

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

São Paulo

2025

SUMÁRIO

1. Contextualização.....	4
1. 1. Introdução e Justificativa.....	4
1. 2. Estado da Arte.....	5
1. 3. Proposta de Pesquisa.....	6
1. 4. Objetivos.....	6
2. Metodologia.....	9
2. 1. Especificação do Sistema.....	12
2. 1. 1. Definição de estrutura e métricas gerais do sistema.....	12
2. 1. 2. Definição de estruturas específicas do sistema.....	14
2. 2. Análise Diferencial do Sistema.....	17
2. 2. 1. Permissividade e Concentração do MUT.....	18
2. 2. 2. Permissividade Efetiva e Permissividade do MUT.....	18
2. 2. 3. Diferença de Fase dos Sinais e Permissividade Efetiva.....	19
2. 2. 4. Tensão após combinador e Diferença de Fase dos Sinais.....	19
2. 2. 5. Tensão detectada e Tensão após combinador.....	19
2. 3. Simulações de Linhas de Transmissão.....	19
2. 3. 1. Mudança de permissividade do meio e a variação de fase da linha.....	22

2. 3. 2. Variação da fase e impedância da linha.....	23
2. 3. 3. Variação da fase e frequência.....	23
2. 3. 4. Variação da fase e volume de interação campo/gás.....	24
2. 3. 5. Variação da fase e topologias de transdução.....	25
2. 3. 6. Design de sistema de transdução completo.....	26
2. 4. Fabricação de Protótipos.....	28
2. 4. 1. Substratos de microondas.....	28
2. 4. 2. Conectores.....	28
2. 4. 3. Serviço de microfresa ou desbaste laser.....	28
2. 4. 4. Serviço de oficina mecânica.....	28
2. 4. 5. Gotejamento de nanoestruturas.....	28
2. 5. Ensaaios com Gases.....	28
2. 5. 1. Bancada de Gases.....	28
2. 5. 2. Bancada de Testes.....	28
3. Resultados.....	28
3. 1. Meandros de microfita.....	29
3. 2. Sistema completo de detecção.....	29
3. 3. Compósitos nanoestruturados.....	29
4. Discussão.....	29
4. 1. Trabalho realizado e Estado da Arte.....	29

4. 2. Figura de Mérito e estruturas de Transdução.....	29
4. 3. Publicações & Trabalhos futuros.....	29
5. SUMÁRIO ESTRUTURADO DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO.....	31
6. Referências Bibliográficas.....	31
A. APENCIDE I - CAMPO LOCAL.....	34
B. Estruturas de Detecção.....	34
6. 1. 1. Avaliação e simulações de estruturas de detecção.....	34
C. CALIBRAÇÃO DE DISPOSITIVOS.....	42
C. 1. Pontos de Otimização.....	42
D. Simulações de Circuitos de Micro-ondas.....	43

1. CONTEXTUALIZAÇÃO

1.1. INTRODUÇÃO E JUSTIFICATIVA

[QUAL O CONTEXTO DA PESQUISA SENDO REALIZADA?]

O desenvolvimento de técnicas de medição de variáveis permitiu o controle de fenômenos naturais de interesse, uma característica crucial que estruturou a sociedade moderna. Tais técnicas são primariamente aplicadas na construção de sensores, elementos de transdução que permitem a transformação de fenômenos físicos em grandezas elétricas, mensuráveis e/ou atuáveis.

A lista de aplicações destinadas aos sensores modernos é praticamente interminável, contudo, neste trabalho será dado um enfoque na aplicação de metodologias de sensoriamento aplicados à medicina moderna, particularmente naquelas que permitem a medição e inferência do estado de um paciente sem a necessidade de intervenções invasivas, prevenindo que seu organismo seja exposto a mais vias de contaminação com o ambiente externo.

Um exemplo de destaque da medicina moderna é o advento das máquinas de ressonância nuclear magnética (RMN ou MRI), que faz uso de sensores baseados em ondas EM para um mapeamento detalhado dos tecidos humanos, permitindo, por exemplo, o diagnóstico de lesões cerebrais, medulares, cardíacas, etc. A máquina de RMN é também um exemplo das principais desvantagens de sensores modernos: complexidade e custo elevado.

Com tais desvantagens em mente, boa parte do desenvolvimento atual na área é voltado à criação de sensores menores, mais simples e mais acessíveis que possam ser produzidos em quantidades massivas por meios de produção já estabelecidos.

1. 2. ESTADO DA ARTE

[QUAL O OBJETIVO RESUMIDO DA PESQUISA?]

Com tais considerações em mente, destaca-se a utilização de sensores de micro-ondas na detecção de gases orgânicos voláteis (VOC) na medicina, principalmente em sua capacidade de detecção de doenças em estágio prematuro. Diversas substâncias secretadas pelo corpo são utilizadas como marcadores para detecção e acompanhamento de doenças crônicas e agudas. Para este trabalho em particular, a substância de interesse será a Acetona, cuja presença em proporções anormais no hálito pode ser considerada um biomarcador para a síndrome metabólica de resistência à insulina (Diabetes Melito Tipo 1 – DM1) [1], [2], [3], [4].

Apesar das baixíssimas concentrações de acetona a serem detectadas [5], estudos voltados à detecção de diabetes por meio de acetona apresentaram resultados positivos.

O estudo realizado por [2] em 2010 se encontra entre os primeiros que buscaram efetivamente demonstrar a correlação entre a concentração de glicose no sangue e acetona no hálito. Em um piloto com 60 voluntários os autores foram capazes de atestar a correlação linear até então teórica fazendo uso de um equipamento de espectroscopia de decaimento em cavidade (CRDS). Apesar de o método proposto em [2] ser sensível e possuir alta seletividade à acetona, é muito grande e requer quase 1L de ar exalado pelo paciente, inviabilizando-o como um meio de monitoramento contínuo.

Com tais desvantagens em vista, diversos métodos de detecção já utilizados para medição de outros gases na indústria foram modificados para suprir tal demanda [6]. Dos inúmeros métodos relatados na literatura, cinco se sobressaem: sensores baseados em microbalanças de quartzo (QCM) [39-44]; sensores eletroquímicos (EQ) [61-68]; sensores resistivos de óxidos metálicos (MOS) [78-124]; sensores de estruturas metal-orgânica (MOF) [136-146]; e sensores capacitivos (CS) [151-161].

Apesar da maioria das publicações apresentarem resultados de sensores baseados em métodos que fazem uso de óxidos de metais semicondutores, estudos recentes demonstraram a viabilidade de técnicas baseadas na transdução por micro-ondas para detecção de gases voláteis [7], [8], [9], [10] e de acetona ([11], [12], [13]).

Em [11], 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 se deslocava, indicando qual a concentração com base na magnitude do desvio. Segundo os autores a solução proposta foi capaz de apresentar uma sensibilidade média para o range de 0 a 200 ppmv de acetona de aproximadamente 14 MHz/ppm.

Pouco tempo depois, o mesmo grupo em [13] propôs 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 acopladas, 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 ppmv, com uma sensibilidade média de 0.13 °/ppm.

Enquanto isso, em [14] 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 manufatura de sensores de acetona capazes de detectar níveis de acetona no hálito humano são factíveis. Em sua grande maioria os trabalhos que apresentam soluções baseadas em óxidos semicondutores são muito promissoras, apesar de sua necessidade de operação em elevadas temperaturas.

Por sua vez, sensores baseados em estruturas metal-orgânicas outros nanocompostos não apresentam a mesma sensibilidade que os sensores MOS, mas operam em temperatura ambiente e podem ser facilmente adaptados para adsorção de espécies gasosas específicas.

[QUAIS AS PREOCUPAÇÕES A SEREM SOLUCIONADAS PELOS AUTORES?]

Independentemente da técnica de escolhida, fica evidente que ao longo da literatura alguns parâmetros são priorizados. Além de parâmetros mais clássicos tais como a sensibilidade e a seletividade às espécies de interesse, verificou-se que os sensores propostos apresentam baixo limite de detecção, suficiente para que a distinção entre concentrações de acetona de pacientes saudáveis e aqueles portadores da síndrome de resistência à insulina.

Segundo os resultados publicados na literatura médica, tais limites devem ser da ordem de algumas centenas de partes por bilhão, os foram reportados em apenas alguns dos trabalhos publicados [78, 79, 80, 94, 95, 96, 97, 121, 123, 142, 144, 145, 148, 155].

1. 3. PROPOSTA DE PESQUISA

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

Apesar dos resultados positivos reportados na literatura, ficam evidentes as problemáticas e deficiências dos detectores disponíveis. Apesar das altas sensibilidades e baixos tempos de resposta, sensores MOS em geral possuem resposta não linear e operam em altas temperaturas. Por outro lado, sensores capacitivos mostram resposta altamente linearizada e operam em condições ambientes, apesar de apresentarem limites de detecção maiores e sensibilidades menores em geral.

