

Міністерство освіти і науки України  
Харківський національний університет радіоелектроніки

Факультет \_\_\_\_\_ Електронної та біомедичної інженерії \_\_\_\_\_  
(повна назва)

Кафедра \_\_\_\_\_ Мікроелектроніки, електронних приладів та пристроїв \_\_\_\_\_  
(повна назва)

## КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА Пояснювальна записка

Рівень вищої освіти \_\_\_\_\_ другий (магістерський) \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_ Дослідження сенсора на основі резонатора в режимі шепочучої галереї  
\_\_\_\_\_ для діелектрометрії в Ка-діапазоні \_\_\_\_\_  
(тема)

Виконав:

студент 2 курсу, групи \_\_\_\_\_ ЕПІМ-22-1 \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_ Чекубашева В.А. \_\_\_\_\_

(прізвище, ініціали)

Спеціальність \_\_\_\_\_ 171 – Електроніка \_\_\_\_\_

(код і повна назва спеціальності)

Тип програми \_\_\_\_\_ освітньо-професійна \_\_\_\_\_

(освітньо-професійна або освітньо-наукова)

Освітня програма \_\_\_\_\_ Електронні прилади та  
пристрої \_\_\_\_\_

(повна назва освітньої програми)

Керівник \_\_\_\_\_ доц. каф. МЕЕПІ. Глухов О.В. \_\_\_\_\_

(посада, прізвище, ініціали)

Допускається до захисту

Зав. кафедри

\_\_\_\_\_ (підпис)

\_\_\_\_\_ (прізвище, ініціали)

2024 р.

## Харківський національний університет радіоелектроніки

Факультет Електронної та біомедичної інженерії  
(повна назва)Кафедра Мікроелектроніки, електронних приладів та пристроїв  
(повна назва)Рівень вищої освіти другий (магістерський)Спеціальність 171 Електроніка  
(код і повна назва)Тип програми освітньо-професійна  
(освітньо-професійна або освітньо-наукова)Освітня програма Електронні прилади та пристрої  
(повна назва)

ЗАТВЕРДЖУЮ:

Зав. кафедри \_\_\_\_\_  
(підпис)

« \_\_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20 \_\_\_\_ р.

**ЗАВДАННЯ**  
НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУстудентові Чекубашевій Валерії Андріївні  
(прізвище, ім'я, по батькові)1. Тема роботи Дослідження сенсора на основі резонатора в режимі шепочучої галереї для діелектрометрії в Ка-діпазонізатверджена наказом університету від 24 листопада 2023 р. № 1392 Ст

2. Термін подання студентом роботи до екзаменаційної комісії \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

3. Вихідні дані до роботи набір порошків Sigma Aldrich 16 амінокислот, діелектричний резонатор, 2 тefлонових хвилеводів, температурний PID регулятор Covesion TC M P 5A, аналізатор спектру Keysight 8722C, Agilent Technologies N5230A, датчик ємності NA503, програмне забезпечення COMSOL Multiphysics, програмне забезпечення для зіставлення експериментальних даних з калібрувальними номограмами, виконане мовою Python

4. Перелік питань, що потрібно опрацювати в роботі \_\_\_\_\_

1) розробити модель резонатора з чипом з мікрофлюїдним каналом з використанням програмного забезпечення COMSOL Multiphysics та розрахувати калібрувальні номограми;2) знайти аналітичну функцію підгонки для несиметричних резонансів;3) з використанням фізичного обладнання провести експериментальні вимірювання діелектричної провідності амінокислот;4) проаналізувати отримані результати та зіставити їх з теоретичною моделлю

5. Перелік графічного матеріалу із зазначенням креслеників, схем, плакатів, комп'ютерних ілюстрацій (п.5 включається до завдання за рішенням випускової кафедри):

1) мультимедійна презентація;

2) графіки залежності діелектричної проникності амінокислот від концентрації;

3) графіки залежності діелектричної проникності амінокислот від частоти;

4) графіки залежності діелектричної проникності амінокислот від молярної маси

### КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№	Назва етапів роботи	Терміни виконання етапів роботи	Примітка
1	Аналіз технічного завдання	27.11.23 – 29.11.23	Виконано
2	Аналітичний огляд джерел	30.11.23 – 05.11.23	Виконано
3	Оформлення пояснювальної записки	06.11.23 – 25.11.23	Виконано
4	Підготовка комп'ютерної моделі за допомогою програмного пакету COMSOL Multiphysics	20.11.23 – 30.11.23	Виконано
5	Налаштування та тестування вимірювального обладнання	01.12.23 – 05.12.23	Виконано
6	Проведення експерименту	05.12.23 – 20.12.23	Виконано
7	Оформлення креслеників	21.12.23 – 25.12.23	Виконано
8	Підготовка презентації	25.12.23 – 30.12.23	Виконано
9	Рецензування, нормоконтроль	02.01.24 – 10.01.24	Виконано
10	Захист роботи	11.01.2024	Виконано

Дата видачі завдання 27 листопада 2023 р.

Студент \_\_\_\_\_  
(підпис)

Керівник роботи \_\_\_\_\_  
(підпис) (посада, прізвище, ініціали)

## РЕФЕРАТ

Пояснювальна записка містить 56 с.; 24 рисунків; 5 таблиць; 5 додатків; 25 джерел.

РЕЗОНАТОР МШГ; КОАКСІАЛЬНИЙ ЗОНД; РЕЛАКСАЦІЙНІ ПРОЦЕСИ; МІЛІМЕТРОВІ ХВИЛІ; КА-ДІАПАЗОН, ДІЕЛЕКТРИЧНА ПРОНИКНІСТЬ; АМІНОКИСЛОТИ

Об'єкт дослідження: діелектрометрія біологічних рідин

Предмет дослідження: характеристики одиничного діелектричного резонатора у режимі мод шепочучої галереї.

Мета роботи: вдосконалити існуючі методи діелектрометрії за допомогою резонатора в режимі мод шепочучої галереї для проведення вимірювань одночасно на шести резонансних частотах.

Методи дослідження: математичне моделювання діаграми Коула-Коула, моделювання з використанням програмного забезпечення COMSOL Multiphysics, експеримент, вимірювання діелектричних характеристик, порівняння розрахованих результатів з літературними джерелами.

Апаратура: температурний PID регулятор Coversion TC M P 5A, пара дзеркальних тefлонових хвилеводів та діелектричний резонатор, аналізатор спектру Keysight 8722C, Agilent Technologies N5230A, датчик ємності NA503, програмне забезпечення, розроблене мовою Python.

Актуальність: Ка-діпазон представляє перспективи для вивчення релаксації різноманітних молекул, проте досі актуальним залишається питання діелектрометрії біологічних рідин в цих частотах, особливо для дослідження розчинів ДНК. Тому було використано метод для високочутливих вимірювань різних розчинів, чия концентрація співставна з концентраціями у тілі людини.

Галузь застосування: медицина, харчова промисловість, наукова дослідницька діяльність, пов'язана з вивченням структури, форми та функцій молекул.

## ABSTRACT

The explanatory note contains 56 pages; 24 figures; 5 tables; 5 applications; 25 sources.

WGM RESONATOR; COAXIAL PROBE; RELAXATION PROCESSES; MILLIMETER WAVES; KA-BAND, DIELECTRIC CONSTANT; AMINO ACIDS.

Research object: dielectrometry of biological fluids.

The subject of research: characteristics of a single dielectric whispering gallery mode resonator.

The purpose of the work: to improve the existing methods of dielectrometry using a WGM resonator for simultaneous measurements at six resonance frequencies.

Research methods: mathematical Cole-Cole fitting, simulation using COMSOL Multiphysics software, experiment, measurement of dielectric characteristics, comparison of calculated results with literature sources.

Equipment: temperature PID controller Covesion TC M P 5A, dielectric resonator and a pair of mirror teflon waveguides, Keysight 8722C spectrum analyzer, Agilent Technologies N5230A, capacitance sensor NA503, software developed in Python.

Relevance: The Ka range presents prospects for the study of Debye relaxation processes of various molecules, however, the issue of dielectrometry of biological fluids at these frequencies remains relevant, especially for the study of DNA solutions. Therefore, a method was improved for highly sensitive measurements of various solutions, the concentration of which is comparable to the concentrations of these substances in the human body.

Field of application: medicine, food industry, scientific research activities related to the study of the structure, form and functions of molecules.

## ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ, СИМВОЛІВ, ОДИНИЦЬ, СКОРОЧЕНЬ І ТЕРМІНІВ	7
ВСТУП	8
1 ТЕОРЕТИЧНІ ЗАСАДИ	10
1.1 Система рівнянь Максвелла	10
1.2 Теоретична модель діелектричної проникності рідин	13
1.4 Дипольна поляризація	17
1.5 Релаксація Дебая для декількох речовин	20
1.6 Діелектричні властивості амінокислот	24
1.7 Використання МШГ резонатору для діелектрометрії рідин	26
2 МОДЕЛЮВАННЯ ХАРАКТЕРИСТИК КВАРЦЕВОГО РЕЗОНАТОРА	32
3 ВИМІРЮВАЛЬНЕ ОБЛАДНАННЯ	40
4 АНАЛІЗ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНО ОТРИМАНИХ РЕЗУЛЬТАТІВ	45
ВИСНОВКИ	52
ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ	54
ДОДАТОК А	57
ДОДАТОК Б	59
ДОДАТОК В	77
ДОДАТОК Г	85
ДОДАТОК І	103

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ, СИМВОЛІВ, ОДИНИЦЬ, СКОРОЧЕНЬ І  
ТЕРМІНІВ

HEM – hybrid electromagnetic, гібридний електромагнітний;

TC – temperature controller, температурний контролер;

TE – transverse electric, поперечна електрична;

TEM – transverse electromagnetic, поперечна електромагнітна;

TM – transverse magnetic, поперечні магнітні;

МК – мікрофлюїдний канал;

МШГ – моди шепочучої галереї.

## ВСТУП

Електромагнітні хвилі є звичайним інструментом для спектроскопічного дослідження твердого тіла, рідких та газоподібних матеріалів з широким спектром застосувань у фізиці, хімії та для систем безпеки, процесу та контролю якості та перевірки харчових продуктів і фармацевтичної продукції. Дослідження діелектричних властивостей молекулярних систем дозволяє вивчати їх будову та фізичні властивості завдяки теорії поляризації діелектрика та величинам, які характеризують міжмолекулярну взаємодію всередині речовини.

Застосовуючи методи діелектрії можна вивчати властивості речовин у широкому спектрі, починаючи від найнижчих діапазонів на кілогерцевих частотах до гамма-випромінювання. У випадку молекулярних зразків смуги частот від кілогерців до гігагерців у поєднанні з магнітними полями дають структурну інформацію за допомогою спектроскопії ядерного магнітного резонансу. Інфрачервона та комбінаційна спектроскопія дають детальну інформацію про окремі хімічні зв'язки [1], оптична та УФ-спектроскопія про електронні збудження переважно для окремих атомів, а рентгенівські промені – про середні атомні номери, масову густину та молекулярну структуру [2]. Діапазон від приблизно одного гігагерца до кількох терагерців є дуже специфічним для колективних збуджень речовини, адже спостереження за колективними модами коливань молекулярних твердих тіл розкриває деталі молекулярної структури та хімічних зв'язків [3].

Враховуючи властивості сигналів, їх інформативність, проникливість та інші характеристики, особливу перспективу використання має зокрема діапазон міліметрових хвиль, який охоплює смугу частот від 20 ГГц до 300 ГГц. Найбільш чутливими методиками для такого роду аналізу є резонансні методи. Вимірювання на численних резонансах було б важливо виконувати в мікрохвильовій області з огляду на різноманітні релаксаційні процеси, які

можуть спостерігатися у цій області. Однак раніше відстань між власними частотами резонаторів на найнижчих модах перешкоджала таким дослідженням. Тому ці вимірювання, як правило, були неприйнятні для дослідницьких цілей. Дана робота спрямована на те, щоб продемонструвати можливість проведення досліджень для ряду мод зі значно меншим інтервалом частот (близько 2 ГГц у цій роботі) за допомогою резонаторів в режимі мод шепочучої галереї (МШГ). Однак зв'язок має бути налаштований таким чином, щоб він став симетричним до резонансної лінії, щоб аналізувати його з частотною смугою на рівні -3 дБ або за допомогою підгонки функції Лоренца. Зміна зв'язку під час дослідження окремого об'єкта потребує додаткового часу та збільшує похибку вимірювання.

У першій частині даної роботи описано основні принципи взаємодії електромагнітного поля з біологічними рідинами. Досліджено, які релаксаційні процеси та чому відбуваються з диполями речовин у діапазоні частот, які представляють зону інтересу.

У другій частині роботи описані основні етапи моделювання та розрахунків номограм для визначення діелектричної проникності рідин на шести частотах з використанням програмного пакету COMSOL Multiphysics, модуля Radiofrequencies.

У третій частині описано процес розробки вимірювального обладнання, програмного забезпечення та етапи проведення експерименту.

У четвертій частині отримані результати були проаналізовані та на основі них створено план досліджень на майбутнє.

Усі вимірювання проводилися на базі дослідницького інституту Forschungszentrum Jülich, Institute of Biological Information Processing, Bioelectronics у складі групи Electronic sensors та у співпраці з Інститутом радіофізики та електроніки ім. О.Я. Усикова, відділом радіофізики твердого тіла.

## 1 ТЕОРЕТИЧНІ ЗАСАДИ

В діапазоні НВЧ довжина хвилі стає порівняною з розмірами сенсорів. Це приводить до того, що в рівняннях, якими описують електромагнітний стан системи, з'являються складові, що залежать від часу. Електромагнітне поле в таких системах уже не може вважатися квазістаціонарним, як на низьких частотах, а проявляється у формі хвиль [4].

Дослідження рідин електромагнітними хвилями мікро- та міліметрового діапазону смуг представляє велику проблему для фундаментального розуміння діелектриків та їхніх провідних властивостей. Будова їхніх молекулярних компонентів, міжмолекулярні зв'язки та електропровідність, індукована розчиненими іонами, виражається в частоті та температурній залежності складної діелектричної функції, яка містить багатий спектр інформації, включаючи різні процеси релаксації, орієнтаційну поляризацію молекул і частотну залежність іонної провідності.

Під діелектрометрією розуміють методи вимірювань, які базуються на визначенні діелектричної проникності та діелектричних втрат. Під дією електричного поля у речовині відбуваються зміни, які зворотно діють на зовнішнє електричне поле. У діелектрику позитивні та негативні заряди зв'язані між собою. Під дією зовнішнього поля речовина поляризується: центри позитивних та негативних зарядів взаємно зміщуються. Кожен елементарний об'єм середовища в цьому випадку може бути представлений наступним чином: на одній його грані знаходиться позитивний заряд, а на протилежній – негативний.

### 1.1 Система рівнянь Максвелла

Існування спектру електромагнітного випромінювання передбачив Дж.К. Максвелл, який визначив видиме світло як окремий випадок різновиду

електромагнітних хвиль в природі, які мають усі інші можливі частоти. Широко відома система рівнянь, запропонована Максвеллом. Тут наведено її вигляді у частинних похідних, які є загальною основою для опису поширення електромагнітних хвиль у середовищах:

$$\operatorname{rot} \vec{H} = \vec{j} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}, \quad (1.1)$$

$$\operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (1.2)$$

$$\operatorname{div} \vec{B} = 0, \quad (1.3)$$

$$\operatorname{div} \vec{D} = \rho, \quad (1.4)$$

де  $\vec{H}$  та  $\vec{E}$  – вектори напруженості магнітного та електричного поля відповідно;

$\vec{B}$  та  $\vec{D}$  – вектори магнітної та електричної індукції відповідно;

$\vec{j}$  – густина струму внаслідок переносу заряду;

$\rho$  – густина заряду.

Рівняння (1.1) відображає закон Ампера, і стверджує, що електричний струм та електричне змінне поле створюють магнітне поле. Рівняння (1.2) показує за допомогою закону Фарадея, як змінне у часі магнітне поле викликає вихрове електричне поле. Рівняння (1.3) та (1.4) є законами Гауса, і показують, що силові лінії магнітного поля замкнені, а джерелом електричного поля є заряди. Наведені рівняння є законами, які діють у середовищі, а не у вакуумі, а отже, ці макроскопічні величини описують властивості матеріалу, такі як електричні диполі, магнітні моменти, явище поляризації та рух зарядів.

