

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

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Diagrama Black-Box do Sistema.....	15
Figura 2 - Diagrama Transparent-Box do Sistema.....	16
Figura 3 - Diagrama Equacional do Sistema.....	16
Figura 4 - Diagrama Construtivo do Sistema.....	18
Figura 5 - Métodos construtivos de linhas planares.....	19
Figura 6 - Topologias de estruturas de atraso de fase.....	19
Figura 7 - Fenômeno de Polarização.....	23
Figura 8 - Geometria equivalente de uma linha de microfita quase-TEM.....	32
Figura 9 - Linha de microfita multicamada.....	33
Figura 10 - Exemplo de divisores de potência empregados em linhas de microfita. .	37
Figura 11 - Divisor de Wilkinson empregando linhas de microfita.....	38
Figura 12 - Configuração da simulação de Balanceamento Harmônico no ADS Keysight.....	40
Figura 13 - Resultados da simulação de ponto de operação.....	40
Figura 14 - Simulação de leiaute no ADS da linha de transdução proposta.....	45
Figura 15 - Parâmetros de Espalhamento da linha proposta.....	46
Figura 16 - Simulação de leiaute no ADS para transdutor proposto.....	48
Figura 17 - Parâmetros de espalhamento do transdutor de fase para amplitude.....	49

Figura 18 - Resposta (S21) do transdutor para variações de permissividade atmosférica.....	50
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 simulação e protótipo construído para linha com conversor fase-amplitude.....	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.....	62
Figura 28 - Configuração dos Experimentos realizados.....	63
Figura 29 - Exemplo de arquivo gerado pelo programa de controle dos MFCs.....	65
Figura 30 - Exemplo de arquivo gerado pelo programa de controle do VNA.....	66
Figura 31 - Design da câmara de medição construída.....	66
Figura 32 - Exemplo de arquivo gerado pelo programa de medição de T e RH.....	67
Figura 33 - Experimento com atmosfera de ar seco e vapor de H ₂ O – 10% a 70% ..	70
Figura 34 - Medidas de S21 variando no tempo para atmosfera de ar seco com vapor de H ₂ O.....	71
Figura 35 - Experimento com atmosfera de ar seco e acetona – 10% a 80%.....	75

Figura 36 - Medidas do parâmetro S21 para atmosfera de ar seco com acetona.....	76
Figura 37 - Comparação entre os parâmetros S dos experimentos com vapores de H ₂ O e de acetona.....	79
Figura 38 - Experimento com atmosfera de ar seco e H ₂ O – 0% a 90%.....	79

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Comparativo dos cálculos de permissividade de atmosfera com vapor de Água.....	30
Tabela 2 - Comparativo dos cálculos de permissividade de atmosfera com vapor de Acetona.....	30
Tabela 3 - Avaliação de atraso de fase para atmosfera com H ₂ O.....	43
Tabela 4 - Avaliação de atraso de fase para atmosfera com Acetona.....	43
Tabela 5 - Avaliação de variação de tensão para atmosfera com H ₂ O.....	47
Tabela 6 - Avaliação de variação de tensão para atmosfera com Acetona.....	47
Tabela 7 - Avaliação da resposta do sistema para atmosfera de ar seco e vapor de H ₂ O.....	73
Tabela 8 - Avaliação da resposta do sistema para atmosfera de ar seco e H ₂ O.....	77
Tabela 9 - Cronograma previsto de atividades.....	82

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

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

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

LISTA DE SÍMBOLOS

V_{DET}	Tensão detectada pelo sistema de transdução em [V]
C_x	Concentração de moléculas de uma substância x em uma atmosfera gasosa padrão [ppm]
ϵ_{eff}	Permissividade elétrica efetiva de um meio guiado
μ_{eff}	Permeabilidade magnética efetiva de um meio guiado
ϵ_x	Permissividade elétrica relativa de um material sob análise
μ_x	Permeabilidade magnética relativa de um material sob análise
ϵ_0	Permissividade elétrica do vácuo
μ_0	Permeabilidade magnética do vácuo
θ	Variação de fase de uma linha de transmissão
V_{COMB}	Tensão na saída da estrutura de combinação de potência
Π_x	Polarizabilidade Molar de x [cm^3/mol]
α_x	Polarizabilidade Molecular de x [cm^3]
ρ_x	Densidade Molar de x [mol/cm^3]
$[V]_x$	Volume Molar de x [cm^3/mol]
x_x	Fração Molar de x [mol/mol]
n_x	Número de moles de x [mol]
A_x e B_x	Coeficientes de Debye para uma substância x
T	Temperatura
N_A	Número de Avogadro
R	Constante Universal dos Gases
P_{amb}	Pressão Ambiente em um experimento
p_x	Pressão parcial de uma substância x
$RS_x(T)$	Saturação relativa de uma substância x
p_{sx}	Pressão de saturação de uma substância x
Z_0	Impedância característica da linha de transmissão
q_i	Fator de preenchimento de um dielétrico i em uma linha de microfita
W_{ef}	Largura eficaz de uma linha de microfita
W	Largura de uma linha de microfita

h	Altura do substrato de uma linha de microfita
β	Constante de propagação de uma linha de transmissão
ω	Frequência angular de uma onda
c	Velocidade da luz no vácuo
l	Comprimento de uma linha de microfita
k	Constante de Boltzman

SUMÁRIO

1. Contextualização.....	4
1.1. Introdução e Justificativa.....	4
1.2. Estado da Arte.....	5
1.3. Proposta de Pesquisa.....	8
1.4. Objetivos.....	9
2. Metodologia.....	10
2.1. Estudo bibliográfico de metodologias em micro-ondas e suas estruturas associadas.....	10
2.2. Revisão bibliográfica do fenômeno de polarização dielétrica.....	11
2.3. Avaliação e seleção dos programas para simulações computacionais EM-3D de circuitos de micro-ondas para o processo de transdução.....	11
2.4. Estudo e definição de especificações e proposição de novas configurações para o sistema de transdução de micro-ondas.....	11
2.5. Projeto dos circuitos que compõem o sensor.....	12
2.6. Simulações computacionais EM-3D dos circuitos projetados e otimização de seus parâmetros.....	12
2.7. Fabricação dos circuitos projetados.....	12
2.8. Caracterização elétrica do sensor projetado.....	12
2.9. Análises comparativas de resultados.....	13
3. Estágio atual de desenvolvimento da pesquisa.....	13
3.1. Especificação do Sistema.....	14
3.1.1. Definição de estrutura e métricas gerais do sistema.....	15
3.1.2. Definição de estruturas específicas do sistema.....	17

3.2. Análise Diferencial do Sistema.....	21
3.2.1. Permissividade e Concentração do MUT.....	22
3.2.2. Permissividade Efetiva e Permissividade do MUT.....	31
3.2.3. Diferença de Fase dos Sinais e Permissividade Efetiva.....	35
3.2.4. Tensão após combinador e Diferença de Fase dos Sinais.....	36
3.3. Simulações de Linhas de Transmissão.....	41
3.3.1. Design e Simulação de conversão Concentração-Fase.....	42
3.3.2. Design e Simulação de conversão Fase-Amplitude.....	47
3.4. Fabricação de Protótipos.....	51
3.5. Ensaios com Gases.....	58
3.5.1. Bancada de Gases.....	58
3.5.2. Bancada de Testes de Micro-ondas.....	61
3.6. Resultados.....	63
3.6.1. Conversor fase-amplitude.....	67
3.6.1.1. Medição em atmosfera com H ₂ O.....	68
3.6.1.2. Medição em atmosfera com acetona.....	73
3.7. Discussão.....	77
4. Atividades em andamento.....	80
5. Atividades Futuras.....	81
6. Cronograma de Execução.....	82
7. Sumário Estruturado da Dissertação de Mestrado.....	83
8. Referências Bibliográficas.....	84

1. CONTEXTUALIZAÇÃO

1. 1. INTRODUÇÃO E JUSTIFICATIVA

O crescente desenvolvimento e aprimoramento de técnicas de medição de variáveis físicas têm possibilitado 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 concentra-se no estudo e na proposição de metodologias de sensoriamento em micro-ondas, com possibilidade de serem aplicadas 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, exigindo equipamentos dedicados.

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 do 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 grandezas 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

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 é 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 [2-5]. Adicionalmente, devido às propriedades físico-químicas desse composto, há grande correlação entre a concentração de acetona detectada no ar exalado por um paciente e aquele presente em seu sangue [6], [7].

Apesar da 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 as proporções existentes de modo quantitativo.

Tal cenário mudou no início do século XXI, com um aumento nas publicações sobre o tópico, das quais destacam-se [8-14]. Em geral, os estudos realizados focaram na 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 (de controle), enquanto no segundo (com DM1) esperam-se níveis acima de 1,8 ppm.

Devido à finalidade investigativa das publicações mencionadas [8-14], todas apresentaram resultados advindos de técnicas de análise química tradicional, tais como a cromatografia com espectrometria de massas (GC-MS), voltametria cíclica (CV), 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, como reportado 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 e utilizados para medição de outros gases na indústria foram modificados para suprir a demanda.

Apesar da maioria das publicações com esse intuito apresentarem transdutores baseados na mudança de resistividade de óxidos de metais semicondutores (MOX), estudos recentes demonstram 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], como a alta sensibilidade, resposta rápida e a capacidade de operar sem contato direto com a amostra [23-26], 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 acopladas, cujo coeficiente de acoplamento se alterna à medida em que os gases são adsorvidos pela camada sensível. Apesar do sensor proposto apresentar resposta a outros gases voláteis como etanol, metanol e 2-propanol, sua resposta à 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 [27] os autores reportaram 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 resso-

nância do ressoador quando exposto ao 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.

Levando em consideração a revisão de literatura realizada, observa-se que a fabricação de sensores de acetona operando na faixa de micro-ondas é factível, visto que tais sensores demonstram capacidade 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, na maioria dos estudos analisados, as soluções baseadas em MOX requerem a operação dos sensores em elevadas temperaturas, da ordem de 400 °C.

Independentemente da técnica a ser escolhida, a literatura destaca que alguns parâmetros dos sensores devem ser priorizados para a detecção de acetona exalada por indivíduos. Além dos mais clássicos, tais como a sensibilidade e a seletividade 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

Sensores baseados na mudança de fase de acordo com a permissividade elétrica de um analito apresentam uma resposta altamente linearizada [28] e operam em condições ambientes. Adicionalmente, devido à sua versatilidade, podem ser utilizadas com uma ampla gama de materiais adsorvedores capazes de aumentar sua sensibilidade e seletividade [16], [21], [22], [29].

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

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, sua sensibilidade e limites de detecção. 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.

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

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. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA DO FENÔMENO DE POLARIZAÇÃO DIELÉTRICA

A revisão bibliográfica 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.

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

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 foco na sua aplicação no sensoriamento de gases. 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 de circuitos planares de micro-ondas que formam o sensor, 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 se 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, assim como 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. 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 importantes para a definição da permissividade de um material. Simultaneamente, efetuou-se 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 viabilizem 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 pudessem ser comparados àqueles obtidos em simulação e àqueles apresentados em outros trabalhos.

As atividades desenvolvidas são descritas a seguir.

3. 1. ESPECIFICAÇÃO DO SISTEMA

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 macrotarefas 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, 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



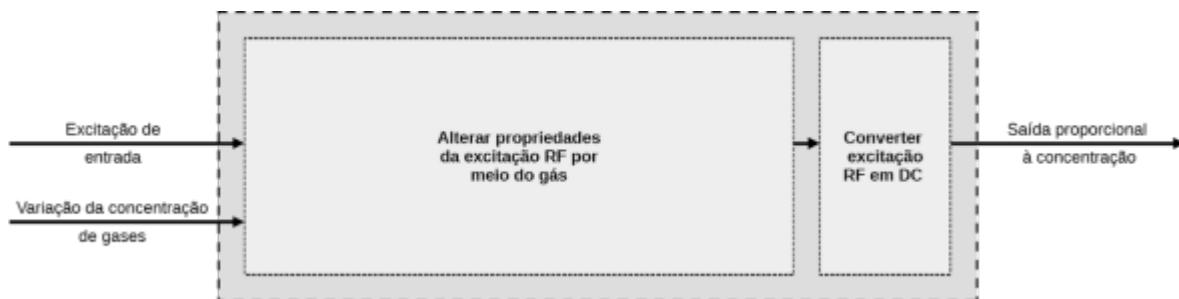
Fonte: Figura do autor.

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 é 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 faça uso da mudança da velocidade de propagação de uma onda eletromagnética em um meio gasoso a fim de 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 auxiliará na seletividade para a acetona.

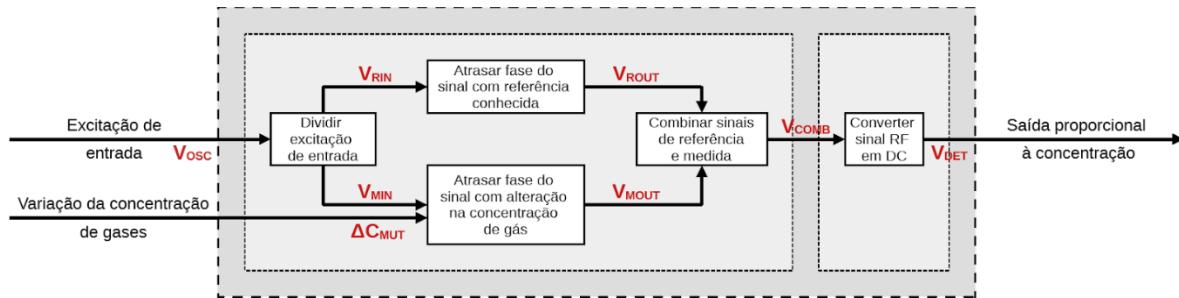
Figura 2 - Diagrama Transparent-Box do Sistema



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 mais importantes a serem consideradas, e que definem em quais regimes físicos as medições serão realizadas, com base nos distúrbios que afetam as entradas do sistema, são:

- Atmosfera sob análise
 - i. Concentração da atmosfera sob análise: **0,01% (100 ppm) -> 10%**
 - ii. Temperatura da atmosfera sob análise: **23 °C -> 25 °C**

- Excitação de Entrada
 - i. Frequência da excitação de entrada: **4 GHz -> 6 GHz**
 - ii. Potência da excitação de entrada: **0 dBm**
- Materiais sensíveis para deposição no sensor:
 - i. Nanotubos de carbono
 - ii. Grafeno

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

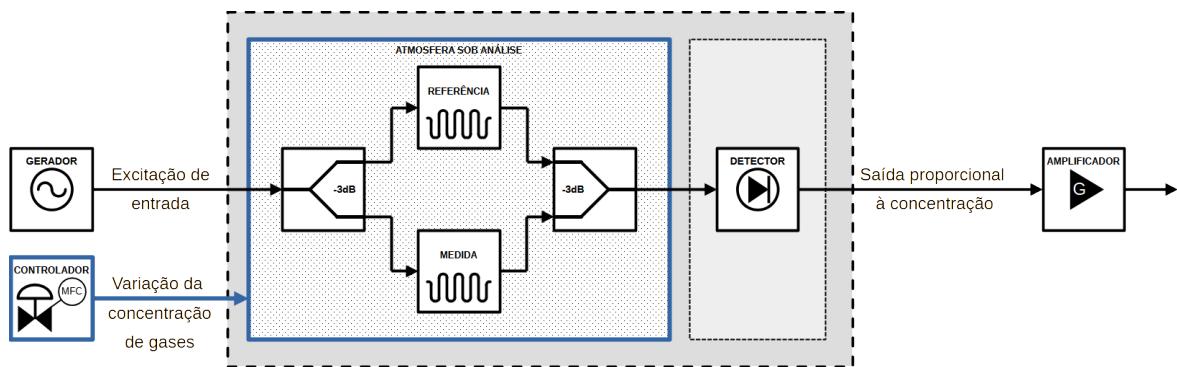
- Sensibilidade ($\frac{\partial V_{DET}}{\partial C_{MUT}}$)
- Seletividade ($\frac{\partial V_{DET}}{\partial C_x}, x \neq MUT$)
- Limite de Detecção ($\min(\Delta C_{MUT})/\Delta V_{DET} \neq 0$)

3.1.2. DEFINIÇÃO DE ESTRUTURAS ESPECÍFICAS DO SISTEMA

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.

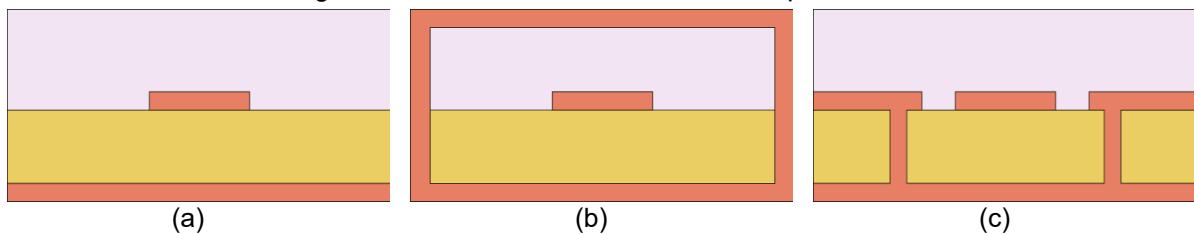
No sistema proposto, um sinal harmônico de RF na faixa de micro-ondas com potência e frequência escolhidos de maneira arbitrária é gerado por uma fonte apropriada. O sinal é injetado em uma linha de referência e uma linha sensível por meio de um divisor de potência. A diferença de fase entre as linhas de referência e de medida 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. Cada um desses blocos será realizado por equipamentos externos.

Outra consideração relevante diz respeito à grande variedade de **metodologias construtivas** e topologias das estruturas que compõe os blocos construtivos

apresentados 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*); entre outras. Cada uma dessas configurações apresenta uma série de vantagens e desvantagens devido à configuração de campo eletromagnético imposta pela disposição dos condutores e dielétricos.

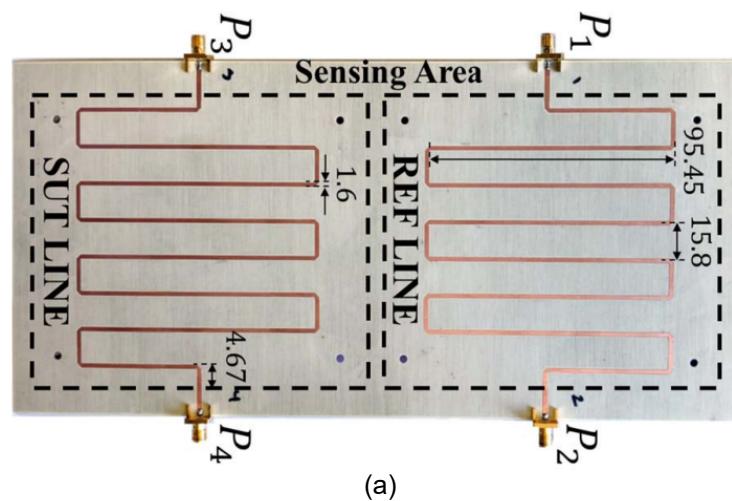
Figura 5 - Métodos construtivos de linhas planares

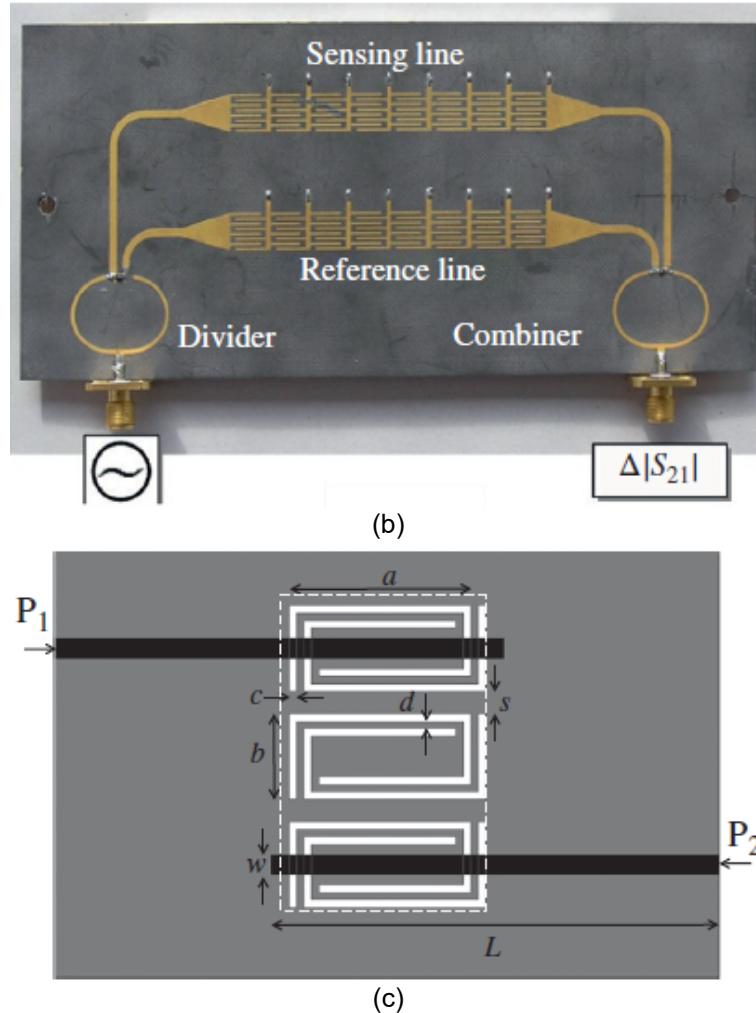


Fonte: Figura do autor. Ilustrações exemplificando: (a) Linhas de microfita. (b) Linhas de microfita coberta. (c) Guias de ondas coplanar aterrados

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 [30], [31]. Por outro lado, outros estudos reportam a utilização de linhas de transmissão CRLH (*Composite Right/Left Handed*) [30], [31], [32], e linhas de transmissão de onda eletro indutiva (EIW) [33], para aumento substancial da sensibilidade do sensor para uma mesma área de sensoriamento.