Sensores baseados em estruturas de micro-ondas fazem uso do mesmo mecanismo de detecção que os sensores capacitivos, a mudança de permissividade do meio, e apresentam uma série de vantagens, revelando-se como uma alternativa interessante. Se utilizados em conjunto com nanoestruturas tais como GO, PDMS, podem otimizar a sensibilidade e os limites de detecção quando comparados com sensores capacitivos tradicionais.

Deste modo, a proposta de pesquisa presente se presta a explorar e entender quais 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 DESTES TRABALHOS?]

O objetivo e escopo principal deste trabalho é a exploração de estruturas de micro-ondas aplicadas à caracterização de atmosferas gasosas por meio de métodos de espectroscopia de impedância em altas frequências, propondo alternativas aos trabalhos realizados atualmente por meio de novas metodologias construtivas, e otimizações aplicadas aos sistemas de detecção e aos processos de calibração do sistema.

[O QUE FOI FEITO ATÉ O MOMENTO PARA ALCANÇAR O OBJETIVO?]

Para atingir esse objetivo, foram 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 que são 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.

[QUAIS OS OBJETIVOS PRIMÁRIOS E SECUNDÁRIOS SINTETIZADOS?]

De modo sucinto, os objetivos são listados abaixo:

- a) Estudo dos mecanismos elétricos representados pela permissividade elétrica complexa de um meio.
- b) Desenvolver estruturas de micro-ondas em linhas de microfita que sejam capazes de realizar a espectroscopia de atmosferas gasosas com baixas concentrações.
- 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 etapas com base nas quais o trabalho será conduzido:

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

O estudo bibliográfico das metodologias de espectroscopia 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.

- Estudo bibliográfico do fenômeno de polarização dielétrica

O estudo bibliográfico do fenômeno de polarização dielétrica compreende uma revisão da teoria eletromagnética, dando-se ênfase nos 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.

- 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 ®.

- 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 espectroscopia e com base nelas serão propostas novas configurações que conduzam ao aumento de sensibilidade e acurácia do dispositivo.

- Projeto dos circuitos especificados

Estando definidas as especificações do sistema de transdução, nesta etapa é realizada a escolha e cálculo de estruturas e de geometrias a serem empregadas.

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

Nesta etapa é realizada uma verificação preliminar do desempenho do sistema de transdução em relação ao esperado em simulações EM-3D. Com base nessa comparação o dispositivo é otimizado a fim de que se aproxime ao máximo dos valores simulados.

- Fabricação dos circuitos projetados

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

- Medidas de parâmetros S dos circuitos construídos

Feita a construção dos dispositivos, prevê-se uma etapa de caracterização dos parâmetros de interesse. Nesta etapa também serão discutidas técnicas de calibração do dispositivo.

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

2. 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, é uma representação simplificada do sistema que visa a compreensão de 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 as macro tarefas a serem realizadas pelo sistema, explicitando quais as ações a serem tomadas pelo sistema dadas 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.

2. 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 presentes em um ambiente controlado.



Figura 1 - Diagrama Black-Box do Sistema

O diagrama funcional simplificado da Figura 1 mostra quais as entradas e saídas do sistema, direcionando os esforços de pesquisa com clareza.

Para realizar tal medição, dentre as diversas metodologias propostas na literatura, propõe-se um sistema que faça 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.

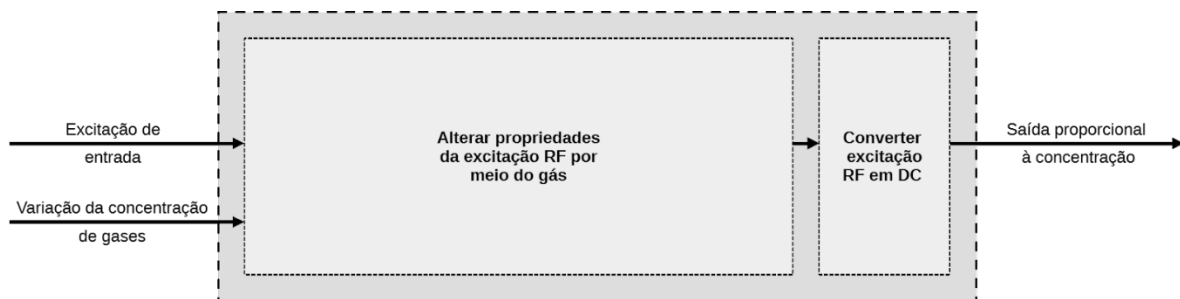


Figura 2 - Diagrama Transparent-Box do Sistema

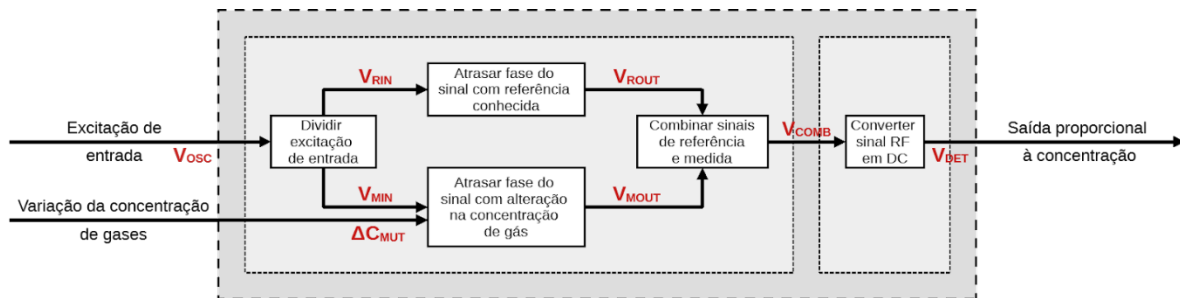


Figura 3 - Diagrama Equacional do Sistema

A alteração das propriedades de propagação da onda eletromagnética no meio guiado será realizada por meio da divisão de um sinal de entrada; da passagem de parte do sinal em um ambiente de referência e outra na atmosfera gasosa; e da combinação dos dois sinais em uma única saída, a qual deverá ser convertida para um sinal DC para medição por equipamentos externos.

Cada componente da lista acima será utilizado para avaliação das estruturas e dos métodos construtivos propostos durante o trabalho realizado. Por sua vez, as condições de contorno que esclarecem sob quais condições físicas tais medidas deverão ocorrer, são dadas pelos distúrbios os 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**

Adicionalmente, as métricas associadas ao desempenho do sistema enquanto sensor de gases são derivadas da saída do sistema e sua relação com as entradas.

Tabela 1 Sensibilidade

Tabela 2 Range de Operação

Tabela 3 Seletividade

2. 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 ao seu tamanho e custo associado.

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

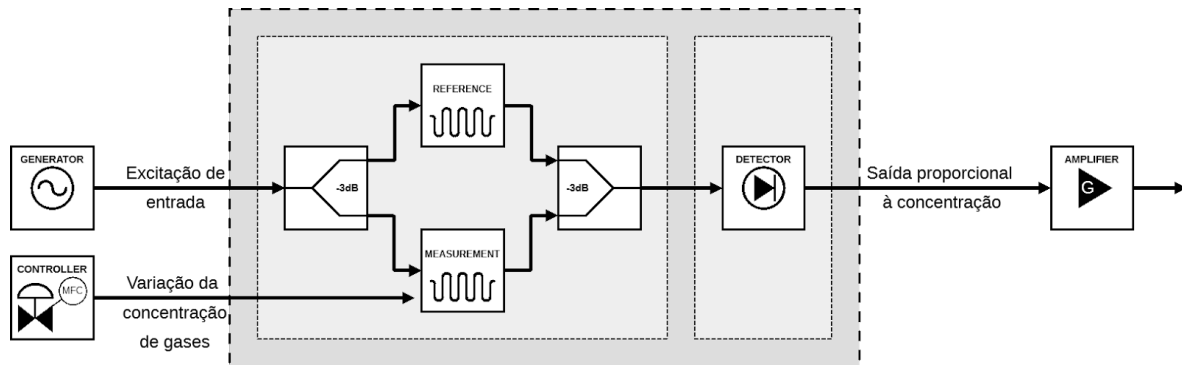


Figura 4 - Diagrama Construtivo do Sistema

No sistema proposto, um sinal com potência e frequência decididos de maneira arbitrária é gerado por uma fonte (oscilador ou VNA); 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 que é proporcional à tensão de entrada, e amplificada até um nível adequado por meio de um estágio amplificador de saída.

Note-se que: a geração de excitação senoidal na entrada do sistema; a geração de concentrações de gases; e à amplificação do sinal de saída do sistema não fazem parte do escopo do projeto, e cada um dos blocos mencionados 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 5. Linhas de transmissão planares podem ser montadas de diversas formas: Linhas de Microfita; Striplines; Guias de Ondas Coplanares; etc. Cada método apresenta uma série de vantagens e desvantagens devido à configuração de campo imposta pela disposição de condutores e dielétricos.