Для того, щоб описати поляризацію діелектриків, необхідно ввести поняття вектору поляризованості, що чисельно дорівнює електричному моменту одиничного об'єму діелектрика та напрямку електричного поля всередині матеріалу. Ефективне електричне поле лінійного діелектричного середовища складається з електричного поля з напруженістю  $E$  та індукованої електричної поляризації  $P$ , і при цьому відносна діелектрична проникність діелектричного середовища становить  $\epsilon_r = 1 + \chi_e$  наступним чином:

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = \varepsilon_0 \vec{E} + \chi_e \varepsilon_0 \vec{E} = \varepsilon_0 (1 + \chi_e) \vec{E} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \vec{E}, \quad (1.5)$$

де  $\varepsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12}$  Ф/м – діелектрична проникність вакууму;

$\chi_e$  – діелектрична сприйнятливість середовища (тобто фізична величина, яка характеризує здатність речовини змінювати свою поляризацію під дією електричного поля).

Таким чином, поляризація кількісно характеризує міру електричного моменту в діелектрику і залежить як від значення електричного поля, так і від структурних особливостей (хімічного складу) цього діелектрика. Поляризованість тим більша, чим вища напруженість електричного поля.

Діелектричність (в рамках електромагнетики) є фундаментальною властивістю матеріалу, яка описує, як матеріал буде впливати і піддаватися впливу змінного в часі електромагнітного поля. Параметри діелектричної проникності часто розглядаються як комплексна функція прикладеного електромагнітного поля, оскільки комплексні числа дозволяють виразити величину і фазу. Фундаментальне рівняння комплексної проникності речовини ( $\varepsilon^*$ ) виглядає наступним чином:

$$\varepsilon^*(\omega) = \varepsilon'(\omega) - i\varepsilon''(\omega), \quad (1.6)$$

де  $\varepsilon'$  і  $\varepsilon''$  – дійсна та уявна складові, відповідно;

$\omega$  – радіальна частота (рад/с) і може бути перетворена в частоту за допомогою наступного рівняння:

$$\omega = 2\pi f. \quad (1.7)$$

Аналогічним образом можна представити і вираз для магнітної проникності середовища  $\mu^*(\omega)$ , але для ізотропного середовища це скалярна

величина, і в розрахунках вона представлена значенням магнітної константи  $\mu_0 = 1,256 \cdot 10^{-6} \text{ Н/А}^2$ .

Зокрема, реальні та уявні параметри, визначені в комплексному рівнянні проникності, описують, як матеріал буде накопичувати електромагнітну енергію і розсіювати цю енергію у вигляді тепла шляхом руху електронів, що несуть заряди відповідно. Реальна частина діелектричної проникності описує здатність матеріалу зберігати енергію, асоційовану з електричним полем, за рахунок поляризації. Уявна частина діелектричної проникності вказує на те, яка частина електричної енергії конвертується в тепло.

Для хвиль, що поширюються в ізотропному середовищі з втратами, узагальнений комплекс діелектричної проникності  $\eta^*$  також включає провідність матеріалу  $\sigma^* = \sigma'(\omega) - i\sigma''(\omega)$  (для біологічних рідин відносна проникність наближується до одиниці):

$$\eta^* = \varepsilon^*(\omega) - i \frac{\sigma^*}{\varepsilon_0 \omega} \quad (1.8)$$

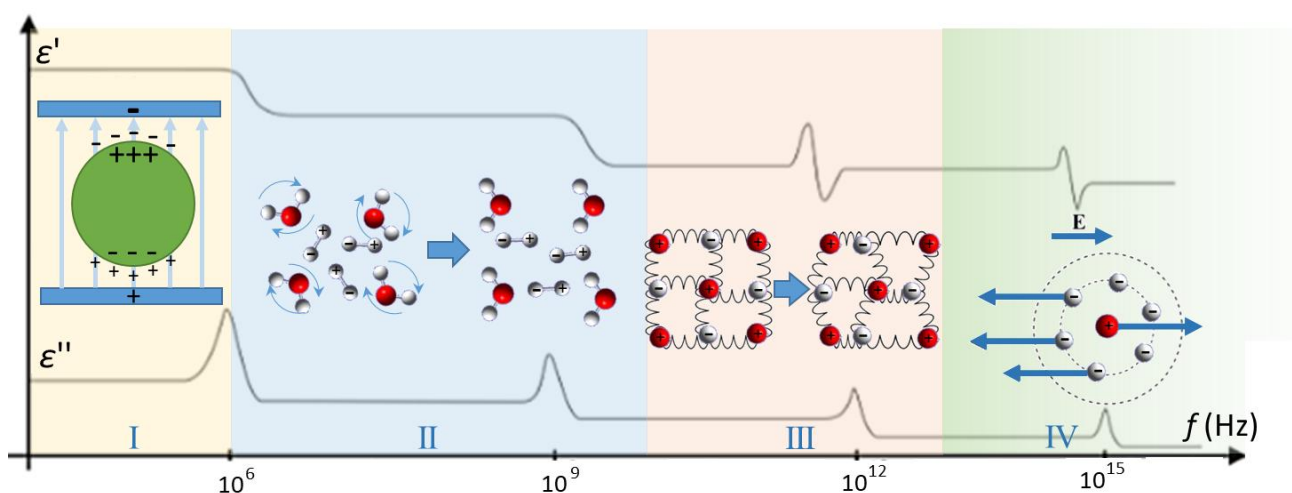
Дослідження частотної залежності діелектричної проникності покладено в основу діелектричної спектроскопії, яка дозволяє вивчити діелектричні властивості матеріалів (проникність та величина діелектричних втрат), релаксаційні процеси всередині матеріалу за рахунок зміни орієнтації молекул або диполів, а також структурні особливості речовин.

## 1.2 Теоретична модель діелектричної проникності рідин

Прикладене електромагнітне поле викликає зміщення вільних електричних зарядів у провіднику. В діелектрику не відбувається переміщення зв'язаних зарядів, що входять у склад кристалів і молекул, а тільки зміна їх орієнтації, що обумовлюється струмом зміщення. Відношення струму провідності до струму зміщення дорівнює величині тангенсу діелектричних

втрат  $tg\delta$  або відношенню уявної частини  $\varepsilon''$  до дійсної  $\varepsilon'$  частини комплексної діелектричної проникності  $\varepsilon^*$ .

Процеси, які впливають на реакцію матеріалу у змінному в часі електромагнітному полі, залежать від частоти та температури і, як правило, класифікуються як іонні, дипольні, вібраційні або електронні за своєю природою [5]. Ці процеси виділені як функція частоти на рис. 1.1. Іонні процеси відносяться до загального випадку, коли заряджений іон рухається вперед і назад у відповідь на змінне в часі електричне поле, в той час як дипольні процеси відповідають за деформацію молекул, які мають постійний електричний дипольний момент. Приклади вібраційних процесів включають молекулярні коливання (наприклад, симетричні та асиметричні) та пов'язані з ними коливальні стани обертання, які є активними в інфрачервоному діапазоні. Електронні процеси включають оптичне та ультрафіолетове поглинання та розсіювання явища, що спостерігається в діапазоні видимого ультрафіолетового випромінювання.



I – поляризація Максвелла-Вагнера; II – поляризація Дебая; III – атомна поляризація; IV – електронна поляризація

Рисунок 1.1 – Вплив різних типів поляризації на діелектричні параметри

На макроскопічному рівні індивідуальний електричний дипольний момент кожної молекули сприяє загальній електричній поляризації рідини.

Взаємодія змінного електричного поля з дипольними моментами кожної молекули визначає складну діелектричну функцію рідини. У випадку, коли рідина представлена лише одним видом молекул, макроскопічна поляризація пов'язана з дипольним моментом окремої молекули  $\vec{p}$ :

$$\vec{P} = N\langle\vec{p}\rangle, \quad (1.9)$$

де  $N$  – кількість молекул в об'ємі.

Час усереднення дипольного моменту є дуже важливою величиною, оскільки він передбачає статистичні ефекти теплового руху молекул і надає інформацію про шкалу часу молекулярної релаксації після переорієнтації, яка забезпечується прикладеним змінним електричним полем [7]. Електричний момент диполя реагує на електричне поле, і оскільки сила, що буде діяти на цей диполь, пропорційна електричному полю, маємо:

$$F = qE. \quad (1.10)$$

Саме під впливом цієї сили дипольна молекула розташовується в напрямку електричного поля, і новий електричний момент, який виникає, орієнтований уздовж нього. Це відбувається не моментально, і тому існує поняття часу релаксації – часу, необхідного молекулі для слідування за електричним полем або для повернення у вихідний стан при його вимкненні. Окрім цього, дипольний момент визначається різницею зарядів та відстанню між ними. У спрощеному випадку молекулярний дипольний момент двох ізольованих точок з протилежними зарядами, розділених вектором  $\vec{l}$ , описується таким виразом:

$$\vec{p} = q\vec{l}. \quad (1.11)$$

Поляризація компонентів матеріалу зумовлена модифікацією перерозподілу електричних зарядів під час застосування електричного поля. В постійному електричному полі поляризація не відбувається одразу за перемиканням електричного поля. Існує час відгуку або затримка, що відповідає діелектричній релаксації, викликаючи втрату енергії. Поляризація може бути обумовлена різними ефектами, такими як накопичення заряду на поверхнях матеріалів, що мають шари з різними значеннями діелектричної проникності (міжфазна поляризація), дипольна орієнтація, атомна та електронна поляризації. Кожен із цих ефектів сприяє загальному значенню діелектричної проникності та відповідає за явище релаксації, яке має місце до терагерцового діапазону, та явище резонансу, що відбувається на частотах вище ТГц.

З огляду на рис. 1 представлені чотири типи поляризації. При низькій частоті вони сприяють високому значенню діелектричної проникності. Коли частота зростає, внески кожного типу поляризаційних явищ зникають, а потім відбувається зменшення діелектричної проникності. Перший вид поляризації, який називається міжфазною поляризацією, так званий ефект Максвелла-Вагнера, з'являється на низьких частотах ( $<10^6$  Гц). Цей тип поляризації виникає в гетерогенному матеріалі. Він походить від обмеженого зміщення вільних зарядів та їхнього накопичення на міжфазних ділянках або на кордонах між різними фазами, що утворюють матеріал, коли ці різні фази мають різні значення діелектричної проникності [6]. Це явище характерне для твердих і рідких діелектриків, особливо з неоднорідною або аморфною структурою.

Орієнтація диполя, також звана поляризацією Дебая, передбачає орієнтацію полярних молекул під дією електричного поля з високою частотою (від  $10^6$  до  $10^{10}$  Гц – зона I на рис. 1). У відсутності електричного поля диполі випадково розташовані, але в умовах прикладення поля вони можуть вирівнюватися у його напрямку. Цей тип поляризації в основному зумовлений обертанням амінокислот, обертанням заряджених бічних груп білків і релаксацією води, яка взаємодіє з білками. Ці молекули мають асиметричний

тип, де центр тяжіння, що виникає внаслідок негативних зарядів такої молекули, не збігається з центром позитивних зарядів. При застосуванні змінного електричного поля та через в'язкість середовища молекули не можуть миттєво зорієнтуватися, коли на них діють сили Дебая (такі як сили в'язкості). З цього випливає, що вторинна структура, а також диполі, що знаходяться в білку, будуть зазнавати впливу частоти електричного поля. Залежно від структури матеріалу і сил взаємодії, тобто сил Ван-дер-Ваальса, водневих зв'язків, ковалентних зв'язків і гідрофобних взаємодій, вплив поля може змінюватися, особливо на динаміку релаксації білка. Зі збільшенням частоти вторинна структура менше піддається впливу електричного поля, впливаючи сильніше на більш дрібні елементи, такі як диполі.

Атомна поляризація (або іонна) є результатом зміщення атомів, пов'язаних іонними зв'язками ( $10^{10}$ – $10^{13}$  Гц). Валентні електрони рухаються навколо орбіт, спільних з іншими атомами, створюючи таким чином індукований диполь. Цей індукований диполь дотримується орієнтації електромагнітного поля, але також враховує динаміку релаксації [5]. Іонні зв'язки зустрічаються в неорганічних твердих діелектричних матеріалах із кристалічною структурою, наприклад, керамічних матеріалах. Цей вид поляризації добре спостерігається за приблизно  $10^{-13}$  с [5].

Електронна поляризація присутня у всіх типах діелектричних матеріалів ( $>10^{13}$  Гц). Вона є результатом зовнішнього електронного зміщення орбіти порівняно з атомним ядром. Атомна, а також електронна поляризація створюють диполі, які не викликають втрати енергії та зникають, як тільки електричне поле припиняється.

Різні види поляризації, які виникають у діелектричному матеріалі під впливом електромагнітного поля, підтверджують, що в білку та амінокислотах, механізми поляризації в основному мають дипольну орієнтацію (тип Дебая).

#### 1.4 Дипольна поляризація

На відміну від твердих тіл, молекули рідин мають ступінь свободи обертання та складаються з полярних молекул, таких як вода. Тому явища релаксації відбуваються на мікрохвильових частотах, які є дуже специфічними для молекулярного складу окремої рідини. Усі рідини мають діелектричні властивості, але деякі з них також проявляють провідні. Якщо розглядати непровідні рідини, тобто рідини з незначним впливом провідних іонів, узагальнену комплексну діелектричну проникність можна представити лише комплексною проникністю  $\varepsilon^*(\omega)$  (формула (1.8)), нехтуючи внеском провідності  $\sigma^*(\omega)$  [7].

Дипольний момент молекули спричиняє такі фізичні ефекти, як розтягування (стискання та згинання хімічних зв'язків) і обертання.

Якщо молекули мають асиметричну форму або вони задіяні у взаємодії з іншими молекулами, вони можуть розтягуватися за напрямком поля. Поляризація тільки по розтягненню відбувається для неполярних молекул. Неполярні молекули – це молекули, у яких центри тяжіння негативного і позитивного зарядів знаходяться в одній точці. За відсутності прикладеного поля неполярні молекули не мають дипольного моменту. Без зовнішнього поля у рідині такі молекули орієнтовані випадковим чином, а при прикладенні – вони окрім розтягування будуть також зазнавати обертання.

На противагу такому ефекту, у полярних молекул (наприклад, у води), які мають постійний дипольний момент внаслідок нерівномірного природного розподілу електронів, через асиметричну структуру центри тяжіння негативних і позитивних зарядів знаходяться не в одному місці, а отже, існує постійний розподіл заряду всередині такої молекули.

Однак, якщо молекули мають постійний дипольний момент, ці молекули будуть прагнути переорієнтуватися в прикладеному полі. Вирівнювання диполів буде порушено тепловим рухом, який має тенденцію до рандомізації орієнтації диполів. Це відбувається внаслідок того, що орієнтації диполів за напрямком поля будуть протидіяти зіткнення з іншими диполями, і цей процес активізується вільною енергією води  $kT$ . Оскільки диполі увесь час

перебувають у русі, то вони містять теплову енергію, а отже, і досить велике значення ентропії  $\Delta S$  [8]. Насправді електричне поле індукує лише малу частину середньої орієнтації в напрямку поля – більшу частину часу окремих диполь може бути орієнтований в будь-якому напрямку. Але загальне значення ентропії при прикладенні поля все одно зменшується внаслідок прагнення диполів до внормованості вектору.

Окрім цього, зміна ентропії має під собою на увазі різницю між початковим та кінцевим станом системи. Також вона визначається величиною  $\Delta Q/T$ , де  $\Delta Q$  – кількість теплоти, переданої системі. Узагальнено можна сказати, що температура впливає на теплові рухи молекул.

В той самий час під дією електричного поля внаслідок переорієнтації диполів ентальпія  $\Delta H$  також буде зазнавати змін. Оскільки внутрішня енергія системи включає в себе кінетичну та потенційну енергії молекул, перерозташування буде впливати на їхню потенційну енергію, в отже, і на внутрішню енергію системи. Зміна внутрішньої ентальпії системи буде пов'язана з роботою, яку вона виконує під час орієнтації молекул, а також з тим, що вона отримує енергію від зовнішнього поля.

Загальний вигляд для зміни енергії в системі представлено рівнянням Гіббса:

$$\Delta E = \Delta H - T \cdot \Delta S. \quad (1.12)$$

Окрім цього, орієнтаційна поляризація з огляду на вплив електричного поля та температури може бути виражена за допомогою рівняння орієнтаційної теорії поляризації Дебая:

$$P = \frac{Np^2E}{3k_B T}, \quad (1.13)$$

де  $N$  – концентрація дипольних молекул;

$k_B = 1,38 \cdot 10^{-23}$  Дж/К – константа Больцмана.

А з огляду на те, що диполу потрібен певний час для повороту та переорієнтації, релаксаційний час Дебая можна виразити наступним чином:

$$\tau = \frac{4\pi\eta a^3}{k_B T}, \quad (1.14)$$

де  $a$  – радіус сферичних молекул з в'язкістю  $\eta$ .

