saída foram posicionadas em lados opostos para encorajar a mistura ao longo de toda a estrutura de micro-ondas.

Figura 20 - Câmara de ensaios fabricada

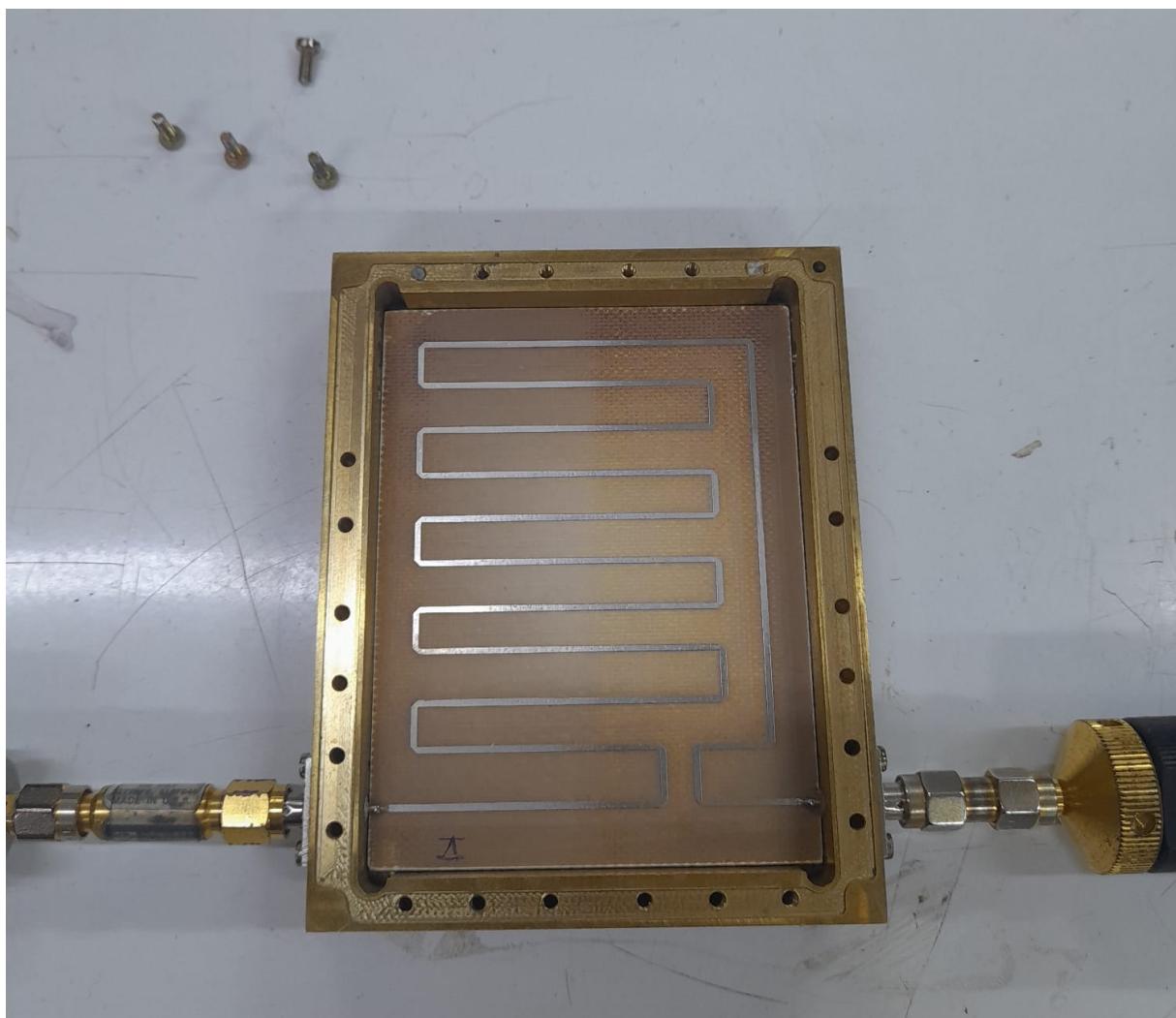


Fonte: Figura do autor.

A primeira estrutura de micro-ondas produzida foi a de um meandro de linha de microfita tradicional (Figura 21), utilizado não só para validação do ambiente de simulação utilizado, como também para aprofundamento do estudo do princípio de transdução.

Adicionalmente, essa estrutura será utilizada para melhor compreensão das interações geradas em micro-ondas pela introdução de nanoestruturas orgânicas como nanotubos de carbono.

Figura 21 - Meandro de Microfita

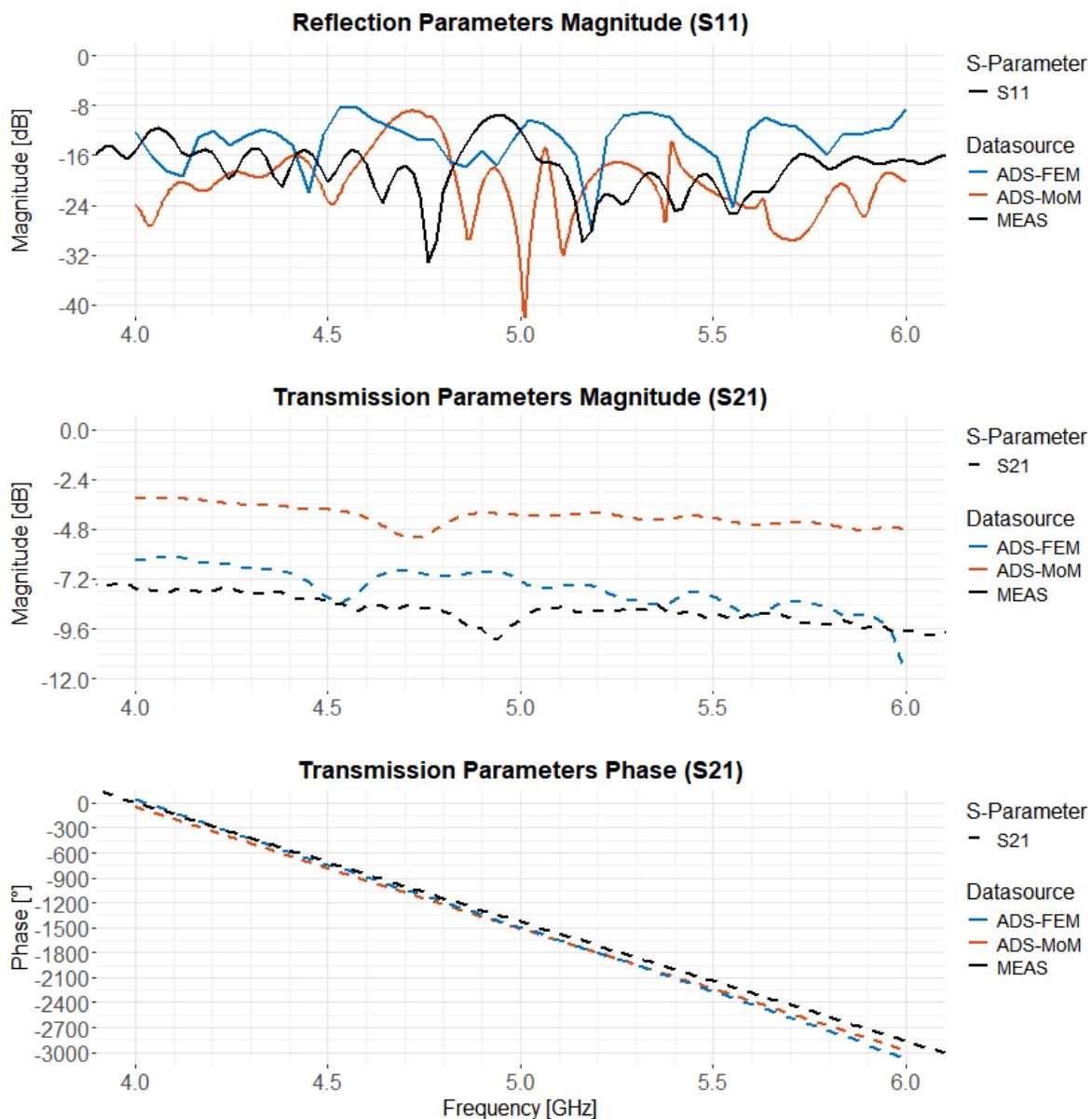


Fonte: Figura do autor.

Após ser devidamente presa na câmara de ensaios e soldada aos conectores de entrada, o protótipo produzido foi caracterizado por meio do uso do analisador vetorial (VNA) HP8722D, devidamente calibrado na faixa de interesse (4 GHz a 6 GHz).

Os resultados obtidos das medidas são mostrados na Figura 22, na qual se compara a medida, em preto, com as simulações realizadas, em laranja (MoM) e azul (FEM). Apesar de algumas divergências próximas da faixa de 6 GHz, há boa concordância entre a simulação, principalmente aquela de elementos finitos, e a linha construída e medida em bancada.