3. 2. 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 [34], optou-se por analisar cada etapa do processo de transdução por meio da análise de derivadas parciais, denominada neste trabalho como uma análise diferencial 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 Eq. 1, percebe-se que tal relação depende dos seguintes fatores:

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

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

Todas as relações descritas podem ser sumarizadas 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.

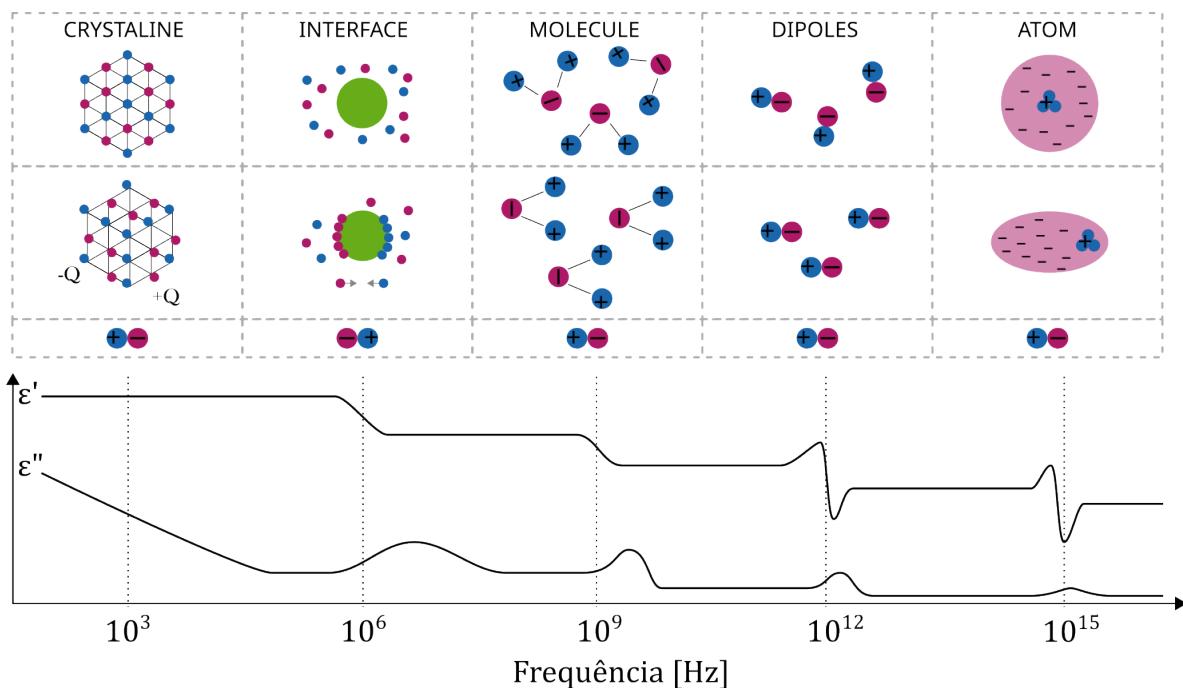
Uma discussão mais aprofundada de cada fenômeno é realizada nos próximos parágrafos, elaborando de forma quantitativa cada etapa do processo de transdução.

3. 2. 1. PERMISSIVIDADE E CONCENTRAÇÃO DO MUT

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 menores. 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.

Figura 7 - Fenômeno de Polarização



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 1, 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 [35], cuja equação de mesmo nome (Eq. 2) relaciona a polarizabilidade molar (Π) [cm^3/mol] de um material x à sua permissividade real (ϵ') e a sua polarizabilidade molecular (α_x) [cm^3].

$$\Pi_x = \frac{\epsilon' - 1}{\epsilon' + 2} \cdot [V]_x = \frac{4\pi}{3} N_A \cdot \alpha_x \quad \text{Eq. 2}$$

onde N_A é o número de Avogadro [1/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.

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}) poderia 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 [36] e Landau-Lifshitz-Loyenga (LLL) [37], [38] fazem parte de um conjunto de trabalhos que modela o comportamento da mistura como uma lei de potência entre a permissividade da mistura e de seus componentes (Eq. 3).

$$\epsilon_{MIX}^{\beta} = x_M \cdot \epsilon_M^{\beta} + x_N \cdot \epsilon_N^{\beta} \quad \text{Eq. 3}$$

onde ϵ_{MIX} , ϵ_M e ϵ_N são as permissividades da mistura e de cada material que a compõe (M e N); x_M e x_N são as frações molares de cada componente; e β é o coeficiente da lei de potência.

Em geral, as formulações de Silberstein (com $\beta=1$) e LLL (com $\beta=1/3$) são utilizadas sob hipótese de que não há interação entre as moléculas de M e N e, portanto, não há depolarização induzida. Adicionalmente, ambas as formulações perdem acurácia frente a componentes cujas permissividades possuem magnitudes distintas [39].

Por outro lado, os trabalhos realizados por Maxwell Garnett [6-7], Bruggeman [42], Polder-Van Santeen [43], Loor [44], Böttcher [45] 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” (Eq. 4), descrita por Sihvola [46].

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

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,

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

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.

No caso específico do trabalho em questão, duas situações são de interesse: a mistura de gases com vapor de água e a mistura de gases com solventes polares, tais como acetona. Para ambos os cenários, a permissividade das misturas pode ser aproximada pelas equações de Maxwell-Garnett (Eq. 4 para $v=0$) ou pela equação de Clausius-Mossoti (Eq. 2), as quais serão comparadas nas Tabelas 1 e 2.

Ao se substituir a polarizabilidade induzida (α) da equação de Claussius-Mossoti (Eq. 2) pela somatória de todas as polarizabilidades induzidas (α_i) das i substâncias que compõe a mistura de gases de interesse, tem-se que [47]:

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

Deste modo,

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

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

Ressalta-se que na Eq. 7 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 O_2 , N_2 e Ar são amplamente catalogadas [48], [49], [50], em contraste às suas permissividades [51]. O segundo motivo é a facilidade de se estender o tratamento da polarizabilidade molar para gases não ideais e gases polares, tais como a água e acetona.

Para misturas que envolvem vapores de moléculas polares, tais como a água e acetona, o cálculo da polarizabilidade molar do componente polar da mistura (Π_x) é modificado, refletindo os avanços na teoria de polarização feita por Debye [45], [52]. Nela, entende-se que a polarização molar (Π_x) não só é composta pela polarizabilidade molecular como visto na equação de Clausius-Mossotti (Eq. 2), mas também por uma componente referente ao momento de dipolo μ [C.m] inerente à estrutura da molécula. Deste modo,

$$\Pi_{polar} = \frac{4\pi}{3} \cdot N_A \cdot \left(\alpha + \frac{\mu^2}{3kT} \right), \text{ ou } \Pi_{polar} = A + \frac{B}{T}, \quad \text{Eq. 8}$$

onde T é a temperatura [K] e k a constante de Boltzman [J/K]. Devido em parte à sua simplicidade, a teoria formulada por Debye é válida apenas para gases polares em baixa concentração [49]. Mesmo com tais considerações, as formulações de trabalhos como os de Vega-Maza [53], Cuccaro [54] e Huang [55], 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 \mathbb{A} e \mathbb{B} , foram extraídos de tabelas tais como as reportadas por [56], [57].

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 [53], [54], [55], 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 3.4, o vapor de água deionizada será utilizado como padrão para calibração do dispositivo, permitindo que sejam feitas inferências com acurácia satisfatória da permissividade de compostos tais como a acetona.

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

$$\varepsilon_{MIX} = \frac{2 \cdot \rho_{MIX} \cdot \Pi_{MIX} + 1}{1 - \rho_{MIX} \cdot \Pi_{MIX}}, \quad \text{Eq. 9}$$

onde

$$\rho_{MIX} = \frac{1}{[V_{MIX}]} = \frac{P/RT}{(1 + \mathbf{B}_{MIX} \cdot P/RT)} \text{ e } \Pi_{MIX} = \sum_i^{air} x_i \cdot \Pi_i + x_w \cdot \left(\mathbb{A}_w + \frac{\mathbb{B}_w}{T} \right) \quad \text{Eq. 10}$$

Com base nas formulações acima, foram construídas tabelas (Tabela 1 e Tabela 1) 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. 11, que estabelece a relação entre a fração molar X_{MUT} (utilizada na estimativa da permissividade) e a saturação relativa de ar (RS_x) com vapores de compostos voláteis.

$$X_x(T) \left[\frac{\text{mol}}{\text{mol}} \right] = \frac{n_x}{n_{\text{air}} + n_x} = \frac{\frac{p_x V}{RT}}{\frac{p_{\text{air}} V}{RT} + \frac{p_x V}{RT}} = \frac{p_x}{p_{\text{air}} + p_x},$$

$$\text{Eq. 11}$$

$$\textcolor{red}{i} \frac{p_x}{P_{\text{amb}}} = \frac{\frac{RS_x(T)}{100} \cdot p_{xs}(T)}{P_{\text{amb}}}$$

onde P_{amb} é a pressão ambiente e p_{xs} é a pressão de saturação da atmosfera x. Para o caso de água, a saturação relativa (RS) é equivalente à umidade relativa (RH). 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.

Abaixo são mostradas tabelas com as permissividades calculadas para atmosferas com vapores de água deionizada (Tabela 1) e com vapores de acetona pura (Tabela 1), calculadas para uma temperatura ambiente de T=25°C.

Tabela 1 - Comparativo dos cálculos de permissividade de atmosfera com vapor de Água

RS [%]	X _{H₂O} [mol/mol] Eq. 11	X _{AIR} [mol/mol]	ε _{MAXWELL_GARNET} Eq. 4	ε _{POLARIZABILITY MIXING} Eq. 7	ε _{VIRIAL MIXING} Eq. 9
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 de atmosfera com vapor de Acetona

RS [%]	X _{ACETONA} [mol/mol] Eq. 11	X _{AIR} [mol/mol]	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 (RS[%]) acarreta numa alteração da fração molar (X_{H₂O}) 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 vapores de acetona em ar seco produz dispersões muito maiores (30 %).

Apesar da diferença entre as permissividades elétricas relativas de ambas as substâncias ($\epsilon_{H_2O} = 78,3$; $\epsilon_{ACETONA} = 20,7$, obtidas na temperatura ambiente e em baixa frequência), percebe-se que a permissividade equivalente do meio é sempre maior para a presença de acetona.

Embora a diferença não seja destacada nas Tabelas 1 e 2, uma análise detalhada dos cálculos apresentados, considerando-se saturações com água deionizada e acetona, permite inferir que a utilização dos coeficientes de Debye e de Virial só leva a resultados significativamente distintos em condições de elevada temperatura

ou alta concentração. Nessas situações, a formulação de Virial se mostra mais precisa, por representar de forma mais adequada as interações moleculares entre os constituintes da mistura.

3. 2. 2. PERMISSIVIDADE EFETIVA E PERMISSIVIDADE DO MUT

Como mencionado anteriormente, a permissividade de um material é definida na presença de um campo elétrico (E), o qual induz os fenômenos de polarização.

No caso da linha de transmissão de microfita a ser utilizada no sensor desta pesquisa, a maior parcela do campo eletromagnético guiado propaga-se no interior do substrato, enquanto o restante irradia para fora do substrato e propaga-se no meio que circunda a microfita, o que confere à linha sensibilidade ao meio que a envolve. Desta forma, a propagação do campo eletromagnético em linhas de microfita ocorre em um meio misto, denominado quase-TEM.

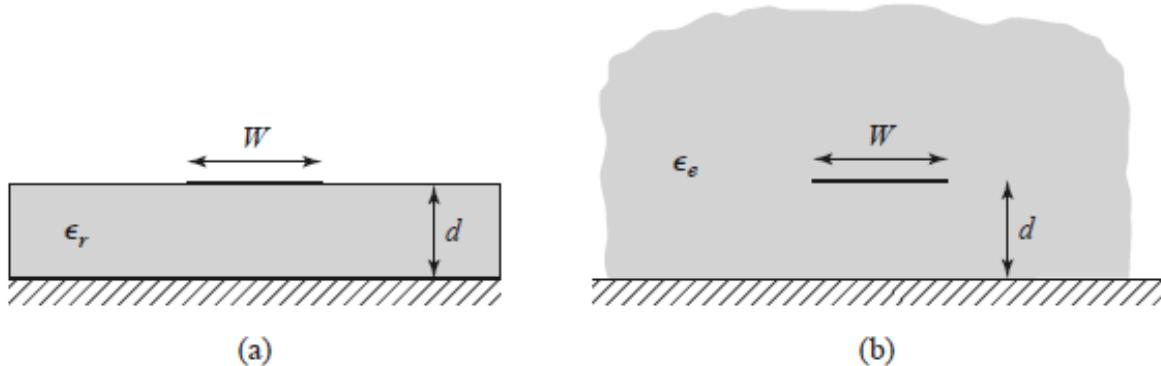
Em geral, para síntese de linhas de microfita utilizam-se métodos matemáticos que transformam uma geometria onde há propagação mista em outra geometria equivalente, na qual os campos passam apenas por meios homogêneos. Nessas metodologias se considera uma permissividade elétrica efetiva do meio, que é função da permissividade do substrato em que a linha de microfita foi fabricada e da permissividade do meio que a envolve.

Para linhas envolvidas por dielétrico com permissividade elétrica igual à do vácuo (ϵ_0), por exemplo, uma transformação matemática adequada à linha de microfita da Figura 8 (a) permite mapear sua geometria [58] e os campos próximos em

outro plano, gerando-se a geometria da Figura 8 (b), na qual o campo eletromagnético propaga-se um meio homogêneo com permissividade elétrica efetiva ϵ_e .

Por meio desse procedimento foram geradas equações sem solução analítica para o cálculo de ϵ_e , mas que foram aproximadas por diversos autores [60-67] em equações simplificadas e de fácil utilização, obtidas por técnicas de ajuste de curva.

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



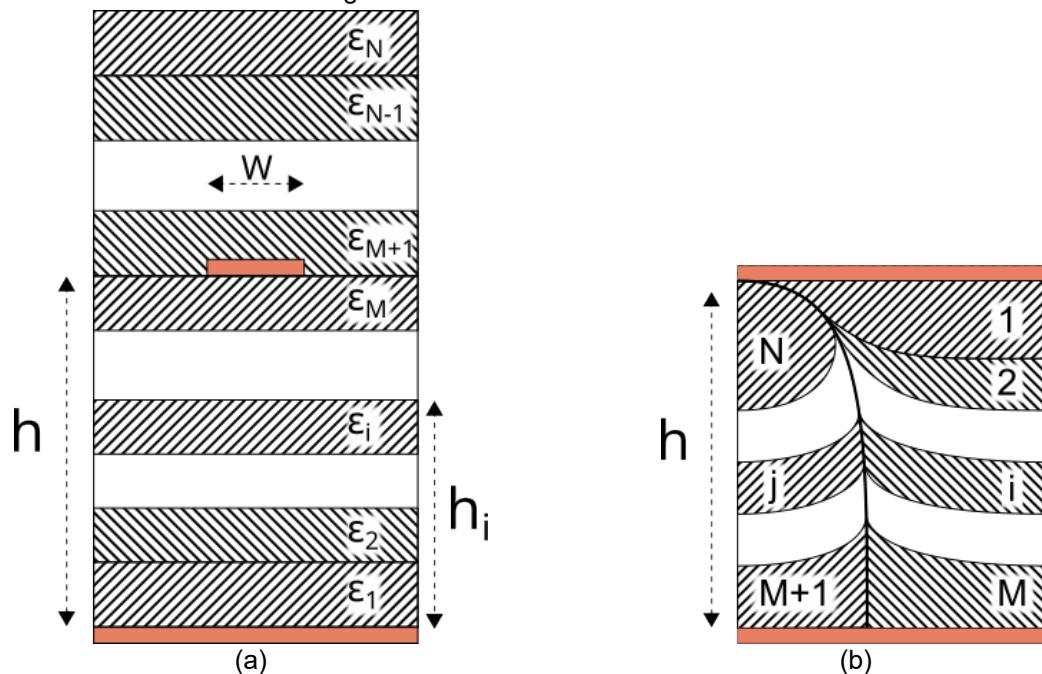
Fonte: Ilustrações retiradas de [59]. (a) Geometria original. (b) Geometria equivalente, com substrato dielétrico de permissividade relativa ϵ_r , substituído por um meio homogêneo de permissividade efetiva ϵ_e equivalente.

Apesar das equações citadas serem precisas, possuem dois fatores limitantes para sua aplicação no contexto dessa pesquisa. O primeiro fator é a necessidade de que as linhas de microfita simuladas estejam envolvidas por um meio de permissividade igual à do vácuo ϵ_0 , o que não será o caso para o transdutor proposto.

O segundo fator limitante, é que as equações são específicas para estruturas comuns utilizadas na literatura e, portanto, incapazes de auxiliar na síntese ou otimização de linhas de transmissão mais complexas, tais como as mencionadas em [30], [31], [32], [33]. Este segundo ponto, no entanto, será ignorado, pois foge ao escopo da pesquisa apresentada.

Para a limitação de dielétrico que pode ser utilizado acima da linha de microfita foram utilizadas equações de síntese e análise de linhas de microfita cobertas, desenvolvidas a partir dos trabalhos de Wheller a respeito do método de mapeamento conforme [59]. Na publicação seminal de Wheller, foi demonstrado o procedimento de mapeamento conforme para cálculo da permissividade efetiva de uma linha de microfita em ar. Com base nesses resultados, Svacina em [67], [68] expandiu essa metodologia para aplicação em estruturas de microfita com múltiplos dielétricos no substrato ou acima da linha de transmissão, tal como ilustrado na Figura 7.

Figura 9 - Linha de microfita multicamada



Fonte: Reprodução de ilustração de [69]

Segundo o autor, para uma linha de microfita de largura W com M dielétricos em seu substrato e $N-M$ dielétricos acima da linha de microfita, cada um a uma distância (h_i) do plano de terra (G), tem-se que:

$$\varepsilon_e = \frac{\left(\sum_{i=1}^M q_i\right)^2}{\sum_{i=1}^M \frac{q_i}{\varepsilon_i}} + \frac{\left(\sum_{j=M+1}^N q_j\right)^2}{\sum_{j=M+1}^N \frac{q_j}{\varepsilon_j}}, \quad \text{Eq. 12}$$

onde as permissividades dos dielétricos do substrato são denominadas por ε_i e as permissividades das camadas acima da linha são denominadas por ε_j . Segundo a Eq. 6, a permissividade efetiva é calculada por meio da soma ponderada entre as permissividades dos dielétricos que compõe a estrutura $\varepsilon_{i..j}$ e um fator de preenchimento denominado $q_{i..j}$, que determina qual o peso que cada dielétrico possui.

Para esta pesquisa, a configuração de linha proposta possui apenas um dielétrico no substrato (ou seja, $M=1$) e apenas um dielétrico acima da linha (ou seja, $N=2$). Portanto, a Eq. 6 se reduz para:

$$\varepsilon_e = \varepsilon_{\text{sub}} \cdot q_1 + \varepsilon_{\text{MUT}} \cdot (1 - q_1), \quad \text{Eq. 13}$$

onde o fator de preenchimento q_1 é dado por:

$$q_1 = 1 - \frac{h}{2W_{\text{ef}}} \cdot \ln\left(\frac{\pi}{h} \cdot W_{\text{ef}} - 1\right), \quad \text{Eq. 14}$$

Na Eq. 14, W_{ef} se refere à largura efetiva da linha de microfita, e é calculada por meio da Eq. 8, apresentada a seguir.

$$W_{\text{ef}} = W + \frac{2h}{\pi} \cdot \ln\left(17.08 \cdot \left(\frac{W}{2h} + 0.92\right)\right), \quad \text{Eq. 15}$$

Deste modo, a sensibilidade de uma linha de microfita com $W/h > 1$, encoberta por um dielétrico com permissividade ε_j é dada pela Eq. 9;

$$\frac{\partial \varepsilon_{\text{eff}}}{\partial \varepsilon_{\text{MUT}}} = (1 - q_1) = \frac{h}{2W_{\text{ef}}} \cdot \ln\left(\frac{\pi}{h} \cdot W_{\text{ef}} - 1\right) \quad \text{Eq. 16}$$

De modo geral, a avaliação das Eq. 8 e Eq. 9 leva à conclusão que, em um substrato com uma altura h definida, quanto **menor** a largura da linha, **maior** será a quantidade de campo eletromagnético que se propaga no dielétrico acima da linha, aumentando sua sensibilidade à permissividade deste.

3.2.3. DIFERENÇA DE FASE DOS SINAIS E PERMISSIVIDADE EFETIVA

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 constante de propagação β de um campo eletromagnético de frequência angular $\omega=2\cdot\pi\cdot f$, em um meio com permissividade elétrica ϵ_r e permeabilidade magnética μ_r , é dado pela Eq. 12 [58]:

$$\frac{\Delta\theta}{l} = \beta = \frac{\omega\sqrt{\epsilon_r\mu_r}}{c} \quad \text{Eq. 17}$$

Essa equação se aplica às linhas de transmissão nas quais o campo eletromagnético propaga-se em um único meio, caracterizado por ϵ_r e μ_r , como, por exemplo, em linhas planares de triplaca e cabos coaxiais.

Em uma linha de transmissão planar de microfita, por outro lado, os campos induzidos propagam-se tanto pelo substrato, quanto pelo meio acima dele. Devido a essa mudança de meio, parte dos campos eletromagnéticos propagam-se na direção paralela à propagação. Nesse caso, diz-se que a propagação é quase-TEM, e a expressão anterior (Eq. 12) sofre pequenas modificações, indicadas a seguir.

$$\frac{\Delta\theta}{l} = \beta = \frac{\omega\sqrt{\epsilon_{eff}\mu_{eff}}}{c} \quad \text{Eq. 18}$$

Deste modo, a mudança no atraso de fase devido à alteração da permissividade efetiva é proporcional à sua raiz quadrada (Eq. 13); enquanto a sensibilidade é proporcional ao inverso da raiz quadrada da permissividade efetiva, tal como indicado na Eq. 14.

$$S_{eff} = \frac{\partial \Delta\theta}{\partial \varepsilon_{eff}} = \frac{\partial}{\partial \varepsilon_{eff}} \cdot \left(\frac{l \cdot \omega \cdot \sqrt{\mu_{eff} \varepsilon_{eff}}}{c} \right) = \left(\frac{l \cdot \omega}{2c} \cdot \sqrt{\frac{\mu_{eff}}{\varepsilon_{eff}}} \right), \quad \text{Eq. 19}$$

Segundo a equação de sensibilidade (Eq. 14), identificam-se algumas formas de otimização dos sensores de micro-ondas reportados na literatura recente [34]. Técnicas que possibilitam o aumento do comprimento da linha (l) e a utilização de frequências (ω) mais elevadas são as mais comuns. Adicionalmente, por meio da Eq. 14 também é possível afirmar que a utilização de substratos de baixa permissividade também auxilia no aumento da sensibilidade do transdutor.

