cbecimat26
26° Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais
22 a 26 de novembro de 2026
Costão do Santinho
Florianópolis-SC

MceMef32-001 - Investigação da discriminação de VOCs em baixas concentrações baseada em respostas dinâmicas utilizando sensores de SnO_2 nanoparticulado

Felipe Hiroshi Mashiba; Ken Watanabe; Koichi Suematsu
Interdisciplinary Graduate School of Engineering Sciences, Kyushu University

Introdução

O SnO_2 nanoparticulado é um semicondutor cuja condutividade elétrica é influenciada por reações superficiais envolvendo espécies de oxigênio adsorvidas.

Sensores de gás baseados nesse material têm potencial para detectar compostos orgânicos voláteis (VOCs) no ar expirado, contribuindo para o desenvolvimento de métodos de diagnóstico de doenças. Entretanto, a baixa seletividade dificulta a distinção entre VOCs com reatividade semelhante.

A modulação de temperatura permite explorar diferenças na cinética das reações superficiais por meio da evolução temporal da resposta elétrica.

Objetivos

Investigar a discriminação de VOCs em baixas concentrações utilizando sensores de SnO_2 nanoparticulado sob modulação de temperatura.

Metodologia

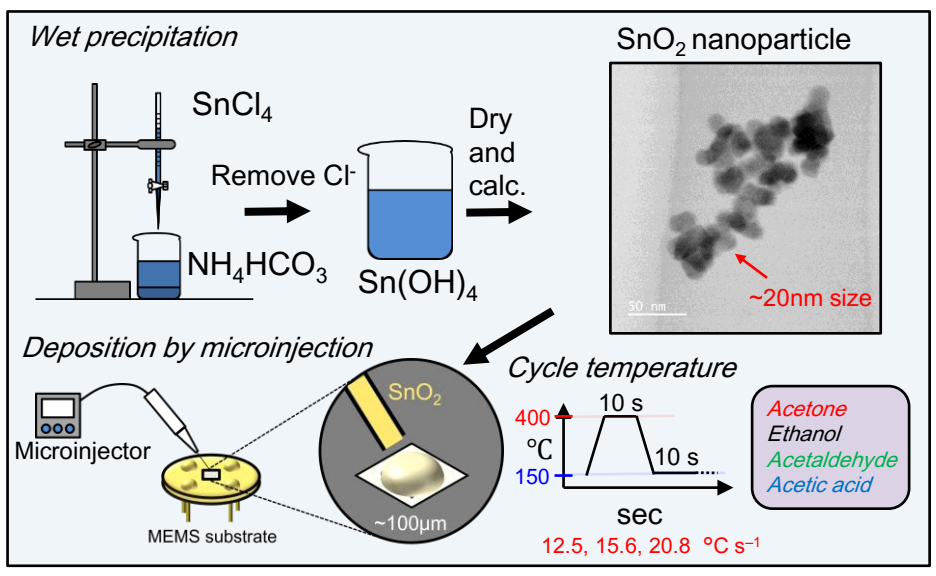


Figura 1 - Síntese de SnO_2 e fabricação do sensor.