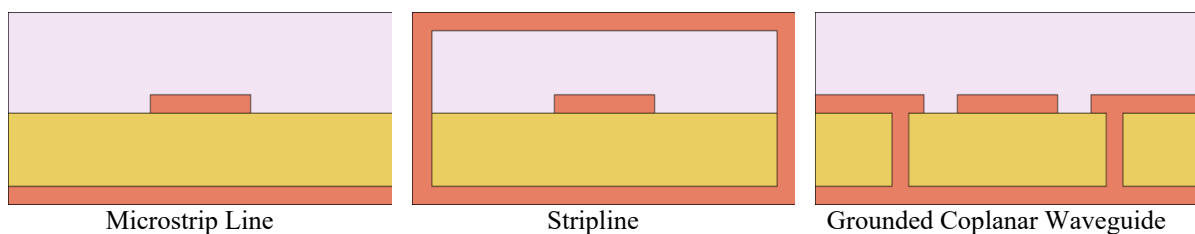


Figura 5 - Métodos construtivos de linhas planares

Por sua vez, cada bloco funcional mencionado na figura acima possui diversas **realizações**. Uma estrutura de atraso de fase, por exemplo, pode ser tão simples quanto uma linha de transmissão reta, ou tão complexa quanto linhas de transmissão artificiais ou linhas de contraste de impedância. O mesmo pode ser dito das estruturas de divisão e combinação de sinais, e das estruturas de detecção de sinais.

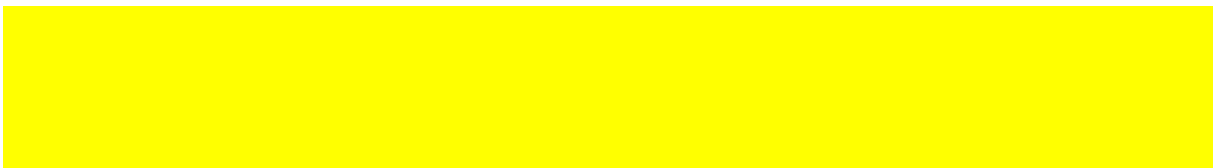


Figura 6 - Topologias de estruturas de atraso de fase

Uma breve discussão teórica sobre cada método construtivo e cada topologia de estrutura será realizada durante a análise diferencial do sistema. Contudo, é importante deixar claro que o foco deste trabalho é na estrutura de transdução em si, ou seja, nas linhas de referência e de medição. Dada sua importância, tais estruturas serão não somente discutidas na próxima seção, mas também intimamente analisadas e simuladas.

2. 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 é a variação de fase (θ), 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 [15], 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 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 ($\frac{\partial \epsilon_{MUT}}{\partial C_{MUT}}$).

- Como a variação da permissividade da mistura de gases influencia na variação da permissividade efetiva do meio guiado ($\frac{\partial \epsilon_{eff}}{\partial \epsilon_{MUT}}$).

- Como a variação da permissividade no meio guiado influencia na variação do atraso de fase ao qual a excitação de entrada da estrutura de medição é submetida ($\frac{\partial \theta}{\partial \epsilon_{eff}}$)

- 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 DC ($\frac{\partial V_{DET}}{\partial |V_{COMB}|}$).

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

Todas as relações descritas anteriormente podem ser sumarizadas por meio de uma única equação de derivadas parciais, as quais descrevem cada ponto de interesse a ser abordado pelo projeto de pesquisa.

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

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

2. 2. 1. 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 compõe o material reagem ao campo imposto. Frequências maiores, com comprimentos de onda menores excitam estruturas menores.

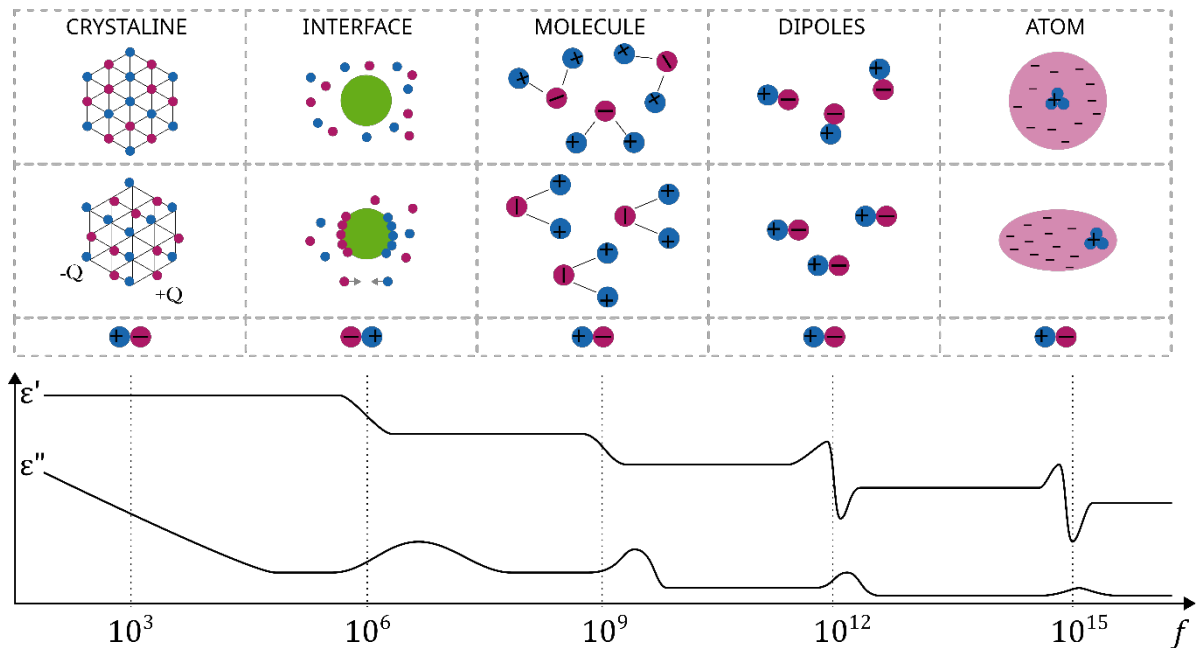


Figura 7 - Fenômeno de Polarização

Fundamentalmente, a permissividade elétrica é uma propriedade macroscópica de um material, que quantifica a capacidade que as substâncias que o compõe tem de armazenar energia elétrica. A permissividade é uma grandeza de natureza complexa, cuja parte imaginária é associada às perdas térmicas durante o processo de polarização; e cuja 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 despercebidas 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 ϵ , essencialmente, do fenômeno de polarização é baseada nos trabalhos realizados por Claussius-Mossoti [16], 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].

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

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 princípio, uma abordagem ingênua nos leva a pensar que uma simples ponderação linear em relação ao volume ocupado por cada substância dentro do material é suficiente para o cálculo da polarizabilidade efetiva da mistura (Π_{MIX}). Contudo, é importante ressaltar que com exceção de mistura de gases, 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 [17] e Landau-Lifshitz-Looyenga [18], [19] 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.

$$(\text{Eq. 3}) \quad \epsilon_{mix}^{\beta} = x_A \cdot \epsilon_A^{\beta} + x_B \cdot \epsilon_B^{\beta}$$

Em geral, as formulações de Silberstein ($\beta=1$) e LLL ($\beta=1/3$) são utilizadas sob hipótese de que não há interação entre as fases A e B e, portanto, não há depolarização induzida. Adicionalmente, ambas as formulações perdem acurácia frente a componentes cujas permissividades possuem magnitudes distintas [20].

Por outro lado, os trabalhos realizados por Maxwell Garnett [6-7], Bruggeman [23], Polder-Van Santeen [24], Looor [25], Böttcher [26] 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 [27].

$$(Eq. 4) \frac{\epsilon_{mix} - \epsilon_h}{\epsilon_{mix} + 2\epsilon_h + v(\epsilon_{mix} - \epsilon_h)} = \sum_{i=1}^N f_i \frac{\epsilon_i - \epsilon_h}{\epsilon_i + 2\epsilon_h + v(\epsilon_{mix} - \epsilon_h)}$$

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,

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

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 apresentado, 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 [28]:

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

Deste modo,

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

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 três motivos. Primeiramente, as polarizabilidades molares de compostos “puros” tais como O_2 , N_2 e Ar são amplamente catalogadas [29], [30], [31], em contraste às permissividades [32]. O segundo e terceiro motivos pelos quais 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 [33], [34], [35], no qual a análise da polarizabilidade molar é sistematizada por uma expansão de virial em termos do volume molar, de modo a que:

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

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 [36], [37], [38], [39] **A**, **B** e **C**.