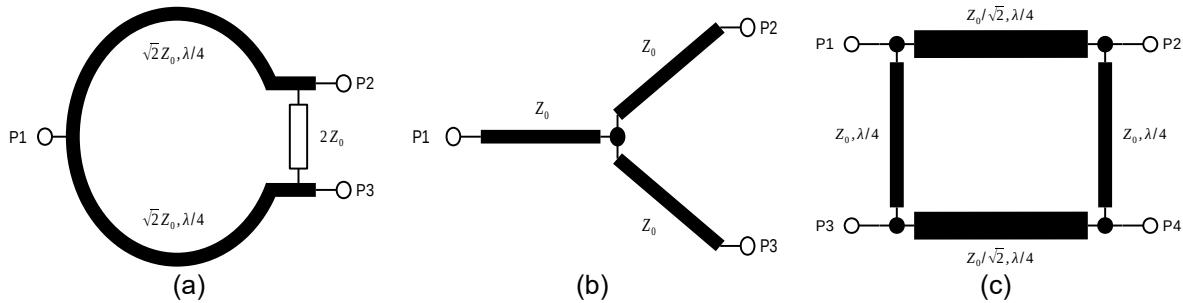
3.2.4. TENSÃO APÓS COMBINADOR E DIFERENÇA DE FASE DOS SINAIS

Como mencionado na seção 3.1.2, 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, que é então medida em estágios subsequentes do sistema.

Tanto combinadores quanto divisores de potência (vide Figura 10) são em essência a mesma estrutura, exceto pela da direção do fluxo de potência, que é determinado pela escolha de quais portas são usadas como entrada(s) ou saída(s). Portanto, serão tratados aqui de forma intercambiável.

Em frequências de micro-ondas, 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 os divisores de Wilkinson e de Junção T, e os acopladores Híbridos de 90° ou 180° .

Figura 10 - Exemplo de divisores de potência empregados em linhas de microfita



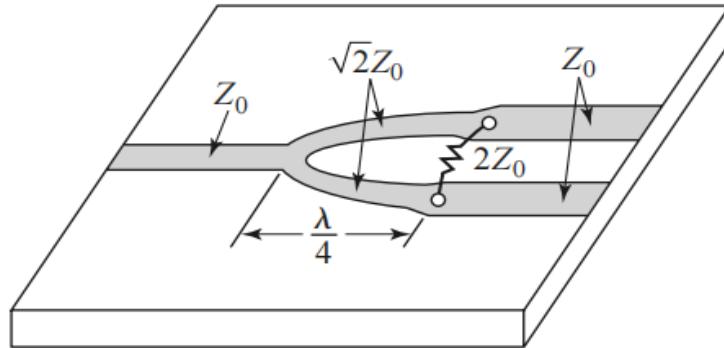
Fonte: Figura do autor. Esquemáticos ideais das estruturas: (a) Divisor de Wilkinson; (b) Divisor de Junção T; e (c) Acoplador Híbrido de 90° .

Geralmente, o desempenho dessas estruturas é definido por seus parâmetros de espalhamento (*Scattering Parameters* ou SP) usualmente apresentados em forma de matrizes, por meio dos quais se estabelece a relação entre as potências incidentes e refletidas nas portas.

Nesta pesquisa serão utilizados divisores de potência de Wilkinson, implementados em tecnologia de linhas de transmissão de microfita, conforme ilustração da Figura 11 [58]. O sinal de entrada do divisor de Wilkinson proveniente de uma linha de transmissão com impedância característica igual à impedância de referência do sistema Z_0 , divide-se entre dois ramos compostos por linhas de transmissão com impedância característica $Z_0/\sqrt{2}$, cada um com comprimento igual a um quarto do comprimento de onda guiado na frequência central de operação ($\lambda/4$), gerando as saídas do divisor. Dessa forma as duas saídas do divisor permanecem em fase entre si e atrasadas de 90° em relação ao sinal de entrada. Um resistor com resistência

$2 \cdot Z_0$ interliga as portas de saída para criar a condição de perda de retorno reduzida nessas portas, na faixa de frequência de operação.

Figura 11 - Divisor de Wilkinson empregando linhas de microfita



Fonte: Realização em linha de microfita de um divisor de Wilkinson, retirado de [59]

A matriz de espalhamento de um divisor de Wilkinson ideal, sem perdas e com todas as portas casadas para a impedância característica do sistema é dada por:

$$S_{WILK} = -1/\sqrt{2} \cdot \begin{bmatrix} 0 & j & j \\ j & 0 & 0 \\ j & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \text{Eq. 20}$$

Tal distribuição 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. Nas condições ideais citadas acima, também 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. 16) em casos especiais de casamento perfeito de impedância.

$$V_1 = V_2 \cdot S_{21} + V_3 \cdot S_{31}, \quad \text{Eq. 21}$$

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:

$$V_{comb} = \frac{V}{\sqrt{2}} \cdot (e^{j\theta_2} + e^{j\theta_3}) \rightarrow |V_{comb}| = \frac{V}{\sqrt{2}} \cdot |e^{j\theta_2} + e^{j\theta_3}| = \sqrt{2}V \cdot \left| \cos\left(\frac{\Delta\theta}{2}\right) \right|, \quad \text{Eq. 22}$$

Como era esperado, quando os sinais aplicados às portas 2 e 3 estão em fase ($\Delta\theta=0^\circ$), $\cos(\Delta\theta/2)=1$, e a tensão na saída do combinador V_{comb} é máxima e igual a $\sqrt{2}V$ (interferência construtiva). Por outro lado, quando os sinais estão em oposição de fase ($\Delta\theta=180^\circ$), a interferência é destrutiva e a tensão na saída do combinador é nula, pois $\cos(180/2)=0$.

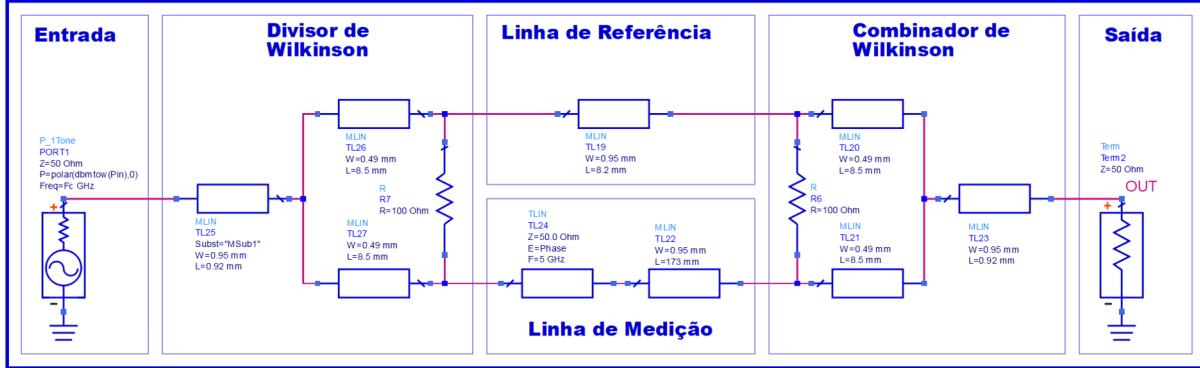
Dada a expressão da Eq. 22, é possível calcular a sensibilidade da tensão combinada V_{comb} para a diferença de fase $\Delta\theta$ entre as linhas de referência e de transdução, indicada na Eq. 23.

$$\frac{\partial V_{comb}}{\partial \Delta\theta} = \frac{\partial}{\partial \Delta\theta} \left(\sqrt{2}V \cdot \cos\left(\frac{\Delta\theta}{2}\right) \right) = -\frac{\sqrt{2}}{2}V \cdot \sin\left(\frac{\Delta\theta}{2}\right), \quad \text{Eq. 23}$$

Com base na Eq. 23 conclui-se que a região de operação de maior sensibilidade do sistema ocorre quando $\sin(\Delta\theta/2)=1$, em torno de $\Delta\theta/2=90^\circ$, ou seja, para $\Delta\theta=180^\circ$.

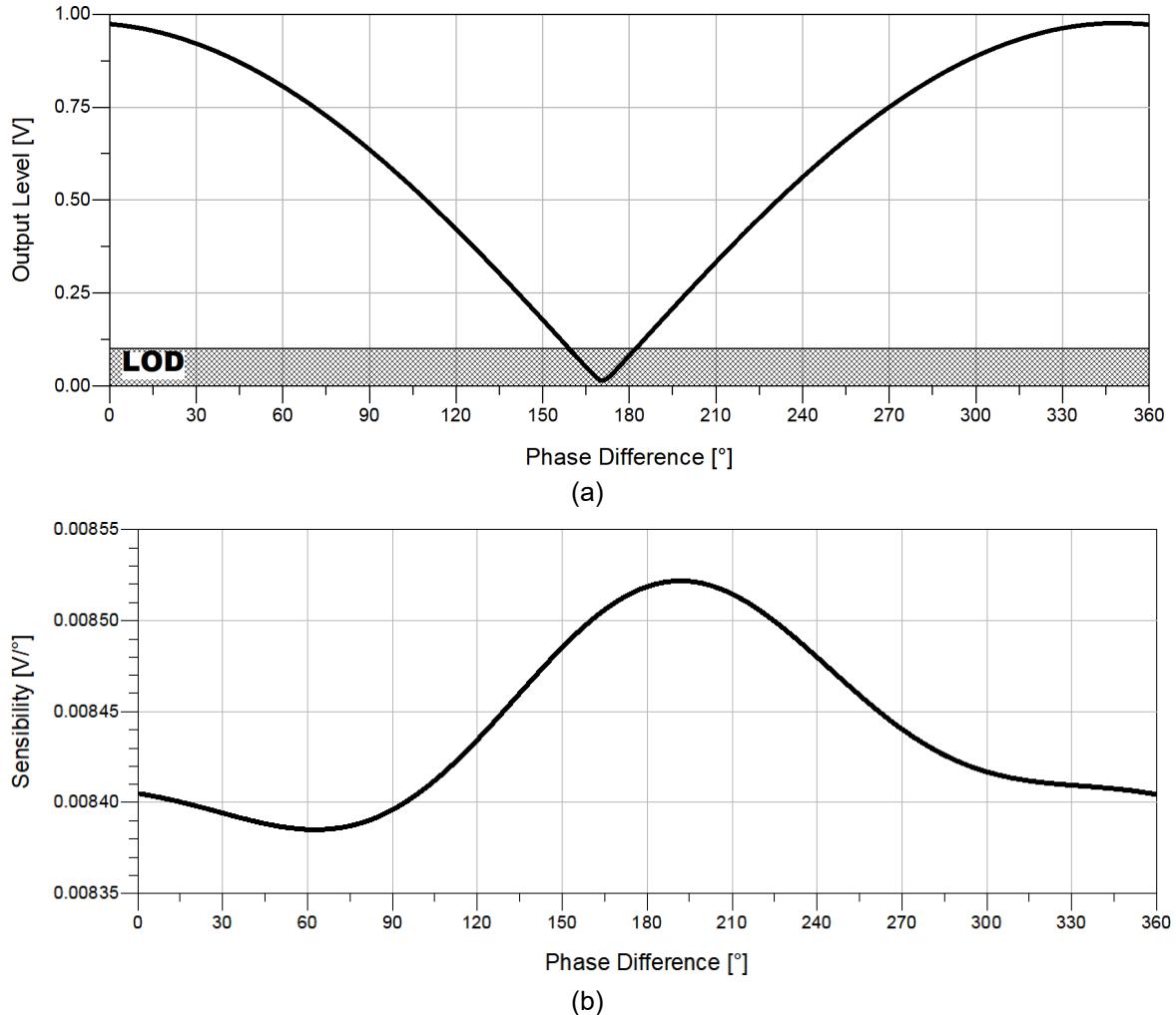
Na Figura 12 é mostrado o esquemático da simulação de Balanceamento Harmônico realizada utilizando o software Advanced Design System (ADS). Os resultados da simulação, mostrados na Figura 13 (a) e (b) indicam que de fato, o ponto de maior sensibilidade é próximo da região de interferência destrutiva.

Figura 12 - Configuração da simulação de Balanceamento Harmônico no ADS Keysight



Fonte: Figura do autor.

Figura 13 - Resultados da simulação de ponto de operação



Fonte: Figura do autor. Simulação da resposta do sistema em (a), dada pela Eq. 22 e da sensibilidade do sistema à variação de fase em (b), dado pela Eq. 23.

Apesar de matematicamente ótimo, um ponto de operação escolhido muito próximo de $\Delta\theta=180^\circ$ é suscetível a pelo menos dois problemas ilustrados na Figura 13 (a).

Primeiramente, como $\Delta\theta=180^\circ$ é o ponto de mínimo de tensão, 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 ($\Delta\theta=180^\circ+x$) e negativas ($\Delta\theta=180^\circ-x$) em torno do ponto de mínimo passam pelos mesmos valores de amplitude, é impossível distinguir qual o valor exato da defasagem e, portanto, da permissividade.

3. 3. SIMULAÇÕES DE LINHAS DE TRANSMISSÃO

Na seção anterior, foram apresentados resultados utilizando-se 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 do método dos momentos (MoM) e de elementos finitos (FEM) do ADS para simulação de circuitos planares de micro-ondas, utilizados para uma abordagem orientada a projeto, validando numericamente o design proposto em uma série de etapas.

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 de potência associadas, visando compreensão do atraso de fase nominal da linha proposta. Assim como no caso do divisor de

Wilkinson mencionado na seção anterior, também serão utilizadas estruturas de microfita para realização das linhas de transdução.

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. 3. 1. DESIGN E SIMULAÇÃO DE CONVERSÃO CONCENTRAÇÃO-FASE

Nesta etapa, o parâmetro de projeto a ser avaliado é o comprimento da linha de sensoriamento, que é responsável pela sensibilidade da variação de fase em relação à permissividade elétrica do MUT. Foi utilizado para simulação eletromagnética 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 estimar a permissividade da atmosfera gasosa (ar seco com vapor de água e ar seco com vapor de acetona) em diferentes níveis de saturação relativa (RS) foi utilizada a Eq. 11. Na transformação da permissividade do MUT em permissividade efetiva, por sua vez, utilizou-se a Eq. 7, considerando os resultados obtidos para a configuração de microfita descritos nas Tabelas 1 e 2.

Com a permissividade efetiva em mãos, a diferença de fase é calculada por meio da Eq. 13. Uma frequência nominal de $f = 5 \text{ GHz}$ foi escolhida por pertencer ao

conjunto de bandas ISM, utilizadas para fins científicos. Nas Tabelas 3 e 4, são mostrados os resultados da mudança de fase relativa à atmosfera com ar seco para comprimentos de 250 mm, 500 mm, 750 mm e 1000 mm.

Tabela 3 - Avaliação de atraso de fase para atmosfera com H₂O

RS [%]	ϵ_{MUT} Eq. 9	ϵ_{EFF} Eq. 7	$\Delta\theta_{\text{REL}}$ (l=250 mm)	$\Delta\theta_{\text{REL}}$ (l=500 mm)	$\Delta\theta_{\text{REL}}$ (l=750 mm)	$\Delta\theta_{\text{REL}}$ (l=1000 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 4 - Avaliação de atraso de fase para atmosfera com Acetona

RS [%]	E_{MUT} Eq. 7	ϵ_{EFF} Eq. 7	$\Delta\theta_{\text{REL}}$ (l=250 mm)	$\Delta\theta_{\text{REL}}$ (l=500 mm)	$\Delta\theta_{\text{REL}}$ (l=750 mm)	$\Delta\theta_{\text{REL}}$ (l=1000 mm)
0,000	1,000538	3,355825	0,000	0,000	0,000	0,000
0,100	1,001329	3,356065	0,098	0,197	0,295	0,393
1,000	1,008470	3,358229	0,985	1,969	2,954	3,939
10,000	1,081795	3,380451	10,071	20,141	30,212	40,283
100,000	2,074984	3,681445	130,317	260,635	390,952	521,269

Com base nos resultados das tabelas anteriores, observa-se que são necessárias linhas de transmissão razoavelmente compridas para que ocorram 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) com dezenas de centímetros é inviável, técnicas de miniaturização tornam-se indispensáveis. A mais comum é o uso de linhas de meandro, que permitem maximizar o aproveitamento da área disponível em uma PCI.

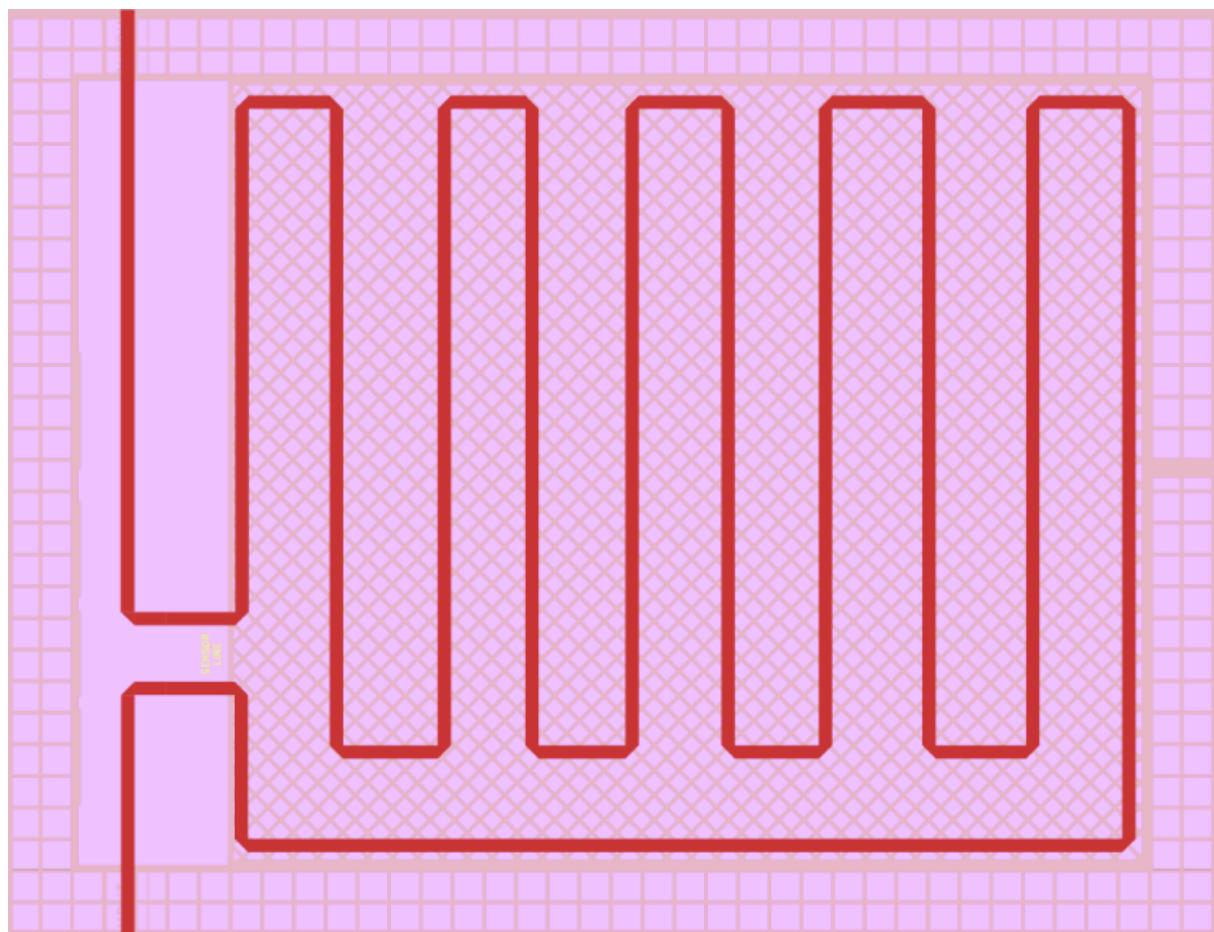
Inicialmente foi realizado o projeto de uma linha de microfita com aproximadamente 675 mm, equivalente a uma mudança de fase de aproximadamente 0,03°

para 0,1% de concentração de vapor de H₂O. 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. A Figura 14 apresenta o leiaute da linha de meandro usada no sensor proposto, que 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 acopladas ao sensor, mas também como um recipiente vedado para manutenção das atmosferas de teste. Mais informações a respeito da construção do sensor serão dadas na seção 3.4.