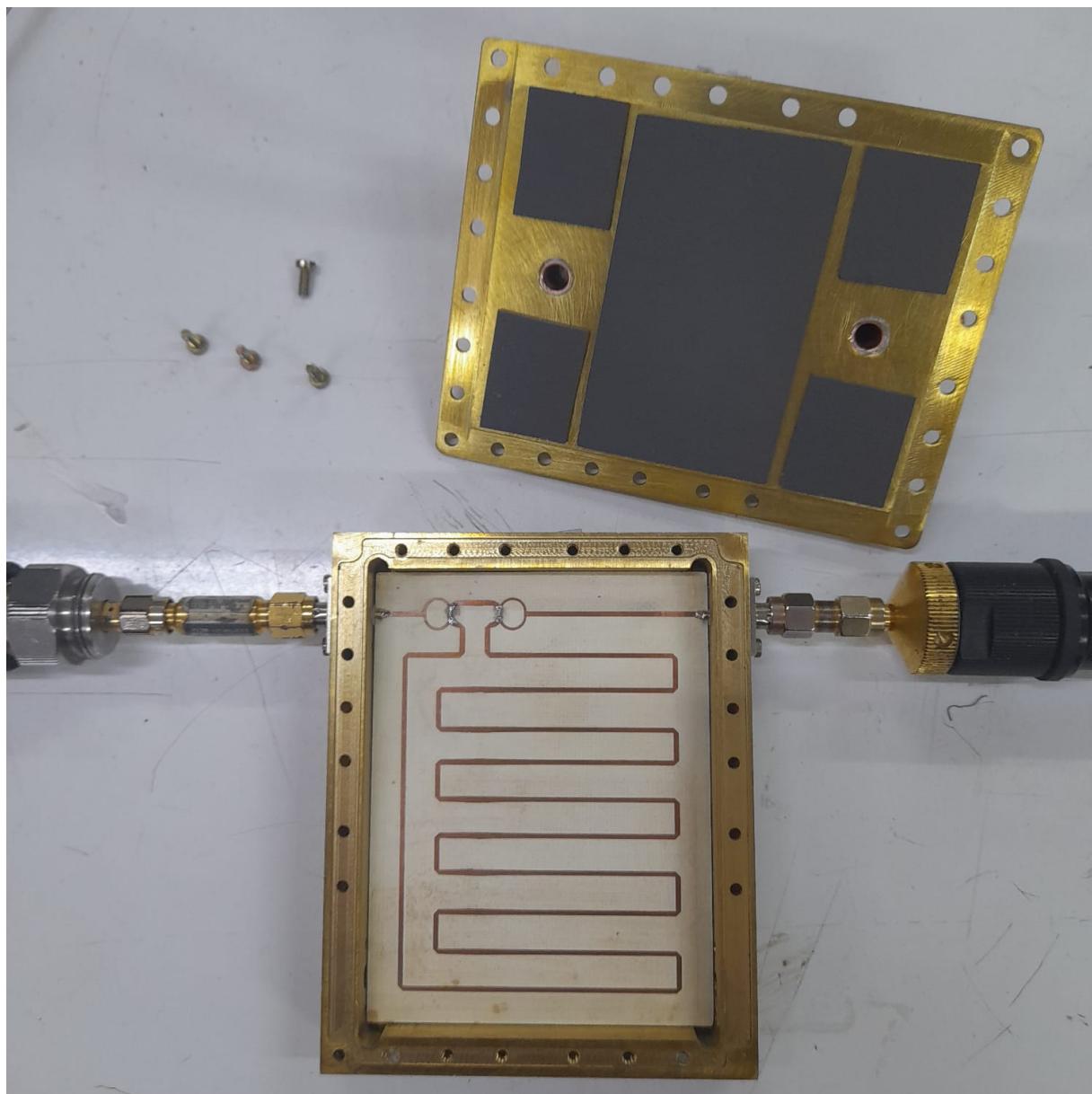
Figura 22 - Comparaçāo entre simulações e protótipo construído



Fonte: Figura do autor.

Em uma segunda iteração, foi produzida uma estrutura na qual a linha de transmissão é precedida por um divisor de Wilkinson e seguida de um combinador de Wilkinson (Figura 23). Neste caso, a intenção é validar a proposta de medição diferencial e a conversão da diferença de fase para diferença em amplitude da onda de saída.

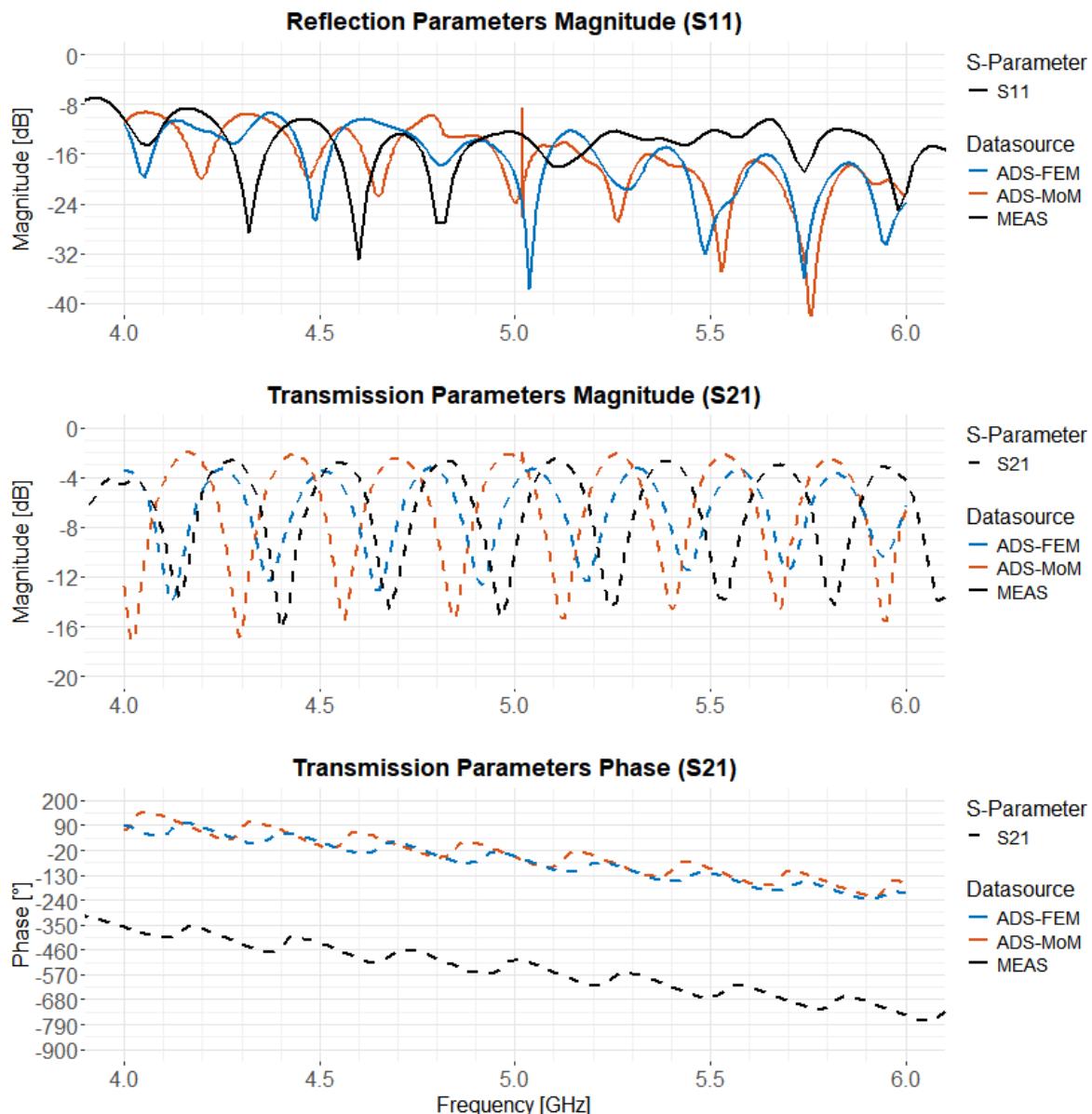
Figura 23 - Linha de Transmissão + Divisor/Combinador de Wilkinson



Fonte: Figura do autor.

Novamente, o protótipo foi caracterizado no VNA na mesma faixa de operação e comparado com a simulação numérica na Figura 24. Note-se que apesar de a simulação FEM e a medida do dispositivo concordarem na região próxima a 4 GHz, à medida que se aumenta a frequência, aumenta-se a distância entre os vales de ressonância destrutiva.

Figura 24 - Comparaçāo entre simulaçāo e protótipo construído para linha com conversor fase-amplitude



Fonte: Figura do autor.

Ou seja, a proporção entre linha de referência e linha de medição é menor do que o esperado, o que pode ocorrer tanto por erros de fabricação, quanto por acoplamentos entre linha e parede da câmara ou por conta da ausência de modelos precisos dos resistores dos combinadores de Wilkinson.

Apesar dessa pequena disparidade, a adição dos divisores/combinadores de potência também produziu resultados em concordância com aqueles simulados.

3. 4. ENSAIOS COM GASES

[COMO FOI ORGANIZADA A ETAPA DE ENSAIO DE GASES?]

Realizada a medição e validação dos dispositivos de micro-ondas a serem utilizados como elementos transdutores, a próxima etapa do projeto consiste na preparação de ensaios de gases junto às estruturas de micro-ondas propostas. Para tal, foi utilizada a bancada de ensaios com gases e a bancada de medidas em micro-ondas descritas a seguir.

3. 4. 1. BANCADA DE GASES

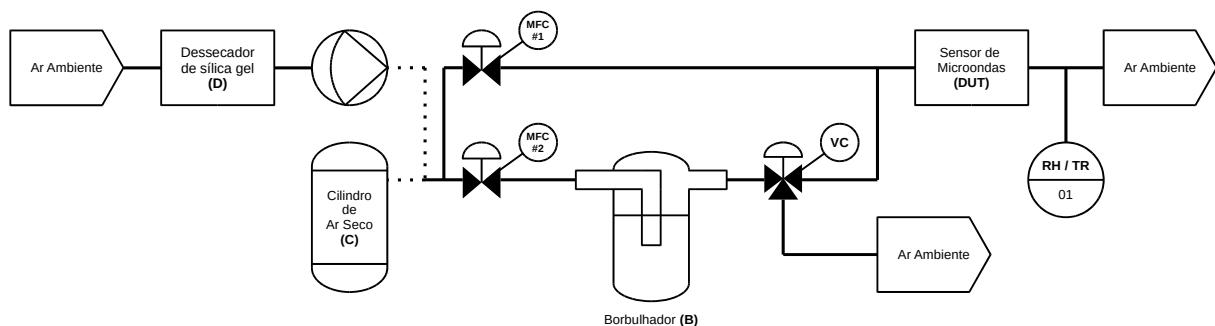
[COMO SE ENCONTRA CONFIGURADA A BANCADA DE GASES?]

A bancada de gases é composta por um conjunto de cilindros e tanques contendo os elementos a serem dispersos na atmosfera gasosa controlada, bem como um conjunto de controladores de fluxo utilizados para controle preciso da proporção de componentes.

Durante os experimentos realizados ao longo da pesquisa, foram utilizadas duas configurações da bancada, destinadas à avaliação de magnitudes de concentração de gases distintas.