При низьких температурах час релаксаційних дипольних молекул великий через високу в'язкість полярного діелектрика і малу теплову рухливість молекул. З підвищенням температури час релаксації зменшується, оскільки в'язкість зменшується, і молекулярна орієнтація послаблюється. Це призводить до збільшення інтенсивності дипольно-релаксаційної поляризації, яка після проходження максимуму знову зменшується зі зворотною температурою внаслідок теплового руху молекул. Для чистої води частотна залежність комплексної діелектричної проникності води може бути описана співвідношенням Дебая.

### 1.5 Релаксація Дебая для декількох речовин

Найпростішою моделлю для опису релаксаційного процесу для дипольної поляризації є теорія Дебая [9], яка розглядає тепловий ансамбль молекул в умовах вимкнення прикладеного електричного поля. Тут аналізується рівняння дифузії в сферичних координатах і шляхом лінеаризації підтверджується, що середній момент експоненційно зменшується з часом:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty}{1 + i\omega\tau}, \quad (1.15)$$

де  $\varepsilon_\infty$  – значення діелектричної провідності при нескінченності частоти,

$\varepsilon_0$  – статична діелектрична проникність. Графічно це представлено на рис. 1.2.

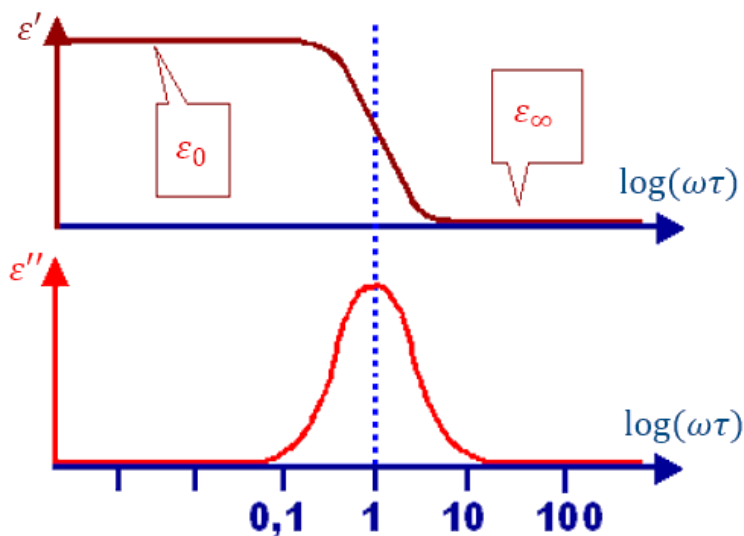


Рисунок 1.2 – Графіки уявної та дійсної частини для релаксації Дебая

Розділення комплексної діелектричної проникності (1.15) на уявну та реальну частини виглядає наступним чином:

$$\varepsilon'(\omega) = \varepsilon_{\infty} + \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_{\infty}}{1 + \omega^2 \tau^2}, \quad (1.16)$$

$$\varepsilon''(\omega) = (\varepsilon_0 - \varepsilon_{\infty}) \cdot \frac{\omega \tau}{1 + \omega^2 \tau^2}. \quad (1.17)$$

Для водних розчинів, де утворився виражений релаксаційний пік за рахунок орієнтаційної поляризації молекулярного диполя молекулою води, що призводить до сильного поглинання на всьому мікро- та міліметровому діапазоні хвиль [6], спостерігаються відхилення від властивостей чистої дистильованої води – як найбільш відповідної еталонної рідини [7], – дуже специфічні для розчинених діелектриків. Окрім цього, на результати діелектрометрії сильний вплив спричиняє концентрація розчиненої речовини.

Проте часто отримані результати для розчинів важко пояснити за допомогою лише рівняння Дебая. Молекули у розчині мають різні розміри, концентрацію, заряд тощо. Існує кілька різних підходів до обліку недебаївської

поведінки, наприклад увесь релаксаційний процес можна представити як суперпозицію процесів різних молекул [12]:

$$\varepsilon^*(\omega) = \varepsilon_\infty + (\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{L(\tau)}{1 + (i\omega\tau)^\alpha} d \ln \ln \tau, \quad (1.18)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} L(\tau) d \ln \ln \tau = 1.$$

Окрім цього, можна використовувати різноманітні емпіричні розширення, такі як моделі Коула-Коула [13], Коула-Девідсона [14], Гавриляка-Негамі [15] тощо (рис. 1.3). Вони відрізняються додатковими коефіцієнтами  $\alpha$  та  $\beta$ , які вводять для кращої підгонки результатів, що зрештою впливає на загальний вигляд функції. Найчастіше у випадку опису релаксації Дебая використовують рівняння Коула-Коула, яке допомагає моделювати поведінку діелектричної проникності речовини як функції частоти.

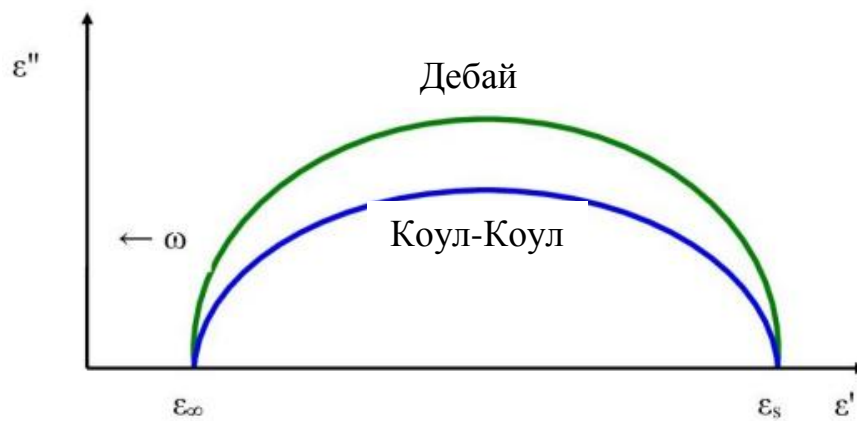
$$\varepsilon^*(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_{10} - \varepsilon_\infty}{(1 + (i\omega\tau_1)^{\alpha_1})^{\beta_1}} + \frac{\varepsilon_{20} - \varepsilon_\infty}{(1 + (i\omega\tau_2)^{\alpha_2})^{\beta_2}}, \quad (1.19)$$

де  $\varepsilon_{10}, \varepsilon_{20}$  – статичні діелектричні проникності,

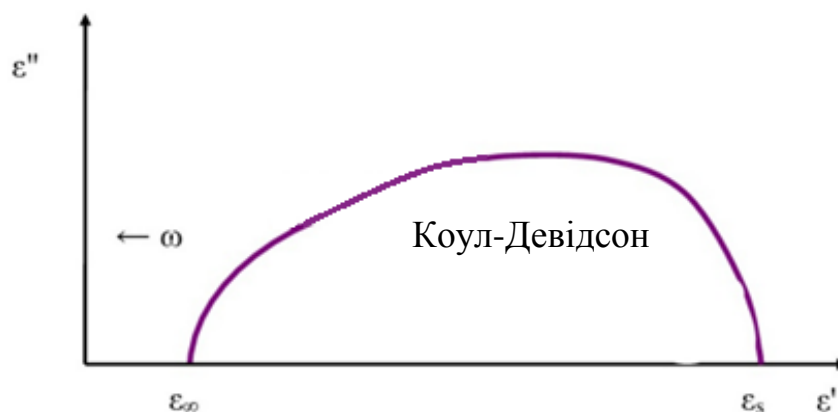
$\tau_1, \tau_2$  – релаксаційні часи,

$\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2$  – параметри форми для води та розчиненої речовини відповідно.

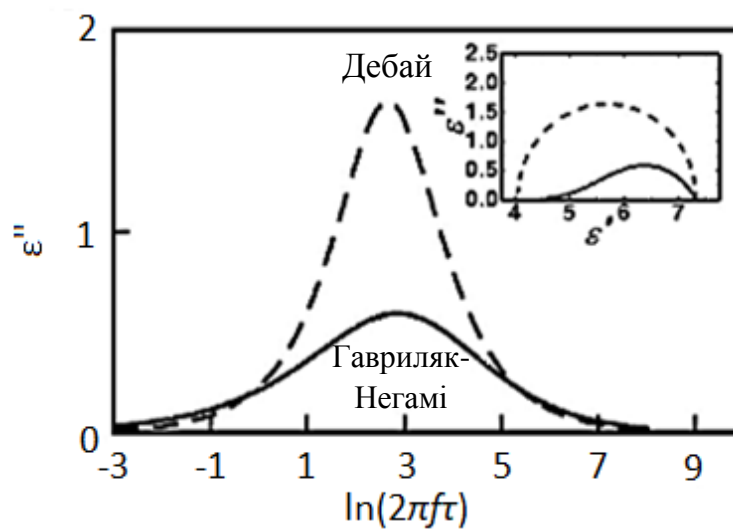
При підгонці за допомогою функції Дебая параметри форми будуть  $\alpha = \beta = 1$ , при Коула-Коула  $0 < \alpha < 1, \beta = 1$ , Коула-Девідсона  $0 < \beta < 1, \alpha = 1$ , а при Гавриляка-Негамі  $0 < \alpha < 1, 0 < \beta < 1$ .



а)



б)



в)

а) релаксації Дебая та Коула-Коула; б) релаксація Коула-Девідсона [16];

в) релаксація Гавриляка-Негамі та Дебая [17]

Рисунок 1. 3 – Порівняння різних моделей для опису релаксаційних процесів

## 1.6 Діелектричні властивості амінокислот

Полімери можна класифікувати як полярні або неполярні залежно від їхньої хімічної структури та зміни діелектричної проникності з частотою та температурою. Аполярні полімери у більшості в основному складаються з атомів вуглецю та водню, симетрично розташованих уздовж вуглецевого ланцюга. Полярні полімери складаються з молекул, що містять електронегативні атоми, наприклад, азоту, кисню, хлориду та фториду, що забезпечує полімер диполями. Їх характеризують більш високі діелектрична проникність і коефіцієнт втрат на відміну від аполярних. Білки є частиною полярної полімерної групи, навіть якщо полярний характер є більш-менш сильним залежно від бічного ланцюга наявних амінокислот.

Амінокислоти – це органічні сполуки; їхня структура показана на рис. 1.4. Особливістю амінокислот порівняно з простими органічними кислотами є наявність карбоксильної (-COOH) та аміногрупи (-NH<sub>2</sub>). При іонізації цих груп створюються позитивні та негативні заряди. Іншими словами, амінокислоти поведуться як цвітер-іони [12]. Наявність позитивних та негативних зарядів у молекулі є джерелом великого дипольного моменту для амінокислот.

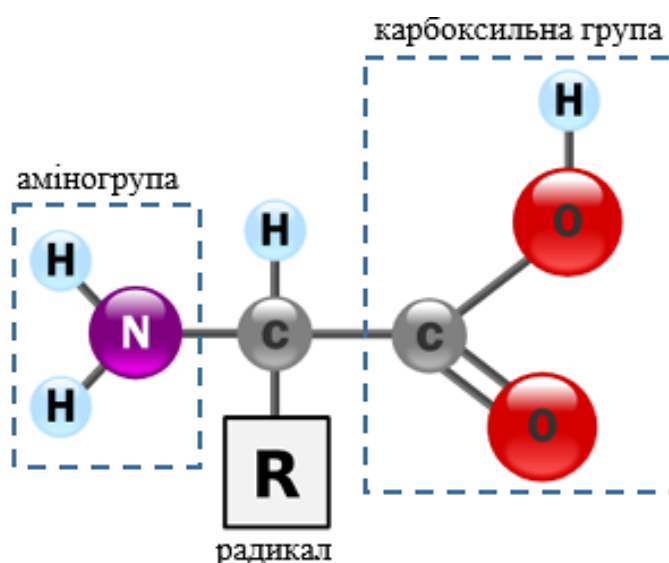


Рисунок 1.4 – Графічне представлення загальної формули амінокислоти

Молекули амінокислот мають дипольний характер через наявність заряджених груп, таких як (-COOH) та (-NH<sub>2</sub><sup>+</sup>). У зв'язку з цим, вони можуть взаємодіяти з електричним полем, що викликає явище поляризації, механізм якого був описаний вище.

Дипольний момент  $\mu$  виникає, коли центри позитивних та негативних зарядів всередині молекули зміщується на певну відстань  $r$ . Його можна визначити, використовуючи наступну формулу [8]:

$$\mu = \sum_k R_k Q_k - \sum_k \psi_k(er) \psi_k d\tau, \quad (1.20)$$

де  $\psi_k$  – хвильова функція валентних електронів;

$R_k$  – вектор положення  $k$ -того ядра;

$Q_k$  – заряд.

Зі застосуванням певних спрощень до цієї формули (розподіл заряду  $r$  розглядається як емпірична величина, а хвильові функції ретельно добираються задля забезпечення високої точності), зрештою величина дипольного моменту пропорційна відстані між зарядами:

$$\mu = er. \quad (1.21)$$

Використовуючи рівняння (1.21), можна визначити відстань між аміно- та карбоксильними групами  $\alpha$ - та  $\beta$ -амінокислот [8].

Загалом амінокислоти можна розділити на такі групи за їхнім зарядом:

- нейтральні: ні аміногрупа, ні карбоксильна група не заряджені (аланін, валін, ізолейцин, лейцин, пролін, треонін, цистеїн, серин, гліцин, тирозин);

- кислі: карбоксильна група заряджена негативно, а аміногрупа не протонувана (аспартат, глутамат);

- основні: аміногрупа заряджена позитивно, а карбоксильна група не депротонувана (аргінін, гістидин, лізин);

- заряджені амінокислоти: такі амінокислоти можуть мати заряд як у карбоксильній, так і в аміногрупі (лізин, аргінін, гістидин, а також аспарат та глутамат (у заряджених формах)).

Окрім впливу електричного поля на молекулу амінокислоти, також за рахунок утворення водневих зв'язків можуть виникати релаксаційні піки у різних діапазонах частот. Молекула води, маючи надлишковий негативний заряд, може притягувати протон від карбоксильної групи. Окрім цього, протон від аміногрупи, що має частковий позитивний заряд, може притягувати молекулу води. Зазвичай аміногрупа є більш активним електрон-донором через наявність двох атомів азоту та двох вільних електронних пар.

Релаксаційних піків буде виникати декілька, так як тепер дві речовини (амінокислота з часом релаксації  $\tau_2$  та вода з часом релаксації  $\tau_1$ ) вносять свій вплив у загальну картину розподілу діелектричної проникності (рис. 1.5).

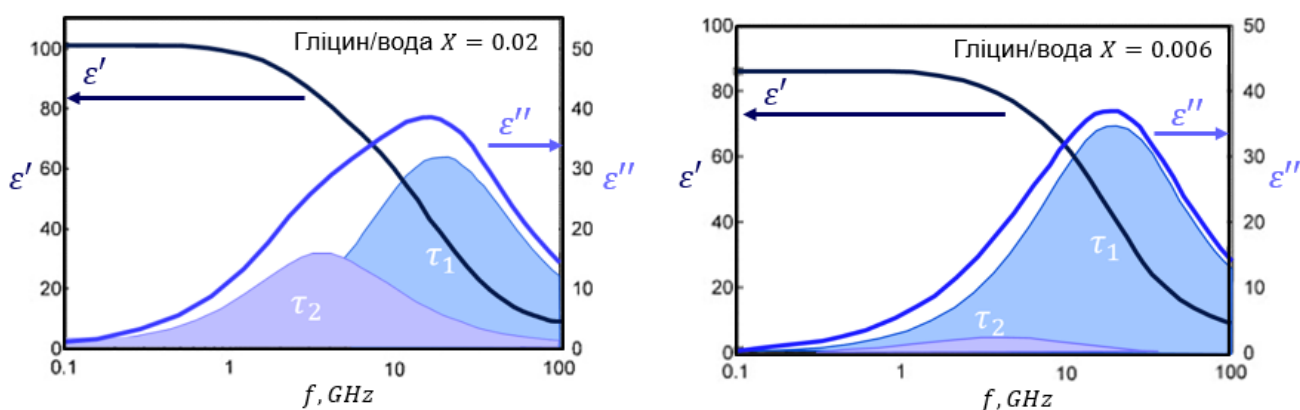


Рисунок 1.5 – Залежність уявної частини діелектричної проникності від частоти

### 1.7 Використання МШГ резонатору для діелектрометрії рідин

Комплексну діелектричну проникність речовин можна визначати за допомогою різних способів, особливий інтерес зокрема представляють резонансні методи. Резонатор – це пристрій, який має резонансні властивості:

на певних частотах відгук на коливання сильніший, ніж на інших. Для міліметрового діапазону хвиль використовуються тривимірні об'ємні резонатори, що резонують на низці мод (типи коливань), які можна охарактеризувати модовими індексами. Вони описують розподіл поля уздовж трьох координат. У циліндричному резонаторі моди шепочучої галереї можна класифікувати як  $HE_{mpl}$ , що мають поперечне електричне поле або  $EH_{mpl}$ , що має аксіальне електричне поле. Цілі індекси  $m$ ,  $p$  та  $l$  позначають переходи через нуль амплітуд електричного поля в азимутальному, радіальному та осьовому напрямках відповідно.