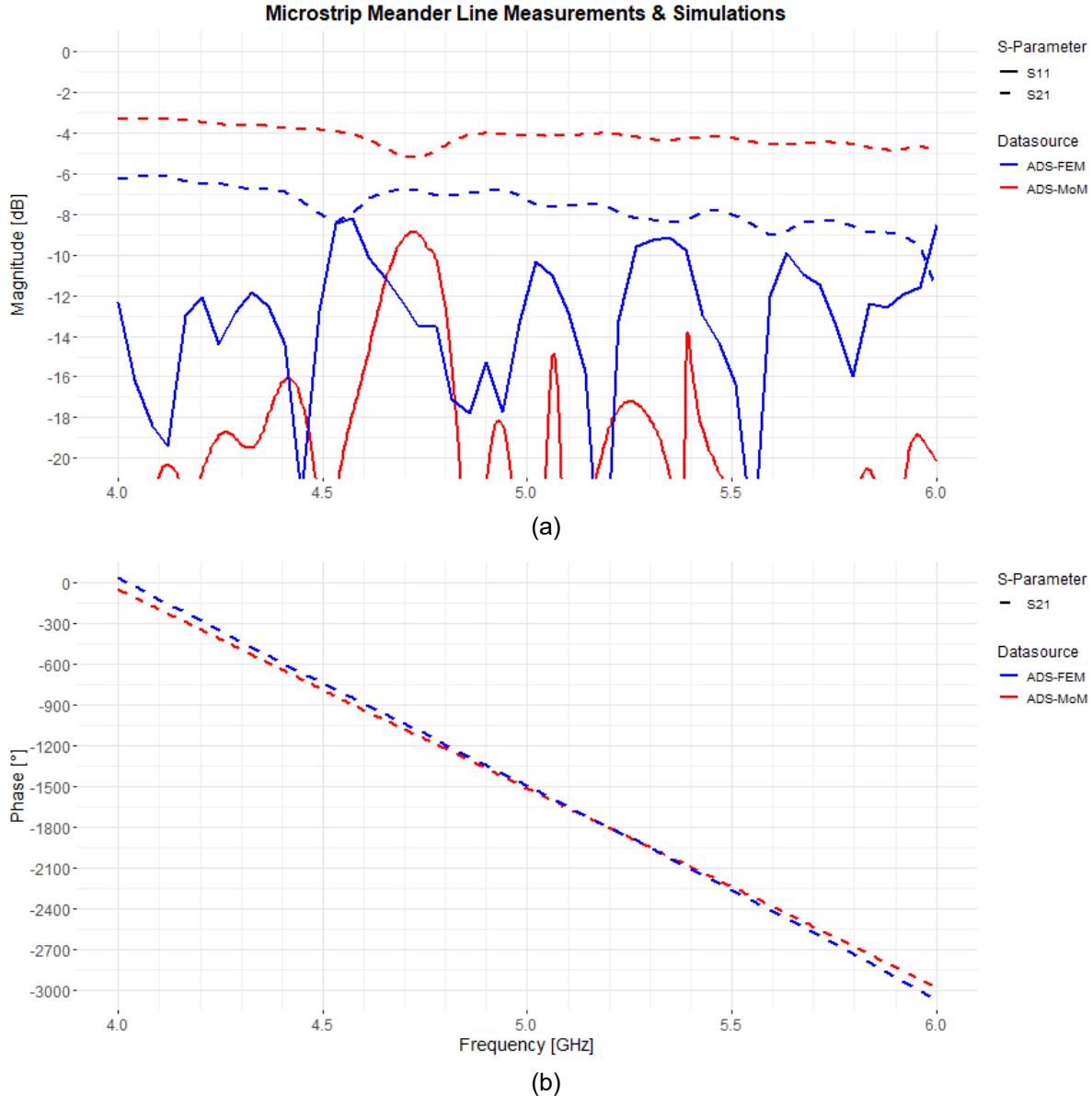
Para verificar a validade do design realizado (Figura 14), foram feitas simulações no ADS MoM e FEM. Na Figura 15 são mostrados os parâmetros de espalhamento de transmissão e reflexão.

Figura 14 - Simulação de leiaute no ADS da linha de transdução proposta



Fonte: Figura do autor.

Figura 15 - 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. Simulações efetuadas no MoM estão em vermelho e simulações no FEM em azul em ambas figuras.

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; já para o algoritmo de FEM ela correspondeu a quase 7 dB segundo os gráficos da Figura 15. Tais discrepâncias são esperadas, uma vez que o método dos momentos 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.

3.3.2. DESIGN E SIMULAÇÃO DE CONVERSÃO FASE-AMPLITUDE

Numa segunda etapa, as estruturas de divisão e combinação de potência foram adicionadas à simulação (Figura 14), 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. 22.

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 5 - Avaliação de variação de tensão para atmosfera com H₂O

RH [%]	ϵ_{MUT} Eq. 9	ϵ_{EFF} Eq. 7	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

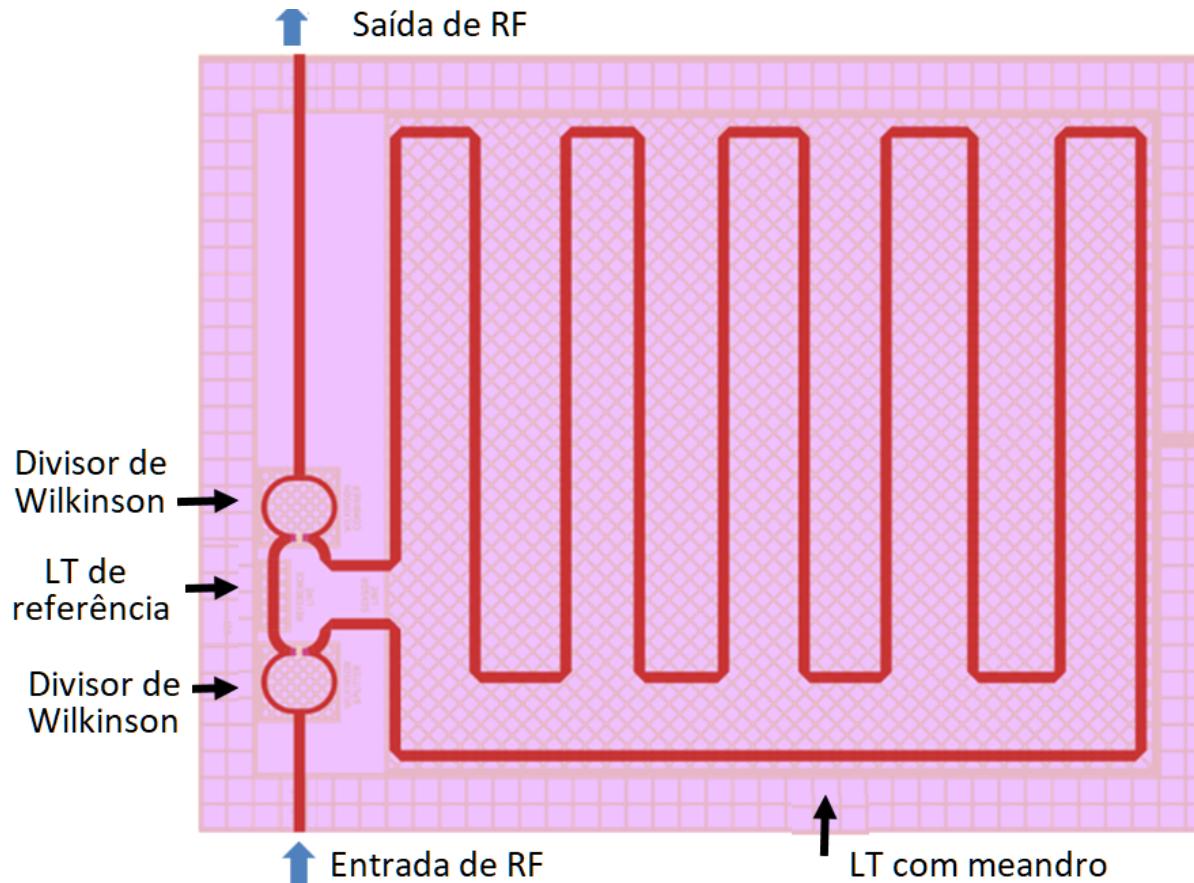
Tabela 6 - Avaliação de variação de tensão para atmosfera com Acetona

RS [%]	ϵ_{MUT} Eq. 7	ϵ_{EFF} Eq. 7	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	1,001329	3,356065	109,993	6731,602	141,608	0,328799	0,001949
1,000	1,008470	3,358229	110,029	6733,772	143,743	0,311150	0,019598
10,000	1,081795	3,380451	110,392	6756,014	165,622	0,125145	0,205603
100,000	2,074984	3,681445	115,202	7050,378	95,176	0,674459	-0,343711

Por meio das Tabelas 5 e 6, espera-se que a diferença de fase inicial seja ao redor de 140° em 5 GHz. Desta forma, para uma tensão de entrada de 1 V espera-se 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 14) para averiguar se os modelos numéricos seguem o comportamento esperado pela teoria.

Figura 16 - Simulação de leiaute no ADS para transdutor proposto

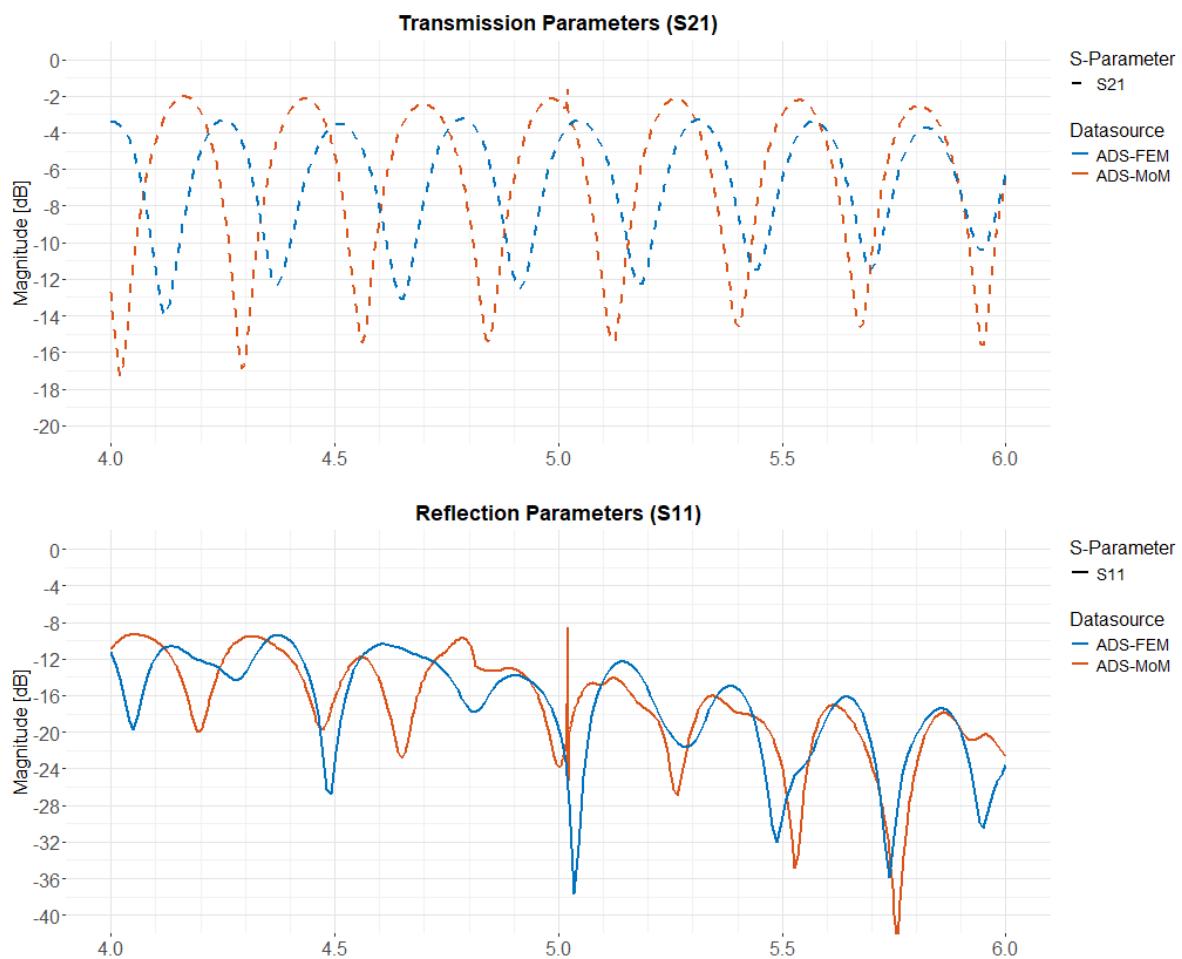


Fonte: Figura do autor.

Como pode ser visto na Figura 17, a adição do sinal de saída da linha de referência de comprimento l_1 com o sinal da linha de medição com comprimento $l_2 \gg l_1$ resultam em diversos pontos de interferência construtiva e destrutiva ao longo das

frequências analisadas, ou seja, entre 4 GHz a 6 GHz, que ocorrem quando os sinais entregues ao combinador de potência encontram-se em fase ou em oposição de fase, respectivamente. As frequências em que ocorrem interferência destrutiva estão relacionadas à diferença entre os comprimentos dessas linhas.

Figura 17 - Parâmetros de espalhamento do transdutor de fase para amplitude

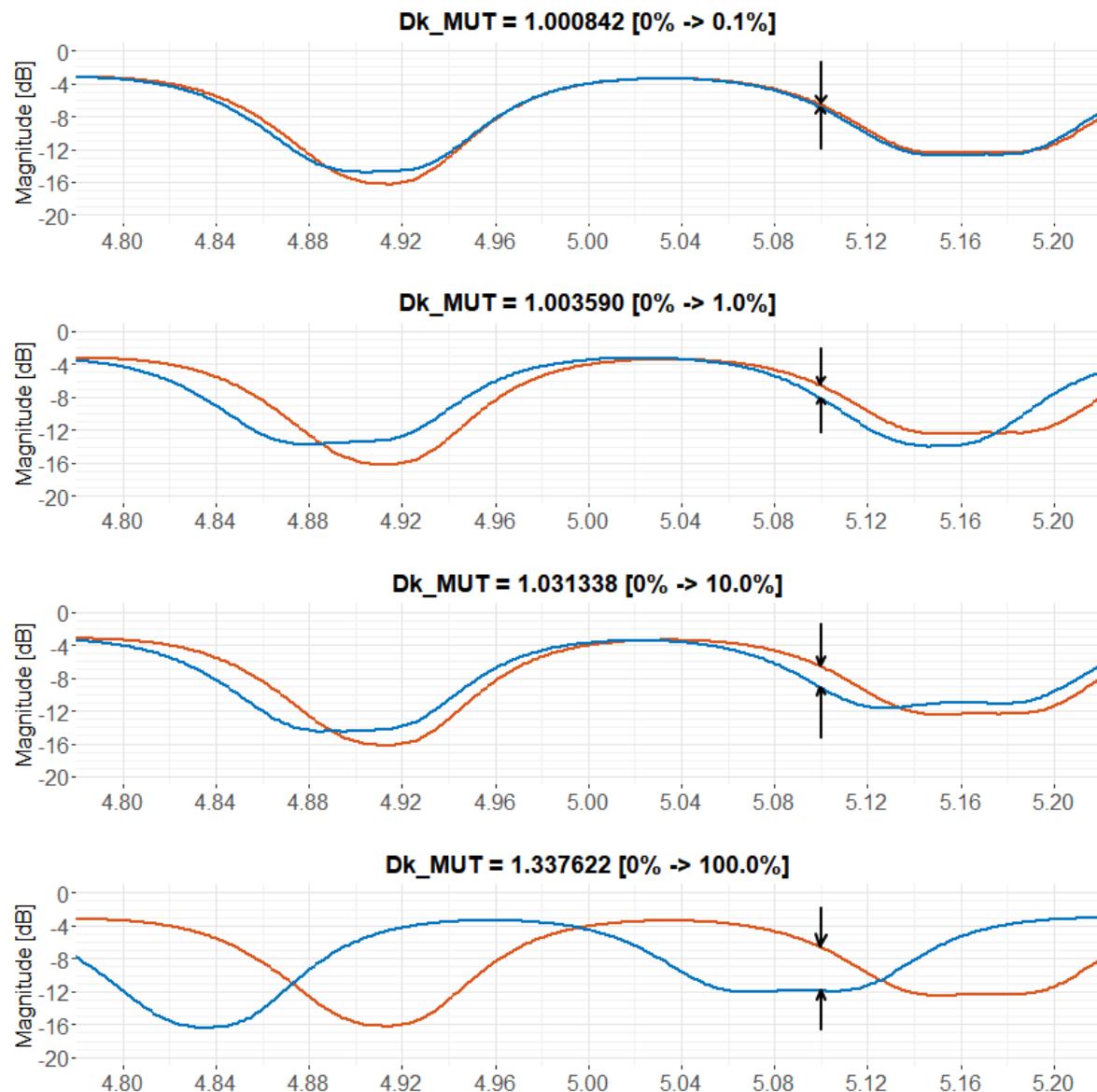


Fonte: Figura do autor. Magnitudes dos parâmetros S11 e S21 em linha sólida e pontilhada respectivamente. Simulações no MoM estão em laranja e simulações no FEM em azul.

Novamente, apesar das diferenças entre as simulações no MoM e no FEM, os resultados obtidos são condizentes entre si. Enquanto nos resultados apresentados pela Figura 17 a atmosfera gasosa é o ar seco ($\epsilon_{\text{MUT}} = 1,000538$), na Figura 18 são

mostradas a respostas (S21) do sistema em diversas simulações FEM com permissividades da atmosfera que seriam encontradas pelas concentrações de umidade descritas na Tabela 5.

Figura 18 - Resposta (S21) do transdutor para variações de permissividade atmosférica



Fonte: Figura do autor. Resposta (S21) esperada do sistema de transdução para diversas condições de atmosfera de teste. Linha laranja refere-se à resposta em ar seco, enquanto as linhas azuis correspondem à resposta nas diferentes atmosferas

Por meio dos resultados da Figura 18, pode-se identificar que há uma variação pequena da resposta em 5 GHz (apenas 0,03 dB para uma variação de 0,1% de umidade), indicando que a frequência escolhida não possui alta sensibilidade. Contudo, ao escolhermos 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 5.

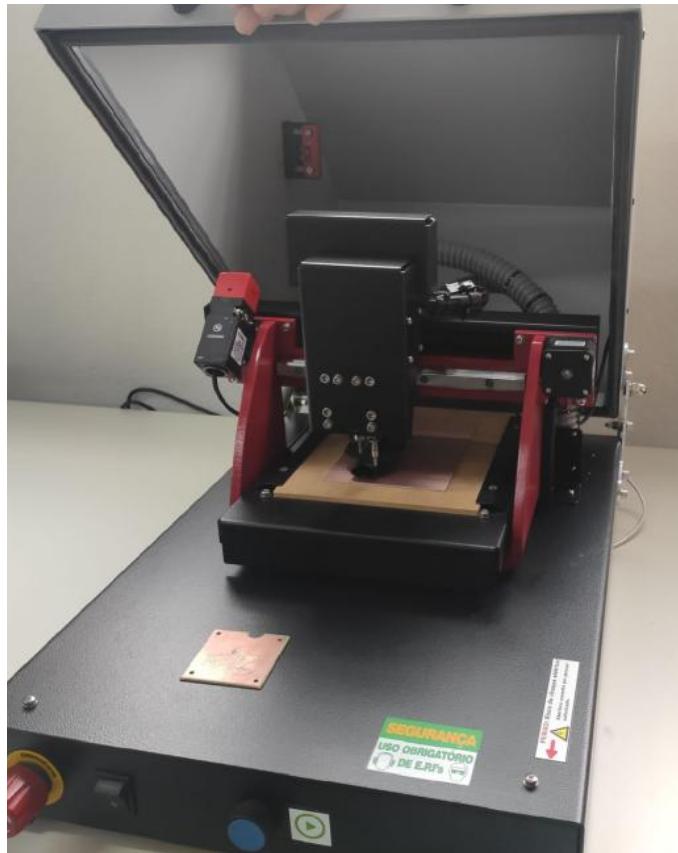
3. 4. FABRICAÇÃO DE PROTÓTIPOS

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 caracterizados dois protótipos, cada qual utilizado em uma etapa distinta dos ensaios realizados.

Para realizar a interface entre os cabos advindos 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 (KLC Eletric Conexões Ltda).

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



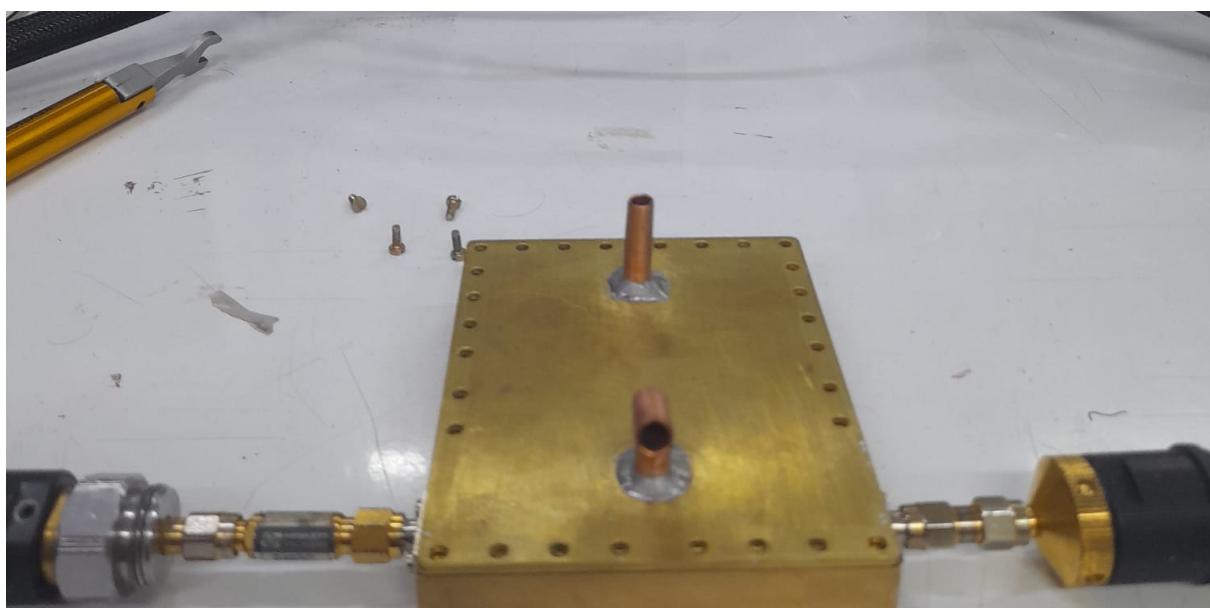
Fonte: Figura do autor.

Em todas as estruturas produzidas foi realizado procedimento de niquelação para evitar a formação de camadas de óxido que pudessem 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 projetada e construída uma câmara de ensaios (Figura 20). A câmara foi usinada a partir de um bloco sólido de latão, e furos de fixação foram incorporados com o objetivo de assegurar adequadamente o 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. A entrada e saída de gás foram posicionadas em lados

opostos da câmara, para favorecer a homogeneização da mistura ao longo da estrutura de micro-ondas.