Na primeira configuração (Figura 25) magnitudes acima de 1% de fração volumétrica são controlados. Ar seco advindo de um sistema de dessecagem (D) ou cilindro comercial (C) é bombeado pelo sistema, passando por dois controladores de massa (MFC1 e MFC2). Por meio da variação do fluxo em cada MFC e da presença de um borbulhador, são produzidas diferentes concentrações de vapor na saída do sistema. Deste modo, é possível realizar misturas de vapores de líquidos, como água, acetona, etanol, etc. Após a mistura, os gases passam pelo sensor de microondas a ser caracterizado (DUT) e por um ou mais sensores comerciais (RH/TR), utilizados para validação das medidas realizadas. Como já mencionado, a proporção molar de vapores misturados em ar seco é definida pela pressão de vapor à temperatura ambiente de cada líquido, de acordo com a equação (Eq. 14).

Figura 25 - Diagrama P&ID da bancada de gases (configuração #1)



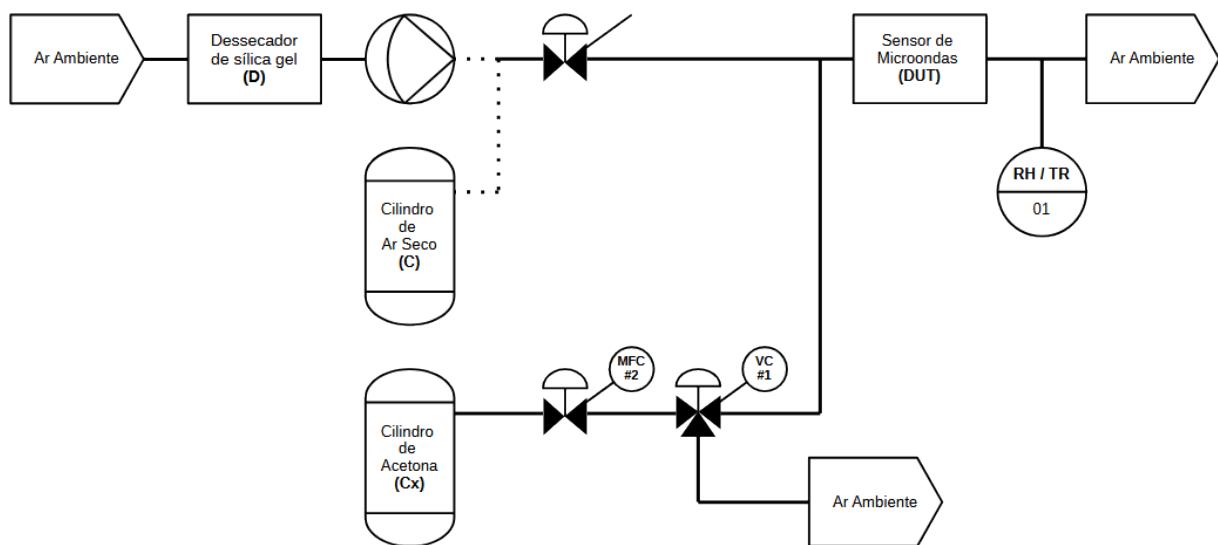
Fonte: Figura do autor.

[QUAL O DETALHAMENTO DO ENSAIO COM GASES? RECEITA, FLUXOS MFC, TEMPO DE INJEÇÃO, LIMPEZA]

A utilização da pressão de vapor mostra-se ser um método simples e prático de realizar misturas de gases com vapores de líquidos. Contudo, devido à adsorção pelas paredes das vias hidráulicas e à resolução limitada dos controladores de massa, a criação de misturas de baixas concentrações é pouco realista.

Em vez de se utilizar um borbulhador para misturar uma via com ar seco e outra com um líquido saturado em ar, foi utilizado um tanque com a substância sob análise já diluída (Cx).

Figura 26 - Diagrama P&ID da bancada de gases (configuração #2)



Fonte: Figura do autor.

[QUAIS OS LIMITES DE OPERAÇÃO DA BANCADA?]

Para os testes realizados em bancada, a primeira configuração foi utilizada para concentrações de 1% a 100% de saturação relativa, equivalente à umidade relativa caso o líquido utilizado no borbulhador seja água destilada. Para saturações menores que 1%, foi utilizada a segunda configuração (Figura 26), na qual a proporção molar de água ou acetona em ar depende da combinação linear de ar seco e mistura advinda do tanque.

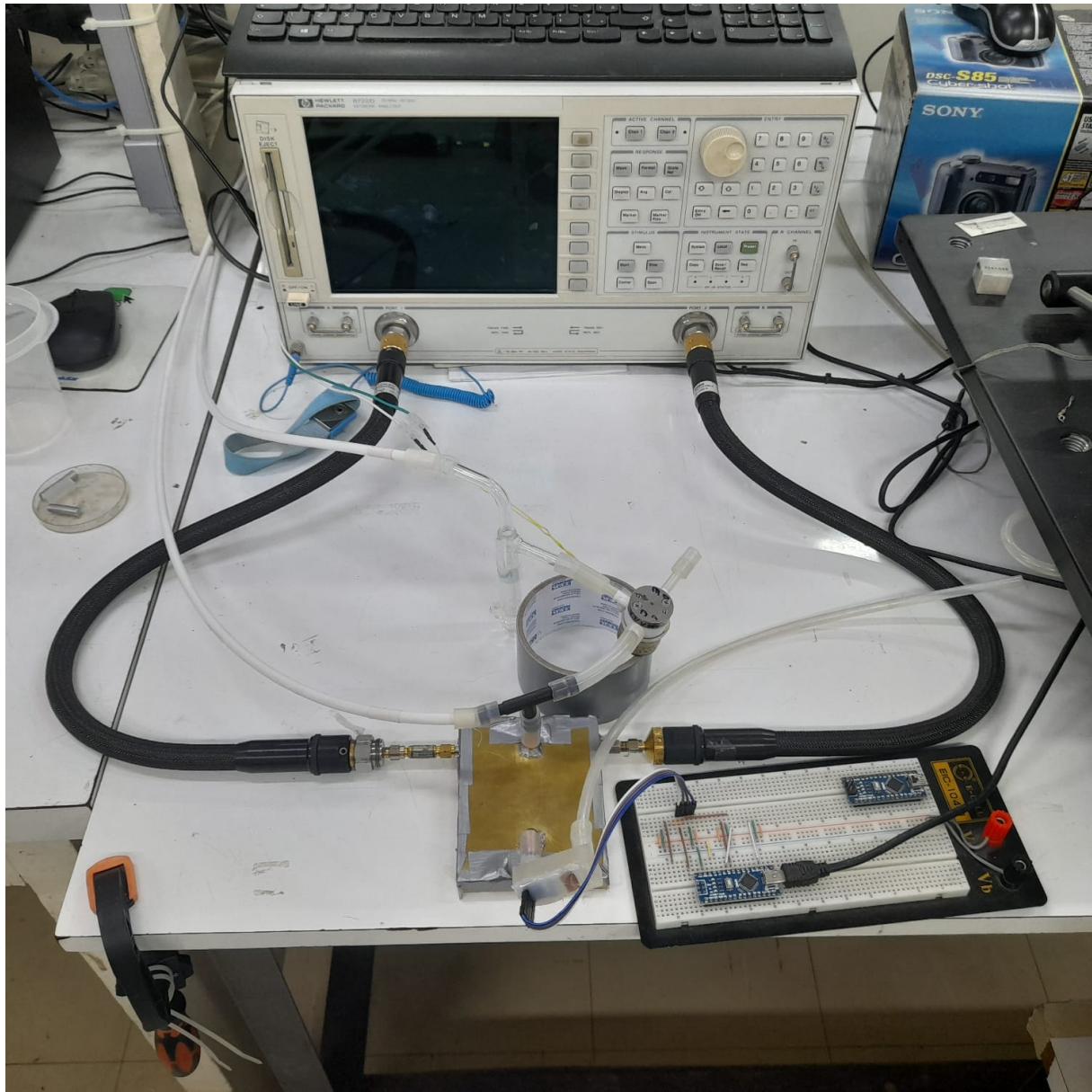
3.4.2. BANCADA DE TESTES DE MICRO-ONDAS

[COMO SE ENCONTRA CONFIGURADA A BANCADA DE TESTES?]

Na bancada de testes de micro-ondas, foram utilizados equipamentos de bancada para geração, divisão e medição das respostas dos circuitos de micro-ondas

desenvolvidos ao longo da pesquisa. O mesmo equipamento utilizado para caracterização das linhas de transmissão fabricadas foi utilizado para automatização das medidas (Figura 27).

Figura 27 - Configuração da Bancada de Testes de Micro-ondas



Fonte: Figura do autor.