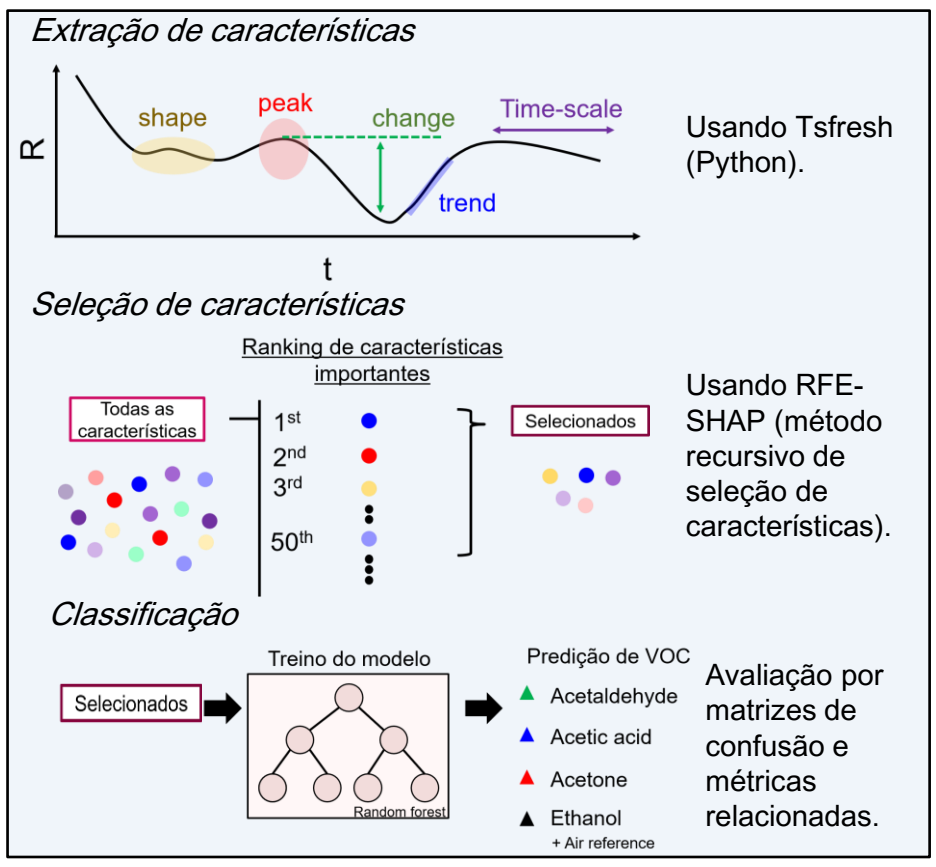


Figura 2 – Método para classificação de gases.

Resultados e Discussão

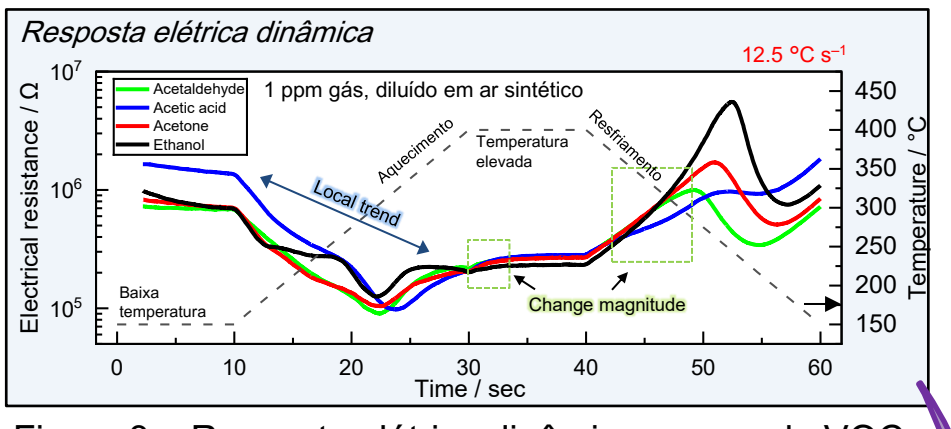


Figura 3 – Resposta elétrica dinâmica para cada VOC.

As características de tendência (trend) e de variação (change) foram as mais relevantes, principalmente nas etapas de aquecimento, de temperatura elevada e de resfriamento.