Figura 20 - Câmara de ensaios fabricada

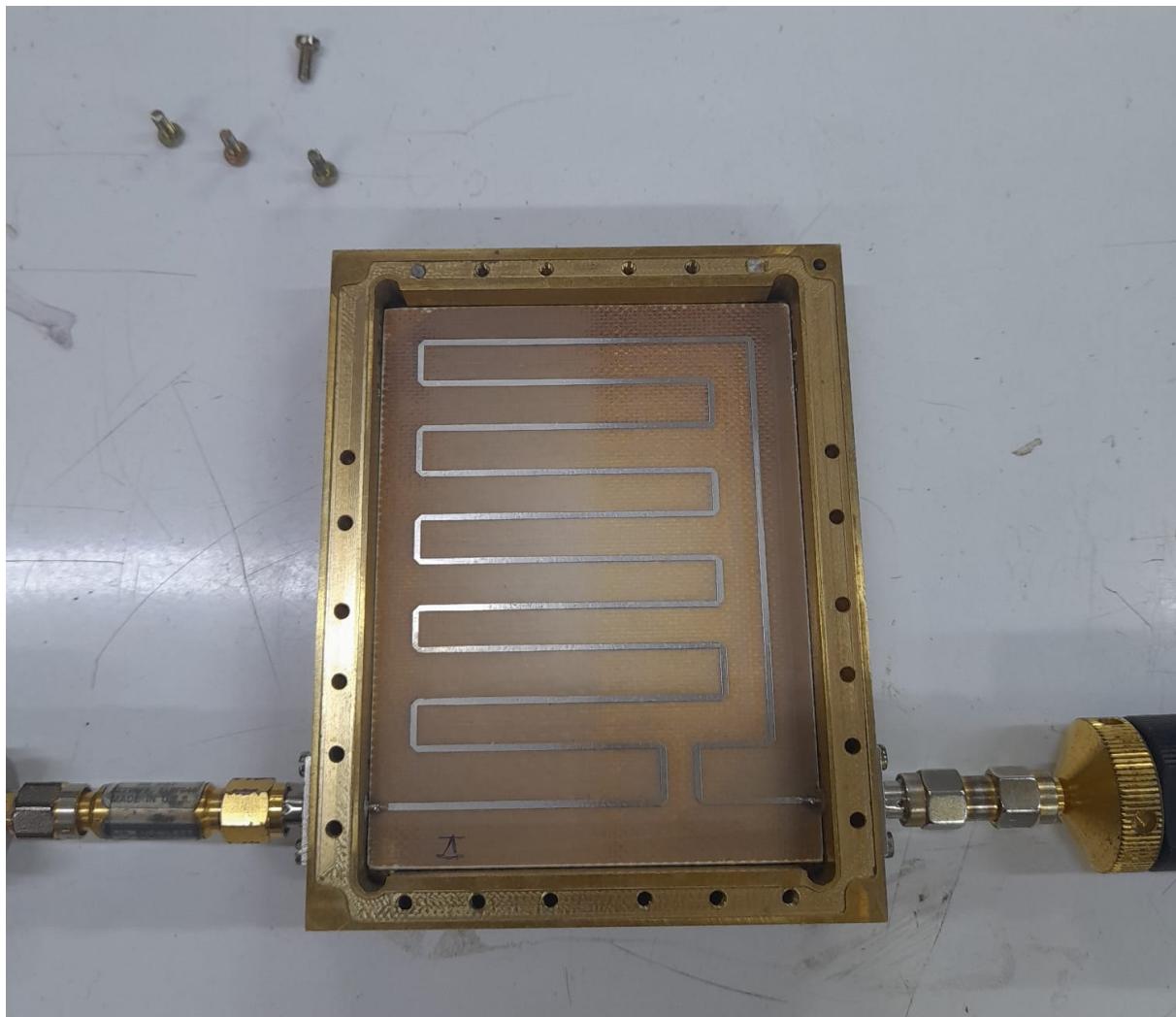


Fonte: Figura do autor.

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

Futuramente, estruturas equivalentes serão utilizadas para melhor compreensão das interações geradas em micro-ondas pela introdução de nanoestruturas orgânicas como nanotubos de carbono sobre as microfitas das linhas de transmissão.

Figura 21 - Meandro de Microfita



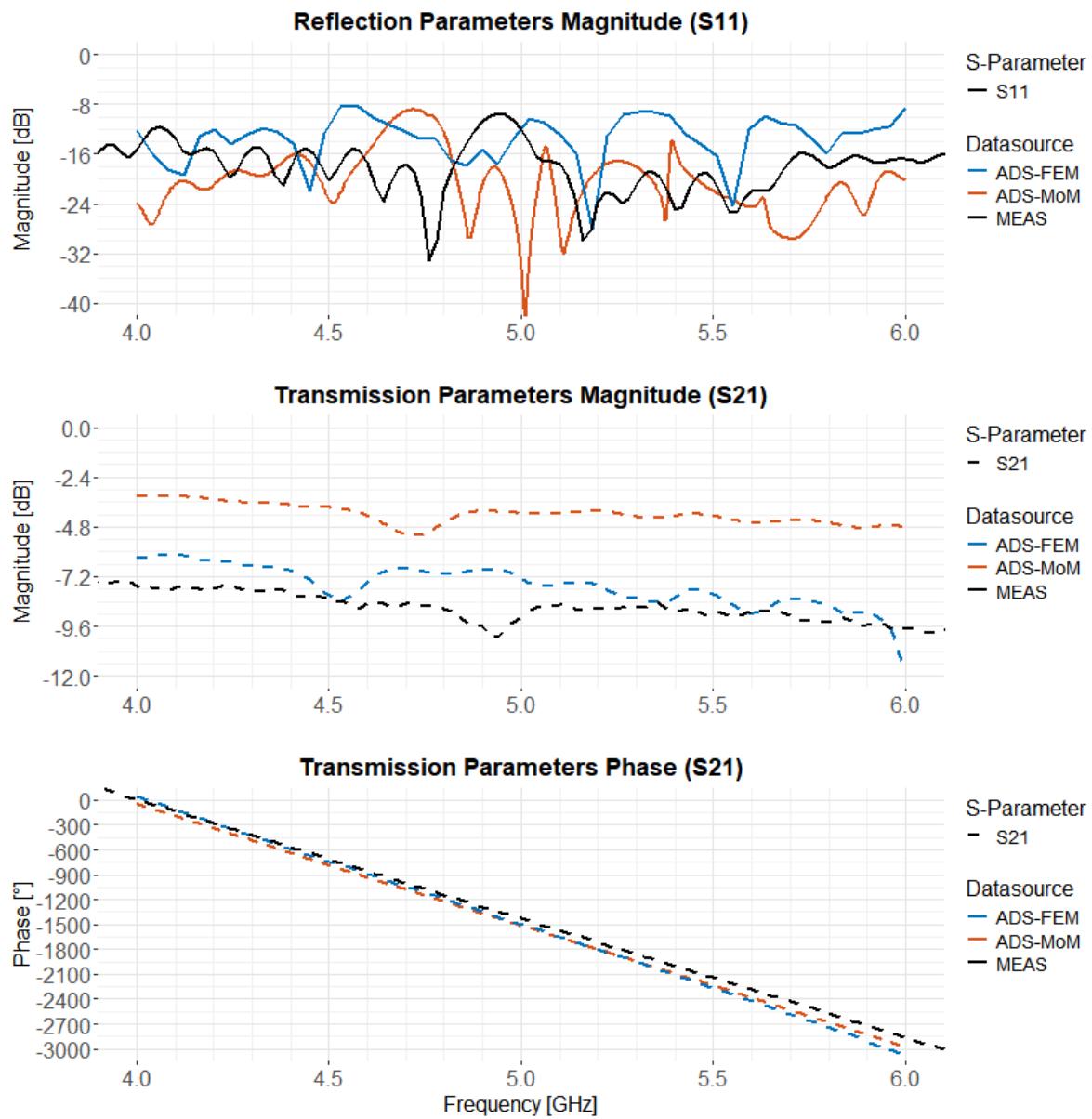
Fonte: Figura do autor.

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 de redes 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 realizada, destacada em preto, com as simulações apresentadas anteriormente na Figura 15. 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 caracterizada em bancada.

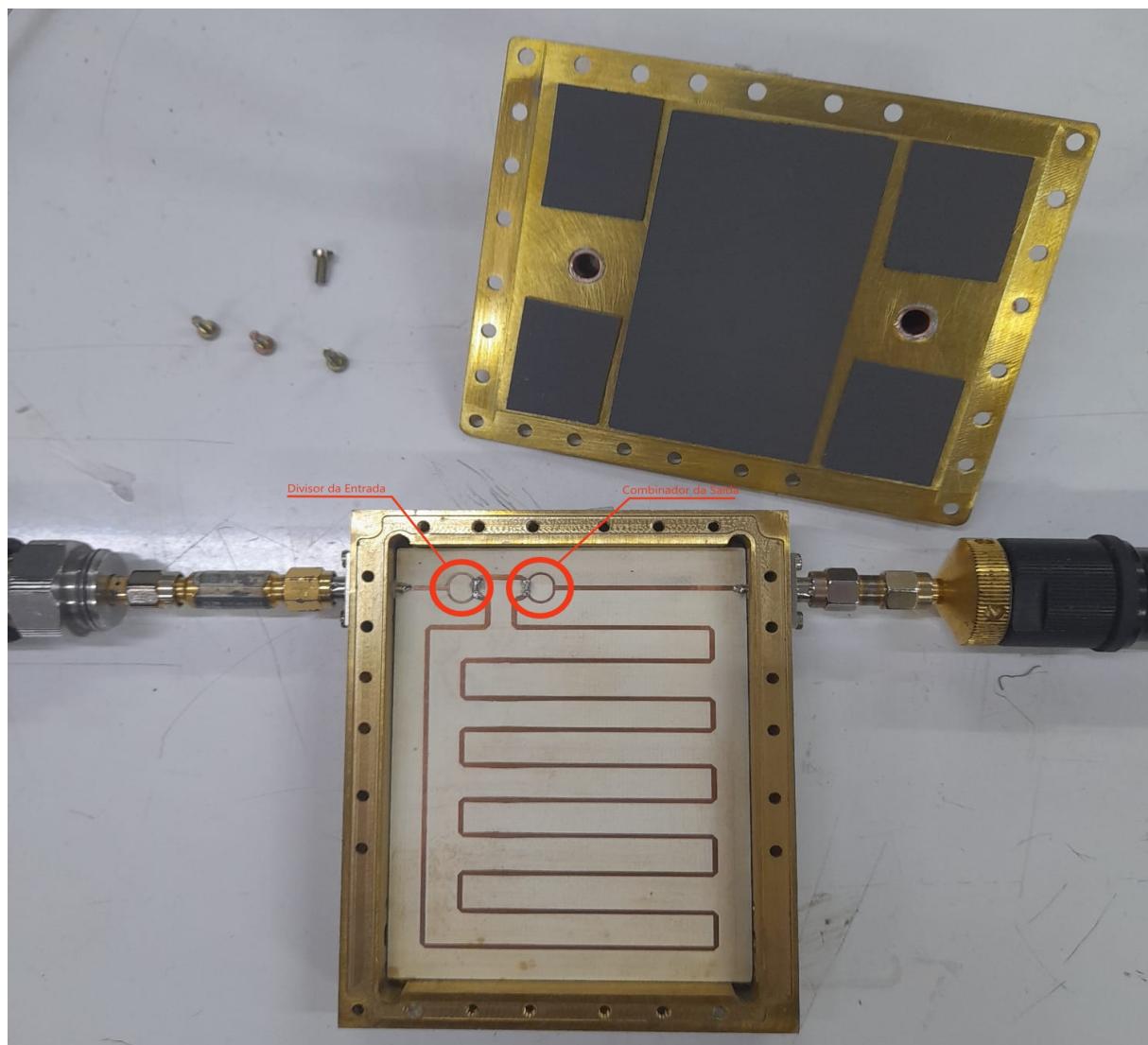
Figura 22 - Comparação entre simulações e protótipo construído



Fonte: Figura do autor.

Em uma segunda iteração, foi produzida uma estrutura na qual a linha de transmissão sensível e a linha de transmissão de referência são alimentadas pelos sinais de saída de um divisor de Wilkinson, sendo que os sinais propagados nessas linhas de transmissão são combinados por um segundo divisor de Wilkinson, ambos circulados em vermelho na 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.

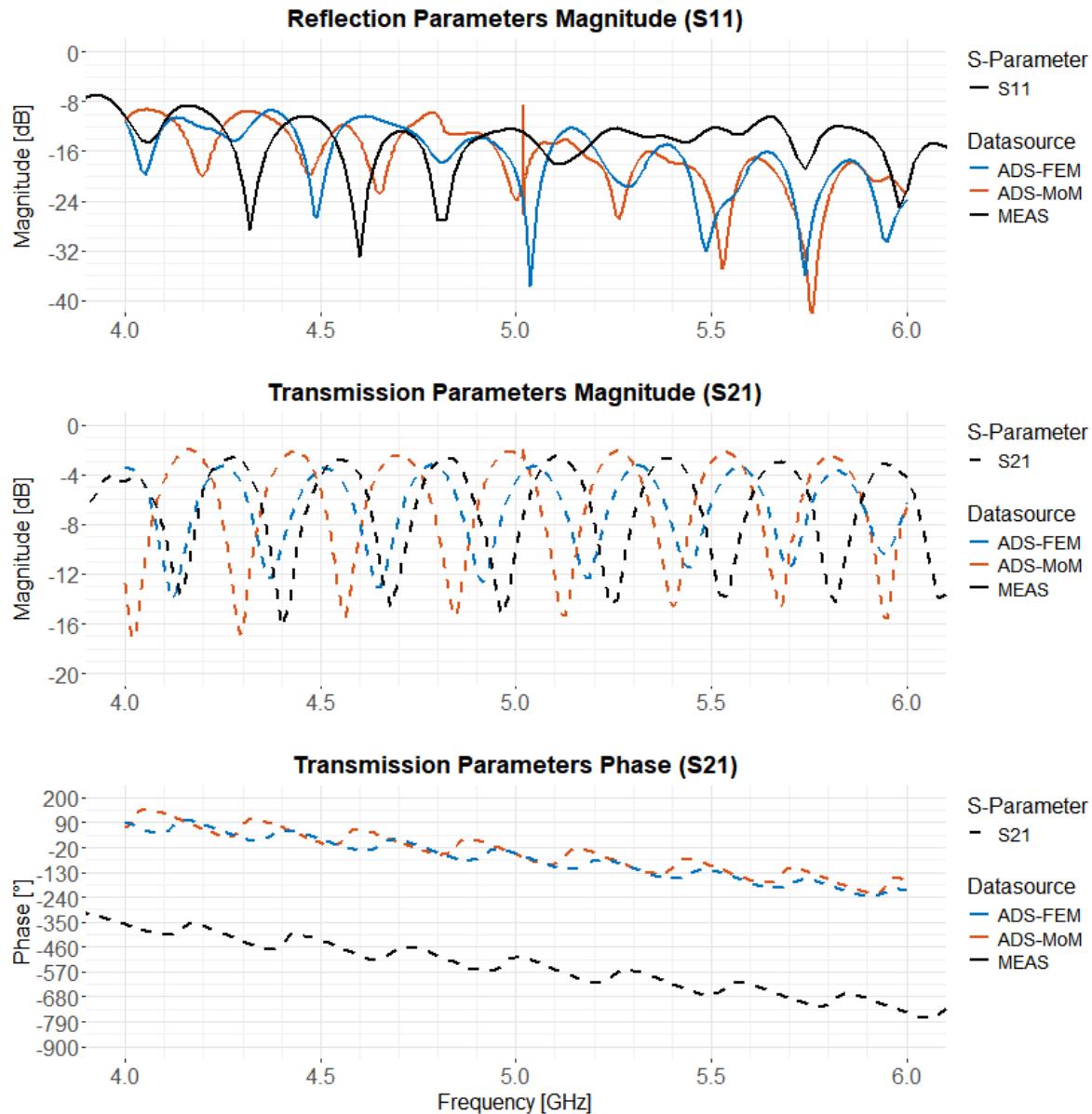
Figura 23 - Linha de Transmissão + Divisor/Combinador de Wilkinson



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.

Figura 24 - Comparaçao entre simulaçao e protótipo construído para linha com conversor fase-amplitude



Fonte: Figura do autor.

Note-se que apesar da simulação FEM e a medida do dispositivo concordam na região próxima a 4 GHz, à medida que se aumenta a frequência, aumenta-se a distância entre os vales de ressonância destrutiva. Ou seja, ao passo em que a

frequência aumenta as medidas são gradualmente mais afetadas por não idealidades no protótipo fabricado, que o diferem do modelo de simulação eletromagnética. Nesse contexto, pode-se citar pequenos erros de fabricação nas dimensões da linha de referência e linha de medição e divisor de Wilkinson, dispersão do valor da permissividade do substrato dielétrico utilizado, efeitos de proximidade entre as linhas de transmissão e as paredes metálicas da câmara, ou por efeitos parasitas dos resistores usados nos divisores de Wilkinson.

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

3. 5. ENSAIOS COM GASES

Realizada a medição e validação dos dispositivos de micro-ondas a serem utilizados como elementos transdutores, a próxima etapa do projeto consistiu 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, que serão descritas a seguir.

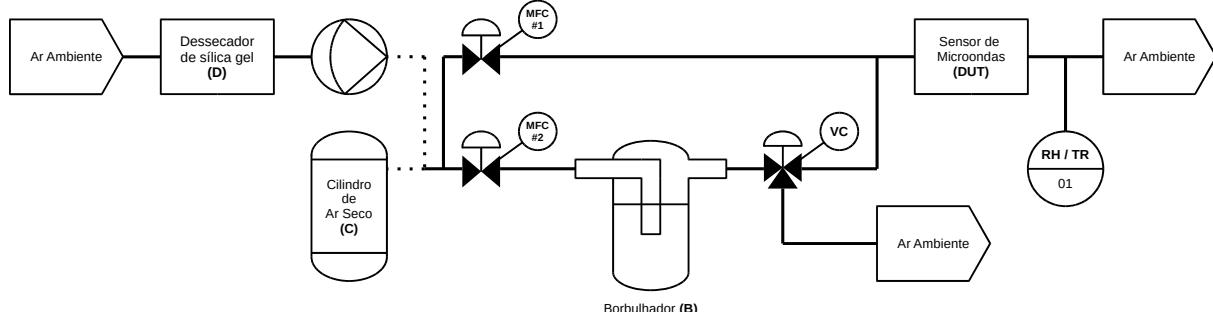
3. 5. 1. BANCADA DE GASES

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) é possível controlar valores acima de 1% de fração volumétrica. Ar seco advindo de um sistema de dessecagem (D) ou de 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. 11.

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



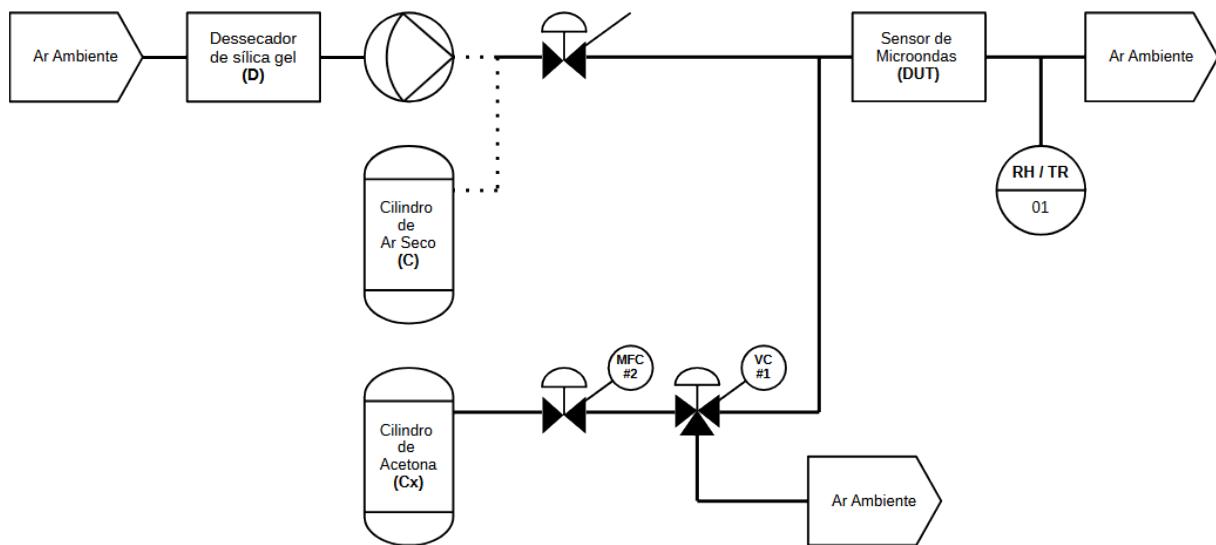
Fonte: Figura do autor.

A utilização da pressão de vapor é um método simples e prático para preparar misturas gasosas contendo vapores de líquidos. No entanto, devido à adsorção dos

vapores nas paredes das tubulações e à limitação de resolução dos MFC, na prática a obtenção de misturas em baixas concentrações torna-se inviável.

Para suprir essa deficiência para ensaios com baixa concentração de gases, foi utilizado um cilindro com a substância sob análise já diluída (C_x), como indicado na Figura 26.