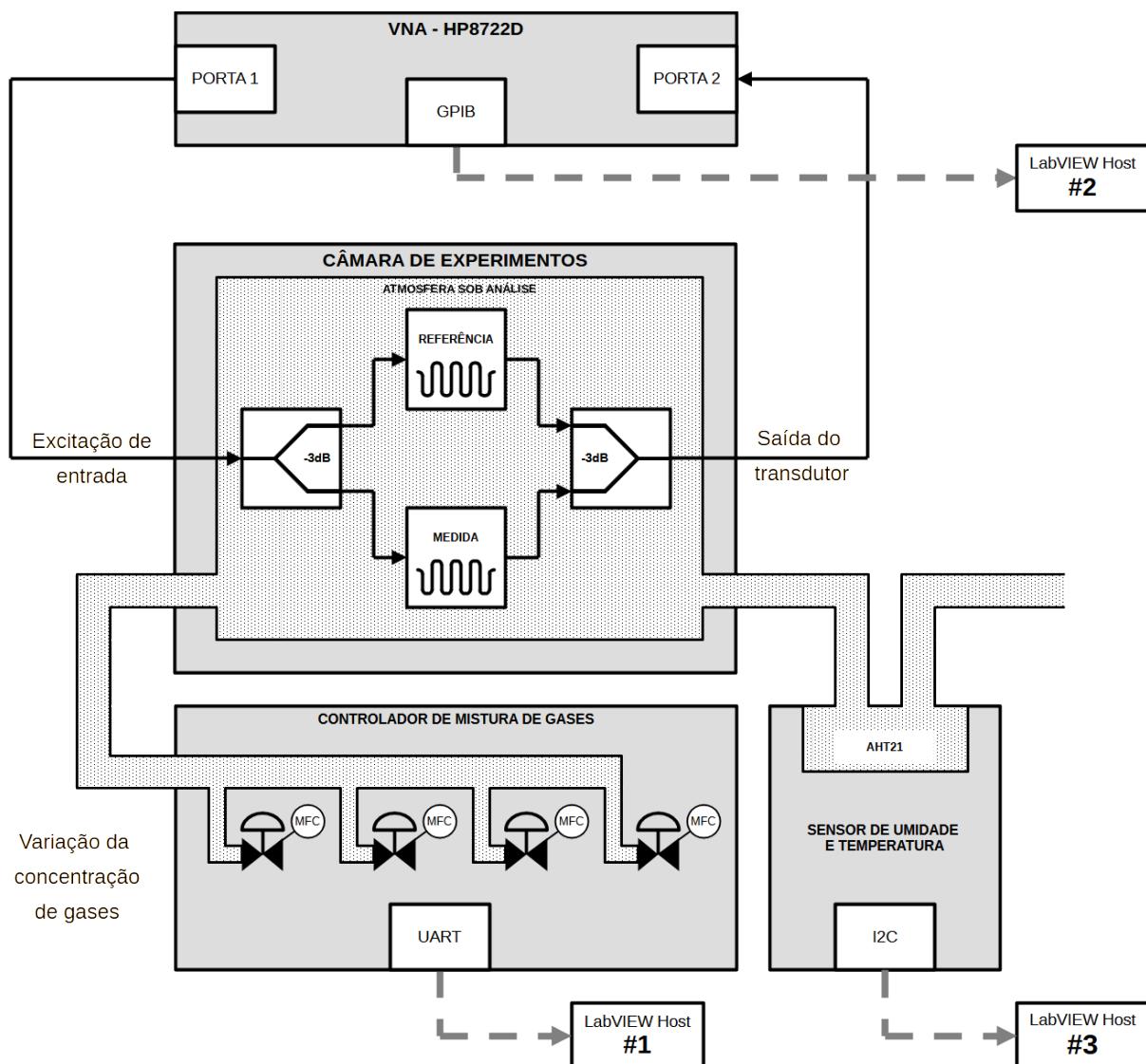
Nesta configuração, foram realizados os testes para se medir diretamente os parâmetros de espalhamento, os quais foram utilizados para caracterização em frequência e em tempo da resposta do transdutor.

4. RESULTADOS

[COMO SERÃO ORGANIZADOS OS EXPERIMENTOS?]

A partir dos protótipos construídos e da utilização da bancada de gases e da bancada de testes de micro-ondas foram realizados diversos experimentos para comparação com a teoria desenvolvida. Os experimentos propostos foram organizados de acordo com a Figura 28, abaixo.

Figura 28 - Configuração dos Experimentos realizados



Fonte: Figura do autor

Durante o experimento, três fontes de dados são medidas e armazenadas pelos respectivos computadores para análise posterior. São estas:

1. Fluxo médio de gasoso passante pelos controladores de massa (MFC[1..4]) em unidades de centímetros cúbicos padrão por minuto (sccm).
2. Parâmetros de espalhamento (S11, S21, S12, S22) do sensor de micro-ondas sob análise dentro da câmara de gás.
3. Temperatura (em °C) e Umidade Relativa (em %) medida na saída da câmara de gás.

Por meio da utilização de um microcontrolador e da interface de comunicação serial, os controladores de massa [modelo] são atuados e sua vazão é medida (com precisão de [precisão]) a cada [intervalo de tempo]. Os dados são transferidos e armazenados em um computador de controle e processados por meio de um software em linguagem LabVIEW. Além das medidas de fluxo, também são armazenadas a data e horário da medida com precisão de centésimo de segundo (Figura 29).

Figura 29 - Exemplo de arquivo gerado pelo programa de controle dos MFCs

MFC1	MFC2	MFC3	MFC4	DATA	HORA
0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	17/04/2025	14:22:17
0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	17/04/2025	14:22:17
0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	17/04/2025	14:22:18
0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	17/04/2025	14:22:19
0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	17/04/2025	14:22:20
0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	17/04/2025	14:22:21
4.704000	0.000000	0.000000	0.000000	17/04/2025	14:22:22
93.884000	0.000000	0.000000	0.000000	17/04/2025	14:22:23
96.824000	0.000000	0.000000	0.000000	17/04/2025	14:22:24
97.804000	0.000000	0.000000	0.000000	17/04/2025	14:22:25
96.824000	0.000000	0.000000	0.000000	17/04/2025	14:22:26

Fonte: Figura do autor.

Do mesmo modo, a utilização do VNA e de sua interface de programação GPIB, permite que outro software escrito em LabVIEW armazene dados dos vetores

de espalhamento S11, S21, S12, S22 a cada 30 segundos para o range de frequências calibrado. Isto é, para cada aquisição é escrito um arquivo numerado que contém todas as informações que definem um experimento. Vide Figura 30 por exemplo.

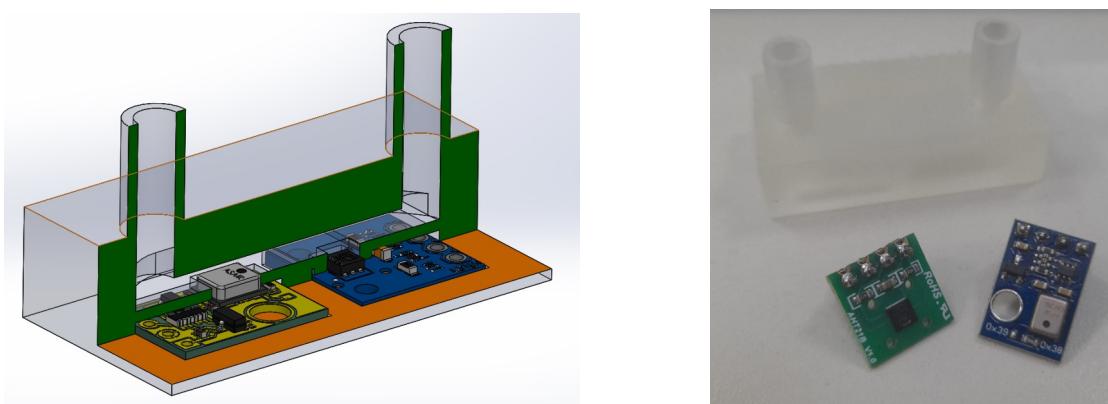
Figura 30 - Exemplo de arquivo gerado pelo programa de controle do VNA

```
! Network Analyzer HP8722D
! Hewlett-Packard
! Data name: Linha & Wilkinson
! Saver's name: Rodrigo Anjos
! Comments: Teste da utilização de aquisição
continua pelo VNA HP8722D
! Time and date: 17/4/2025 14:21
!
    Frequency          S11          S21
                      S12          S22
# HZ S MA R 50
4800000000.00000  3.34716800000000E-01  -1.14000000000000E+02  2.92251600000000E-01  -
6.10488200000000E+01  2.85980200000000E-01  -1.75250000000000E+02  6.55029300000000E-01  -
-9.02617100000000E+01
4801000000.00000  3.33633400000000E-01  -1.14808600000000E+02  2.96127300000000E-01  -
6.11835900000000E+01  2.89611800000000E-01  -1.75117200000000E+02  6.54632600000000E-01  -
-9.01953100000000E+01
4802000000.00000  3.32809400000000E-01  -1.15949200000000E+02  3.00781300000000E-01  -
6.11386700000000E+01  2.94433600000000E-01  -1.75000000000000E+02  6.52740500000000E-01  -
-9.03476500000000E+01
4803000000.00000  3.31939700000000E-01  -1.16906200000000E+02  3.06121800000000E-01  -
6.13027300000000E+01  2.97378500000000E-01  -1.74898400000000E+02  6.51855500000000E-01  -
-9.05234300000000E+01
```

Fonte: Figura do autor.

Por fim, foi utilizado um sensor comercial (AHT21) de alta precisão e uma câmara de passagem impressa em resina plástica (Figura 31) para medição de temperatura e umidade a cada segundo.

Figura 31 - Design da câmara de medição construída



Fonte: Figura do autor. (a) Design feito em CAD-3D. (b) Modelo impresso em impressora 3D de resina.

De acordo com o folheto de dados do fabricante, o sensor possui acurácia de até 2% para medição de umidade, e de 0.3°C para medição de temperatura, com resoluções de 0.024% e 0.01°C respectivamente. Adicionalmente, o tempo de resposta para umidade é de 8s e para temperatura se encontra entre 5 a 30 segundos.

Figura 32 - Exemplo de arquivo gerado pelo programa de medição de T e RH

DATA, HORA, TEMPERATURA, UMIDADE_RELATIVA
2025-04-17, 14:08:51.665, 21.88, 51.29
2025-04-17, 14:08:51.669, 21.90, 51.21
2025-04-17, 14:08:51.669, 21.89, 51.25
2025-04-17, 14:08:51.669, 21.90, 51.31