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 [26], [40]. Nela, entende-se que a polarização molar (Π) não só é composta pela polarizabilidade molecular como visto na equação de Clausius-Mossotti (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 válida apenas para gases polares em baixa concentração. Mesmo com tais considerações, as formulações de trabalhos como os de Vega-Maza [41], Cuccaro [42] e Huang [43], fazem uso de tais equações e apresentam alto grau de concordância com os valores reportados na literatura.

Os valores utilizados para as constantes de Debye A e B, foram extraídos de tabelas tais como as reportadas por [44], [45].

[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 [41], [42], [43], 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, a 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:

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

, 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, um composto apolar, não se faz necessária a utilização da equação de Debye, simplificando a formulação para:

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

, 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 que permitem entender as dimensões das grandezas a serem medidas durante os experimentos realizados. Para determinar o range de permissividade a ser estudado, 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.

Tabela 4 - Comparativo dos cálculos de permissividade para Água

RH [%]	X_{H_2O} [mol/mol] (Eq. 14)	X_{AIR} [mol/mol]	$\epsilon_{MAXWELL_GARNET}$ (Eq. 4)	$\epsilon_{POLARIZABILITY\ MIXING}$ (Eq. 7)	$\epsilon_{VIRIAL\ MIXING}$ (Eq. 10)
0.0 %	0.000000	1.000000	1.000538	1.000538	
0.1 %	0.000031	0.999969	1.000628	1.000628	
1.0 %	0.000313	0.999687	1.001442	1.001441	
10.0 %	0.003127	0.996873	1.009601	1.009597	
100.0 %	0.031271	0.968729	1.093697	1.093665	

Tabela 5 - Comparativo dos cálculos de permissividade para Acetona

RS [%]	X _{ACETONA} [mol/mol] (Eq. 14)	X _{AIR} [mol/mol]	$\epsilon_{\text{MAXWELL_GARNET}}$ (Eq. 4)	$\epsilon_{\text{POLARIZABILITY MIXING}}$ (Eq. 7)
0.0 %				
0.1 %				
1.0 %				
10.0 %				
100.0 %				

Note-se que uma variação de 0 a 100% de umidade relativa acarreta a alteração da fração molar de H₂O em ar ambiente de aproximadamente 3.1 %. Ou seja, a cada mil moléculas de ar saturado com umidade, apenas 31 moléculas são de água.

Adicionalmente, ao comparar as colunas ϵ percebe-se que ...

Tabelas completas com cálculos para saturações de água deionizada e de acetona são apresentadas no Apêndice APÊNDICE A.

2. 2. 2. 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 ocorre sob a presença de um campo (**E**) uniforme, a partir do qual ocorrem os fenômenos de polarização. Contudo, em meios guiados, o campo elétrico nem sempre se propaga em um mesmo material. No caso de estruturas planares, a propagação ocorre tanto dentro do substrato quanto pelo meio que circunda a linha de transmissão, denominado modo quasi-TEM de propagação.

Sendo assim, a permissividade efetiva surge como um artifício matemático para a simplificação de equações de projeto. Seu valor corresponde à permissividade de um meio equivalente, pelo qual todas as linhas do campo **E** que surgem da linha de transmissão passam.

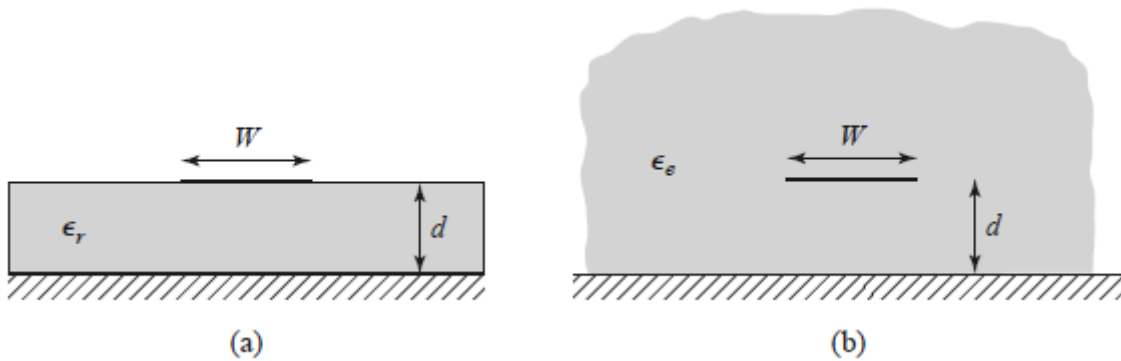


Figura 8 - Geometria equivalente de uma linha de microfita quasi-TEM.
 (a) Geometria original. (b) Geometria equivalente, com substrato dielétrico de permissividade relativa ϵ_r é substituído por um meio homogêneo de permissividade efetiva ϵ_e . [46].

[COMO TAIS RELAÇÕES PODEM SER DESCRITAS PARA LINHAS DE TRANSMISSÃO PLANARES?]

Diversos autores [47], [48], [49], possuem equações de projeto que são capazes de determinar a permissividade efetiva por meio de parâmetros 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 [15], [50], [51], [52]. 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) [46] 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:

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

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.

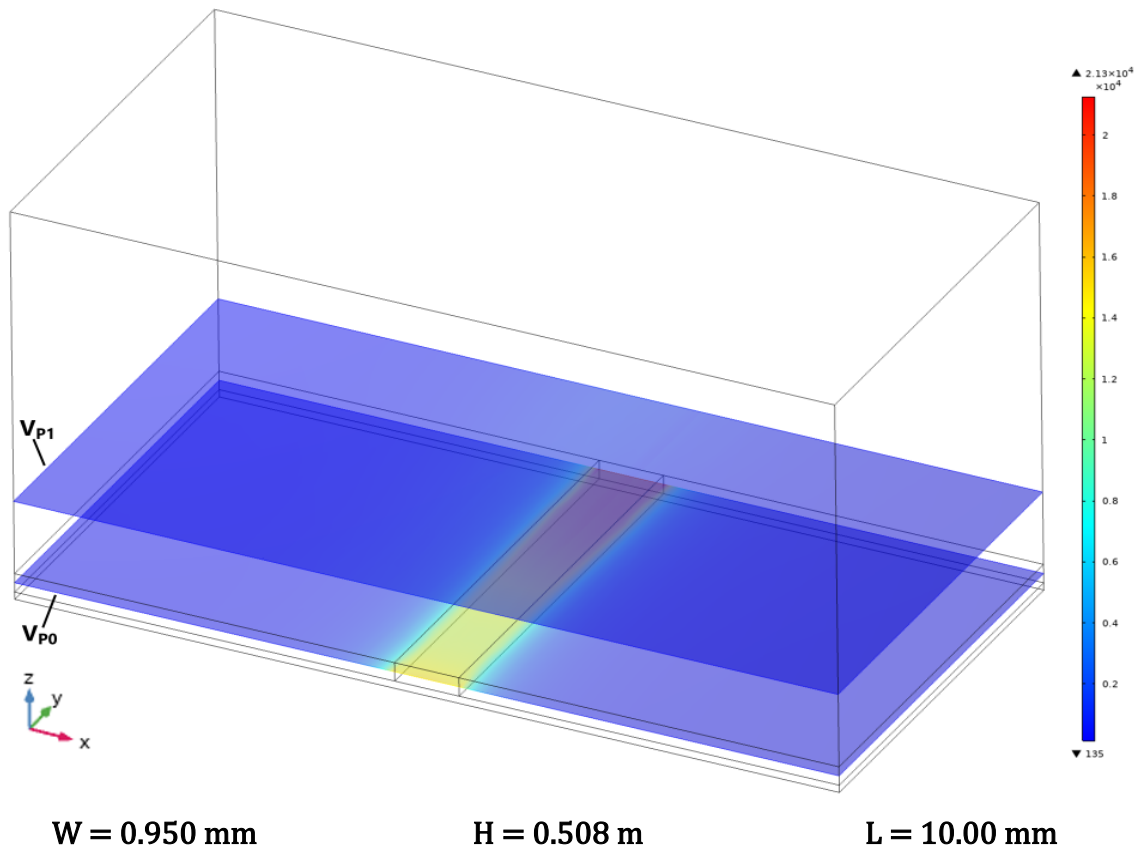


Figura 9 - Configuração de linha de microfita - COMSOL

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.