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



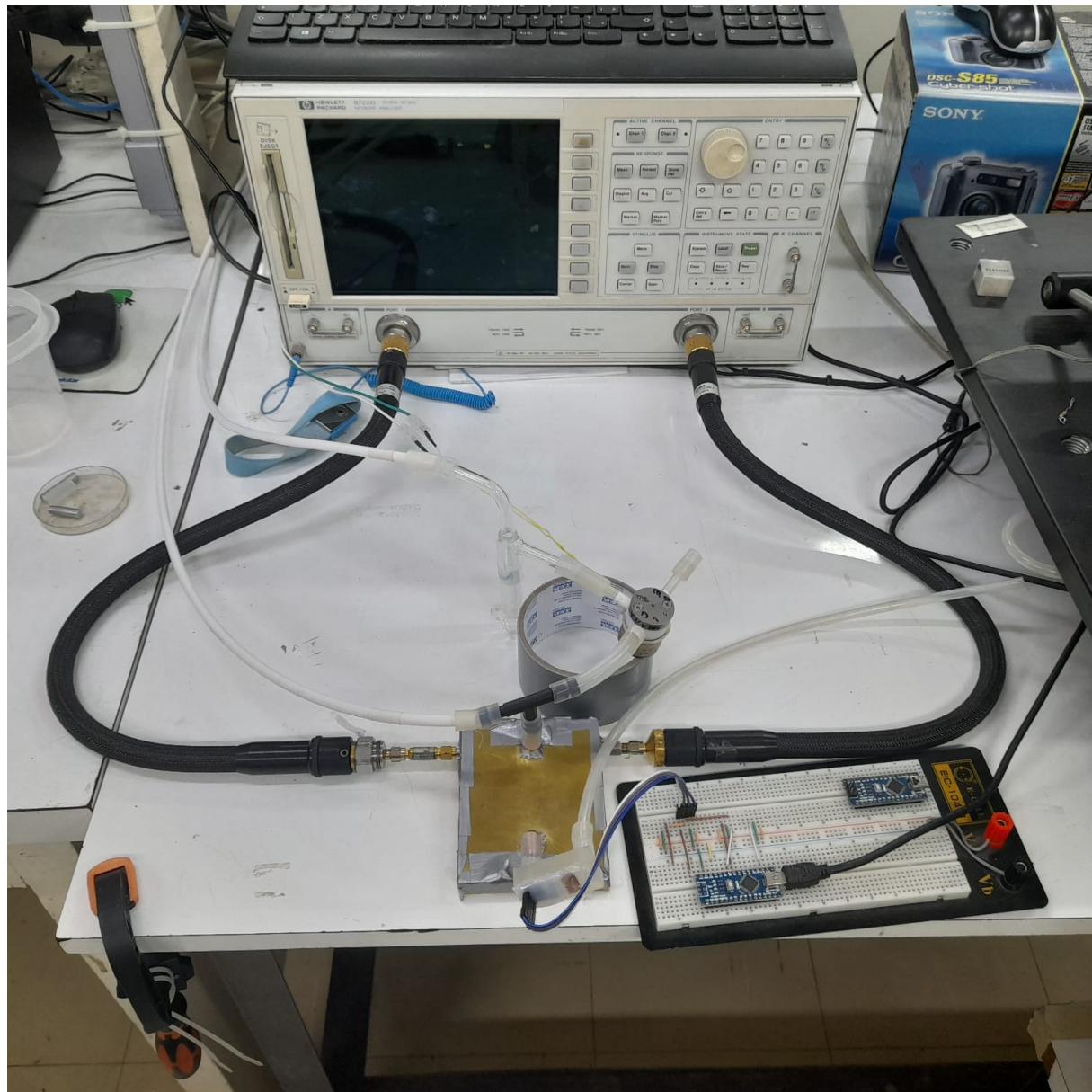
Fonte: Figura do autor.

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 fosse 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 cilindro.

3. 5. 2. BANCADA DE TESTES DE MICRO-ONDAS

Na bancada de testes de micro-ondas, foi utilizado o Analisador Vetorial de Redes modelo HP8722D, e foram integrados equipamentos de bancada para geração 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 dos experimentos com gases (Figura 25).

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



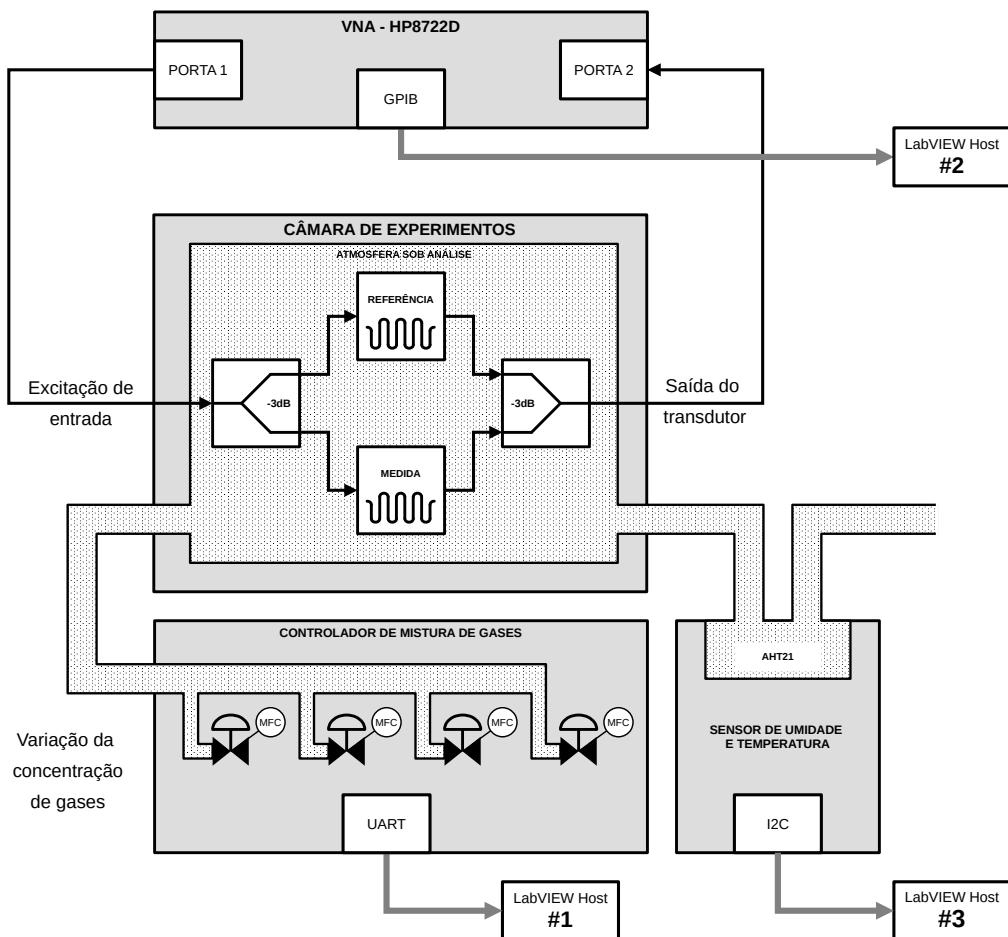
Fonte: Figura do autor.

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.

3.6. RESULTADOS

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

A entrada e saída do protótipo de micro-ondas foram conectadas às portas do VNA. O parâmetro medido foi S21 (dB), coeficiente de transmissão que fornece a diferença em decibéis entre as amplitudes dos sinais de saída e de entrada do sen-

sor em teste. Apesar das estruturas de microfita construídas terem sido caracterizadas na faixa de 4 GHz a 6 GHz, nas medidas experimentais iniciais delimitou-se uma faixa de frequência mais restrita, cobrindo apenas um ciclo de interferência construtiva e destrutiva entre as linhas de referência e de medição, equivalente à faixa de 4,8 GHz a 5,2 GHz.

A entrada de gás da câmara de experimentos construída foi ligada ao conjunto da bancada de gases na configuração #1 (vide Figura 25). Por outro lado, a saída da câmara de gás foi ligada a um sensor comercial de umidade e temperatura comercial (Figura 31), utilizado para processo de calibração dos sensores de micro-ondas.

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

1. Fluxo médio do gás passante pelos controladores de massa (MFC) em unidades de centímetros cúbicos padrão por minuto (sccm).
2. Parâmetros de espalhamento (S_{11} , S_{21} , S_{12} , S_{22}) do sensor de micro-ondas sob análise dentro da câmara de gás, medidos pelo VNA HP8722D.
3. Temperatura (em °C) e Umidade Relativa (em %) obtidas na saída da câmara de gás, medidas através do sensor comercial AHT21.

Por meio da utilização de um microcontrolador e da interface de comunicação serial, os MFC (MKS1179) são atuados e sua vazão é medida (com precisão de 0,001 sccm) a cada segundo. 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.