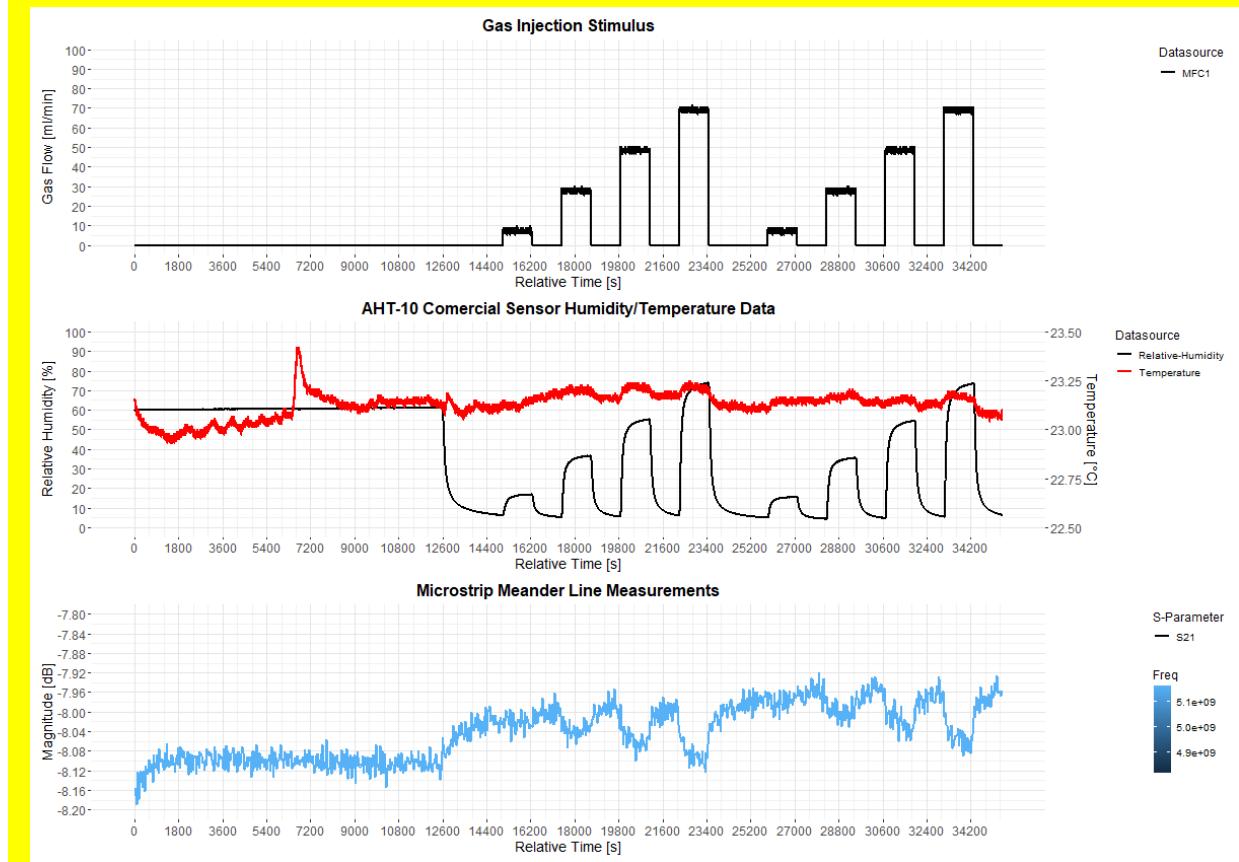
Fonte: Figura do autor.

Do mesmo modo como foi realizado com as outras duas fontes de dados, além das medidas em si, também foi armazenada a data e tempo exatos da medida (Figura 32).

4. 1. CONVERSOR FASE-AMPLITUDE

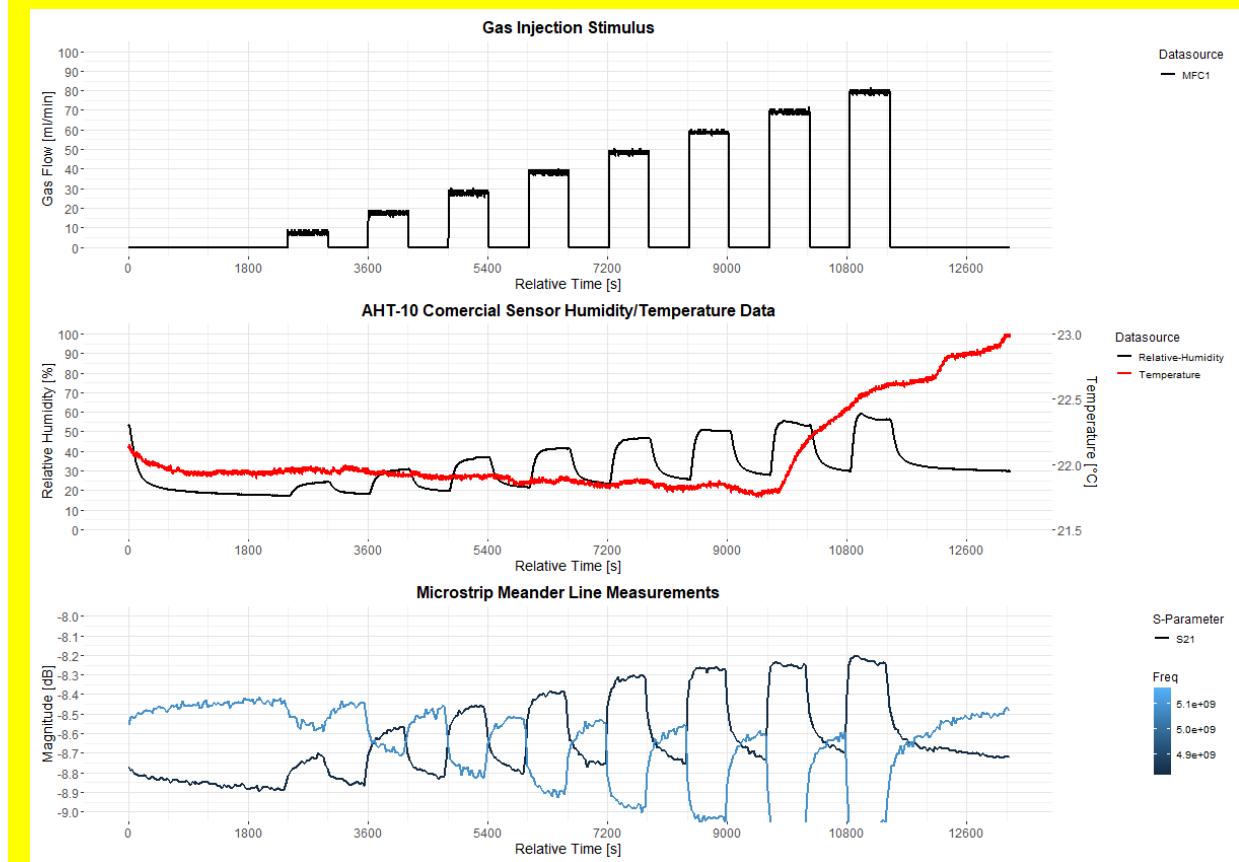
Ao longo de diversos meses, foram realizadas inúmeras medidas com a estrutura descrita anteriormente. Destas destacam-se três.

Figura 33 - Configuração da Bancada de Testes de Micro-ondas



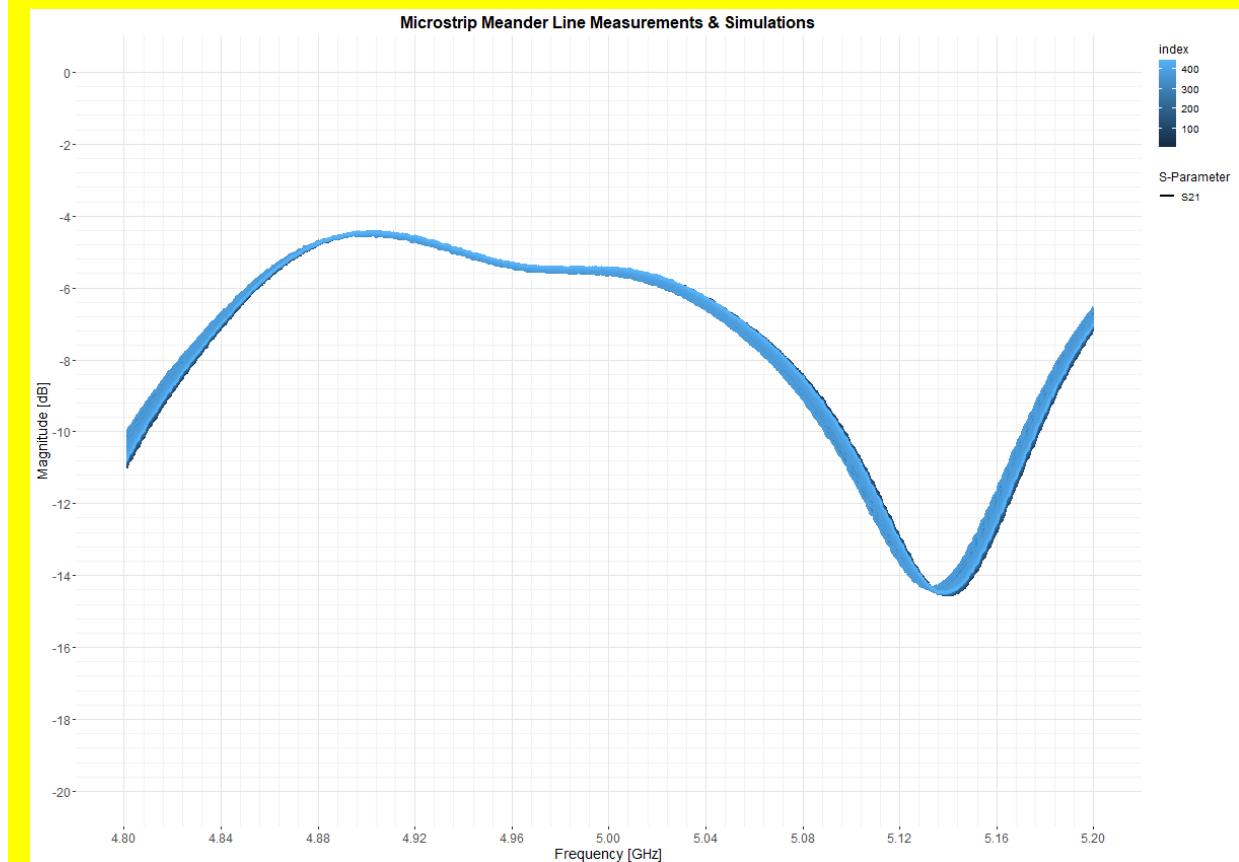
Fonte: Figura do autor.

Figura 34 - Configuração da Bancada de Testes de Micro-ondas



Fonte: Figura do autor.

Figura 35 - Configuração da Bancada de Testes de Micro-ondas



Fonte: Figura do autor.