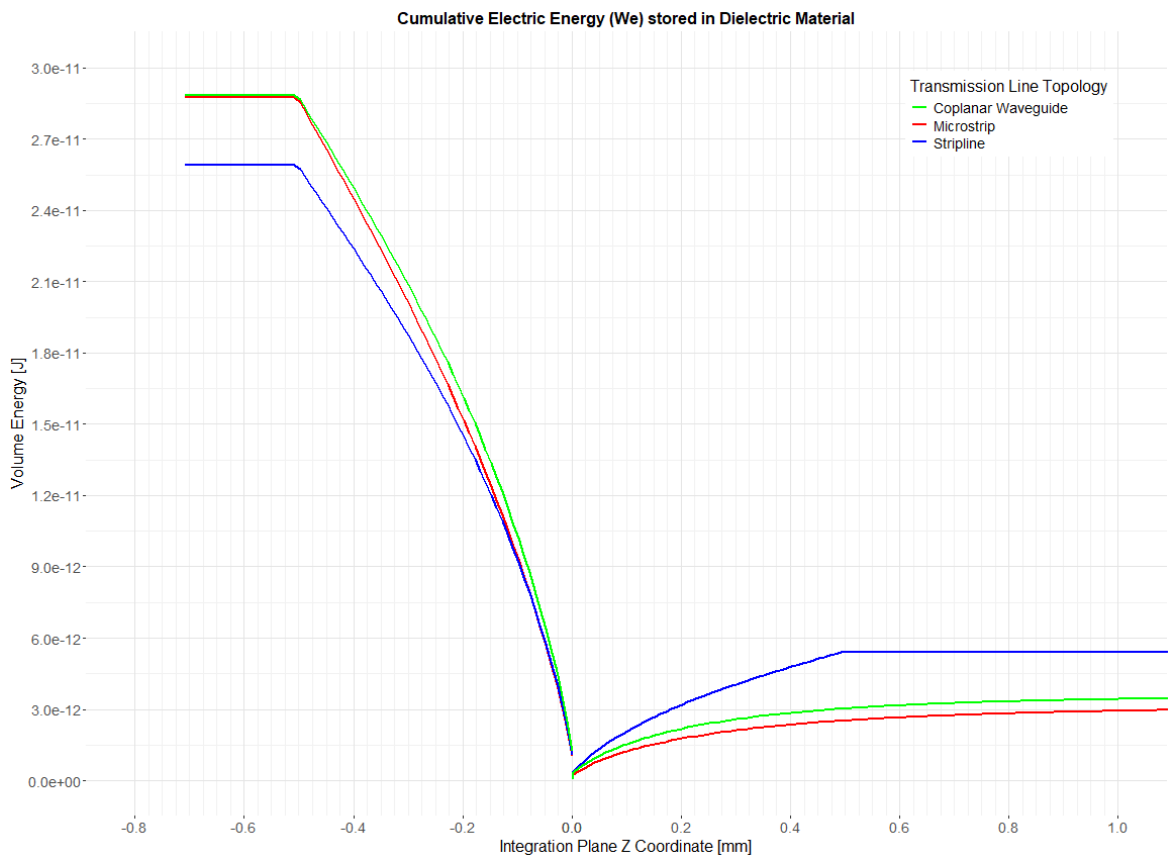


Figura 10 - Energia armazenada em cada plano de integração

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

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

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

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

A equação acima é válida, à priori, para qualquer configuração de linha de transmissão (ver APÊNDICE A). Contudo, devido ao modo como a energia armazenada é calculada, fica evidente a importância de simulações nas quais as malhas de elementos finitos possuam densidades maiores de acordo com a intensidade do campo elétrico E.

[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. 19), 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.

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

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.

2. 2. 3. 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 [46]:

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

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 [15]. 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.

2. 2. 4. 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/combinção 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:

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

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 $\Delta\theta = 180^\circ$.

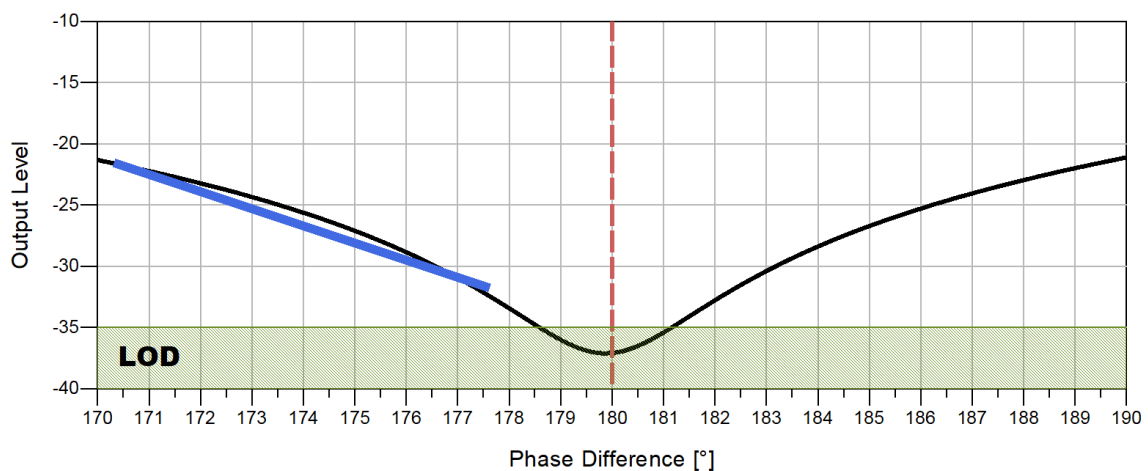
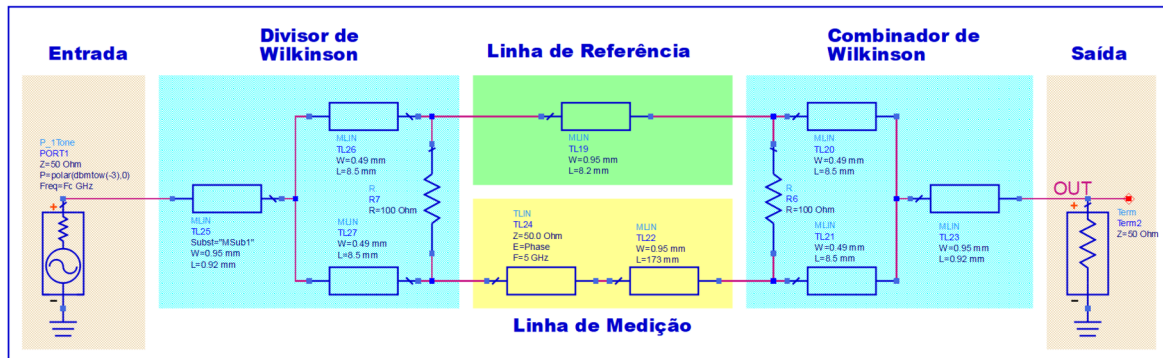


Figura 11 - Resultados da simulação de ponto de operação

Uma simulação SPICE utilizando o software Advanced Design System (ADS) mostra que de fato, esse é o caso. Entretanto, apesar de matematicamente ótimo, um ponto de operação escolhido muito próximo de $\Delta\theta=180^\circ$ é suscetível a dois problemas.

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.

2. 3. 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 componentes Momentum e 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 DC, a qual pode ser medida por multímetro de bancada.

2. 3. 1. Etapa 1 – 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 do projeto, 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 4 e Tabela 5. 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 Figura 9 e no APÊNDICE C. Com a permissividade efetiva em mãos, a diferença de fase é calculada por meio da (Eq. 22), para uma frequência e comprimentos arbitrários. Como mencionado na Especificação do Sistema, a frequência de operação nominal foi projetada para $f = 5\text{ GHz}$. Cálculos de mudança de fase foram realizados para comprimentos de 250, 500, 750 e 1000 milímetros para se compreender as ordens de grandeza da variação de fase.

Tabela 7 - Avaliação de atraso de fase para atmosfera com H₂O

RH [%]	ϵ_{MUT} (Eq. 4)	ϵ_{EFF} (Eq. 17)	$\Delta\theta$ ($l = 250\text{ mm}$)	$\Delta\theta$ ($l = 500\text{ mm}$)	$\Delta\theta$ ($l = 750\text{ mm}$)	$\Delta\theta$ ($l = 1000\text{ mm}$)
0.0 %	1.000538	3.355825	0°	0°	0°	0°
0.1 %	1.000628	3.355918	0.037867	0.075735	0.113602	0.151469
1.0 %	1.001442	3.356750	0.378998	0.757996	1.136994	1.515993
10.0 %	1.009601	3.365162	3.822528	7.645057	11.467585	15.290113
100.0 %	1.093697	3.458012	41.551734	83.103468	124.655202	166.206936

Tabela 8 Avaliação de atraso de fase para atmosfera com Acetona

RS [%]	ϵ_{MUT} (Eq. 4)	ϵ_{EFF} (Eq. 17)	$\Delta\theta$ ($l=250\text{ mm}$)	$\Delta\theta$ ($l=500\text{ mm}$)	$\Delta\theta$ ($l=750\text{ mm}$)	$\Delta\theta$ ($l=1000\text{ mm}$)
0.0 %	1.000538	1.000538				
0.1 %	1.000628					
1.0 %	1.001442					
10.0 %	1.009601					
100.0 %	1.093697					

Com base nos resultados das tabelas anteriores, percebe-se que são necessárias linhas de transmissão razoavelmente compridas para que haja mudanças de permissividade consideráveis. 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 12), foi realizado o design de uma linha de microfita com aproximadamente 675 mm, equivalente a uma mudança de fase de aproximadamente 0.1° 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 de ruídos externos 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 - Fabricação de linhas de transmissão por meio de microfresamento.