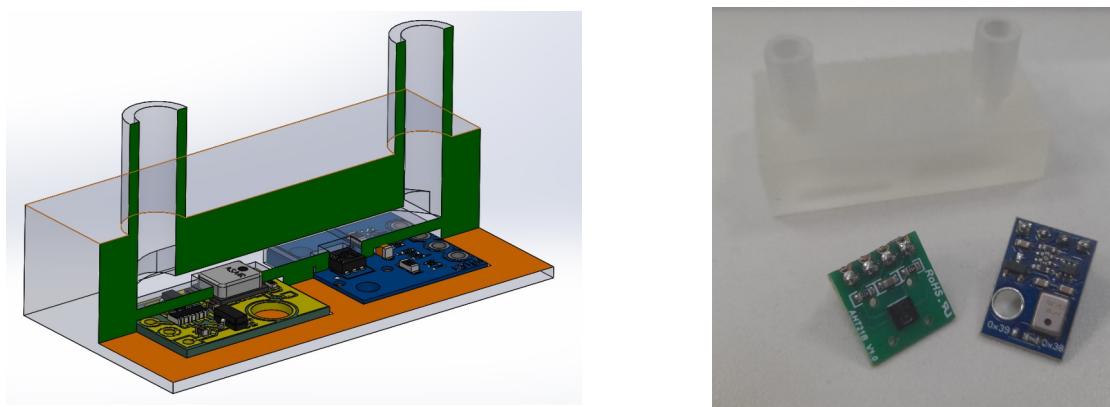
Figura 30 - Exemplo de arquivo gerado pelo programa de controle do VNA

```
! 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 AHT21 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 8 segundos e para temperatura se encontra entre 5 e 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 foram armazenados a data e tempo exatos da medida (Figura 32), as quais foram utilizadas para o processamento dos dados obtidos. Para tal finalidade, foi escrito um programa em R para retirada automática dos dados gerados pelos computadores e processamento.

3. 6. 1. CONVERSOR FASE-AMPLITUDE

Uma vez concluídas a fabricação e caracterização das estruturas de micro-ondas utilizadas como elementos de transdução, foram realizadas inúmeras medidas preliminares para aperfeiçoamento da metodologia de testes. Para realização de uma medida no sistema proposto, os equipamentos de medição em micro-ondas deverão ter sido ligados há, no mínimo, uma hora, permitindo tempo suficiente para que atinjam estabilidade térmica. Adicionalmente, antes da passagem de qualquer mistura a ser analisada, deverá haver uma purga das linhas hidráulicas por no mínimo 30 minutos. Alguns dos resultados obtidos são discutidos a seguir.

3.6.1.1. MEDAÇÃO EM ATMOSFERA COM H₂O

A Figura 33 apresenta os resultados de um experimento, com medidas efetuadas sob atmosfera com vapor de H₂O ao longo de aproximadamente 10 horas. Nesse experimento foram realizadas injeções de misturas de ar seco e com ar saturado de vapor de H₂O com diferentes proporções de saturação relativa (10%, 30%, 50% e 70%), cada uma com aproximadamente 20 minutos de duração. Após cada injeção foi realizada a purga do sistema com ar seco puro por 20 minutos.

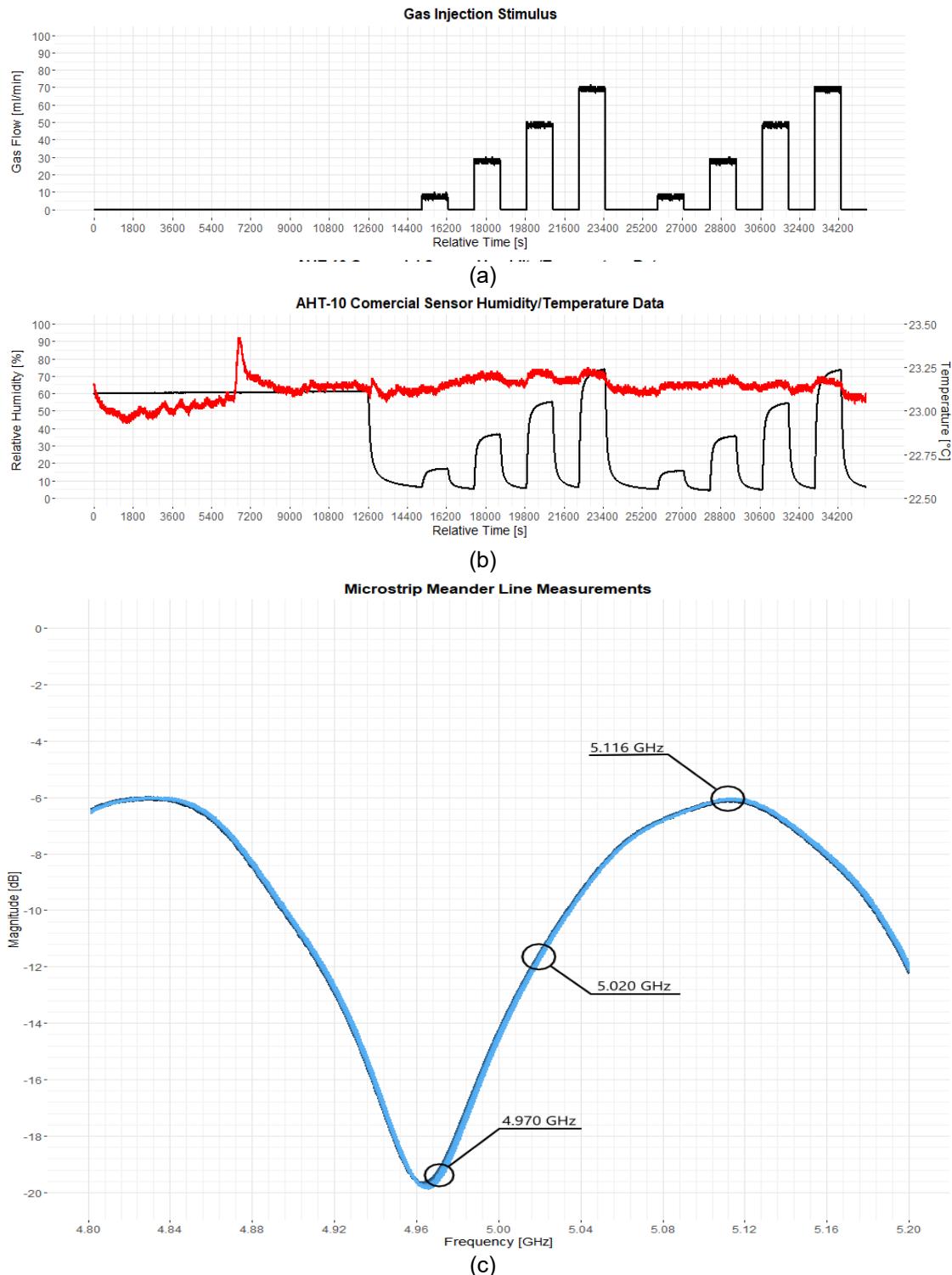
Na Figura 33 (a) são mostrados os dados obtidos dos MFCs, indicando qual o fluxo gasoso permitido pelo MFC1 (ar seco) e pelo MFC2 (ar saturado com umidade). Para que as condições hidrodinâmicas dentro da câmara fossem as mais estáveis possíveis, optou-se por manter um fluxo gasoso total igual a 100 sccm. Ou seja, para que uma mistura tivesse 55% de saturação relativa de vapor de H₂O no ar, o MFC1 foi ajustado para um fluxo de 45 sccm enquanto o MFC2 foi ajustado para um fluxo de 55 sccm.

Na Figura 33 (b) são apresentados os dados advindos do sensor comercial, utilizado para monitorar a umidade relativa e a temperatura dentro da câmara. Os dados obtidos mostram que a curva umidade medida acompanha as proporções de mistura realizada pelo sistema de controladores de massa. Uma análise mais detalhada do gráfico indica que ainda que seja injetado apenas ar seco, nunca são obtidas umidades relativas nulas (RH=0%), o que se atribui à adsorção e penetração de umidade pelos tubos e conexões hidráulicas realizadas. Adicionalmente, percebe-se

também que há correlação entre a temperatura do gás na saída da câmara e à mudança de umidade. Neste caso, acredita-se que este processo ocorra devido à diferença entre a capacidade térmica da água e das moléculas que compõe o ar seco.

Na Figura 33 (c) são apresentadas todas as medidas de parâmetro S21 que compuseram esse experimento. Por meio dessa figura é possível verificar em quais frequências o sensor apresenta maior ou menor sensibilidade à variação de concentração de vapor de H₂O. Quanto mais espessa for a região da curva em torno de uma dada frequência, maior será a amplitude de resposta à variação de umidade da atmosfera. Para melhor visualizar tal fenômeno, foram escolhidas três frequências arbitrárias (4,970 GHz; 5,020 GHz; e 5,116 GHz), a partir das quais foram plotados os gráficos da Figura 33.

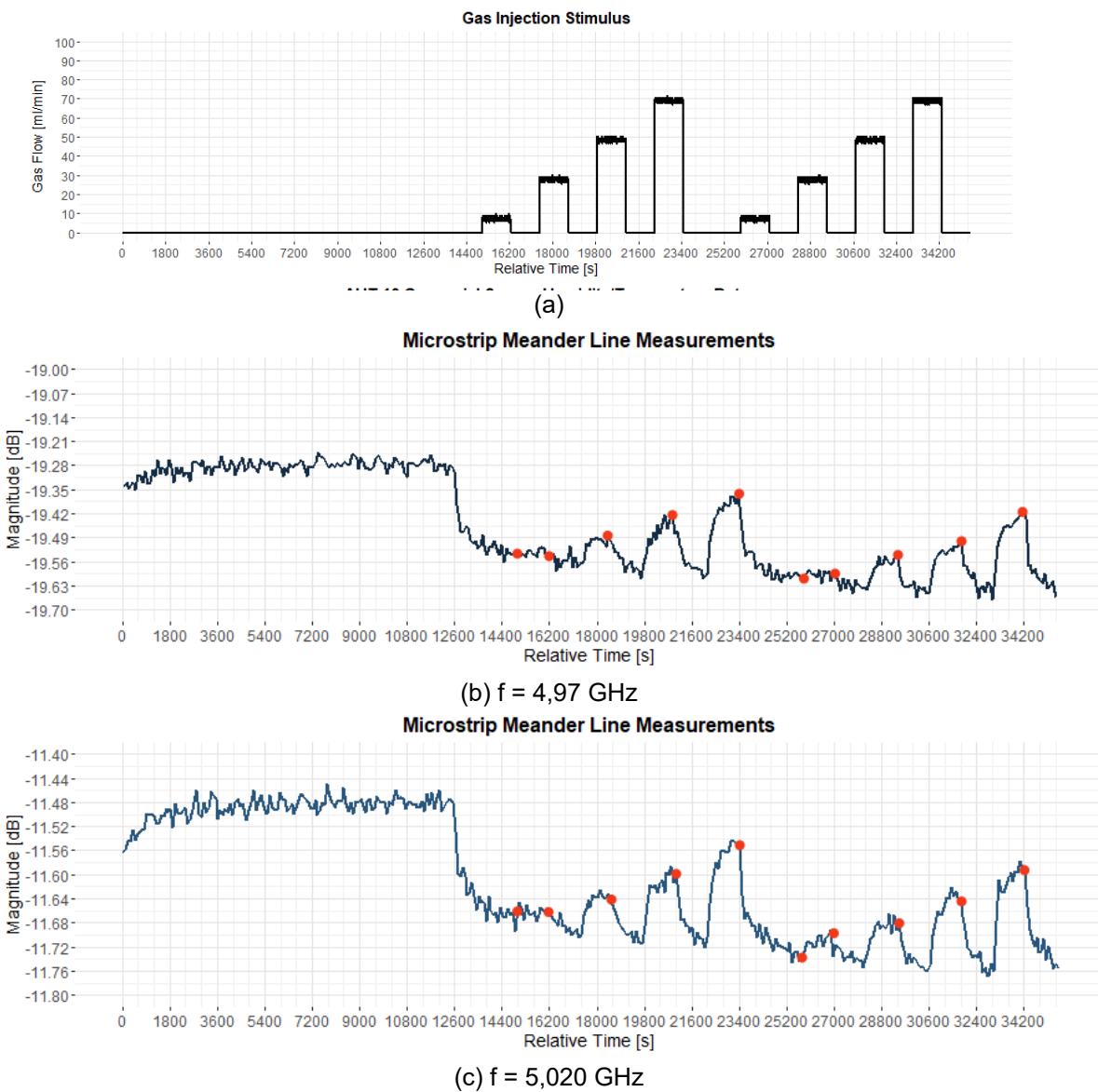
Figura 33 - Experimento com atmosfera de ar seco e vapor de H₂O – 10% a 70%

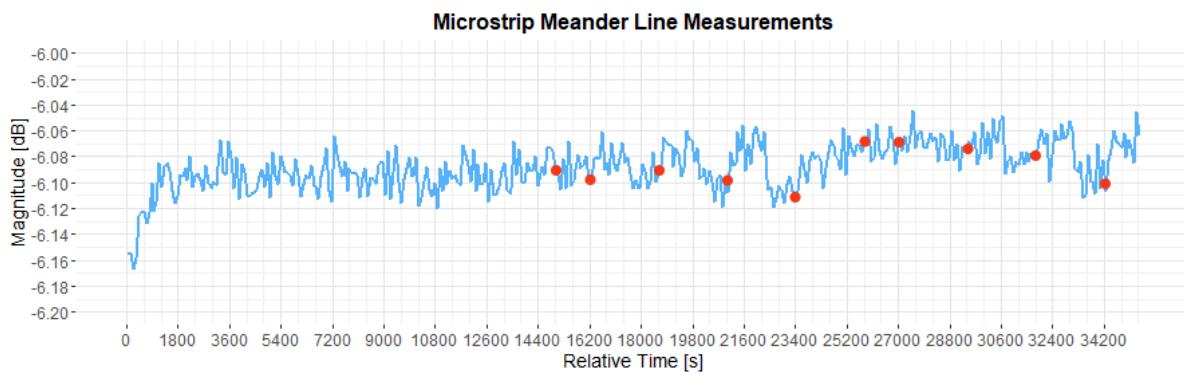


Fonte: Figura do autor. Dados retirados do experimento #9 de atmosfera de ar seco com vapor de H₂O. Em (a) são apresentados os valores dos fluxos dos MFCs em sccm; em (b) são plotados os valores de temperatura (em vermelho) e umidade relativa (em preto) medidos pelo sensor ATH21; em (c) é plotada a resposta S21 em frequência durante o experimento para os diferentes valores de vapor de H₂O, com destaque para três frequências de interesse.

Por meio das curvas apresentadas na Figura 33 confirma-se que o sensor desenvolvido é mais sensível à variação de permissividade do ambiente em frequências em torno do vale das curvas da Figura 33 (c), nas quais ocorre interferência destrutiva, e que a menor sensibilidade é obtida quando o sensor opera em frequências próximas à região de máximo dessas curvas. Esses resultados confirmam o previsto pela Eq. 23 e os resultados simulados apresentados nas Figuras 13 e 18.

Figura 34 - Medidas de S21 variando no tempo para atmosfera de ar seco com vapor de H_2O





Fonte: Figura do autor. São apresentadas as curvas de injeção de gases (a); e as medidas do parâmetro S21 para três frequências escolhidas de modo arbitrário de acordo com o gráfico da Figura 33 (c). Curva (b) corresponde a uma frequência de 4,970 GHz; curva (c) corresponde a uma frequência de 5,020 GHz; e curva (d) corresponde a uma frequência de 5,116 GHz.

Por meio de uma análise das curvas das Figuras 33 e 34, gerou-se a Tabela 7, na qual são apontados quais os valores de saturação relativa programados no experimento e quais os valores medidos pelo sensor comercial (RH [%]) e pelo sensor de micro-ondas fabricado (S21 [dB]).

Observa-se que no intervalo de concentrações de vapor de H₂O considerado, obteve-se maior variação em S21 [dB] na frequência de 4,97 GHz, sendo que essa seria a melhor opção para operar o sensor como detetor de umidade. Caso um sinal de 100 mW em 4,97 GHz fosse aplicado na entrada do sensor, sua potência de saída cresceria de 1,09 mW para 1,14 mW quando a concentração de vapor de H₂O aumenta de 0 para 70%.

Os valores referentes às medidas do sensor de micro-ondas foram obtidos a partir do nível apontado pelo sensor imediatamente antes do fim do período de injeção, indicado por círculos vermelhos nas Figuras Figura 33 (a), (b), (c) e (d).

Tabela 7 - Avaliação da resposta do sistema para atmosfera de ar seco e vapor de H₂O

RS programada [%]	RS medida por sensor comercial [%]	S21 medido por sensor de micro-ondas [dB]		
		4,970 GHz	5,020 GHz	5,116 GHz
0%	5%	-19.63 dB	-11.76 dB	-6.09 dB
10%	15%	-19.60 dB	-11.72 dB	-6.10 dB
30%	35%	-19.56 dB	-11.68 dB	-6.09 dB
50%	54%	-19.51 dB	-11.64 dB	-6.10 dB
70%	70%	-19.42 dB	-11.60 dB	-6.11 dB

3.6.1.2. MEDAÇÃO EM ATMOSFERA COM ACETONA

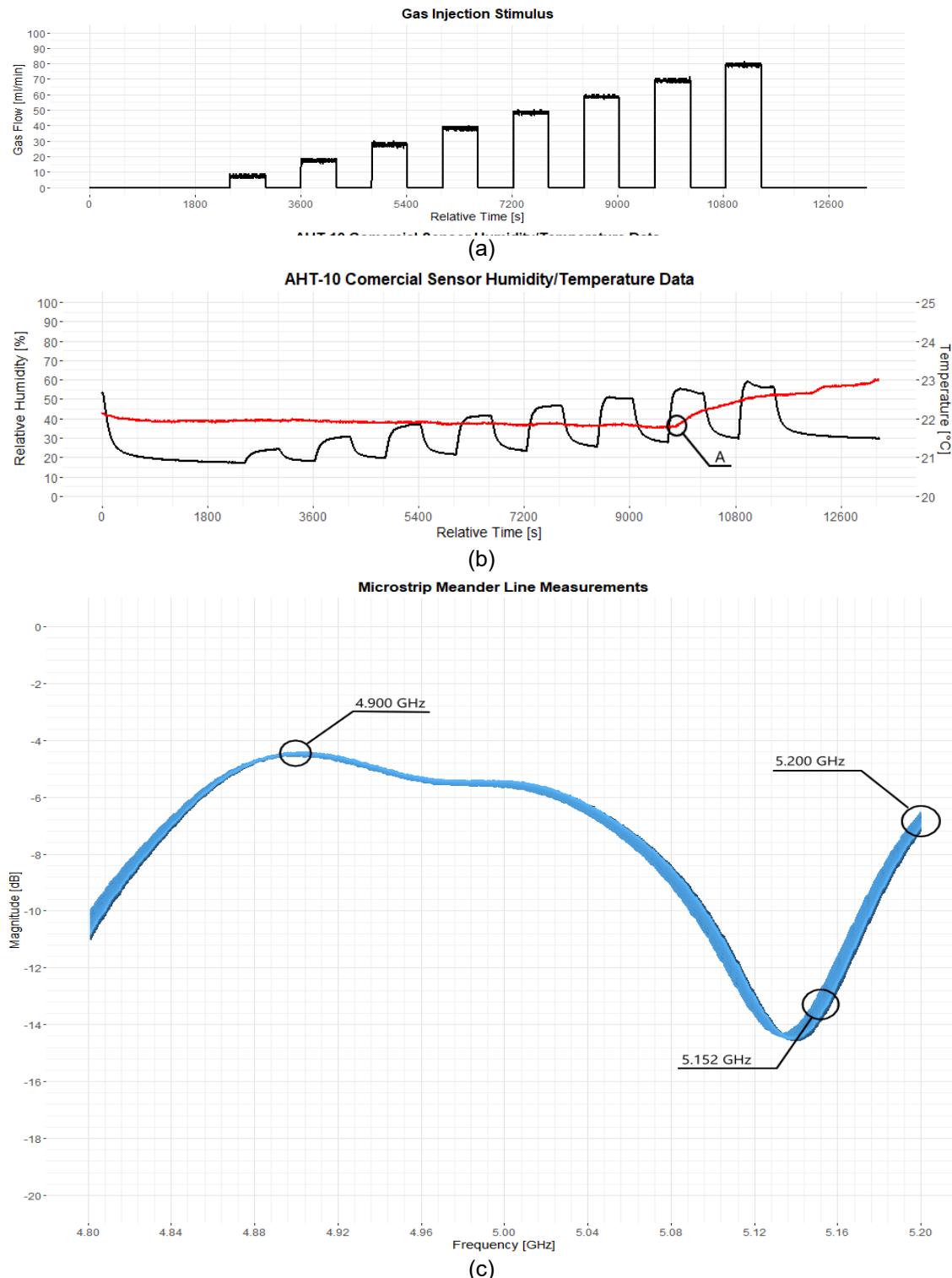
Seguindo a mesma metodologia do experimento anterior, foram realizados experimentos com a saturação de vapor de acetona em atmosfera de ar seco. No caso do experimento mostrado na Figura 33, foram realizadas oito injeções consecutivas, com intervalos de 15 minutos de purga da atmosfera sob análise entre cada uma. Como mostrado na Figura 33 (a), a cada injeção incrementou-se a saturação relativa em 10% (10%, 20%, 30%, etc) até atingir 80% de saturação relativa de acetona em ar seco.

Na Figura 33 (b), foi plotado o gráfico referente aos dados coletados do sensor de temperatura e umidade, a partir do qual pôde-se inferir que o sensor de umidade comercial possui resposta não nula para a presença de acetona na atmosfera local. Além disso, experimentos subsequentes ao mostrado na Figura 33 apresentaram incongruências entre o valor indicado pelo sensor comercial e aquele esperado, indicando que a presença de acetona neste sensor causou um dano irreversível. Uma análise do comportamento da temperatura, por sua vez, indica que se manteve constante ao longo de quase todo o experimento, com exceção das amostras retiradas após 9600 segundos desde seu início (marcado no gráfico como ponto A). Tal

comportamento se deve ao desligamento do sistema de ar-condicionado do laboratório.

Por fim, assim como foi realizado no experimento anterior, foram traçados os parâmetros S21 (dB) correspondentes a todo o período do experimento na Figura 33 (c), permitindo a seleção das frequências mais sensíveis à variação da concentração de acetona no sistema. Foram escolhidas as frequências de 4,900 GHz; 5,152 GHz; e 5,200 GHz, circuladas na Figura 33 (c), e cujos gráficos no tempo são mostrados nas Figuras 36 (a), (b), (c) e (d).

Figura 35 - Experimento com atmosfera de ar seco e acetona – 10% a 80%

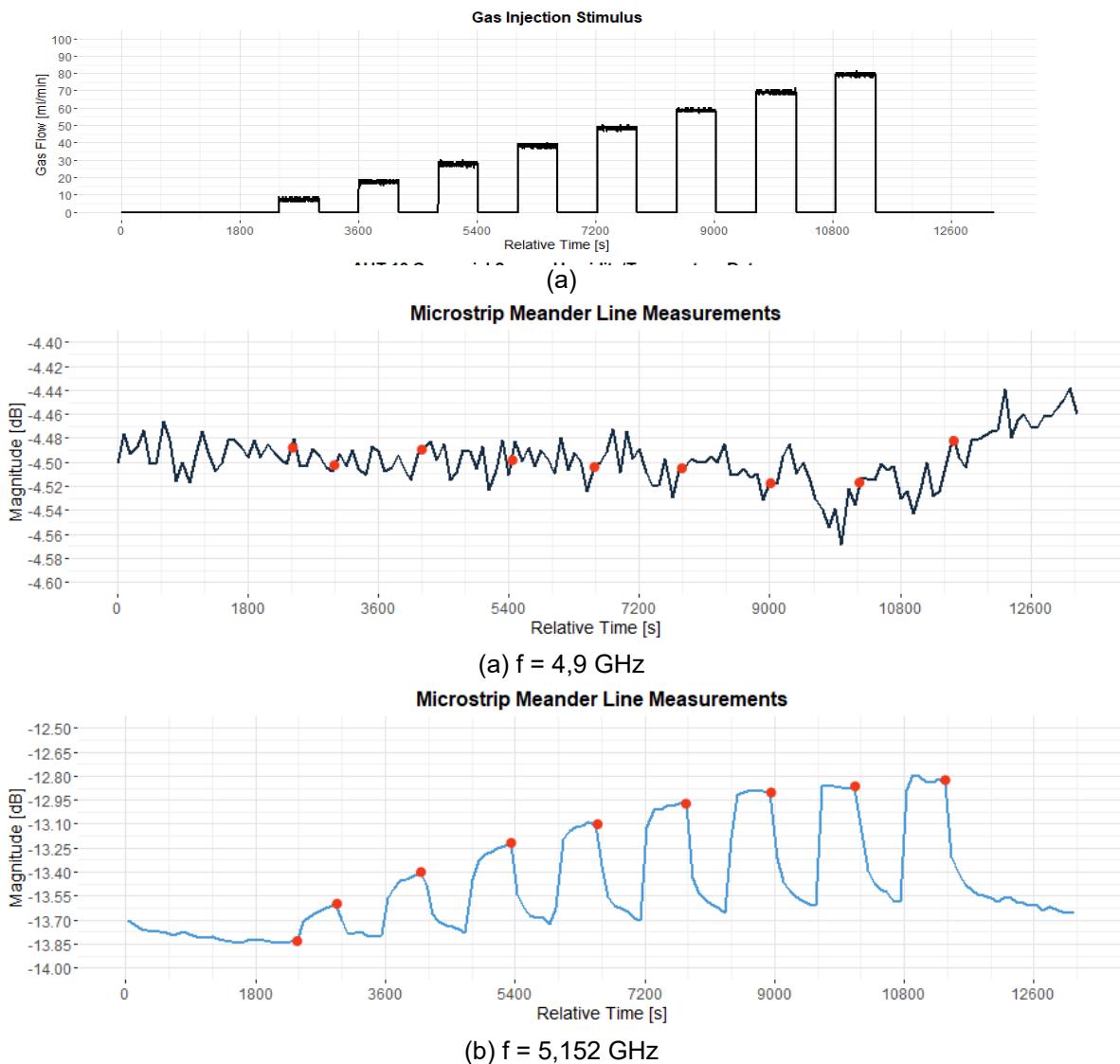


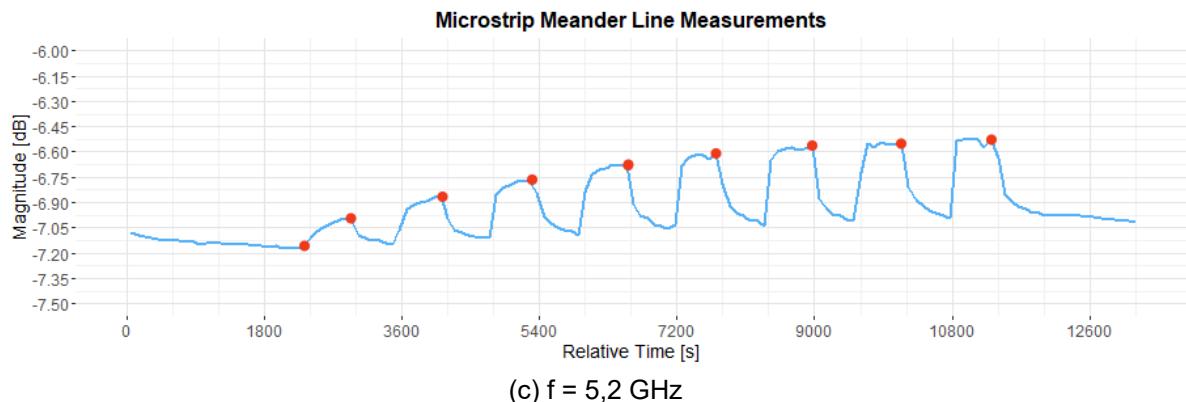
Fonte: Figura do autor. Dados retirados do experimento #4 de atmosfera de ar seco com acetona.

Em (a) são apresentados os valores dos fluxos dos MFCs em sccm; em (b) são apresentados os valores de temperatura e umidade relativa medidos pelo sensor ATH21; em (c) é fornecida a resposta em frequência durante o experimento, com destaque para três frequências de interesse.

Nota-se que os resultados dos parâmetros S21 obtidos no experimento com atmosfera com vapor de H₂O e atmosfera com vapor de acetona diferem consideravelmente. Acredita-se que tais disparidades tenham origem na montagem experimental e não refletem respostas distintas. Os motivos para essa crença são brevemente discutidos na seção 3.7.

Figura 36 - Medidas do parâmetro S21 para atmosfera de ar seco com acetona





Fonte: Figura do autor. São apresentadas as curvas de injeção de gases (a); e as medidas do parâmetro S21 para três frequências escolhidas de modo arbitrário de acordo com o gráfico da Figura 33 (c). Curva (b) corresponde a uma frequência de 4,900 GHz; curva (c) corresponde a uma frequência de 5,152 GHz; e curva (d) corresponde a uma frequência de 5,200 GHz.

Novamente, foi gerada uma tabela com todos os pontos de interesse marcados nos gráficos (a), (b), (c) e (d) da Figura 36 em círculos vermelhos.

Tabela 8 - Avaliação da resposta do sistema para atmosfera de ar seco e H₂O

RS programada [%]	RS medida por sensor comercial [%]	S21 medido por sensor de micro-ondas [dB]		
		4,900 GHz	5,152 GHz	5,200 GHz
0%	17%	-4.49 dB	-13.85 dB	-7.15 dB
10%	15%	-4.50 dB	-13.63 dB	-6.97 dB
20%	30%	-4.49 dB	-13.40 dB	-6.85 dB
30%	37%	-4.51 dB	-13.24 dB	-6.75 dB
40%	41%	-4.50 dB	-13.10 dB	-6.67 dB
50%	45%	-4.51 dB	-12.95 dB	-6.60 dB
60%	50%	-4.52 dB	-12.87 dB	-6.58 dB
70%	55%	-4.52 dB	-12.85 dB	-6.56 dB
80%	57%	-4.50 dB	-12.80 dB	-6.53 dB

3. 7. DISCUSSÃO

Analisando as curvas apresentadas nas Figuras 33 e 36, e comparando-as com os respectivos fluxos medidos nos MFCs em cada experimento, verifica-se que o sistema projetado foi capaz de medir com sucesso a presença de umidade e de acetona em uma atmosfera controlada.

Adicionalmente, confirmou-se que a resposta do sistema para um mesmo nível de saturação relativa segue a teoria desenvolvida, com a resposta para acetona

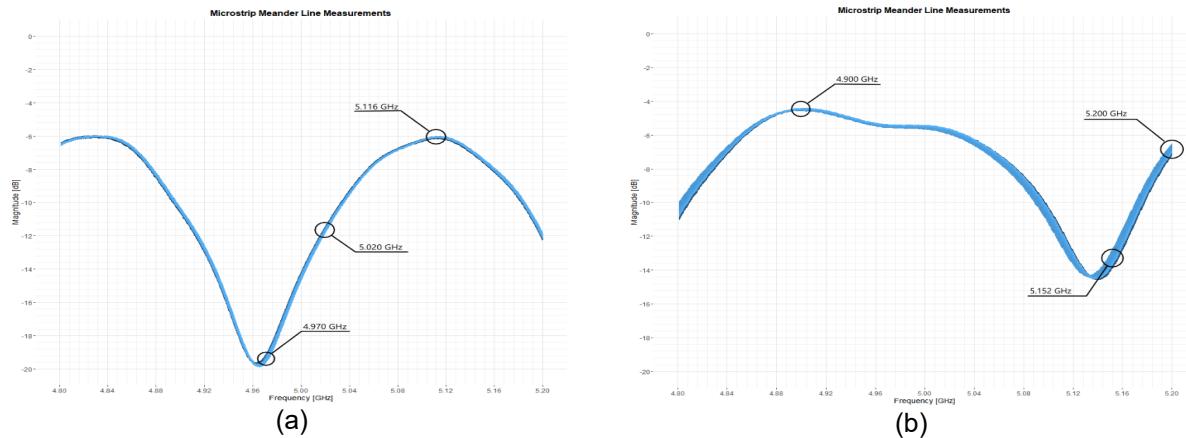
dispersa na atmosfera quase uma ordem de grandeza acima daquela medida para H₂O.

Apesar dos resultados positivos para detecção dos analitos de interesse, algumas ressalvas são necessárias.

Primeiramente, nota-se que a resposta do sistema para acetona apresentada na Figura 36 atingiu um patamar após o nível de 50% de saturação relativa. Acredita-se que este comportamento se deva à total evaporação da acetona dentro do borbulhador do experimento.

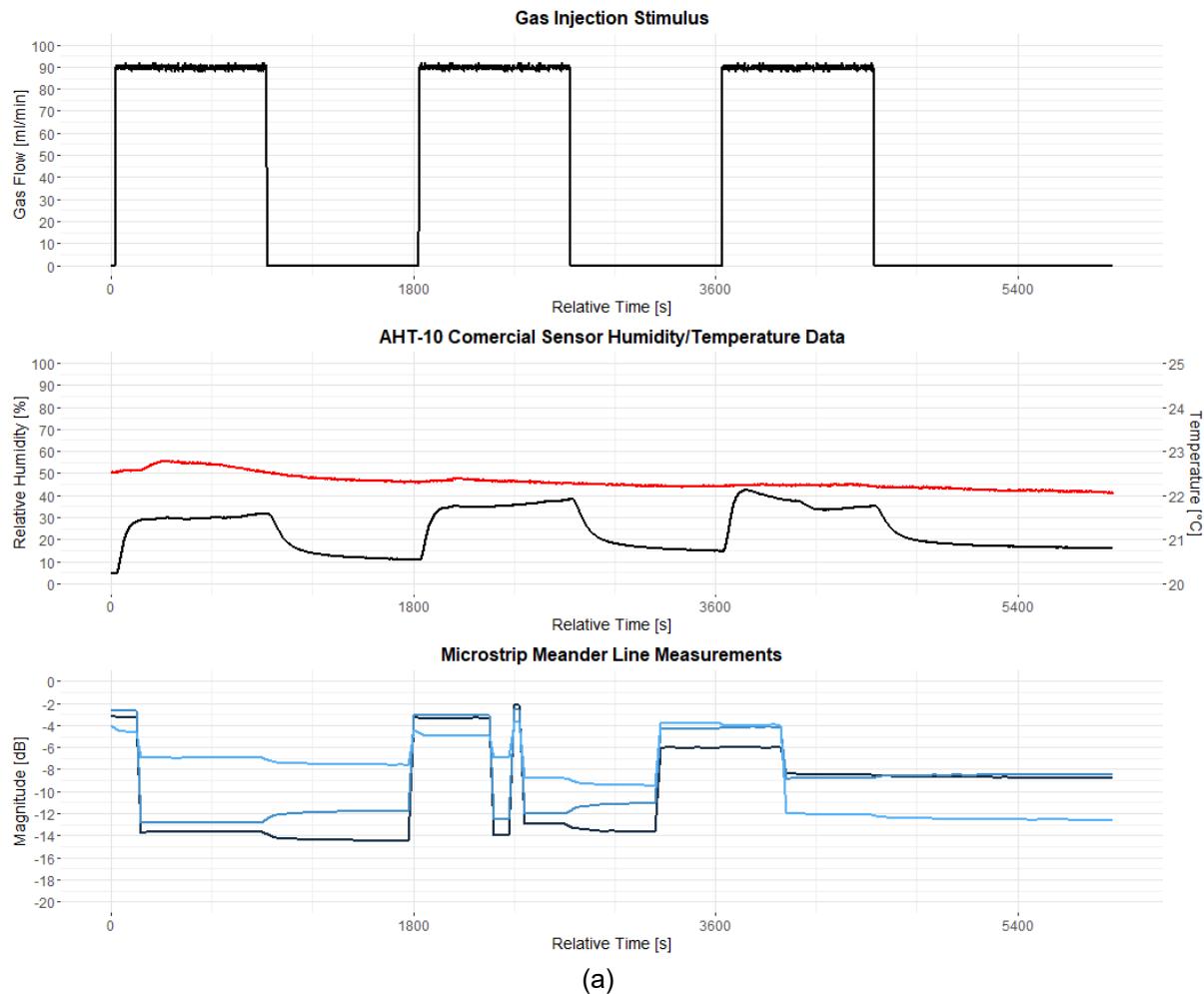
Outro ponto de discussão é a diferença da forma dos parâmetros S21 apresentados nos experimentos anteriores, apresentados na Figura 33 (c) e Figura 33 (c) e comparados novamente na Figura 37. Uma comparação dos formatos das respostas apresentadas em ambos sugere que houve uma mudança drástica nas respostas entre um experimento e outro. Contudo, como em ambos os experimentos partiu-se de condições idênticas (ar seco), não se acredita que tal mudança possa ser atribuída à presença de acetona ou H₂O. Portanto, acredita-se que entre um experimento e outro houve mudança do plano de referência do VNA. Como a calibração nos dois casos foi igual, acredita-se que houve mudança do torque das conexões SMA entre o VNA e o dispositivo de micro-ondas construído. Tal comportamento também foi verificado em outros experimentos, sendo fonte de incongruência nas medidas realizadas pelo VNA, como mostrado na Figura 38 (a) e (b). A causa desse comportamento será melhor investigada em etapas futuras, através de simulações computacionais e de medidas em micro-ondas do sensor.

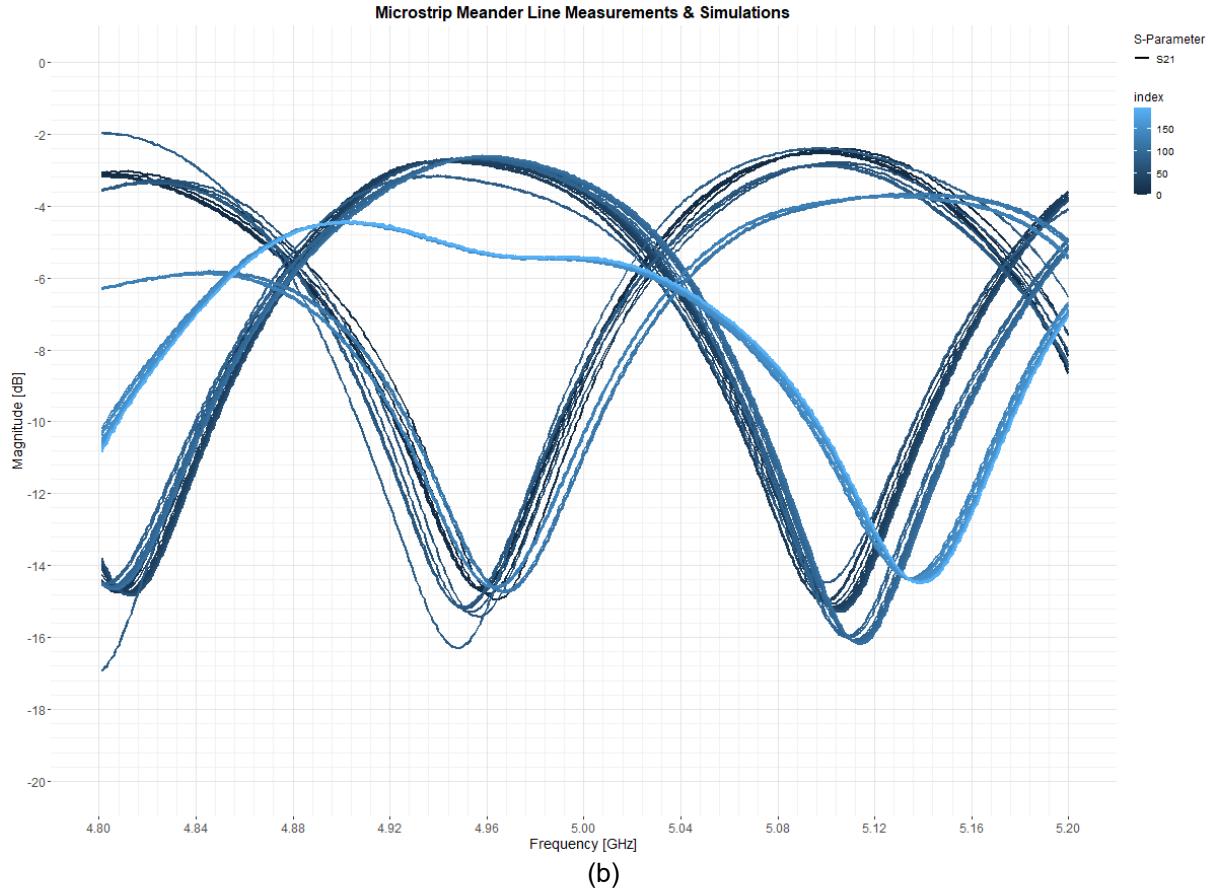
Figura 37 - Comparação entre os parâmetros S dos experimentos com vapores de H₂O e de acetona



Fonte: Figura do autor. Comparação entre experimentos #9 e #4 nos quais foram medidas as respostas S21 (dB) das atmosferas com vapor de H₂O (a) e com vapor de acetona (b).

Figura 38 - Experimento com atmosfera de ar seco e H₂O – 0% a 90%





Fonte: Figura do autor. Dados retirados do experimento #3 de atmosfera de ar seco com H₂O. Curvas traçadas em (b) mostram o comportamento transitório dos parâmetros S21 (dB) vistos em (a).

4. ATIVIDADES EM ANDAMENTO

Apesar da validação do princípio de transdução apresentado nas Figuras 33 a 36 por meio do VNA, acredita-se que a medição utilizando um equipamento de bancada dedicado para medição de potência, tal como o HP437B, possam auxiliar na precisão e acurácia das medidas, além de fornecerem com maior resolução temporal qual o tempo de resposta do sensor. Desta maneira, os esforços atuais se concentram na inclusão dessas medidas na metodologia elaborada.

Além disso, como mencionado na seção 3.7 por meio da Figura 38, é necessário estabelecer com maior cautela qual a metodologia para conexão dos equipamentos de medição ao sensor.

5. ATIVIDADES FUTURAS