5. DISCUSSÃO

5. 1. ATIVIDADES CONCLUÍDAS

Modelagem, simulação, caracterização inicial

5. 2. ATIVIDADES EM ANDAMENTO

Medição com RF-DC usando power meter

Caracterização com nanocompositos

5. 3. ATIVIDADES FUTURAS

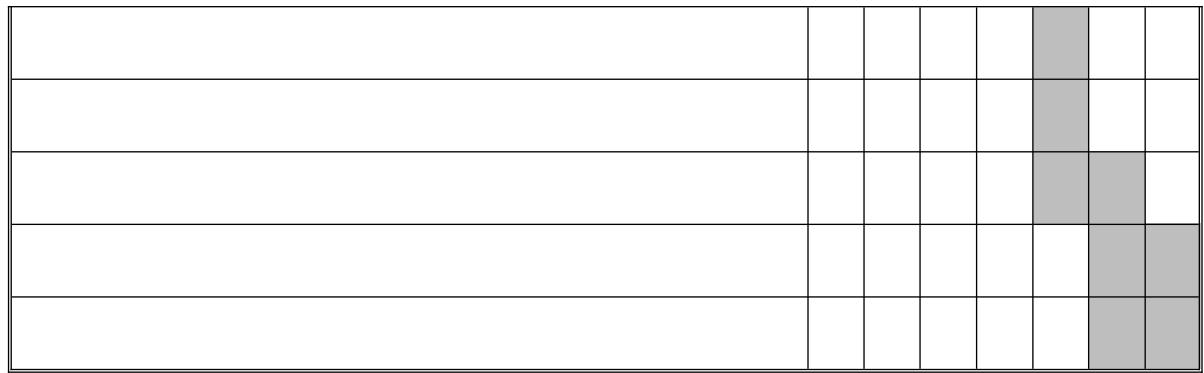
Utilização de estruturas de detecção dentro do sensor

Os experimentos realizados ao longo do projeto têm por objetivo principal validar a utilização da transdução por atraso de fase como um método para sensorialização de gases em baixas concentrações. Adicionalmente, procura-se também validar a utilização de nanomateriais orgânicos como metodologia para aumento de sensibilidade e seletividade do sistema proposto.

6. CRONOGRAMA DE EXECUÇÃO

Com base nos objetivos e na metodologia de trabalho propostos, delineou-se o cronograma de execução, que é apresentado na Tabela 8.

Tabela 8 - Cronograma previsto de atividades



7. SUMÁRIO ESTRUTURADO DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

1. Contextualização

1.1. Introdução e Justificativa

1.2. Estado da Arte

1.3. Proposta de Pesquisa

1.4. Objetivos

2. Metodologia

2.1. Estudo bibliográfico de metodologias de espectroscopia em micro-ondas e suas estruturas de micro-ondas associadas

2.2. Estudo bibliográfico do fenômeno de polarização dielétrica

2.3. Avaliação e seleção dos programas mais adequados para simulações computacionais EM-3D de circuitos de micro-ondas para o processo de transdução proposto

2.4. Estudo e definição de especificações e proposição de novas configurações para o sistema de transdução de micro-ondas

2.5. Projeto dos circuitos que compõem o sensor

2.6. Simulações computacionais EM-3D dos circuitos projetados e otimização de seus parâmetros

2.7. Fabricação dos circuitos projetados

2.8. Caracterização elétrica do sensor projetado

2.9. Análises comparativas de resultados

3. Estágio atual de desenvolvimento da pesquisa

3.1. Especificação do Sistema

3.1.1. Definição de estrutura e métricas gerais do sistema

3.1.2. Definição de estruturas específicas do sistema

3.2. Análise Diferencial do Sistema

3.2.1. Permissividade Efetiva e Permissividade do MUT

3.2.2. Diferença de Fase dos Sinais e Permissividade Efetiva

3.2.3. Tensão após combinador e Diferença de Fase dos Sinais

3.2.4. Simulações de Linhas de Transmissão

3.2.5. Design e Simulação de sistema de conversão Concentração-Fase

3.2.6. Design e Simulação de sistema de conversão Fase-Amplitude

3.3. Fabricação de Protótipos

3.4. Ensaios com Gases

3.4.1. Bancada de Gases

3.4.2. Bancada de Testes de Micro-ondas

4. Resultados

4.1. Conversor fase-amplitude

4.2. Conversor RF-DC

5. Discussão

7. Trabalhos Futuros

8. Referências Bibliográficas

8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] F. Martín, P. Vélez, J. Muñoz-Enano, and L. Su, *Planar microwave sensors*. Piscataway, NJ: IEEE Press, 2023. doi: 10.1002/9781119811060.

- [2].....A. Chełkowski and J. Tomaszczyk, *Dielectric physics*, Rev. and Enlarged transl. from the Polish original. in Studies in physical and theoretical chemistry, no. 9. Amsterdam Oxford New York Warszawa: Elsevier PWN, 1980.
- [3]...K. Lichtenecker, "Die Herleitung des logarithmischen Mischungsgesetzes aus allgemeinen Prinzipien der stationären Stromung," *Phys. Z.*, vol. 32, pp. 255–260, 1931.
- [4]....H. Looyenga, "Dielectric constants of heterogeneous mixtures," *Physica*, vol. 31, no. 3, pp. 401–406, Mar. 1965, doi: 10.1016/0031-8914(65)90045-5.
- [5]....L. D. Landau, E. M. Lifšic, L. P. Pitaevskij, and L. D. Landau, *Electrodynamics of continuous media*, Second edition revised and Enlarged. in Course of theoretical physics / L. D. Landau and E. M. Lifshitz, no. Volume 8. Oxford New York Toronto Sydney Paris Frankfurt: Pergamon Press, 1984.
- [6]...M. Scheller, C. Jansen, and M. Koch, "Applications of Effective Medium Theories in the Terahertz Regime," in *Recent Optical and Photonic Technologies*, K. Young, Ed., InTech, 2010. doi: 10.5772/6915.
- [7].....J. C. Maxwell Garnett, "Colours in Metal Glasses and in Metallic Films," *Philos. Trans. R. Soc. Lond. Ser. A*, vol. 203, pp. 385–420, Jan. 1904.
- [8].....Lord Rayleigh, "LVI. On the influence of obstacles arranged in rectangular order upon the properties of a medium," *Lond. Edinb. Dublin Philos. Mag. J. Sci.*, vol. 34, no. 211, pp. 481–502, Dec. 1892, doi: 10.1080/14786449208620364.

- [9]...D. A. G. Bruggeman, "Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogenen Substanzen. I. Dielektrizitätskonstanten und Leitfähigkeiten der Mischkörper aus isotropen Substanzen," *Ann. Phys.*, vol. 416, pp. 636–664, Jan. 1935, doi: 10.1002/andp.19354160705.
- [10]....D. Polder and J. H. Van Santeen, "The effective permeability of mixtures of so-lids," *Physica*, vol. 12, no. 5, pp. 257–271, Aug. 1946, doi: 10.1016/S0031-8914(46)80066-1.
- [11]G. P. D. Loor, "Dielectric Properties of Heterogeneous Mixtures Containing Water*," *J. Microw. Power*, vol. 3, no. 2, pp. 67–73, Jan. 1968, doi: 10.1080/00222739.1968.11688670.
- [12].C. J. F. Böttcher, O. C. van Belle, P. Bordewijk, and A. Rip, *Theory of electric polarization*, 2d ed. completely rev, by O.C. Van Belle, P. Bordewijk , and A. Rip. Amsterdam New York: Elsevier Scientific Pub. Co, 1973.
- [13].....A. H. Shivola, "Self-consistency aspects of dielectric mixing theories," *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, vol. 27, no. 4, pp. 403–415, Jul. 1989, doi: 10.1109/36.29560.
- [14]....C. J. F. Böttcher, O. C. van Belle, P. Bordewijk, and A. Rip, *Dielectrics in static fields*, 2nd ed. completely rev. in Theory of electric polarization, no. 1. Amsterdam London New York: Elsevier, 1993.
- [15]. K. Irikura, "NIST Standard Reference Database Number 101." NIST Computational Chemistry Comparison and Benchmark Database, May 2022. [Online]. Available: <https://cccbdb.nist.gov/pollistx.asp>

- [16].U. Hohm and K. Kerl, “Temperature dependence of mean molecular polarizability of gas molecules,” *Mol. Phys.*, vol. 58, no. 3, pp. 541–550, Jun. 1986, doi: 10.1080/00268978600101351.
- [17].M. E. Shaheen *et al.*, “Determination of the refractive index of air and its variation with temperature and pressure using a Mach–Zehnder interferometer,” *J. Opt.*, vol. 53, no. 3, pp. 2219–2228, Jul. 2024, doi: 10.1007/s12596-023-01486-2.
- [18]...L. Essen and K. D. Froome, “The Refractive Indices and Dielectric Constants of Air and its Principal Constituents at 24,000 Mc/s,” *Proc. Phys. Soc. Sect. B*, vol. 64, no. 10, pp. 862–875, Oct. 1951, doi: 10.1088/0370-1301/64/10/303.
- [19]..A. D. Buckingham and R. E. Raab, “The dielectric constant of a compressed gas mixture,” *Trans. Faraday Soc.*, vol. 54, p. 623, 1958, doi: 10.1039/tf9585400623.
- [20]...A. D. Buckingham and J. A. Pople, “The statistical mechanics of imperfect polar gases. Part 2.—Dielectric polarization,” *Trans Faraday Soc*, vol. 51, no. 0, pp. 1179–1183, 1955, doi: 10.1039/TF9555101179.
- [21]....A. D. Buckingham and J. A. Pople, “Electromagnetic properties of compressed gases,” *Discuss. Faraday Soc.*, vol. 22, p. 17, 1956, doi: 10.1039/df9562200017.
- [22]. .A. H. Harvey and P. H. Huang, “First-Principles Calculation of the Air–Water Second Virial Coefficient,” *Int. J. Thermophys.*, vol. 28, no. 2, pp. 556–565, Apr. 2007, doi: 10.1007/s10765-007-0197-8.
- [23]...R. W. Hyland and E. A. Mason, “Third virial coefficient for air-water vapor mixtures,” *J. Res. Natl. Bur. Stand. Sect. Phys. Chem.*, vol. 71A, no. 3, p. 219, May 1967, doi: 10.6028/jres.071A.029.