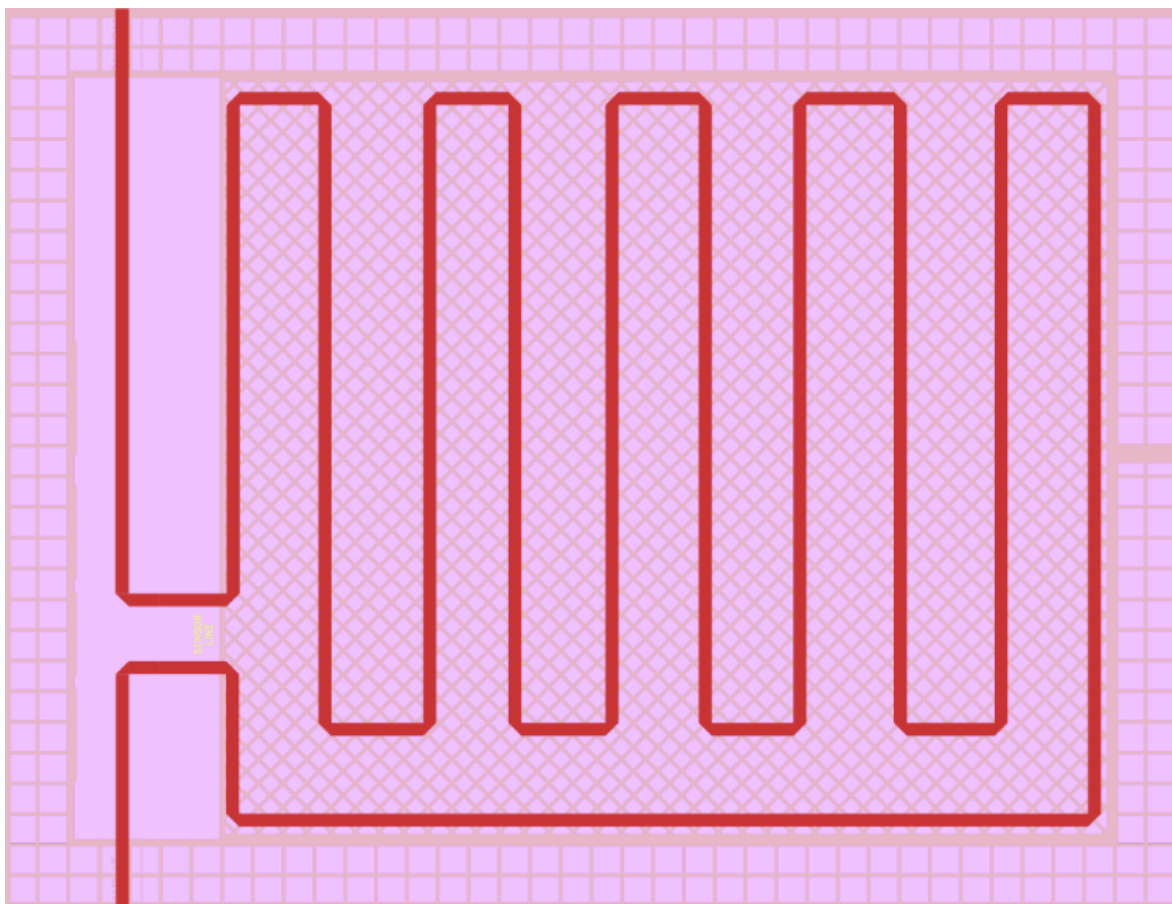


Figura 12 - Linha de microfita proposta

Para verificar a validade do design realizado, foram feitas simulações no ADS MoM. Na Figura 13 são mostrados os parâmetros de espalhamento de transmissão e reflexão. A perda de transmissão para linha de 675 mm foi calculada em 3.566 dB por meio da ferramenta LineCalc, e mostrou concordância com as simulações eletromagnéticas. Com exceção das frequências no entorno de 4.7 GHz, todo o intervalo apresentou desempenho satisfatório.

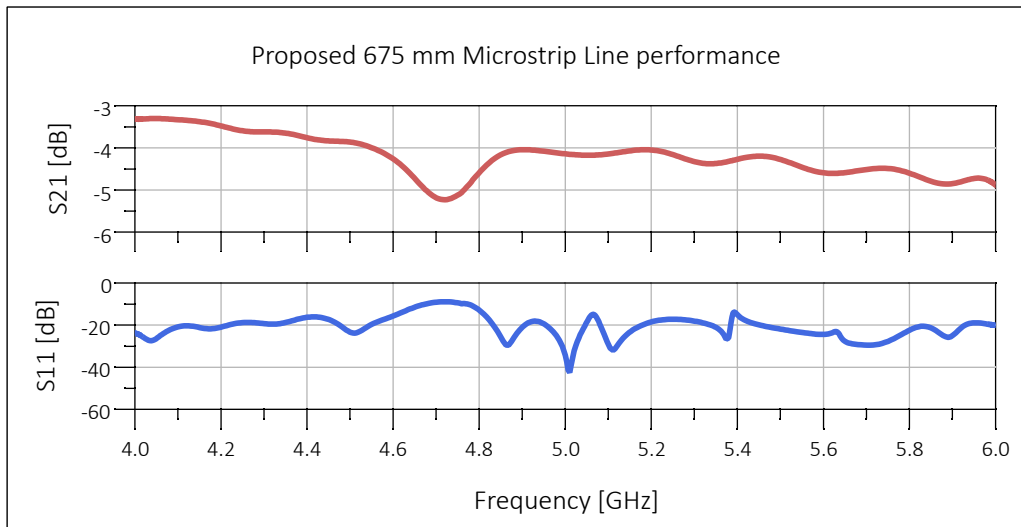


Figura 13 - Parâmetros de Espalhamento da linha proposta

2. 3. 2. Etapa 2 – Design e Simulação de sistema de conversão Fase-Amplitude

Na segunda etapa, as estruturas de divisão e combinação de potência foram adicionadas à simulação, transformando a diferença de fase entre as linhas de referência e sensoria-mento em uma tensão. Aqui se manteve o comprimento de linha em 675 mm e foram avalia-das as tensões de saída do combinador em três frequências no entorno de 5 GHz. Deste modo pode-se obter uma noção aproximada da sensibilidade esperada do sistema em torno do ponto de operação.

RH [%]	E_{MUT} (Eq. 4)	ϵ_{EFF} (Eq. 17)	θ ($l=675\text{ mm}$)	V_{COMB} ($f=4.9\text{ GHz}$)	V_{COMB} ($f=5.0\text{ GHz}$)	V_{COMB} ($f=5.1\text{ GHz}$)
0.0 %	1.000538	3.355825	0.000000			
0.1 %	1.000628	3.355918	0.102242			
1.0 %	1.001442	3.356750	1.023295			
10.0 %	1.009601	3.365162	10.320826			
100.0 %	1.093697	3.458012	112.189682			