Якщо розглядаючи резонатор циліндричної форми, то їхні властивості можна описати за допомогою теорії хвилеводів, так як фактично це відрізок відповідних ліній передачі. У резонаторі з ідеальними провідними стінками резонансна крива мала б вигляд  $\delta$ -функцій, що збуджуються тільки на резонансних частотах. Проте діелектрики характеризуються в тому числі і втратами, у результаті чого коливальний процес у резонаторі є згасаючим. Це призводить до можливості спостереження суперпозиції частот навколо частоти  $\omega_0$ . При цьому резонансна крива має певну скінченну ширину  $\Delta\omega$ , яка визначається відношенням середньої енергії, збереженої у резонаторі, до енергії втрат за період коливань. Ця величина називається добротністю резонатора:

$$Q = \frac{2\pi W}{T_0 P} = \omega_0 \frac{W}{P}, \quad (1.24)$$

де  $W$  – накопичена середня енергія у резонаторі;

$T_0$  – період коливань;

$P$  – середня потужність теплових втрат.

Будь-який резонатор є осцилятором з затуханням, характеристики якого можна отримати шляхом розв'язання диференційного рівняння:

$$\ddot{u}(t) + \eta\dot{u}(t) + \omega_0^2 u(t) = 0, \quad (1.25)$$

де  $\eta$  відображає загасання коливань;

$\omega_0$  – резонансна частота осцилятора без втрат;

$u(t)$  – компоненти електричного чи магнітного поля чи кутова амплітуда маятника.

Розв'язком рівняння (1.25) є вираз

$$u(t) = \exp \exp (-\eta t/2) \exp \exp [i(\omega_1 t + \varphi)], \quad (1.26)$$

де

$$\omega_1^2 = \omega_0^2 - \eta^2/4. \quad (1.27)$$

З формули (1.26) видно, що втрати в усіх осциляторах призводять до зниження власної частоти. Цей висновок вказує на те, що втрати в резонаторах не тільки визначають власну добротність, але й впливають на значення власних частот [21]. Цей факт важливо прийняти до уваги, адже у поле резонатора для дослідження діелектричних властивостей речовини треба внести цю сильнопоглинаючу речовину. Одночасно при великих значеннях дійсної частини діелектричної проникності рідини вона буде впливати не тільки на частоту, але й на добротність резонатора.

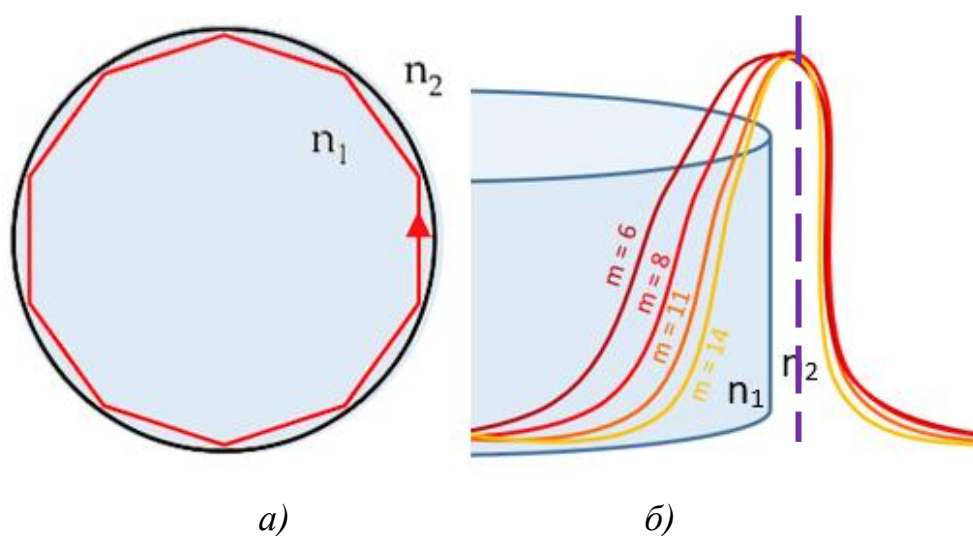
З огляду на це з'являється необхідність у використанні високодобротних резонаторів. Одним з можливих рішень, яке зокрема застосовується у даній роботі, є використання резонатора з модами шепочучої галереї (МШГ).

Електромагнітне випромінювання характеризується взаємними коливаннями електричного та магнітного полів. Охарактеризувати картину розповсюдження цих хвиль можна за допомогою поняття «мода». У хвилеводах та лініях передачі моди можуть бути поздовжніми (*TEM*, у яких електричне та магнітне поля мають компоненти, які лежать вздовж напрямку поширення хвиль) та поперечними (електричне («transverse electric» *TE*-моди) та магнітне («transverse magnetic» *TM*-моди) поля відповідно перпендикулярні напрямку

поширення хвиль) та гібридними («hybrid electromagnetic» *HEM* представляють собою комбінацію повздовжніх та поперечних компонент у своїх полях).

Режими резонансу шепочучої галереї збуджуються в осесиметричному діелектричному резонаторі, такому як сфера, диск або кільце. Резонатори МШГ функціонують на основі принципу повторного відбиття хвиль вздовж внутрішньої поверхні резонатора з подальшим фазовим зсувом (рис 1.6, а). МШГ можна описати як режими поширення хвиль навколо центру такого резонатора з повторним повним відбиттям від краю резонатора і фазовим зсувом кратним  $2\pi$  (тобто зсув кратний повному обертанню). Це означає, що коливання хвиль повертаються до свого початкового стану після кожного цілого обертання.

Окрім цього, необхідно розуміти, яким чином можна з'єднати лінійні хвилеводи з резонатором для введення та виведення інформації (електромагнітної хвилі). Для резонаторів МШГ характерним є явище еванесцентного (затухаючого) поля, яке поширюється від джерела за межі хвилеводної моди в радіальному напрямку та експоненційно спадає (рис. 1.6, б). На величину зв'язку резонатор/хвилевод впливають такі параметри, як відстань між ними, довжина зв'язку та показники діелектричних втрат.



а) відбивання хвилі всередині резонатора; б) розподіл поля затухання

Рисунок 1.6 – Схематичне представлення резонатора МШГ

На міліметрових і субміліметрових частотах резонатори шепочучої галереї мають відносно великі розміри і, отже, вони менш чутливі до допусків виготовлення. Навпаки, розмір резонаторів у режимах  $TE$ ,  $TM$  або гібридних режимах стає непрактично малим. Втрати випромінювання є незначними, особливо для більш високих модових чисел. Метод резонансних збурень може бути застосований до режиму шепочучої галереї при внесенні досліджуваного зразка у власне поле резонатора. Зразок порушує режим резонансу та викликає зміну резонансної частоти та добротності (рис. 1.7). Як видно, при внесенні сильнопоглинаючої речовини (води) змінюється частота та добротність резонатора, а це означає, що діелектричні властивості речовини можна визначити як функції зміни характеристик резонатора, тобто  $\varepsilon' = f_1(\Delta f, \Delta(1/Q))$  та  $\varepsilon'' = f_2(\Delta f, \Delta(1/Q))$ .

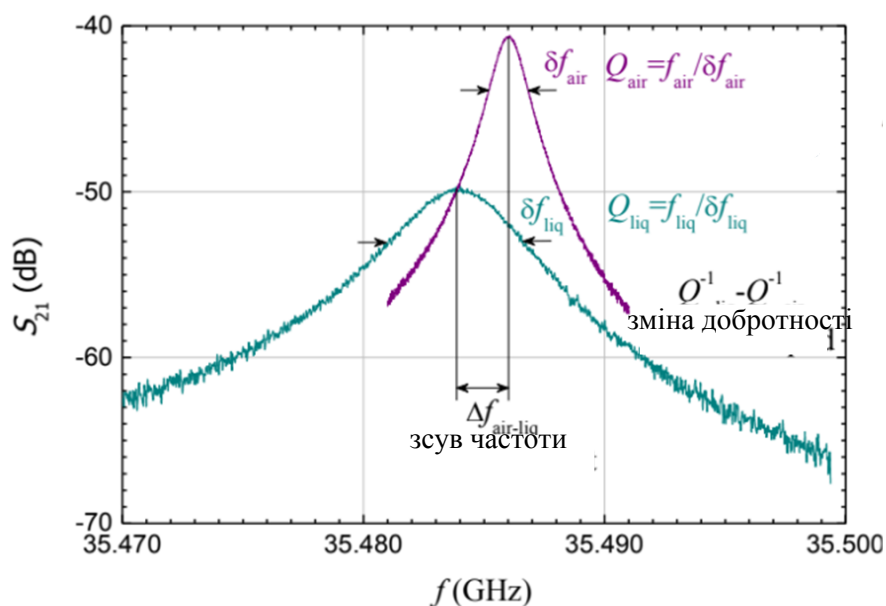


Рисунок 1.7 – Графік залежності добротності та резонансної частоти для резонатора без сильнопоглинаючої рідини (фіолетова крива) та з сильнопоглинаючою рідиною (синя крива) [22]

Найбільшу цікавість для зондування представляють режими  $HE_{m00}$  і  $EH_{m00}$ , оскільки більша частина електромагнітної енергії по суті обмежена невеликою областю навколо межі резонатора, а отже, будь-яке невелике

збурення на межі області через наявність зразка викликає значну зміну резонансних характеристик і призводить до більш високої чутливості.

Використання резонаторів МШГ є ефективним для зондування через високу чутливість і вибірковість, тому що вони демонструють високу ненавантажену добротність, яка в основному обмежена лише тангенсом втрат матеріалу резонатора для сильно обмежених мод. Крім того, відкрита структура резонатора з МШГ робить дуже зручним розміщення та видалення зразка в заздалегідь визначених місцях поблизу резонатора.

З огляду на дані, описані у цьому розділі, пропонується розробка методу визначення, ідентифікації та аналізу діелектричних рідин на основі аналізу зміни спектральних характеристик резонатору у режимі МШГ.

## 2 МОДЕЛЮВАННЯ ХАРАКТЕРИСТИК КВАРЦЕВОГО РЕЗОНАТОРА

Анізотропія є важливою характеристикою матеріалів, визначаючи, як фізичні властивості (механічні, теплові, електричні чи оптичні) змінюються в різних напрямках. Одним із напрямків анізотропії є її проявлення у діелектричних матеріалах, де властивості відгуку на електричне поле можуть залежати від орієнтації. Анізотропія пов'язана з будовою тіла, властивостями його структурних частинок (молекул, атомів, іонів) та специфікою їх розташування. Відносна діелектрична проникність резонатора, виготовленого з монокристалічного кварцу, характеризується наступним діагональним тензором:

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\perp}(1 - i \tan \delta_{\perp}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{\perp}(1 - i \tan \delta_{\perp}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\parallel}(1 - i \tan \delta_{\parallel}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{\parallel}(1 - i \tan \delta_{\parallel}) \end{pmatrix} \quad (1.27)$$

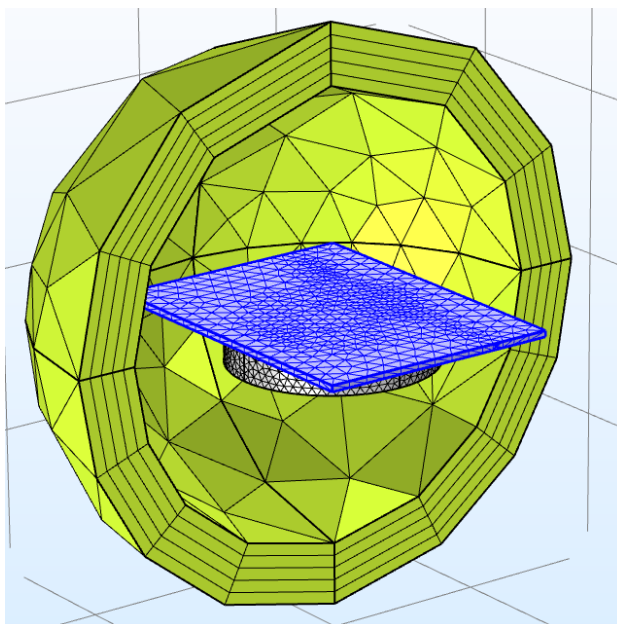
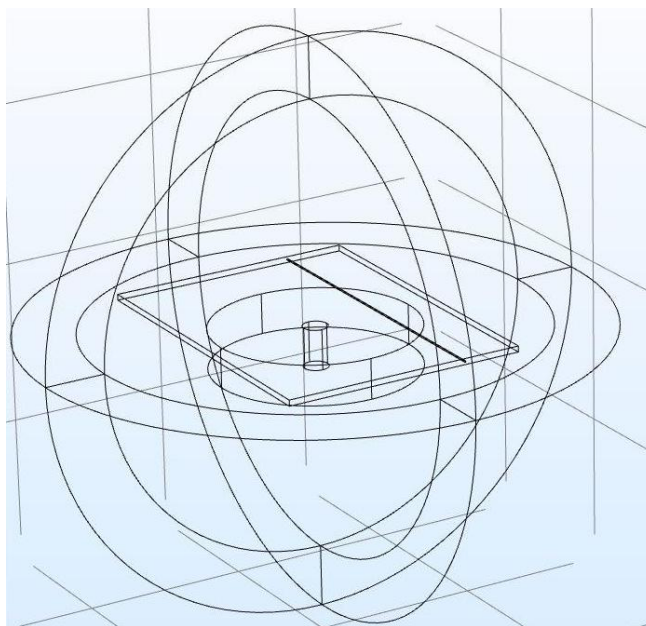
який визначає його електричні властивості,  $i$  скаляр для магнітних властивостей. Символи  $\parallel$  і  $\perp$  пов'язані зі складовими відповідно в напрямку оптичної (геометричної) осі та в площині, перпендикулярній до цієї осі.

При температурі 25 °С діелектричні втрати для перпендикулярної та паралельної складової становлять  $\tan \delta_{\perp} = 4.15 \cdot 10^{-5}$  та  $\tan \delta_{\parallel} = 1.772 \cdot 10^{-5}$  відповідно. Параметри діелектричної проникності відповідають наведеним у літературі [24].

Для створення комп'ютерної моделі для дослідження розподілу електромагнітних хвиль всередині діелектричного резонатора було використано програмний пакет COMSOL Multiphysics, модуль Radiofrequency. Для знаходження резонансних частот та добротностей було вирішено використовувати етап дослідження власної частоти (Eigenfrequency) лінеаризованої моделі.

На рис. 2.1, а представлено вигляд розробленої моделі, а також побудова спеціальної сітки для реалізації методу кінцевих елементів (рис. 2.1, б). Такі

умови були вибрані з огляду на те, що відстань між резонатором та хвилеводами достатня для мінімізації їхнього впливу на характеристики резонатора. Відкритий простір навколо резонатора також моделювався з використанням ідеально підбраного шару (Perfectly matched layer). Ця умова необхідна для того, щоб уникнути відбивання хвилі від межі розподілу резонатор/повітря, що унеможливило б моделювання еванесцентного поля.



а)

б)

а) геометрія моделі; б) створена сітка

Рисунок 2.1 – Модель, реалізована за допомогою програмного забезпечення COMSOL

Окрім цього, експериментально було отримано спектр кварцового резонатора (рис. 2.2) в Ка-діапазоні з використанням програмного забезпечення, розробленого за допомогою мови програмування Python. Експериментально отримані дані порівнювалися зі змодельованими (результати порівняння – табл. 2.1) для пошуку найбільш оптимальних значень діелектричних властивостей матеріалу.