- [24]. R. W. Hyland and A. Wexler, "The second interaction (cross) virial coefficient for moist air," *J. Res. Natl. Bur. Stand. Sect. Phys. Chem.*, vol. 77A, no. 1, p. 133, Jan. 1973, doi: 10.6028/jres.077A.007.
- [25]. A. H. Harvey and E. W. Lemmon, "Method for Estimating the Dielectric Constant of Natural Gas Mixtures," *Int. J. Thermophys.*, vol. 26, no. 1, pp. 31–46, Jan. 2005, doi: 10.1007/s10765-005-2351-5.
- [26]....G. R. Govinda Raju, "Dielectric constant of binary mixtures of liquids," in *1988. Annual Report., Conference on Electrical Insulation and Dielectric Phenomena*, Ottawa, Ont., Canada: IEEE, 1988, pp. 357–363. doi: 10.1109/CEIDP.1988.26358.
- [27].D. Vega-Maza, W. W. Miller, D. C. Ripple, and G. E. Scace, "A Humidity Generator for Temperatures up to 200 °C and Pressures up to 1.6 MPa," *Int. J. Thermophys.*, vol. 33, no. 8–9, pp. 1477–1487, Sep. 2012, doi: 10.1007/s10765-010-0838-1.
- [28]R. Cuccaro, R. M. Gavioso, G. Benedetto, D. Madonna Ripa, V. Fericola, and C. Guianvarc'h, "Microwave Determination of Water Mole Fraction in Humid Gas Mixtures," *Int. J. Thermophys.*, vol. 33, no. 8–9, pp. 1352–1362, Sep. 2012, doi: 10.1007/s10765-011-1007-x.
- [29].P. Huang, D. Ripple, M. Moldover, and G. Scace, "A Reference Standard for Measuring Humidity of Air Using a Re-entrant Radio Frequency Resonator," 5th International Symposium on Humidity and Moisture; ISHM 2006 Brazil , Rio de Janeiro, -1, May 2006. [Online]. Available: https://tsapps.nist.gov/publication/get_pdf.cfm?pub_id=902995

- [30] G. Birnbaum and S. K. Chatterjee, "The Dielectric Constant of Water Vapor in the Microwave Region," *J. Appl. Phys.*, vol. 23, no. 2, pp. 220–223, Feb. 1952, doi: 10.1063/1.1702178.
- [31] S. Hasegawa and D. P. Stokesberry, "Automatic digital microwave hygrometer," *Rev. Sci. Instrum.*, vol. 46, no. 7, pp. 867–873, Jul. 1975, doi: 10.1063/1.1134331.
- [32].....D. M. Pozar, *Microwave engineering*, 4th ed. Hoboken, NJ: Wiley, 2012.
- [33].R. Garg and I. Bahl, *Microstrip lines and slotlines*, Fourth edition. Boston London: Artech House, 2025.
- [34]...H. A. Wheeler, "Transmission-Line Properties of a Strip on a Dielectric Sheet on a Plane," *IEEE Trans. Microw. Theory Tech.*, vol. 25, no. 8, pp. 631–647, Aug. 1977, doi: 10.1109/TMTT.1977.1129179.
- [35]. E. Hammerstad and O. Jensen, "Accurate Models for Microstrip Computer-Aided Design," in *MTT-S International Microwave Symposium Digest*, Washington, DC,USA: MTT006, 1980, pp. 407–409. doi: 10.1109/MWSYM.1980.1124303.
- [36]....L. Yang, L. Sun, Q. Shi, and H. Sun, "Extraction of dielectric constant based on S-parameter inversion method," in *2011 3rd International Conference on Computer Research and Development*, Shanghai, China: IEEE, Mar. 2011, pp. 353–356. doi: 10.1109/ICCRD.2011.5764212.
- [37]. .L. Chen, Ed., *Microwave electronics: measurement and materials characterisation*. Chichester: John Wiley, 2004.

- [38] M. T. Sebastian, *Microwave Materials and Applications*. in Wiley Series in Materials for Electronic and Optoelectronic Applications Series. New York: John Wiley & Sons, Incorporated, 2017.
- [39].....G. A. Vidulich and R. L. Kay, "THE DIELECTRIC CONSTANT OF WATER BETWEEN 0° AND 40°," *J. Phys. Chem.*, vol. 66, no. 2, pp. 383–383, Feb. 1962, doi: 10.1021/j100808a525.
- [40].....A. L. Buck, "New Equations for Computing Vapor Pressure and Enhancement Factor," *J. Appl. Meteorol.*, vol. 20, no. 12, pp. 1527–1532, Dec. 1981, doi: 10.1175/1520-0450(1981)020<1527:NEFCVP>2.0.CO;2.
- [41]D. P. Gatley, S. Herrmann, and H.-J. Kretzschmar, "A Twenty-First Century Molar Mass for Dry Air," *HVACR Res.*, vol. 14, no. 5, pp. 655–662, Sep. 2008, doi: 10.1080/10789669.2008.10391032.nte de simulação do ADS.

APÊNDICE A. TABELAS DE CONSTANTES FÍSICAS

Constante Dielétrica da Água [68]

$$\epsilon_{H_2O} = 87.740 - T \cdot 0.40008 + T^2 \cdot 9.398 \cdot 10^{-4} - T^3 \cdot 1.41 * 10^{-6}$$

Pressão de Vapor da Água [69]

$$p_w = 0.61121 \cdot e^{\left(\left(18.678 - \frac{T}{234.5} \right) * \left(\frac{T}{(257.14+T)} \right) \right)} \text{ [kPa]}$$

Polarizabilidade Molecular N₂, O₂, Ar [45]

$$\alpha_{N_2} = (+1.7037) \cdot 10^{-30} + T \cdot (+3.0100) \cdot 10^{-34} + T^2 \cdot (-2.0000) \cdot 10^{-37} \text{ [m}^3\text{]}$$

$$\alpha_{O_2} = (+1.5343) \cdot 10^{-30} + T \cdot (+2.8800) \cdot 10^{-34} + T^2 \cdot (-1.6300) \cdot 10^{-37} \text{ [m}^3\text{]}$$

$$\alpha_{Ar} = (+1.6253) \cdot 10^{-30} + T \cdot (+1.6490) \cdot 10^{-34} \text{ [m}^3\text{]}$$

Fração Molar de Ar-Seco-Ambiente [70]

$$x_{N_2} = 0.780818 \text{ [%]}$$

$$x_{O_2} = 0.209435 \text{ [%]}$$

$$x_{Ar} = 0.009332 \text{ [%]}$$

Parameter	Value	Standard uncertainty
<i>s</i>	0.00267 to 0.0186	7×10^{-7}
<i>P</i>	1.6 MPa	200 Pa
<i>T</i> ^a	473 K	0.2 K
<i>A_n</i>	$4.3901 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$3 \times 10^{-4} \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
<i>A_w + B_w/T</i> ^b	$47.9 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$0.28 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
<i>B_{ww}</i>	$-203 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$4.1 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
<i>B_{nn}</i>	$14.7 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$1 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
<i>B_{nw}</i>	$-2.9 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$	$1.1 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$

Constantes de Virial para H₂O – Ar

function of frequency, and then fit the data to obtain f (see [3] for details). The polarizability A_n and Debye constants A_w and B_w were obtained from the literature [7–9]. The second virial coefficient is calculated from the equation [10]:

$$B_{\text{mix}} = x_w^2 B_{ww} + 2x_w (1 - x_w) B_{nw} + B_{nn} (1 - x_w)^2, \quad (4)$$

using literature values for the second virial coefficient B_{nn} for nitrogen [10], B_{ww} for water [11], and B_{nw} for nitrogen–water interactions [12].

Constantes de Debye

1. A. Mawardi, F. Yang, R. Pitchumani, J. Fuel Cell Sci. Technol. **2**, 121 (2005)
2. W. Wagner, A. Pruss, J. Phys. Chem. Ref. Data **31**, 387 (2002)
3. P.H. Huang, D.C. Ripple, M.R. Moldover, G.E. Scace, A Reference Standard for Measuring Humidity of Air Using a Re-entrant Radio Frequency Resonator, in *Proceedings 5th International Symposium on Humidity and Moisture* (ISHM, Rio de Janeiro, 2006)
4. N.P. Cheremisinoff, *Fluid Flow: Pumps, Pipes and Channels* (Ann Arbor Science, Ann Arbor, 1981)
5. D.J. Tritton, *Physical Fluid Dynamics*, 2nd edn. (Oxford University Press, Oxford, 1988)
6. A.D. Buckingham, R.E. Raab, Trans. Faraday Soc. **54**, 623 (1958)
7. A.H. Harvey, E.W. Lemmon, Int. J. Thermophys. **26**, 31 (2005)
8. M.R. Moldover, T.J. Buckley, Int. J. Thermophys. **22**, 859 (2001)
9. G. Birnbaum, S.K. Chatterjee, J. Appl. Phys. **23**, 220 (1952)
10. J.H. Dymond, E.B. Smith, *The Virial Coefficients of Pure Gases and Mixtures, A Critical Compilation* (Oxford University Press, Oxford, 1980)
11. A.H. Harvey, E.W. Lemmon, J. Phys. Chem. Ref. Data **33**, 369 (2004)
12. P.E. Huang, A.H. Harvey, NIST, private communication

Relação entre Permissividade e Saturações de Água deionizada

Verificar que a polarizabilidade e a permissividade da água estão sendo avaliadas em 5GHz e não em DC

$$r_{\text{mol}}(T) = \frac{n_x}{n_{\text{air}} + n_x} = \frac{\frac{p_x V}{RT}}{\frac{p_{\text{air}} V}{RT} + \frac{p_x V}{RT}} = \frac{p_x}{p_{\text{air}} + p_x} = \frac{p_x}{P_{\text{amb}}} = \frac{\frac{RS_x(T)}{100} \cdot p_{xs}(T)}{P_{\text{amb}}}$$

pxs retirado de [71], [72]