Os experimentos realizados até o momento tiveram por objetivo principal a validar da transdução por atraso de fase como um método para sensoriamento de gases. Por meio dos gráficos nas Figuras 33 e 36 fica evidente que o sensor proposto é capaz de medir concentrações na ordem de algumas unidades de saturação relativa, principalmente no caso da acetona. Contudo, medições de concentrações de gases na ordem de partes por milhão ou até mesmo partes por bilhão são pouco promissoras na configuração atual. Portanto, procura-se também validar a utilização de nanomateriais orgânicos como metodologia para aumento de sensibilidade e ao mesmo tempo de seletividade do sistema proposto para as moléculas de interesse.

Além disso, uma vez validada a utilização de detectores em frequências específicas e otimizadas para maximização da sensibilidade, pretende-se adicionar à placa de circuito impresso diodos detectores, potencialmente diminuindo a susceptibilidade a ruídos e interferências externas.

Adicionalmente, espera-se que uma vez feitas tais otimizações seja possível realizar a comparação do sensor proposto com aqueles reportados na literatura.

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 9.

Tabela 9 - Cronograma previsto de atividades

Etapa	Mês				
	2025				
	AGO	SET	OUT	NOV	DEZ
Medidas com Power Meter					
Reprodutibilidade dos resultados reportados					
Caracterização de linhas com nanoestruturas					
Fabricação de protótipo com diodo integrado					
Caracterização de protótipo com diodo integrado					
Análises comparativas de resultados					
Redação e defesa da dissertação de mestrado					

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
6. Trabalhos Futuros
7. 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 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. 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]...“Biomarkers and surrogate endpoints: Preferred definitions and conceptual framework,” *Clin. Pharmacol. Ther.*, vol. 69, no. 3, pp. 89–95, Mar. 2001, doi: 10.1067/mcp.2001.113989.
- [2] G. Hetenyi and C. Ferrarotto, “Gluconeogenesis from acetone in starved rats,” *Biochem. J.*, vol. 231, no. 1, pp. 151–155, Oct. 1985, doi: 10.1042/bj2310151.
- [3]...G. A. Reichard, C. L. Skutches, R. D. Hoeldtke, and O. E. Owen, “Acetone Metabolism in Humans During Diabetic Ketoacidosis,” *Diabetes*, vol. 35, no. 6, pp. 668–674, June 1986, doi: 10.2337/diab.35.6.668.
- [4].....G. A. Reichard, A. C. Haff, C. L. Skutches, P. Paul, C. P. Holroyde, and O. E. Owen, “Plasma Acetone Metabolism in the Fasting Human,” *J. Clin. Invest.*, vol. 63, no. 4, pp. 619–626, Apr. 1979, doi: 10.1172/jci109344.

- [5]M. P. Kalapos, "Possible physiological roles of acetone metabolism in humans," *Med. Hypotheses*, vol. 53, no. 3, pp. 236–242, Sept. 1999, doi: 10.1054/mehy.1998.0752.
- [6]. .C. N. Tassopoulos, D. Barnett, and T. Russell Fraser, "BREATH-ACETONE AND BLOOD-SUGAR MEASUREMENTS IN DIABETES," *The Lancet*, vol. 293, no. 7609, pp. 1282–1286, June 1969, doi: 10.1016/s0140-6736(69)92222-3.
- [7].G. Rooth and S. Östenson, "ACETONE IN ALVEOLAR AIR, AND THE CONTROL OF DIABETES," *The Lancet*, vol. 288, no. 7473, pp. 1102–1105, Nov. 1966, doi: 10.1016/s0140-6736(66)92194-5.
- [8]....S. T. Senthilmohan, D. B. Milligan, M. J. McEwan, C. G. Freeman, and P. F. Wilson, "Quantitative analysis of trace gases of breath during exercise using the new SIFT-MS technique," *Redox Rep.*, vol. 5, no. 2–3, pp. 151–153, Apr. 2000, doi: 10.1179/135100000101535537.
- [9]..C. Turner, B. Parekh, C. Walton, P. Španěl, D. Smith, and M. Evans, "An exploratory comparative study of volatile compounds in exhaled breath and emitted by skin using selected ion flow tube mass spectrometry," *Rapid Commun. Mass Spectrom.*, vol. 22, no. 4, pp. 526–532, Feb. 2008, doi: 10.1002/rcm.3402.
- [10]. C. Deng, J. Zhang, X. Yu, W. Zhang, and X. Zhang, "Determination of acetone in human breath by gas chromatography–mass spectrometry and solid-phase microextraction with on-fiber derivatization," *J. Chromatogr. B*, vol. 810, no. 2, pp. 269–275, Oct. 2004, doi: 10.1016/S1570-0232(04)00657-9.
- [11]....C. Turner, P. Španěl, and D. Smith, "A longitudinal study of ammonia, acetone and propanol in the exhaled breath of 30 subjects using selected ion flow tube mass

- spectrometry, SIFT-MS," *Physiol. Meas.*, vol. 27, no. 4, pp. 321–337, Apr. 2006, doi: 10.1088/0967-3334/27/4/001.
- [12]. .D. Smith, T. Wang, and P. Spanel, "On-line, simultaneous quantification of ethanol, some metabolites and water vapour in breath following the ingestion of alcohol," *Physiol. Meas.*, vol. 23, no. 3, pp. 477–489, Aug. 2002, doi: 10.1088/0967-3334/23/3/301.
- [13] N. Teshima, J. Li, K. Toda, and P. K. Dasgupta, "Determination of acetone in breath," *Anal. Chim. Acta*, vol. 535, no. 1–2, pp. 189–199, Apr. 2005, doi: 10.1016/j.aca.2004.12.018.
- [14]. C. Wang, A. Mbi, and M. Shepherd, "A Study on Breath Acetone in Diabetic Patients Using a Cavity Ringdown Breath Analyzer: Exploring Correlations of Breath Acetone With Blood Glucose and Glycohemoglobin A1C," *IEEE Sens. J.*, vol. 10, no. 1, pp. 54–63, Jan. 2010, doi: 10.1109/jsen.2009.2035730.
- [15]...V. Saasa, T. Malwela, M. Beukes, M. Mokgotho, C.-P. Liu, and B. Mwakikunga, "Sensing Technologies for Detection of Acetone in Human Breath for Diabetes Diagnosis and Monitoring," *Diagnostics*, vol. 8, no. 1, p. 12, Jan. 2018, doi: 10.3390/diagnostics8010012.
- [16].....M. H. Zarifi, A. Gholidoust, M. Abdolrazzaghi, P. Shariaty, Z. Hashisho, and M. Daneshmand, "Sensitivity enhancement in planar microwave active-resonator using metal organic framework for CO₂ detection," *Sens. Actuators B Chem.*, vol. 255, pp. 1561–1568, Feb. 2018, doi: 10.1016/j.snb.2017.08.169.

- [17]. B. De Fonseca, J. Rossignol, D. Stuerga, and P. Pribetich, "Microwave signature for gas sensing: 2005 to present," *Urban Clim.*, vol. 14, pp. 502–515, Dec. 2015, doi: 10.1016/j.uclim.2014.10.010.
- [18]....F. Li, Y. Zheng, C. Hua, and J. Jian, "Gas Sensing by Microwave Transduction: Review of Progress and Challenges," *Front. Mater.*, vol. 6, May 2019, doi: 10.3389/fmats.2019.00101.
- [19]R. Yoo *et al.*, "Acetone-sensing properties of doped ZnO nanoparticles for breath-analyzer applications," *J. Alloys Compd.*, vol. 803, pp. 135–144, Sept. 2019, doi: 10.1016/j.jallcom.2019.06.254.
- [20]...A. Rydosz, E. Maciak, K. Wincza, and S. Gruszczynski, "Microwave-based sensors for exhaled acetone and ethanol detection," in *2018 International Conference on Electromagnetics in Advanced Applications (ICEAA)*, Cartagena des Indias: IEEE, Sept. 2018, pp. 32–34. doi: 10.1109/iceaa.2018.8520366.
- [21].X. Hao *et al.*, "Gas sniffer (YSZ-based electrochemical gas phase sensor) toward acetone detection," *Sens. Actuators B Chem.*, vol. 278, pp. 1–7, Jan. 2019, doi: 10.1016/j.snb.2018.09.025.
- [22].....K. Staszek, A. Szkudlarek, M. Kawa, and A. Rydosz, "Microwave system with sensor utilizing GO-based gas-sensitive layer and its application to acetone detection," *Sens. Actuators B Chem.*, vol. 297, p. 126699, Oct. 2019, doi: 10.1016/j.snb.2019.126699.
- [23]. .M. Palandoken *et al.*, "Novel Microwave Fluid Sensor for Complex Dielectric Parameter Measurement of Ethanol–Water Solution," *IEEE Sens. J.*, vol. 23, no. 13, pp. 14074–14083, July 2023, doi: 10.1109/JSEN.2023.3276817.

- [24]....A. J. A. Al-Gburi *et al.*, “A Miniaturized and Highly Sensitive Microwave Sensor Based on CSRR for Characterization of Liquid Materials,” *Materials*, vol. 16, no. 9, p. 3416, Apr. 2023, doi: 10.3390/ma16093416.
- [25]....J. Ma, J. Tang, K. Wang, L. Guo, Y. Gong, and S. Wang, “Complex Permittivity Characterization of Liquid Samples Based on a Split Ring Resonator (SRR),” *Sensors*, vol. 21, no. 10, p. 3385, May 2021, doi: 10.3390/s21103385.
- [26]A. Yasin, N. Gogosh, S. I. Sohail, S. M. Abbas, M. F. Shafique, and A. Mahmoud, “Relative Permittivity Measurement of Microliter Volume Liquid Samples through Microwave Filters,” *Sensors*, vol. 23, no. 6, p. 2884, Mar. 2023, doi: 10.3390/s23062884.
- [27]....M. H. Zarifi, A. Sohrabi, P. M. Shaibani, M. Daneshmand, and T. Thundat, “Detection of Volatile Organic Compounds Using Microwave Sensors,” *IEEE Sens. J.*, vol. 15, no. 1, pp. 248–254, Jan. 2015, doi: 10.1109/jsen.2014.2345477.
- [28]...J. Muñoz-Enano *et al.*, “Planar Phase-Variation Microwave Sensors for Material Characterization: A Review and Comparison of Various Approaches,” *Sensors*, vol. 21, no. 4, p. 1542, Feb. 2021, doi: 10.3390/s21041542.
- [29]R. Yoo *et al.*, “Acetone-sensing properties of doped ZnO nanoparticles for breath-analyzer applications,” *J. Alloys Compd.*, vol. 803, pp. 135–144, Sept. 2019, doi: 10.1016/j.jallcom.2019.06.254.
- [30]...A. Ebrahimi *et al.*, “Highly Sensitive Phase-Variation Dielectric Constant Sensor Based on a Capacitively-Loaded Slow-Wave Transmission Line,” *IEEE Trans. Circuits Syst. Regul. Pap.*, vol. 68, no. 7, pp. 2787–2799, July 2021, doi: 10.1109/TCSI.2021.3074570.

- [31].J. Coromina *et al.*, “Capacitively-Loaded Slow-Wave Transmission Lines for Sensitivity Improvement in Phase-Variation Permittivity Sensors,” in *2020 50th European Microwave Conference (EuMC)*, Utrecht, Netherlands: IEEE, Jan. 2021, pp. 491–494. doi: 10.23919/EuMC48046.2021.9338025.
- [32]. C. Damm, M. Schussler, M. Puentes, H. Maune, M. Maasch, and R. Jakoby, “Artificial transmission lines for high sensitive microwave sensors,” in *2009 IEEE Sensors*, Christchurch: IEEE, Oct. 2009, pp. 755–758. doi: 10.1109/ICSENS.2009.5398538.
- [33]...M. Gil, P. Velez, F. Aznar-Ballesta, J. Munoz-Enano, and F. Martin, “Differential Sensor Based on Electroinductive Wave Transmission Lines for Dielectric Constant Measurements and Defect Detection,” *IEEE Trans. Antennas Propag.*, vol. 68, no. 3, pp. 1876–1886, Mar. 2020, doi: 10.1109/TAP.2019.2938609.
- [34]..F. Martín, P. Vélez, J. Muñoz-Enano, and L. Su, *Planar microwave sensors*. Piscataway, NJ: IEEE Press, 2023. doi: 10.1002/9781119811060.
- [35]..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.
- [36].....K. Lichtenegger, “Die Herleitung des logarithmischen Mischungsgesetzes aus allgemeinen Prinzipien der stationären Stromung,” *Phys. Z.*, vol. 32, pp. 255–260, 1931.
- [37]..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.

- [38]..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.
- [39]. 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.
- [40]....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, Accessed: Apr. 06, 2025. [Online]. Available: <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1904RSPTA.203..385M>
- [41]...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.
- [42]. 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.
- [43].....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.
- [44]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.

- [45].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.
- [46].....A. H. Shivola, "Self-consistency aspects of dielectric mixing theories," *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, vol. 27, no. 4, pp. 403–415, July 1989, doi: 10.1109/36.29560.
- [47]....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.
- [48]. 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>
- [49].U. Hohm and K. Kerl, "Temperature dependence of mean molecular polarizability of gas molecules," *Mol. Phys.*, vol. 58, no. 3, pp. 541–550, June 1986, doi: 10.1080/00268978600101351.
- [50].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, July 2024, doi: 10.1007/s12596-023-01486-2.
- [51]...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.

- [52].....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.
- [53].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, Sept. 2012, doi: 10.1007/s10765-010-0838-1.
- [54]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, Sept. 2012, doi: 10.1007/s10765-011-1007-x.
- [55].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
- [56] 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.
- [57]S. Hasegawa and D. P. Stokesberry, "Automatic digital microwave hygrometer," *Rev. Sci. Instrum.*, vol. 46, no. 7, pp. 867–873, July 1975, doi: 10.1063/1.1134331.
- [58].....D. M. Pozar, *Microwave engineering*, 4th ed. Hoboken, NJ: Wiley, 2012.

- [59] H. A. Wheeler, "Transmission-Line Properties of Parallel Wide Strips by a Conformal-Mapping Approximation," *IEEE Trans. Microw. Theory Tech.*, vol. 12, no. 3, pp. 280–289, May 1964, doi: 10.1109/TMTT.1964.1125810.
- [60]....H. A. Wheeler, "Transmission-Line Properties of Parallel Strips Separated by a Dielectric Sheet," *IEEE Trans. Microw. Theory Tech.*, vol. 13, no. 2, pp. 172–185, Mar. 1965, doi: 10.1109/TMTT.1965.1125962.
- [61]...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.
- [62]. 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.
- [63]. M. Kirschning and R. H. Jansen, "Accurate model for effective dielectric constant of microstrip with validity up to millimetre-wave frequencies," *Electron. Lett.*, vol. 18, no. 6, pp. 272–273, Mar. 1982, doi: 10.1049/el:19820186.
- [64] M. Kirschning and R. H. Jansen, "Accurate Wide-Range Design Equations for the Frequency-Dependent Characteristic of Parallel Coupled Microstrip Lines," *IEEE Trans. Microw. Theory Tech.*, vol. 32, no. 1, pp. 83–90, Jan. 1984, doi: 10.1109/TMTT.1984.1132616.
- [65]. .M. Kobayashi, "A dispersion formula satisfying recent requirements in microstrip CAD," *IEEE Trans. Microw. Theory Tech.*, vol. 36, no. 8, pp. 1246–1250, Aug. 1988, doi: 10.1109/22.3665.

- [66].R. Garg and I. Bahl, *Microstrip lines and slotlines*, Fourth edition. Boston London: Artech House, 2025.
- [67]. J. Svacina, “A simple quasi-static determination of basic parameters of multilayer microstrip and coplanar waveguide,” *IEEE Microw. Guid. Wave Lett.*, vol. 2, no. 10, pp. 385–387, Oct. 1992, doi: 10.1109/75.160115.
- [68]....J. Svacina, “Analysis of multilayer microstrip lines by a conformal mapping method,” *IEEE Trans. Microw. Theory Tech.*, vol. 40, no. 4, pp. 769–772, Apr. 1992, doi: 10.1109/22.127530.dos