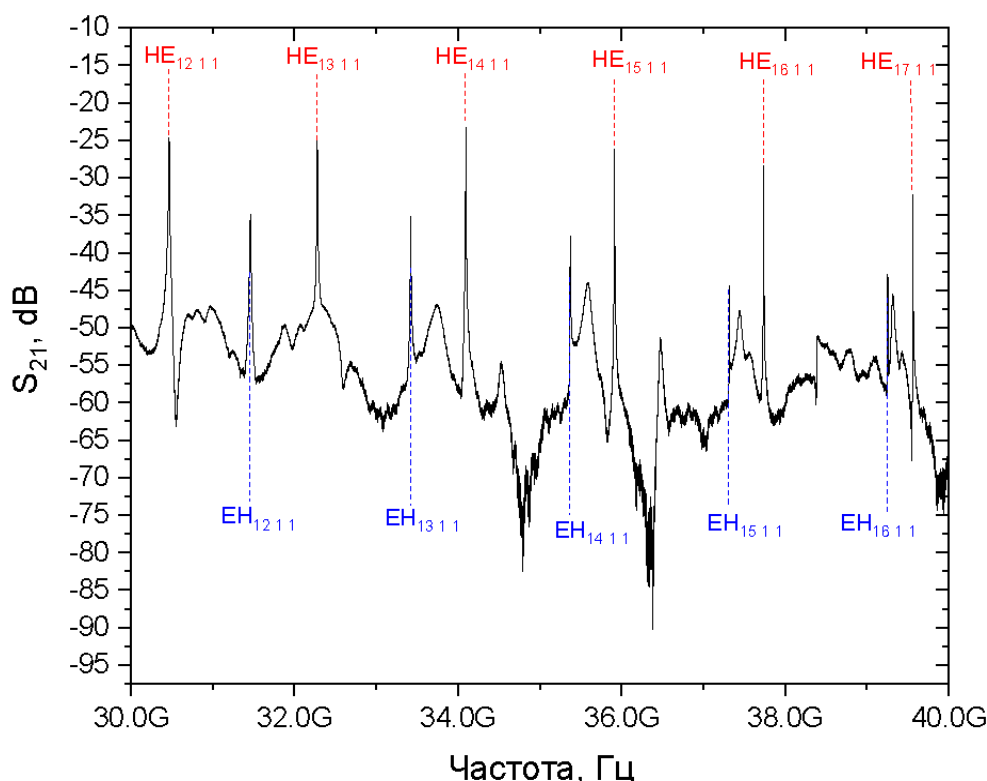


Рисунок 2.2 – Експериментально вимірний спектр не покритого кварцу

Таблиця 2.1 – Власні частоти та добротності не покритого кварцового резонатора

Мода	Експеримент		Симуляція			
	$f$ (ГГц)	$Q$	$f$ (ГГц)		$Q$	
HE <sub>12 1 1</sub>	30.462	6491	30.461057	30.461238	6337	6203
HE <sub>13 1 1</sub>	32.274	13354	32.273936	32.274337	13741	13111
HE <sub>14 1 1</sub>	34.089	23810	34.089797	34.090253	23734	24080

HE <sub>15 1 1</sub>	35.908	34987	35.902204	35.903458	34890	36292
HE <sub>16 1 1</sub>	37.730	43058	37.728881	37.730958	43365	42763
HE <sub>17 1 1</sub>	39.556	45789	39.556268	39.559981	46452	46894

Окрім цього, для створення моделі, яка точно відображала б процеси розповсюдження електромагнітних хвиль всередині резонатора, необхідно знати властивості матеріалу, з якого було виготовлено чип з мікрофлюїдним каналом (МК). Цей матеріал повинен мати низький рівень діелектричних втрат у Ka-діапазоні, а також бути зручним для створення у ньому МК. На рис. 2.3 наведена порівняльна характеристика для трьох різних матеріалів: пластик Zeonor 1420, фотополімер Norland Optical Adhesive 65 (NOA65) та полідиметилсилоксан (PDMS). З огляду на те, що пластик Zeonor 1420 найменшим чином впливає на рівень втрат резонатору, цей матеріал було обрано для чипу з МК.

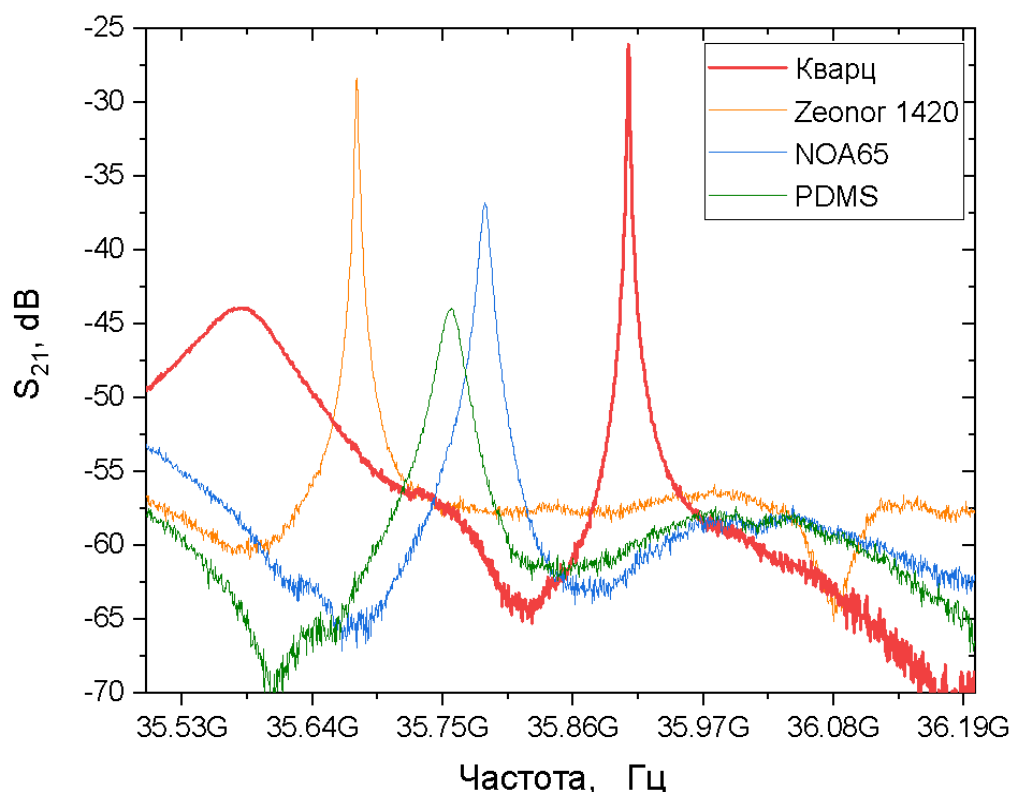
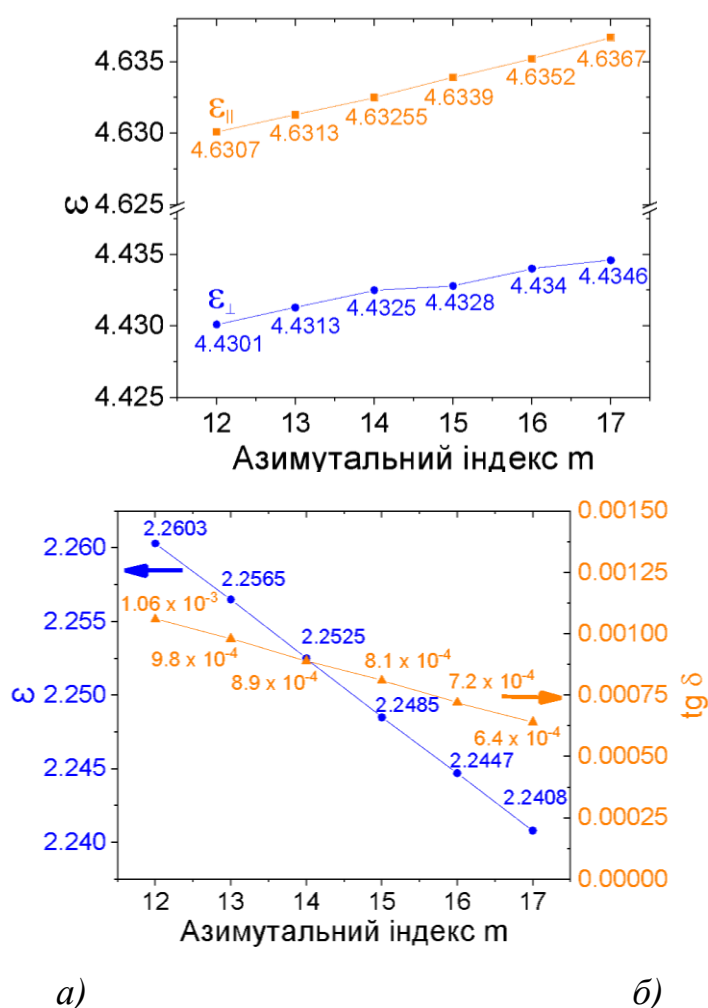


Рисунок 2.3 – Порівняння спектрів, отриманих експериментально для кварцового резонатора, покритого різними матеріалами

Для створення моделі чипу з МК були використані параметри, розраховані у попередніх дослідженнях [23]. На рис. 2.4, а наведені діелектричні характеристики для кварцу залежно від частоти, на рис. 2.4, б показані діелектричні характеристики пластику Zeonor 1420.

Місце розташування МК у шарі пластику впливає на частоту і радіаційну добротність резонатора, тому воно було обрано з огляду на цей факт. За допомогою розробленої моделі було визначено позицію каналу відносно центру, де напруженість електромагнітного поля для моди  $HE_{15\ 1\ 1}$  сягає свого максимуму.



а) діелектрична проникність кварцу; б) діелектрична проникність та тангенс діелектричних втрат пластикового чипу з МК

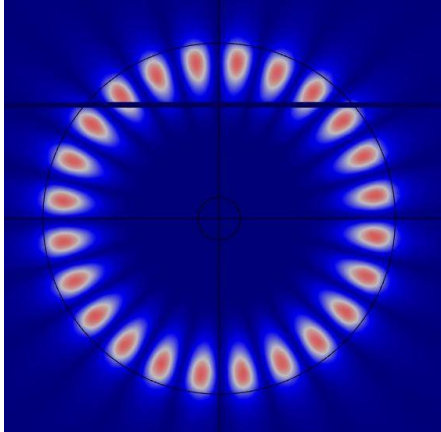
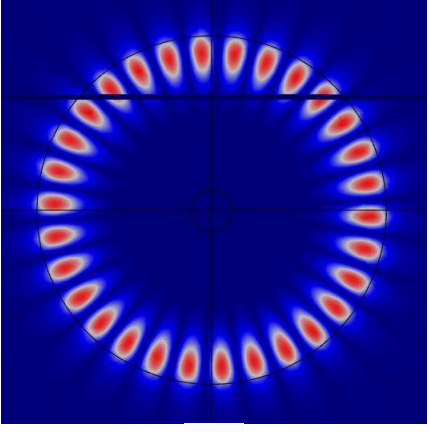
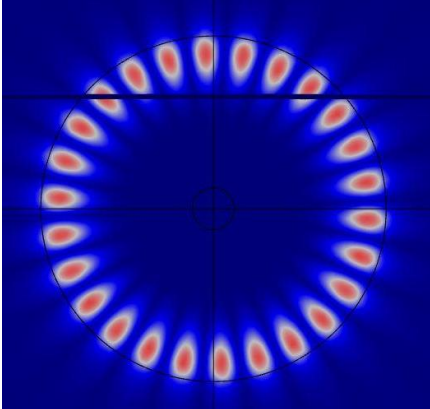
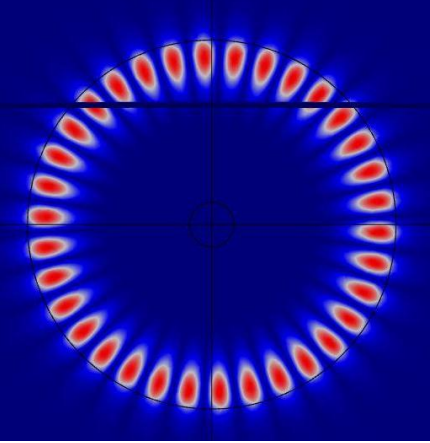
Рисунок 2.4 – Ефективні значення електрофізичних параметрів для мод з різними азимутальними індексами  $m$  при  $T = 25\ ^\circ\text{C}$

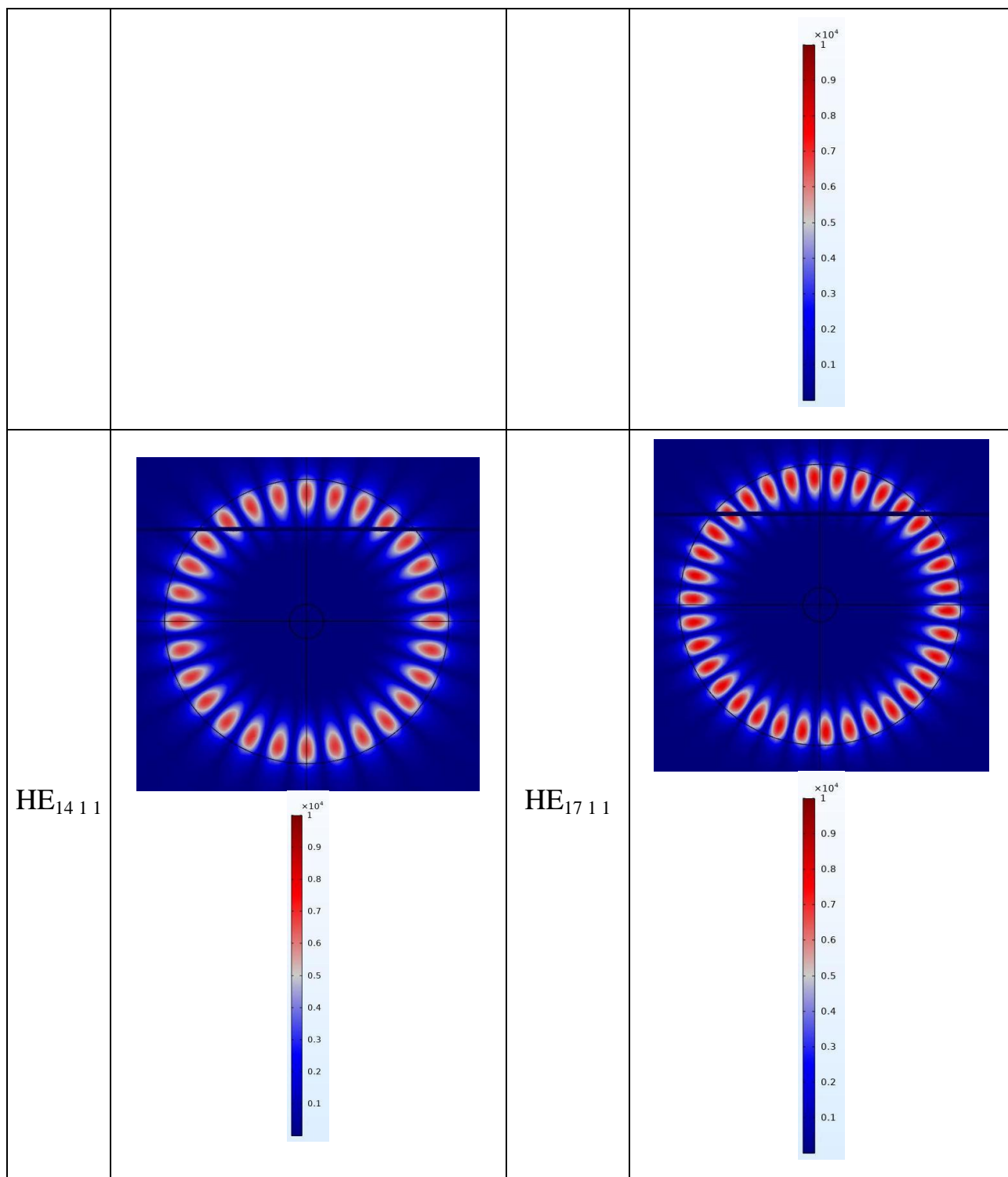
З урахуванням значень, наведених на рис. 2.4, було створено модель кварцового резонатору, покритого шаром пластику з МК, заповненого повітрям (результати моделювання наведено у табл. 2.2). Окрім цього, у табл. 2.3 показано вигляд розподілу напруженості електромагнітного поля всередині резонатору для шести мод в Ка-діапазоні частот.

Таблиця 2.2 – Власні частоти та добротності кварцового резонатора з МК, заповненим повітрям при 25 С

Мода	Експеримент		Симуляція			
	$f$ (ГГц)	$Q$	$f$ (ГГц)		$Q$	
HE <sub>12 1 1</sub>	30.165045	4445	30.164952	30.165604	4350	4564
HE <sub>13 1 1</sub>	31.999539	8528	31.997402	31.998357	8826	9088
HE <sub>14 1 1</sub>	33.835195	14462	33.831595	33.832037	14695	14990
HE <sub>15 1 1</sub>	35.672412	20457	35.670827	35.671832	20819	20967
HE <sub>16 1 1</sub>	37.510278	25473	37.167775	37.168245	25529	25385
HE <sub>17 1 1</sub>	39.351660	27537	39.351079	39.352833	28523	28672

Таблиця 2.3 – Результати моделювання розподілу електромагнітного поля кварцу з пластиковим чипом з МК, заповненим повітрям для різних мод

Мода	Розподіл електромагнітного поля $E_z$ компоненти моди у площині $xу$	Мода	Розподіл електромагнітного поля $E_z$ компоненти моди у площині $xу$
$HE_{12\ 1\ 1}$	 <p>Color scale: <math>\times 10^4</math>, 1, 0.9, 0.8, 0.7, 0.6, 0.5, 0.4, 0.3, 0.2, 0.1</p>	$HE_{15\ 1\ 1}$	 <p>Color scale: <math>\times 10^4</math>, 1, 0.9, 0.8, 0.7, 0.6, 0.5, 0.4, 0.3, 0.2, 0.1</p>
$HE_{13\ 1\ 1}$	 <p>Color scale: <math>\times 10^4</math>, 1, 0.9, 0.8, 0.7, 0.6, 0.5, 0.4, 0.3, 0.2, 0.1</p>	$HE_{16\ 1\ 1}$	



Після цього було створено аналогічну модель у врахуванням значень діелектричних характеристик матеріалів з каналом, заповненим водою (табл. 2.4). Ці дані представляють високу важливість у даному дослідженні, адже саме зі значеннями параметрів резонатора при МК, заповненому водою, порівнюються значення, отримані для тестових речовин.