Tabela 1 -

RH [%]	xH2O	xAir	$\epsilon_{MAXWELL_GARNET}$	$\epsilon_{POLARIZABILITY MIXING}$	$\epsilon_{VIRIAL MIXING}$
0.0 %	0.000000	1.000000	1.000538	1.000538	
0.1 %	0.000031	0.999969	1.000628	1.000628	
0.2 %	0.000063	0.999937	1.000719	1.000718	
0.3 %	0.000094	0.999906	1.000809	1.000809	
0.4 %	0.000125	0.999875	1.000899	1.000899	
0.5 %	0.000156	0.999844	1.000990	1.000989	
0.6 %	0.000188	0.999812	1.001080	1.001080	
0.7 %	0.000219	0.999781	1.001170	1.001170	
0.8 %	0.000250	0.999750	1.001261	1.001261	
0.9 %	0.000281	0.999719	1.001351	1.001351	
1.0 %	0.000313	0.999687	1.001442	1.001441	
2.0 %	0.000625	0.999375	1.002346	1.002345	
3.0 %	0.000938	0.999062	1.003251	1.003250	
4.0 %	0.001251	0.998749	1.004156	1.004155	
5.0 %	0.001564	0.998436	1.005062	1.005061	
6.0 %	0.001876	0.998124	1.005969	1.005967	
7.0 %	0.002189	0.997811	1.006876	1.006874	
8.0 %	0.002502	0.997498	1.007784	1.007781	
9.0 %	0.002814	0.997186	1.008692	1.008689	
10.0 %	0.003127	0.996873	1.009601	1.009597	
20.0 %	0.006254	0.993746	1.018718	1.018712	
30.0 %	0.009381	0.990619	1.027891	1.027882	
40.0 %	0.012508	0.987492	1.037120	1.037108	
50.0 %	0.015635	0.984365	1.046406	1.046390	
60.0 %	0.018763	0.981237	1.055748	1.055729	

70.0 %	0.021890	0.978110	1.065148	1.065125	
80.0 %	0.025017	0.974983	1.074605	1.074580	
90.0 %	0.028144	0.971856	1.084122	1.084093	
100.0 %	0.031271	0.968729	1.093697	1.093665	

APÊNDICE B. FIGURA DE MÉRITO PARA SENSORES DE PERMISSIVIDADE

[PORQUE É NECESSÁRIO A UTILIZAÇÃO DE UMA FIGURA DE MÉRITO?]

[QUAIS AS CONDIÇÕES DE CONTORNO QUE ESSA FIGURA DE MÉRITO DEVE SATISFAZER?]

[TABELAS DE RESPOSTA DE OUTROS TIPOS DE SENSORES]

Tipo	Material	Límite Sensível de Detecção	Sensibilidade	Tempo de Resposta (min)	Tipo de Resposta	Temperatura de Operação	Área	Volume	Referência Bibliográfica
QCM	ZIF-8	0.13%/ volume	2x10-5	60	Não- Linear	25°C			[73]
QCM	Pd + ZnO	72ppm	3.8x10-4		Não- Linear	25°C			[74]
QCM	Líquido ionico baseado em Imidazo lium	10%/ volume	1.6x10- 1 7		Linear	30°C			[75]
QCM	Thiofen o	77.6 ppm	1.36x10-5	0.5	Linear	25°C			[76]
QCM	Calixarene	200 ppm	1.0x10-5	-		25°C			[77]
QCM	Ag+ZS M-5zeolito	0.26 ppm	9.3x10- 4 3		Linear	25°C			[78]

Sensing Material	Sensitivity / Response	Response Type	Response Time	Limit of Detection	Operating Temperature (°C)	Referência Bibliográfica
NiO/SnO ₂	20.18 R _a /R _g	Linear	2 s	0.01 ppm	300	[77]
NiFe ₂ O ₄	30.4 R _a /R _g	Linear	8 s	0.52 ppm	160	[78]
SnO ₂ /SiO ₂	2193.7 R _a /R _g	Non-linear	9 s	0.5 ppm	280	[79]

TiO ₂ /In ₂ O ₃	33.34 R _a /R _g	Linear	51.8 s	0.1 ppm	250	[80]
CuO/SnO ₂	30.6 R _a /R _g	Non-linear	10 s	0.087 ppm	300	[81]
Pt/LaFeO ₃	1.9 R _g /R _a	Linear	4 s	1 ppm	280	[82]
Pt-Au/LaFeO ₃	40 R _g /R _a	Non-linear	12 s	0.3 ppm	280	[83]
CuFe ₂ O ₄ /Fe ₂ O ₃	14.8 R _a /R _g	Non-linear	10 s	0.1 ppm	200	[84]
ZnO-Fe ₂ O ₃	47 R _a /R _g	Non-linear	5 s	0.15 ppm	475	[85]
ZnO/Ga ₂ O ₃	38 R _a /R _g	Linear	19 s	0.5 ppm	300	[86]
WO ₃ /Pt-GNs	12 R _a /R _g	Non-linear	14.1 s	1 ppm	200	[87]
In ₂ WO ₆ /SnO ₂	66.5 R _g /R _a	Linear	4 s	1 ppm	200	[88]
monolayer graphene	0.07	Non-Linear	-	0.3 ppm	RT	[89]
PbS(0.3)/α-Fe ₂ O ₃	24 R _g /R _a	Linear	10 s	0.25 ppm	RT	[90]
In ₂ O ₃ /ZnO-In ₂ O ₃	43.2 R _g /R _a	Non-linear	5 s	0.125 ppm	280	[91]
Mesoporous In ₂ O ₃	29.2 R _a /R _g	Non-linear	0.7 s	0.2 ppm	220	[92]
In ₂ O ₃ hollow nanofibers	151 R _a /R _g	Linear	7 s	0.02 ppm	340	[93]
ZnO dandelion-like spheres	33 R _a /R _a	Non-linear	3 s	0.25 ppm	230	[94]
SnO ₂ nanofibers-RGO	10.4 R _a /R _g (5 ppm)	Linear	3.3 min	0.1 ppm	350	[95]
Carbon nanotubes-SnO ₂	120 R _a /R _g (2.5 ppm)	Non-Linear	2 min	0.5 ppm	200	[96]
Graphene-loaded Ni-doped SnO ₂	169 R _a /R _g (200 ppm)	Non-Linear	5.4 s	0.04 ppm	350	[97]
Eu-Doped SnO ₂	32 R _a /R _g (100 ppm)	Linear until 500 ppm	4 s	0.3 ppm	200	[98]
Pd@ZnO/SnO ₂ NT	5.06 R _g /R _a (1 ppm)	Linear	20 s	0.01 ppm	400	[99]
Y-Doped SnO ₂ Nanobelt	114 R _a /R _g (100 ppm)	-	9.25 s	0.99 ppm	210	[100]
α-Fe ₂ O ₃ with porous structure	15.7 R _a /R _g (100 ppm)	Non-Linear	0.8 s	0.5 ppm	240	[101]
Vertically ordered α-Fe ₂ O ₃	84 R _a /R _g (50 ppm)	Linear	3 s	0.00171 ppm	350	[102]
La-doped α-Fe ₂ O ₃ NT	44 R _a /R _g (100 ppm)	Linear until 200 ppm	3 s	-	240	[103]
Ce-doped α-Fe ₂ O ₃ NT	40 R _a /R _g (100 ppm)	Linear until 200 ppm	3 s	-	240	[104]
Y-Fe ₂ O ₃	65 R _a /R _g (1 ppm)	Non-Linear	-	<1 ppm	150	[105]
RGO-CdFe ₂ O ₄ composites	5.5 R _a /R _g (1 ppm)	Linear	5 s	0.001 ppm	200	[106]
In ₂ O ₃ nanoparticles	11.6 R _a /R _g (50 ppm)	Linear until 50 ppm	1 s	1 ppm	240	[107]
In ₂ O ₃ NT	1.5 R _a /R _g	-	-	0.01 ppm	200	[108]
Pt-decorated In ₂ O ₃ NPs	1.88 R _g /R _a (1.56 ppm)	Linear	<25 s	0.01 ppm	200	[109]
Pd/In ₂ O ₃ Hierarchical	30.6 R _g /R _a (100 ppm)	-	9 s	1 ppm	370	[110]
Au/In ₂ O ₃ inverse opals	24.2 R _a /R _g	Linear	8 s	0.02 ppm	340	[111]

	(5 ppm)					
Porous Co ₃ O ₄ Nanosheets	11.4 R _a /R _g (100 ppm)	-	41 s	<1.8 ppm	150	[112]
In-GO-Co ₃ O ₄	2.4 R _a /R _g (5 ppm)	Non-linear	-	0.102 ppm	300	[113]
V ₂ O ₅	2.37 R _a /R _g (140 ppm)	Non-Linear	67-73 s	0.941 ppm	RT	[114]
ZnFe ₂ O ₄	33.5 R _a /R _a	Linear	18 s	0.2 ppm	RT	[115]
Al-doped ZnO	245 R _a /R _a	Linear	3 s	0.1 ppm	350	[116]
C-doped WO ₃	1.33 R _a /R _a	Non-Linear	-	Sub ppm	RT	[117]
ZnO thin films	13.3 R _a /R _g	Linear	10 s	1 ppm	300	[118]
ZnO nanotubes	5.4 R _a /R _g	-	-	0.3 ppm	350	[119]
Au/α-Fe ₂ O ₃ NRs	143 R _g /R _a	Linear	8 s	2 ppm	350	[120]
Co ₃ O ₄ /CoO NRs	180 R _a /R _g (500 ppm)	-	4.8 s	0.5 ppm	200	[121]
TiO ₂ -ZnO	93.83% (70 ppm)	-	42 s	3 ppm	(29 ± 2)	[123]

[QUAIS OS PARÂMETROS DE INTERESSE PASSIVEIS DE OTIMIZAÇÃO??]

Max Sensibilidade --> Fator Q; Volume de Interação; Diferencial

Max Seletividade --> Materiais Adsorção; BW;

Max Linearidade --> Calibração; Diferencial

Min Volume de Amostra -->

Max Accurácia -->

Max Limite de Detecção -->

[ESTUDO DO FATOR DE EMPACOTAMENTO DAS LINHAS DE TRANSMISSÃO]

Por fim, um último aspecto a ser estudado é o fator de empacotamento entre as opções de linhas a serem utilizadas. Como já mencionado anteriormente, o fator de empacotamento indica, nesse contexto, qual a extensão máxima de linha de transmissão que pode ser empacotada em uma área ou volume.

**APÊNDICE C. CÁLCULO DE PERMISSIVIDADE EFETIVA EM ESTRUTURAS NÃO
PADRÃO**