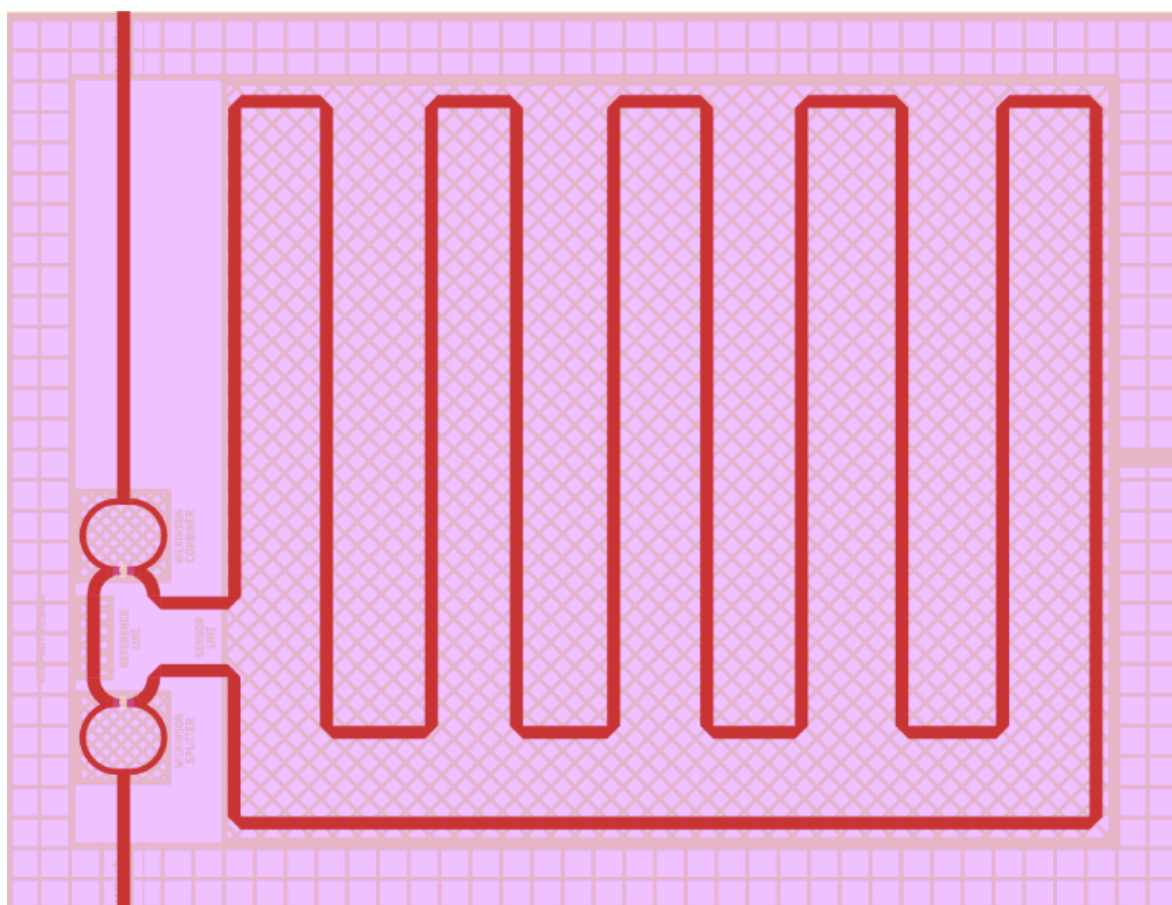


Figura 14 - Linha de microfita proposta

Novamente, foram realizadas simulações no simulador ADS para averiguar se os modelos numéricos seguem o comportamento esperado pela teoria. Verifica-se que apesar da teoria prever um comportamento quase linear para permissividades próximas à do vácuo, as simulações numéricas realizadas não seguem a mesma tendência. Apesar disso, na presença de variações substanciais ($\epsilon_{MUT}=1.0005378 \rightarrow \epsilon_{MUT}=1.337622790$) há deslocamento dos parâmetros S conforme esperado. Dada a divergência entre a resposta obtida na Figura 15 e aquela descrita na Figura 11, acredita-se que hajam problemas de estabilidade numérica que levam a comportamentos não realísticos.

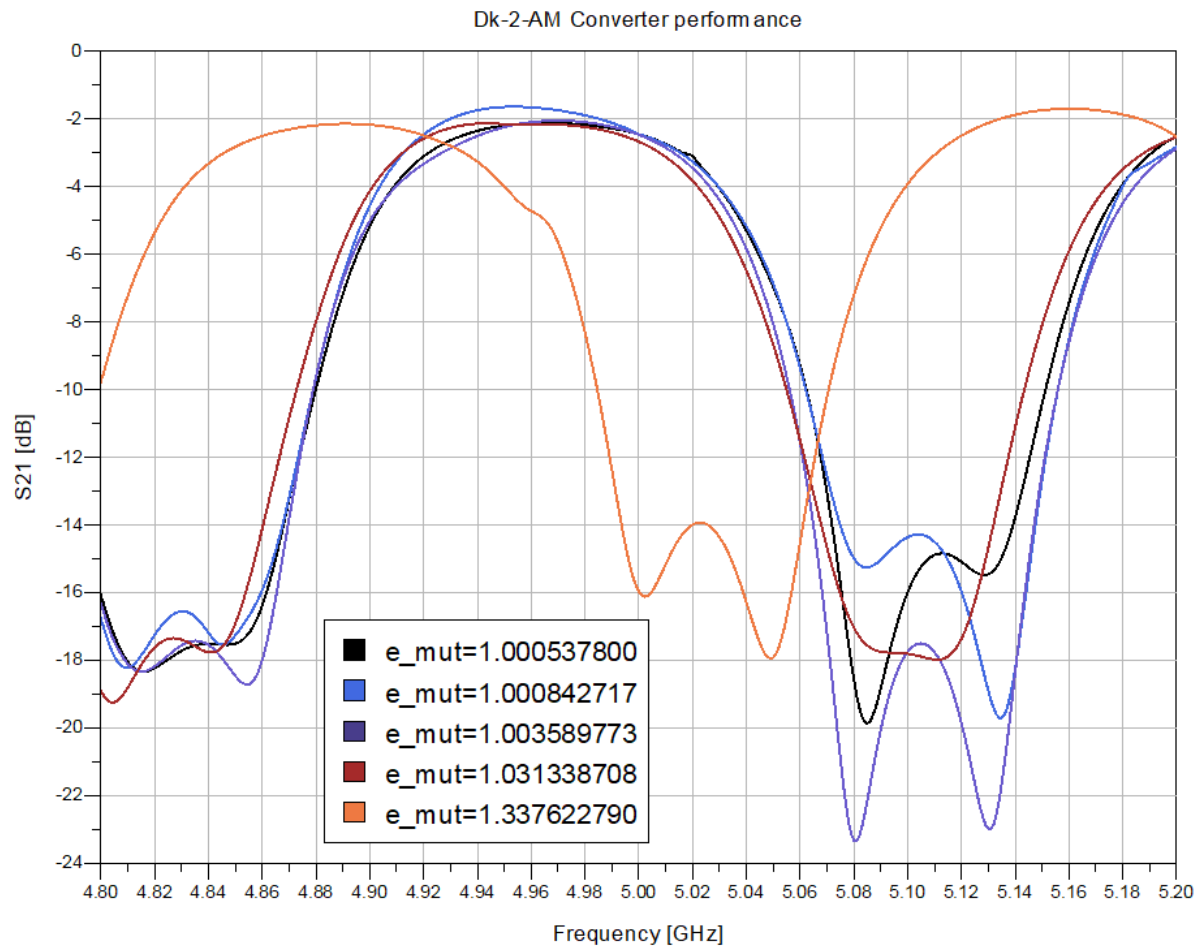


Figura 15 - Parâmetros de Espalhamento da linha proposta

2. 4. 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. Ao total 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 advindos dos equipamentos e os circuitos projetados, foram utilizados conectores SMA, cujas faixas de operação se estendem até 12 GHz (segundo fabricante).

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

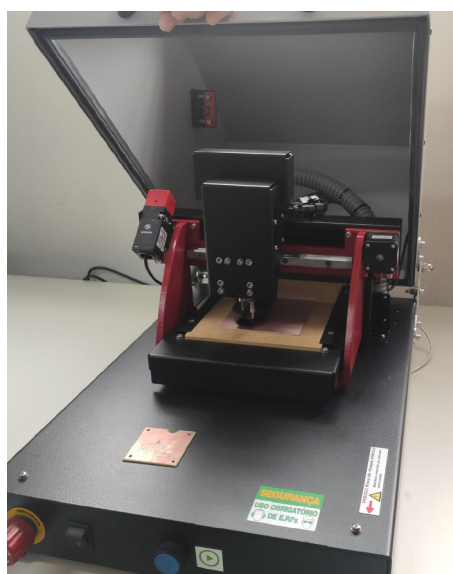


Figura 16 - Fabricação de linhas de transmissão por meio de microfresamento

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.

Adicionalmente, para realizar os ensaios com gases propostos, foi projetado e construída uma câmara de ensaios feita em latão (Figura 17), por meio da qual se garantiu bom aterramento das estruturas e vedação para os ensaios.



Figura 17 - Câmara de ensaios fabricada

A primeira estrutura de micro-ondas produzida foi a de um meandro de linha de microfita tradicional (Figura 18), utilizado não só para validação do ambiente de simulação utilizado, como também para aprofundamento do estudo do princípio de transdução. Mais especificamente, das interações geradas em micro-ondas pela introdução de nanoestruturas orgânicas como nanotubos de carbono.



Figura 18 - Meandro de Microfita

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 19, na qual se compara a medida (em preto) com as simulações realizadas (em vermelho). Apesar de algumas divergências próximas da faixa de 6 GHz, há boa concordância entre a linha simulada e aquela construída e medida em bancada.