Таблиця 2.4 – Власні частоти та добротності кварцевого резонатора з МК, заповненим водою при 25 С

Мода	Експеримент		Симуляція			
	$f$ (ГГц)	$Q$	$f$ (ГГц)		$Q$	
HE <sub>12 1 1</sub>	30.158495	1487	30.1585937	30.1591798	1484	1450
HE <sub>13 1 1</sub>	31.993249	2182	31.9931615	31.9933372	2189	2155
HE <sub>14 1 1</sub>	33.829419	2941	33.8285473	33.8291546	2970	3045
HE <sub>15 1 1</sub>	35.667159	3803	35.6661335	35.6677838	3838	3920
HE <sub>16 1 1</sub>	37.506486	4697	37.5056090	37.5065558	4696	4782
HE <sub>17 1 1</sub>	39.347230	5700	39.3471452	39.3478050	5717	5750

З урахуванням цих моделей, було використано шість, розрахованих у [], калібрувальних номограм – для кожної частоти. На рис. 2.5 показано вигляд залежності реальної та уявної частин діелектричної проникності від зміни добротності та частоти резонатора для моди HE<sub>15 1 1</sub>. У розділі 4 показано, як впливає використання однієї номограми та унікальної для кожної частоти на визначення діелектричних характеристик тестової величини.

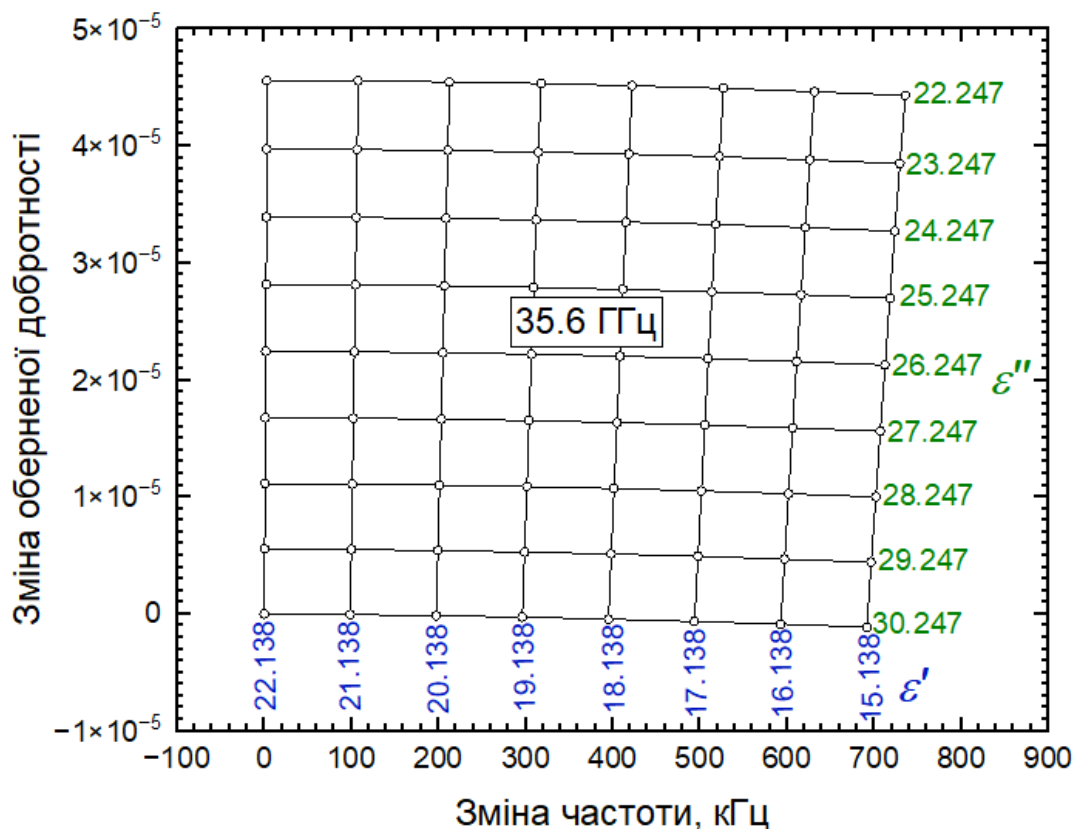


Рисунок 2.5 – Калібрувальна номограма для моди  $HE_{15\ 1\ 1}$ : зміна оберненої добротності  $\Delta(1/Q) = (1/Q_{water}) - (1/Q_{liq})$  та зміна частоти

$$\Delta f = f_{liq} - f_{water}$$

### 3 ВИМІРЮВАЛЬНЕ ОБЛАДНАННЯ

Вимірювальна установка (рис. 3.1) складається з діелектричного резонатора з діаметром 24.97 мм та висотою 5.04 мм; діаметр внутрішнього отвору складає 3.05 мм. Для отримання відгуку від резонатора використано пару дзеркальних діелектричних хвилеводів. Зверху резонатор покритий чіпом розміром  $30 \times 40 \times 0.73$  мм з МК всередині діаметром 0.23 мм (експериментально встановлено, що об'єм цього каналу складає 400 нл). Характеристики резонатора отримано з використанням аналізатору спектру Keysight 8722C.

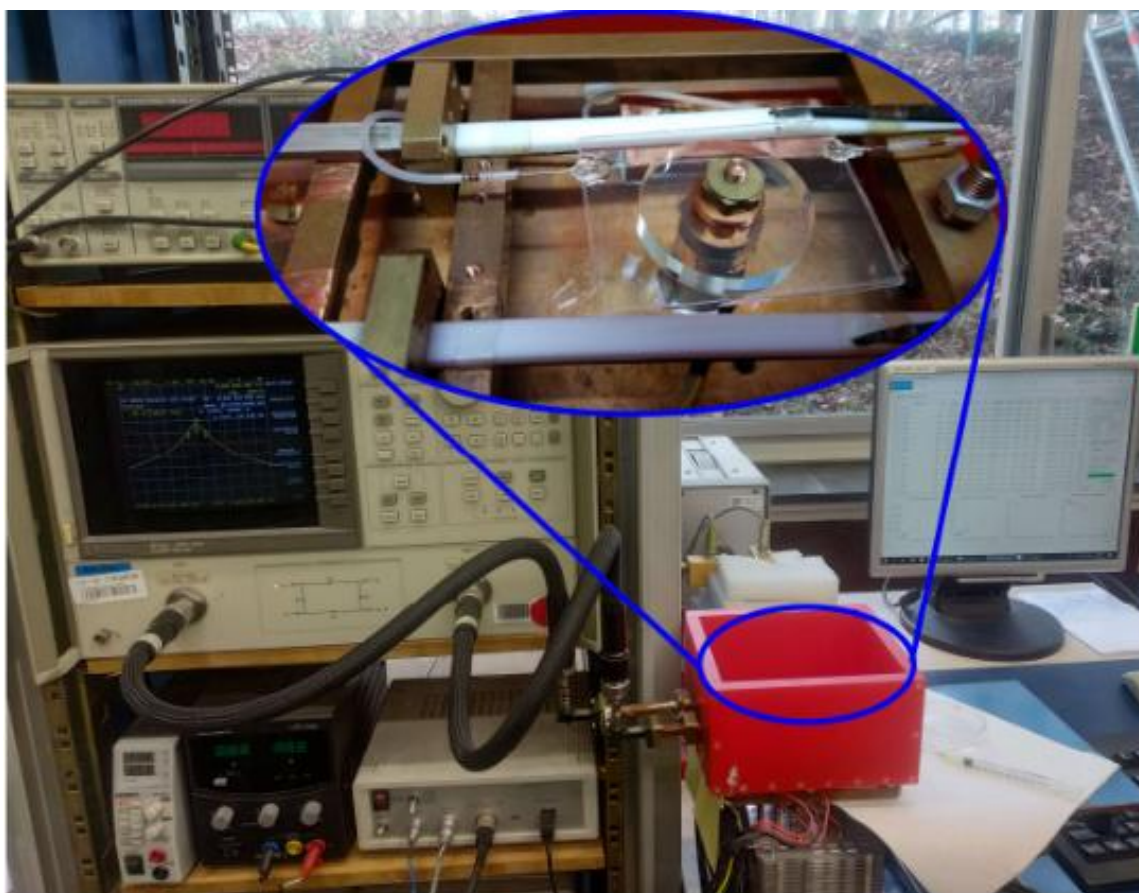


Рисунок 3.1 – Фото вимірювальної установки

Чип з МК було розроблено з використанням методу термокомпресії [23] з використанням матеріалу з низькими діелектричними втратами Zeonor 1420.

Металеві трубки для розміщення рідини всередині каналу були закріплені за допомогою епоксидної смоли, і вони знаходяться від максимумів розподілу електромагнітного поля достатньо далеко, щоб не впливати на нього.



а)

б)

Рисунок 3.2 – Фото чипу з МК (а) та МК наближено (б)

Окрім цього, оскільки величина діелектричної проникності сильно залежить від температури, було використано температурний PID регулятор (рис. 3.3) Coversion TC M P 5A, який забезпечує за допомогою встановленого всередині термоізолюваної пластикової коробки температурного сенсору PT100 та елементів Пельтьє стабільність температури з точністю до 0.01 °C.

Пропорційна складова виробляє вихідний сигнал, протидіє відхиленням регульованої величини від заданого значення, що спостерігається в даний момент часу. Однак за використання тільки пропорційного регулятора значення регульованої величини ніколи не стабілізується на заданому значенні. Існує так звана статична помилка, яка дорівнює такому відхиленню регульованої величини, яка забезпечує вихідний сигнал, що стабілізує вихідну величину саме на цьому значенні. Наприклад, у даному випадку для регулятора температури вихідний сигнал (напруга, що надходить на Пельтьє елемент) поступово зменшується при наближенні температури до заданої, і система стабілізується при потужності, що дорівнює тепловим втратам. Температура не може досягти

заданого значення, тому що в цьому випадку потужність нагрівача дорівнюватиме нулю, і він почне остигати.

Для усунення статичної помилки використовують також інтегральну складову. Вона пропорційна інтегралу за часом відхилення регульованої величини. Якщо система не відчуває зовнішніх збурень, то через деякий час регульована величина стабілізується на заданому значенні, сигнал пропорційної складової дорівнюватиме нулю, а вихідний сигнал повністю забезпечуватиметься за допомогою інтегруючої складової.

Для більш точної стабілізації температури також використовують складову похідної. Вона пропорційна темпу зміни відхилення регульованої величини та призначена для протидії відхиленням від цільового значення, які прогнозуються у майбутньому. Відхилення можуть бути викликані зовнішніми збуреннями або запізненням впливу регулятора на систему.

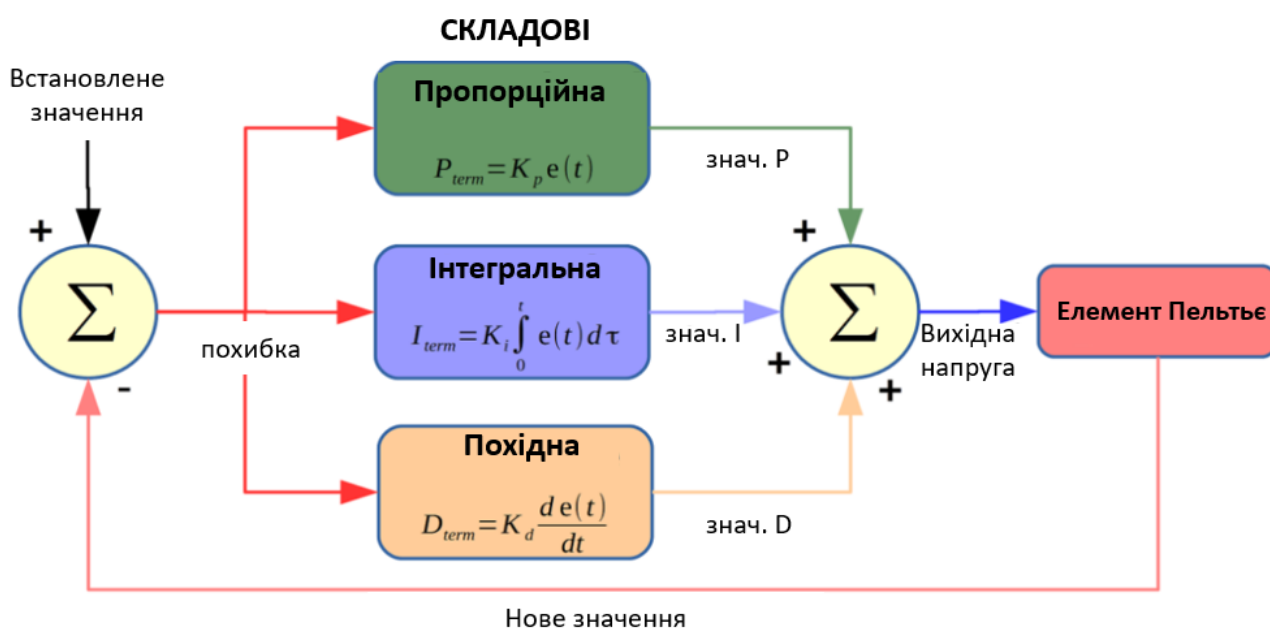
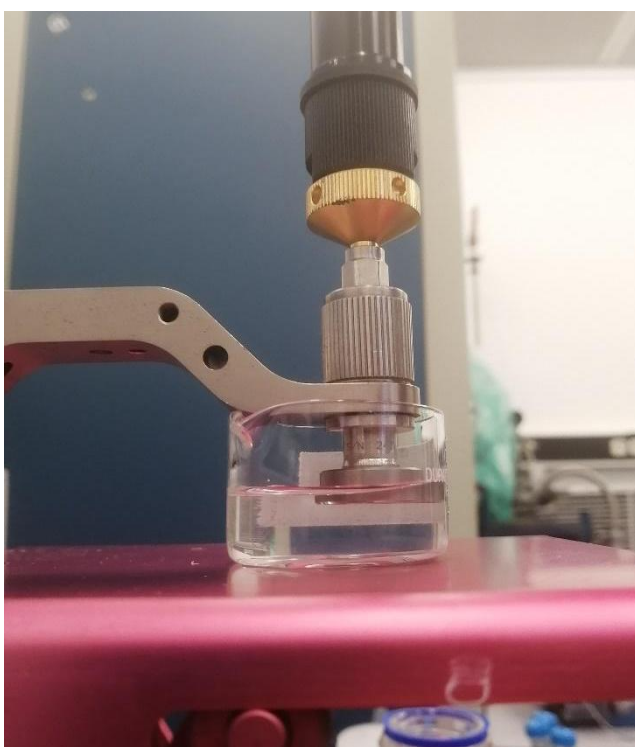
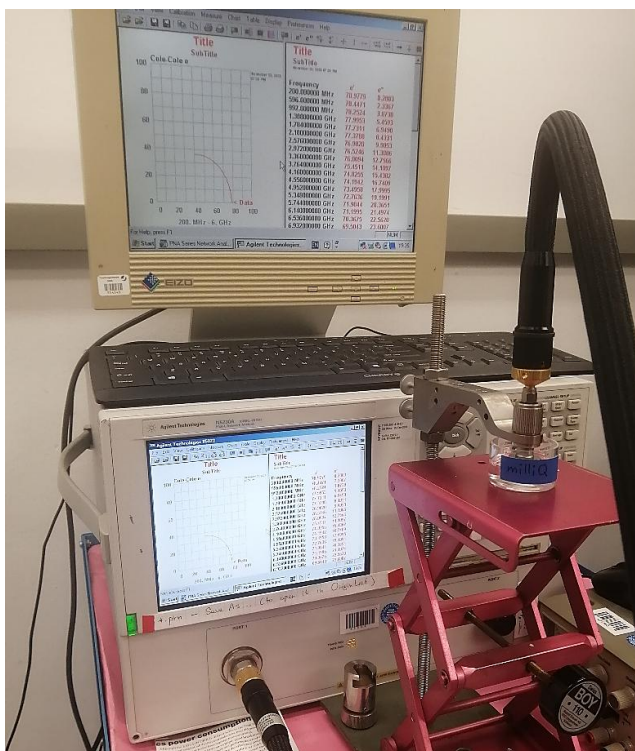


Рисунок 3.3 – Функціональна схема PID-регуляції температури

Варто також зауважити, що потрібно проводити контрольні вимірювання та порівняння з теорією для підтвердження достовірності отриманих результатів. За допомогою аналізатору спектру Agilent Technologies N5230A

(рис. 3.4, а) та датчику ємності NA503 (рис. 3.4, б) було проведено референсні вимірювання.