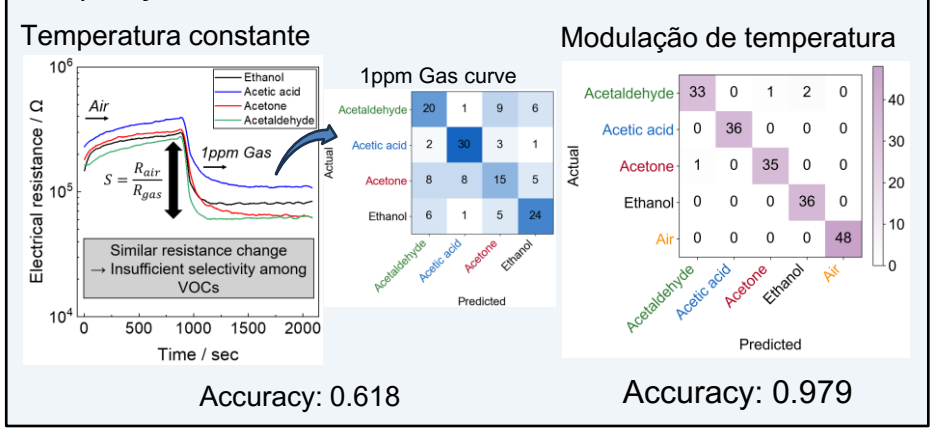


Figura 4 – Matrizes de confusão e suas métricas.

A acurácia de 97,9% sugere que a análise das respostas elétricas dinâmicas pode contribuir para aprimorar a seletividade dos sensores de gás, favorecendo a discriminação entre diferentes VOCs.

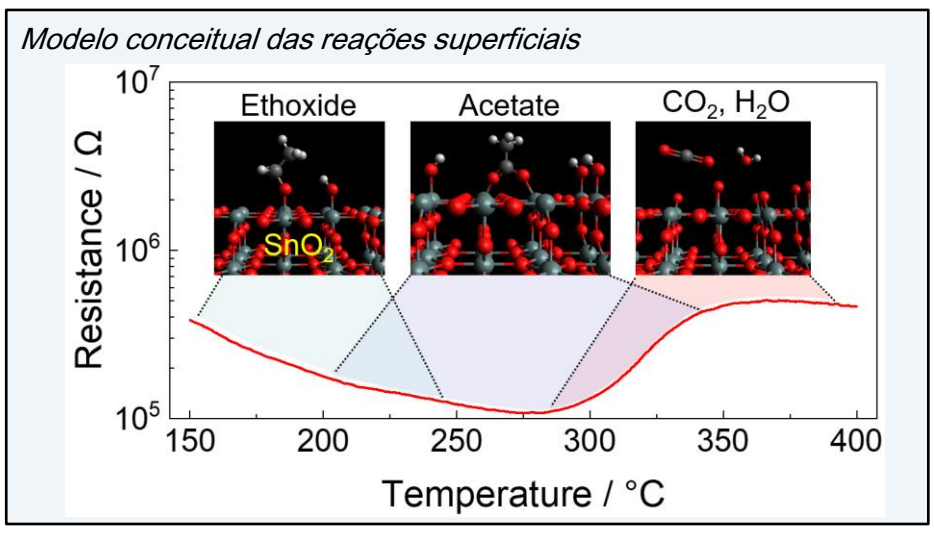


Figura 5 – Mecanismo proposto para a resposta dinâmica (com base em FT-IR in situ e TPR-QMS).

A evolução da cobertura superficial e da cinética das reações em função da temperatura pode contribuir para as variações na resistência elétrica ao longo do ciclo de modulação.

Conclusões

A análise das respostas elétricas dinâmicas permitiu discriminar quatro VOCs com acurácia de 97,9%, demonstrando o potencial da modulação de temperatura para aprimorar a seletividade dos sensores de SnO_2. A análise das reações superficiais auxilia na interpretação físico-química dessas respostas.

Referências

CHRIST, Maximilian; BRAUN, Nils; NEUFFER, Julius; KEMPA-LIEHR, Andreas W. Time Series FeatuRe Extraction on basis of Scalable Hypothesis tests (tsfresh – A Python package). *Neurocomputing*, v. 307, p. 72–77, 2018.

HUANG, Jing; PENG, Yang; HU, Lin. A multilayer stacking method base on RFE-SHAP feature selection strategy for recognition of driver's mental load and emotional state. *Expert Systems with Applications*, v. 238, parte B, art. 121729, 2024.

LEE, Andrew P.; REEDY, Brian J. Temperature modulation in semiconductor gas sensing. *Sensors and Actuators B: Chemical*, v. 60, n. 1, p. 35–42, 1999.