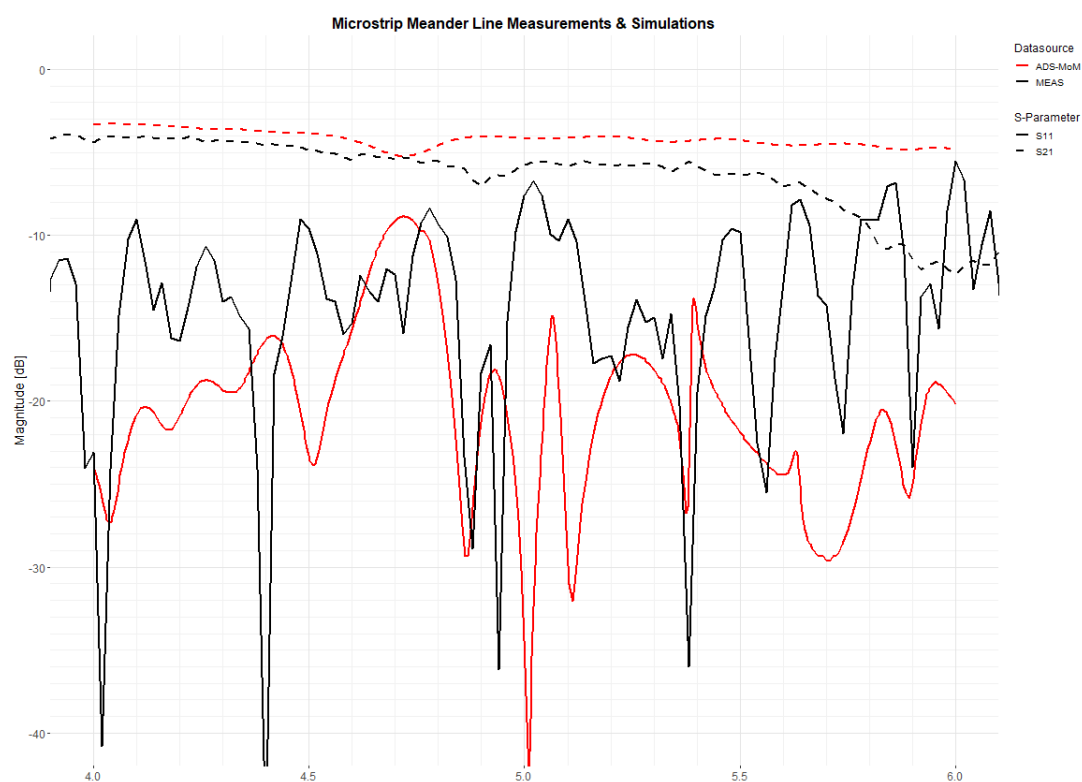


Figura 19 - Comparação entre simulações e protótipo construído

Em uma segunda iteração, foi produzida uma estrutura intermediária, na qual a linha de transmissão é precedida por um divisor de Wilkinson e seguida de um combinador de Wilkinson (Figura 14). 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 20 - Linha de Transmissão + Divisor/Combinador de Wilkinson

Novamente, o protótipo foi caracterizado no VNA na mesma faixa de operação e comparado com a simulação numérica.



Figura 21 - Comparação entre simulações e protótipo construído

Do mesmo modo como ocorreu com a linha de microfita, a adição dos divisores/combinadores de potência também produziu resultados em concordância com aqueles calculados.

2. 5. ENSAIOS COM GASES

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

Para realização de ensaios com gases e as estruturas de micro-ondas propostas para sensoriamento, foram utilizadas duas infraestruturas já presentes no laboratório: a bancada de ensaios com gases e a bancada de medidas em micro-ondas.

2. 5. 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 22) magnitudes acima de 1% de fração volumétrica são controlados. Ar seco advindo de um sistema de dessecação (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 micro-ondas 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).

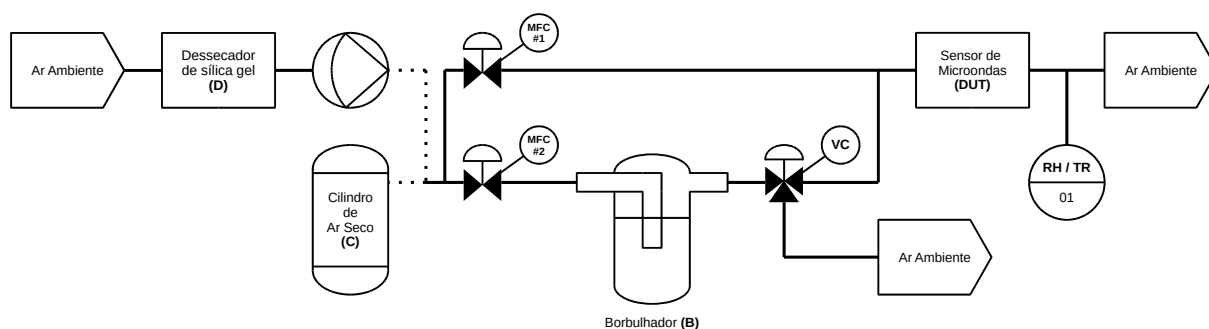


Figura 22 - Diagrama P&ID da bancada de gases (configuração #1)

[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 ().

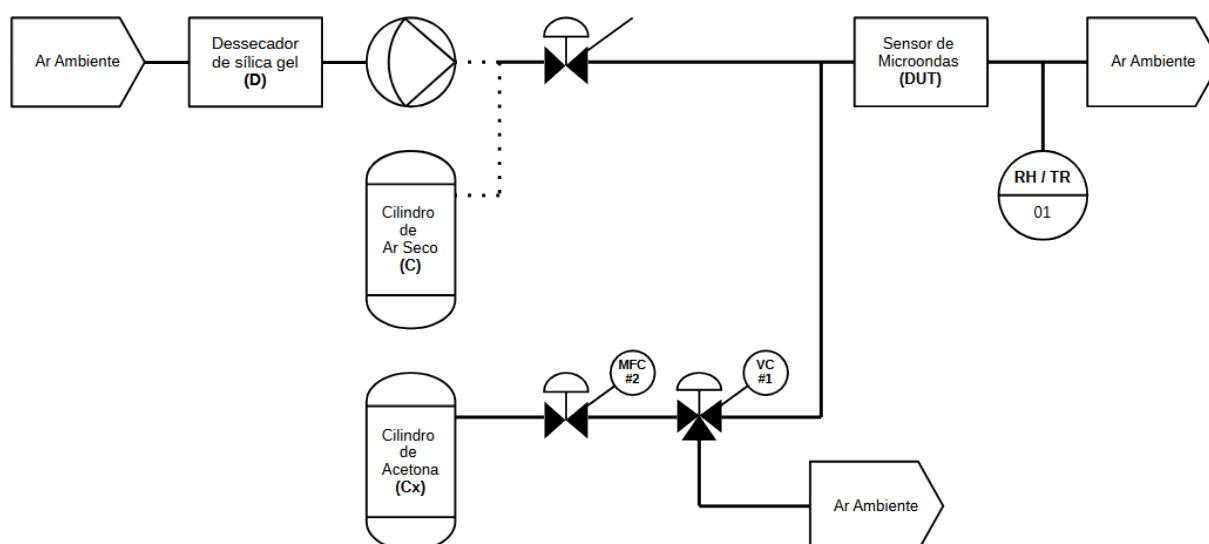


Figura 23 - Diagrama P&ID da bancada de gases (configuração #2)

[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, em cuja proporção molar de água ou acetona em ar depende da combinação linear de ar seco e mistura advinda do tanque.

2. 5. 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 24).



Figura 24 - Configuração da Bancada de Testes de Micro-ondas

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.

2. 5. 3. Programação de Experimentos

[QUAIS OS OBJETIVOS SUCINTOS DOS EXPERIMENTOS A SEREM REALIZADOS?]

Os experimentos realizados ao longo do projeto têm por objetivo principal validar a utilização da transdução por atraso de fase como um método para sensoriamento 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.

[COMO SERÃO ORGANIZADOS OS EXPERIMENTOS?]

Os experimentos propostos foram organizados de acordo com a figura X, abaixo. Inicialmente, as simulações das linhas de transmissão foram utilizadas para síntese da estrutura de transdução inicial e os primeiros experimentos foram realizados para validar todas as simulações realizadas, desde altas concentrações (#1, #2, #3) até baixas (#4).

3. RESULTADOS

3. 1. MEANDROS DE MICROFITA

3. 2. SISTEMA COMPLETO DE DETECÇÃO

3. 3. COMPÓSITOS NANOESTRUTURADOS

4. DISCUSSÃO

4. 1.

5. SUMÁRIO ESTRUTURADO DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Segue abaixo o sumário estruturado previsto para a dissertação de mestrado:

[TODO]

6. 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. Chelkowski 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 solids,” *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. Fernicola, 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 [53]

$$\varepsilon_{H2O} = 87.740 - T \cdot 0.40008 + T^2 \cdot 9.398 \cdot 10^{-4} - T^3 \cdot 1.41 \cdot 10^{-6}$$

Pressão de Vapor da Água [54]

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

Polarizabilidade Molecular N2, O2, Ar [30]

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

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

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

Fração Molar de Ar-Seco-Ambiente [55]

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

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

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

Constantes de Virial para H2O – Ar

Constantes de Debye

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

RH [%]	xH2O	xAir	$\epsilon_{\text{MAXWELL_GARNET}}$	$\epsilon_{\text{POLARIZABILITY MIXING}}$	$\epsilon_{\text{VIRIAL MIXING}}$
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?]

[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**