а)

б)

а) Agilent Technologies N5230A; б) датчик ємності NA503

Рисунок 3.4 – Фото вимірювальної установки для проведення контрольних вимірювань

Однак важким є питання вилучення добротності та резонансної частоти з несиметричних резонансів. За допомогою звичайних методів, таких як підгонка Лоренца та метод визначення частот та втрат на рівні -3 дБ є точними лише для симетричних резонансних частотних характеристик. На жаль, при використанні техніки МШГ резонатору для дослідження діелектричних характеристик речовин одразу на декількох частотах неможливо налаштувати зв'язок, щоб усі резонансні криві були симетричними. Це спотворення відбувається через близьке розташування двох зв'язаних мод. Тому була запропоновано використовувати підхід вилучення параметрів у зв'язаних режимах [25]. Він заснований на наближенні амплітудно-частотної характеристики резонатора в квадраті суми комплексних амплітуд моди  $(G(f))^2$ . У даному випадку кожен окремий несиметричний резонанс можна встановити за допомогою наступної комплексної функції для коефіцієнту пропускання:

$$G(f) = G_s + \frac{A_1 e^{i\varphi_1}}{1 + 2iQ_1(f - f_1)/f_1}, \quad (3.1)$$

де  $G_s$  – дійсне число, що відображає амплітуду сигналу у вихідній лінії;

$\varphi_1$  – різниця фаз між комплексними амплітудами  $A_1$  та  $G_s$ ;

$A_1 e^{i\varphi_1}$  – комплексна амплітуда нормальних коливань на резонансній частоті;

$Q_1$  – добротність;

$f_1$  – резонансна частота;

$f$  — поточна частота.

При використанні такої функції похибка стандартного відхилення визначення резонансної частоти коливається від 1 кГц ( $3 \cdot 10^{-6}$  %) до 5,4 кГц ( $1.8 \cdot 10^{-5}$  %), а визначення Q-фактору — від 0,6 (0,03 %) до 5,1 (0,09 %). Результати підгонки наведено на рис. 3.5.

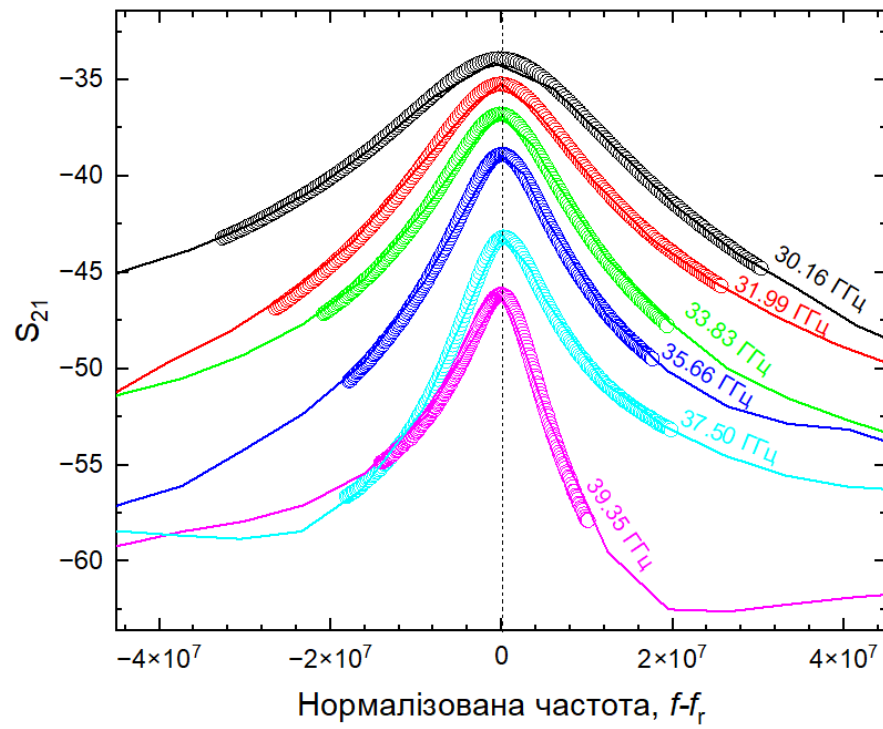


Рисунок 3.5 – Резонансні криві, отримані при заповненні МК водою: лінії – отримані експериментально, відкриті кружечки – результат підгонки за формулою (3.1)

## 4 АНАЛІЗ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНО ОТРИМАНИХ РЕЗУЛЬТАТІВ

Частотна залежність  $\varepsilon'$  і  $\varepsilon''$  для різних речовин різна. Так, неполярні діелектрики мають дуже малі втрати і слабку залежність від частоти. Але навіть незначна добавка полярної речовини до неполярної може викликати сильно виражену дисперсію у такої суміші. Аналогічно, вводячи домішки у полярну речовину, можна істотно змінити її діелектричні властивості. Також істотно впливає на зміну діелектричних властивостей і зміна температури.

У результаті проведення експериментальних досліджень, були отримані значення діелектричної проникності для 16 амінокислот з 20 при кімнатній температурі. Властивості аспарагінової та глутамінової кислот, а також тирозину та триптофану не були виміряні через їхню погану розчинність у воді при кімнатній температурі. Для вимірювань були використані амінокислоти від компанії Sigma Aldrich. Маса, необхідна для отримання розчину 1000 ммоль/л розраховувалася за допомогою формули:

$$m = cMV, \quad (4.1)$$

де  $c$  – концентрація (моль/л);

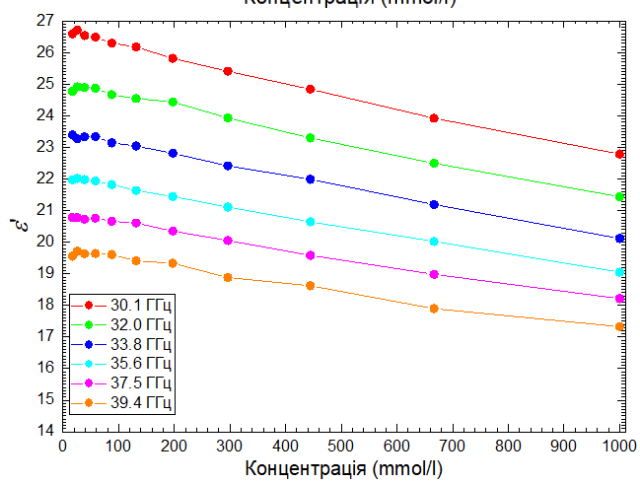
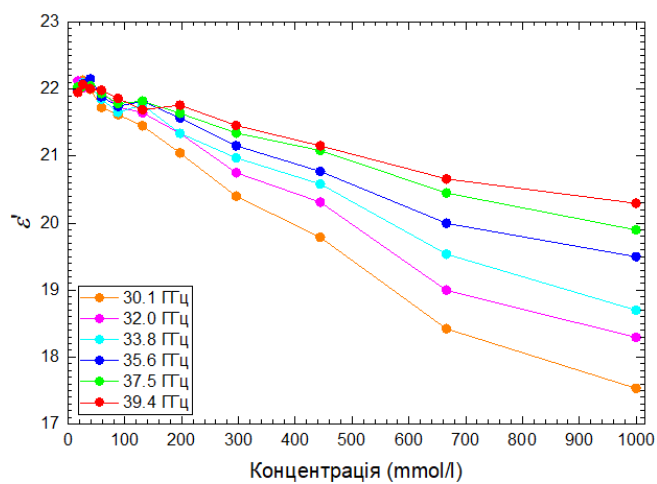
$M$  – молярна маса речовини (г/моль);

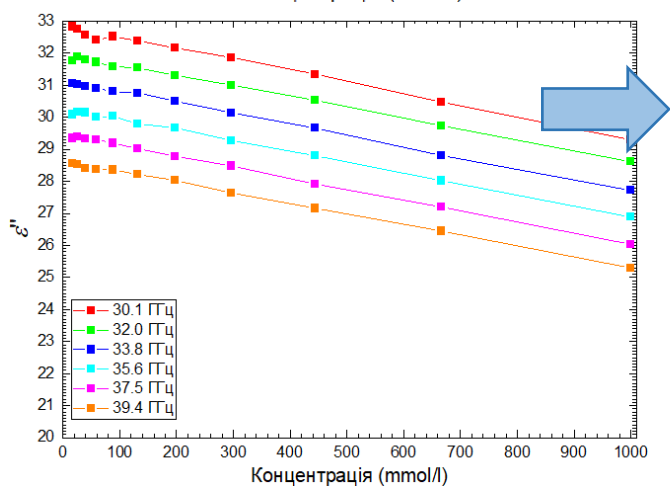
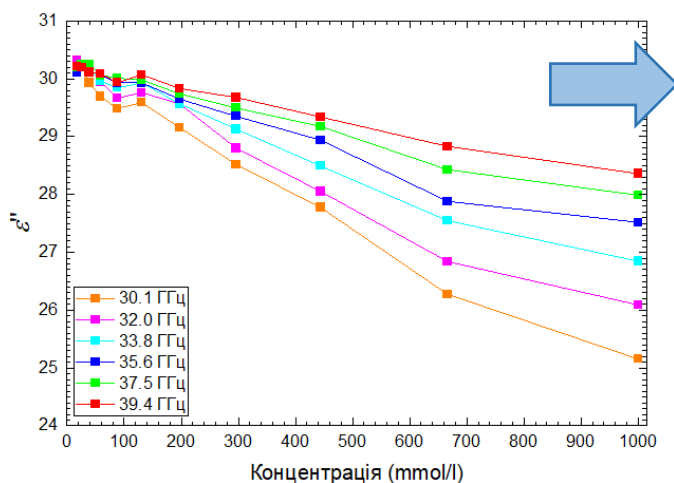
$V$  – об'єм (л).

Приготування менших концентрацій було отримано шляхом розбавлення концентрації основного розчину 1 М водою у пропорціях 2:3. Таким чином були проаналізовані діелектричні властивості молекул з різною формою, будовою, молярною масою та концентрацією на шести частотах одночасно.

На рис. 4.1 представлений типовий набір отриманих даних, у даному випадку для L-Аланіну. Для даних на рис. 4.1, а було використано одну калібрувальну номограму, а на рис 4.1, б – шість, кожен з яких відповідно було отримано для різних частот. Видно, що діелектричні властивості молекул

мають сильну залежність від частоти. Окрім цього, продемонстровано можливість розрізнення різної концентрації розчиненої речовини у воді.





а)

б) :

а) з використанням однієї калібрувальної номограми; б) з використанням шести калібрувальних номограм

Рисунок 4.1 – Залежність діелектричної проникності (реальної (зверху) та уявної (знизу) частин) L-Аланіну від частоти та концентрації розчиненої речовини у воді

Окрім цього, на релаксацію молекул у електромагнітному полі впливає їхній заряд та атоми, що входять до складу речовини. На рис. 4.2 порівняно декілька амінокислот з різними характеристиками. Так, наприклад, Гліцин та L-Аланін є неполярними амінокислотами з не зарядженими бічними групами. Але у бічному ланцюзі L-Аланіну міститься метильна група, що складається з трьох вуглецевих атомів; у той самий час бічний ланцюг Гліцину є найкоротшим з усіх амінокислот. Тому діелектричні властивості L-Аланіну від концентрації більш виражені.

Так само до складу L-Треоніну входить гідроксильна група, яка є зарядженою, і це чинить сильний вплив на релаксацію молекули у електромагнітному полі. В той же самий час, L-Аргінін є також полярною амінокислотою, адже у його бічному ланцюгу міститься аміно- та гуанідинова групи, які також мають заряд в сумі більший за гідроксильну групу, тому залежність діелектричної проникності L-Треоніну від концентрації менше виражена.

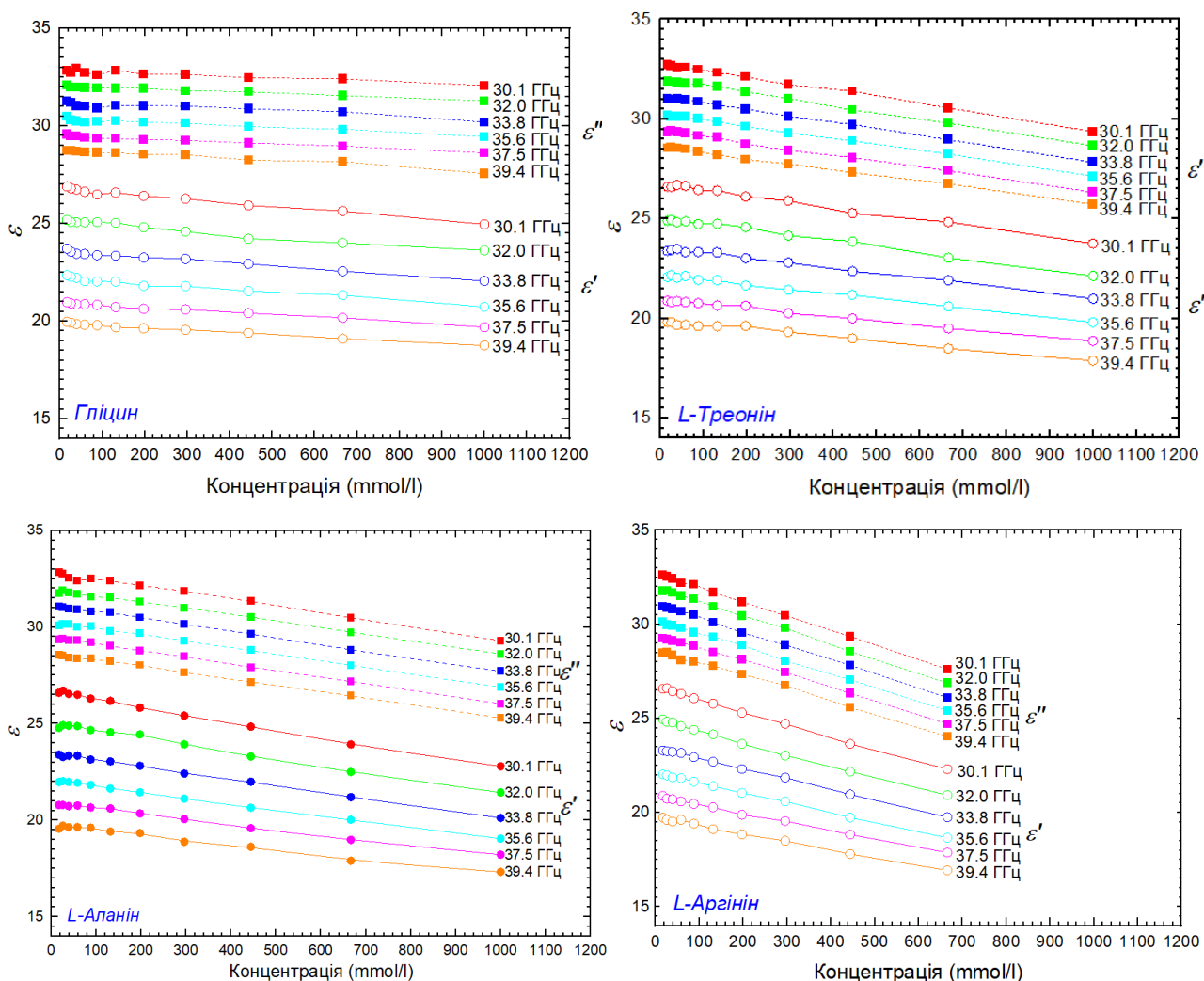


Рисунок 4.2 – Типовий вигляд реальної та уявної частин діелектричної проникності для різних амінокислот: Гліцину, L-Треоніну, L-Аргініну та L-Аланіну

Залежність діелектричної проникності від концентрації для інших вимірних амінокислот наведена у додатку Б.

Також було проаналізовано, як молярна маса впливає на величину діелектричної проникності речовин. З рис. 4.3 видно, що чим вища молярна маса речовини, тим меншою буде діелектрична проникність, але в той же самий час залежність діелектричної проникності від концентрації буде вищою.

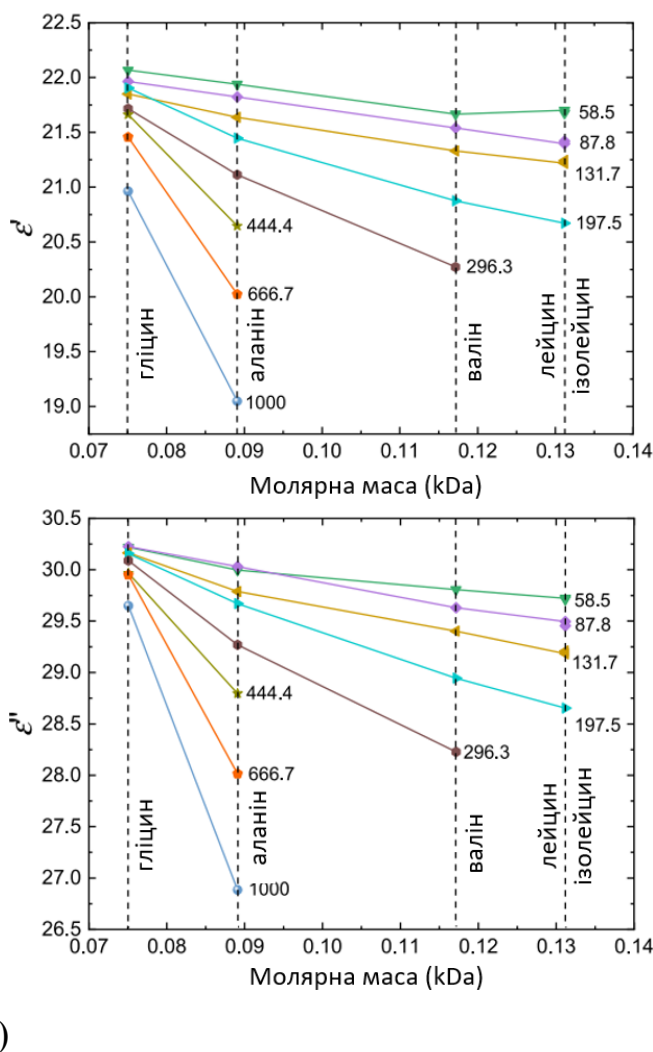


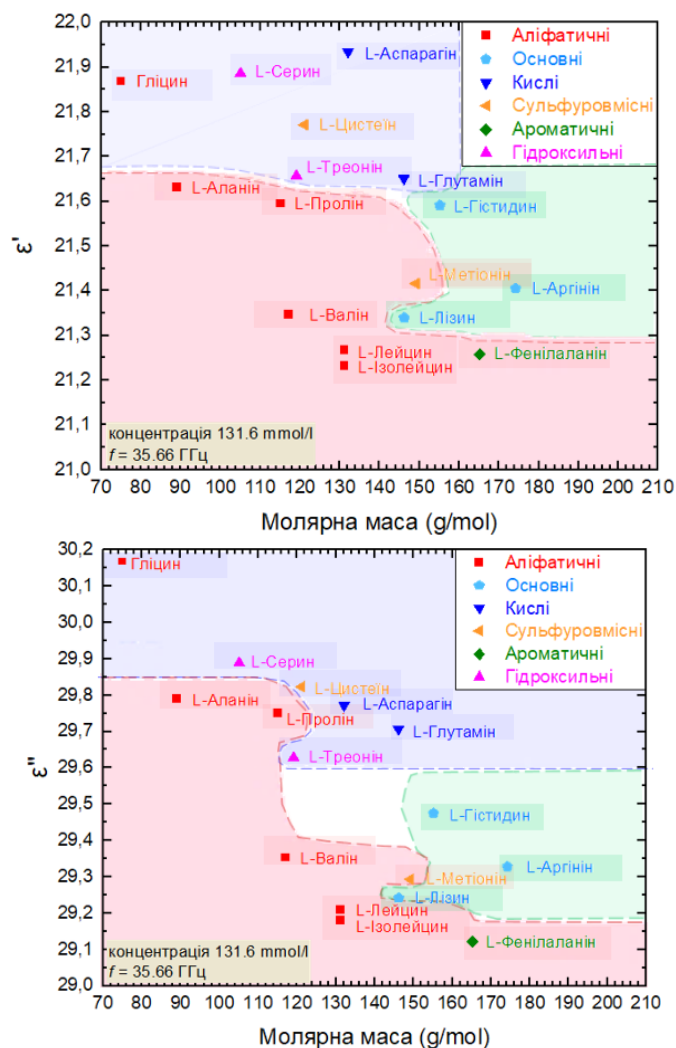
Рисунок 4.3 – Залежність діелектричної проникності від молярної маси

Окрім цього, було проаналізовано залежність діелектричних характеристик усіх амінокислот залежно від їхньої будови для усіх шести частот. Так на рис. 4.4 наведено графіки залежності діелектричної проникності для 16 амінокислот однакової концентрації у воді від їхньої молярної маси, розділених за їхньою будовою та зарядом бічних груп. Видно, що для кожної групи амінокислот зі збільшенням молярної маси лінійно знижується величина

діелектричної проникності, а отже діелектричні властивості залежать від будови молекули та її форми. Розглянемо, наприклад, аліфатичну групу. З загального тренду вибивається лише пролін, бо на відміну від інших амінокислот його бічний ланцюг складається з п'ятичленного циклу, що включає  $\alpha$ -вуглецевий атом і  $\alpha$ -аміногрупу. Для інших груп, наприклад, для гідроксильної, сульфуровмісної та кислотої, також спостерігається така залежність діелектричних властивостей від молярної маси.

З іншого боку, якщо поглянути на основні амінокислоти, для них не прослідковується такий тренд. Але L-Гістидин також містить органічне з'єднання, імідазол, яке відрізняє його з-поміж інших амінокислот основної групи, тому він має більш яскраво виражений діелектричний характер.

Також було проаналізовано вплив заряду бічних груп на діелектричні властивості речовини. На рис. 4.4 на синьому тлі показані полярні амінокислоти з незарядженою бічною групою. Тому вони проявляють сильніші ізоляційні властивості (мають вищу діелектричну проникність). На зеленому тлі показані полярні амінокислоти з позитивно зарядженими бічними групами, а на червоному – неполярні амінокислоти. Залежності для цієї концентрації для інших частот наведені в додатку В.



а) реальна частина діелектричної проникності; б) уявна частина діелектричної проникності

Рисунок 4.4 – Залежності дійсної та уявної частин комплексної діелектричної проникності амінокислот від молярної маси для концентрацій 131,7 ммоль/л у водних розчинах, виміряних на частоті близько 35,6 ГГц

У якості контрольних досліджень для аналізу того, наскільки достовірні результати були отримані під час експерименту з використанням МШГ резонатору, було виміряно діелектричні характеристики з використанням датчику ємності NA503 у діапазоні частот 20 МГц – 20 ГГц (рис. 4.5). Також було проведено процедуру підгонки за формулою (1.19), результати – у табл. 4.1.

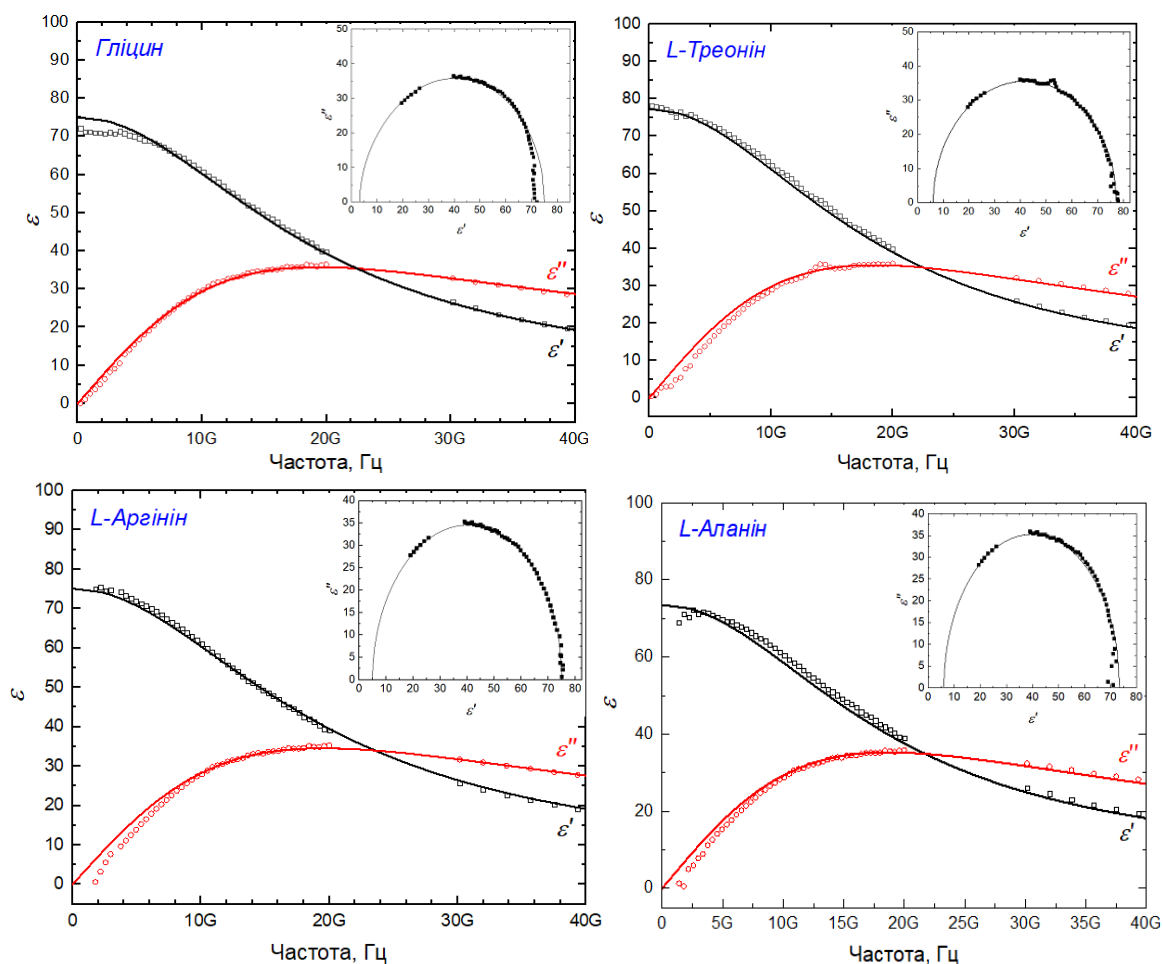


Рисунок 4.5 – Графік залежності діелектричної проникності від частоти та діаграма Коула-Коула для Гліцину: відкриті точки – експериментальні дані, суцільні лінії – результат підгонки

Процес підгонки відбувається наступним чином (рис. 4.6): визначаються параметри  $\epsilon_s$  та  $\epsilon_\infty$  для води, які задають радіус кола діаграми Коула-Коула. Потім знаходиться час релаксації: у найвищій точці визначається циклічна частота  $\omega$ , і з неї виражається  $\tau$ . Оцінюється загальний вигляд функції підгонки та аналогічна процедура проводиться для таких самих параметрів, але які відповідають релаксації амінокислоти.

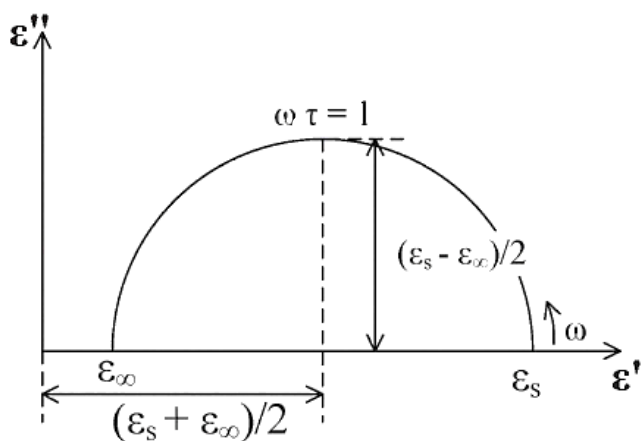


Рисунок 4.6 – Схематичне зображення визначення параметрів функції підгонки Коула-Коула

Експериментальні дані, отримані за допомогою методики оцінки діелектричної проникності за допомогою МШГ резонатору та результати підгонки наведені у додатку Г. Величина середнього квадратичного відхилення оцінена в діапазоні від 0.244 до 0.501.

Таблиця 4.1 – Значення, які були використані для підгонки за формулою Коула-Коула

Амінокислота	$\tau_1, \text{с}$	$\Delta\epsilon_1$	$\tau_2, \text{с}$	$\Delta\epsilon_2$	$\alpha_2$	$\alpha_2$
Аланін	$8.5 \cdot 10^{-12}$	67	$8.376 \cdot 10^{-12}$	7.5215	1	1
Аргінін	$8.5 \cdot 10^{-12}$	64	$4.547 \cdot 10^{-12}$	6.0961	1	1
Аспарагін	$8.5 \cdot 10^{-12}$	71.9	$7.140 \cdot 10^{-12}$	7.265	1	1
Валін	$8.5 \cdot 10^{-12}$	67,3	$7.246 \cdot 10^{-12}$	1.02515	1	1
Гістидин	$8.5 \cdot 10^{-12}$	69,7	$7.315 \cdot 10^{-12}$	1.5007	1	1
Гліцин	$8.5 \cdot 10^{-12}$	66.5	$2.234 \cdot 10^{-12}$	5.277	1	1
Глутамін	$8.5 \cdot 10^{-12}$	69,2	$3.320 \cdot 10^{-12}$	1.5295	1	1
Ізолейцин	$8.5 \cdot 10^{-12}$	63	$8.246 \cdot 10^{-12}$	4.490	1	1
Лейцин	$8.5 \cdot 10^{-12}$	69,7	$8.146 \cdot 10^{-12}$	0.4156	1	1
Лізин	$8.5 \cdot 10^{-12}$	68,39	$15.25 \cdot 10^{-12}$	0.0215	1	1
Метіонін	$8.5 \cdot 10^{-12}$	69,6	$12.24 \cdot 10^{-12}$	1.0225	1	1
Пролін	$8.5 \cdot 10^{-12}$	66.6	$15.24 \cdot 10^{-12}$	2.5175	1	1
Серин	$8.5 \cdot 10^{-12}$	67.6	$13.24 \cdot 10^{-12}$	1.9597	1	1
Треонін	$8.5 \cdot 10^{-12}$	68.4	$11,54 \cdot 10^{-12}$	2.810	1	1
Фенілаланін	$8.5 \cdot 10^{-12}$	72.4	$7,958 \cdot 10^{-12}$	1.4156	1	1
Цистеїн	$8.5 \cdot 10^{-12}$	65,4	$8,286 \cdot 10^{-12}$	7.530	1	1

## ВИСНОВКИ

Дослідження біологічних розчинів вимагають високої точності вимірювань, здатності виявляти невеликі зміни концентрації речовини та невеликі кількості досліджуваної рідини. У цій роботі було продемонстровано комплексну методику мікрохвильового вимірювання діелектричної проникності, засновану на високоякісному резонаторі в режимі МШГ з МК, виготовленого з матеріалу з низькими діелектричними втратами, яка дозволяє досліджувати невеликі кількості діелектричних рідин з високою точністю.

Під час виконання даної магістерської роботи було розроблено вимірювальну систему з єдиним МШГ резонатором з МК чипом для вимірювань на шести резонансних частотах без необхідності налаштування зв'язку. Резонаторна методика розроблена на основі резонатора МШГ, виготовленого з монокристалічного кварцового матеріалу.

У даному випадку можна проводити дослідження для ряду мод з кроком резонансу близько 2 ГГц. Зсув резонансної частоти та зміни зворотного Q-фактору були виділені шляхом підгонки вимірюваних частотних характеристик для різних концентрацій 16 амінокислот у водних розчинах. Отримання Q-фактора та резонансної частоти за допомогою звичайних методів, таких як підгонка Лоренца та метод рівня -3 дБ, є точним лише для симетричних резонансних частотних характеристик, тому для одночасного вимірювання на шести різних частотах було використано підхід вилучення параметрів зв'язаних мод. Використана функція ідеально відповідає несиметричним резонансним характеристикам, і похибка стандартного відхилення визначення резонансної частоти коливається від 1 кГц ( $3 \cdot 10^{-6} \%$ ) до 5,4 кГц ( $1.8 \cdot 10^{-5} \%$ ), а визначення Q-фактору — від 0,6 (0,03 %) до 5,1 (0,09 %).

Резонансна структура була змодельована за допомогою програмного забезпечення COMSOL Multiphysics. На основі цієї моделі були отримані шість градууювальних номограм для вимірювання на кожному з шести режимів.

Розрахунок номограм потребує часу, однак його слід виконувати лише один раз і безпосередньо до експериментального дослідження, тому це не збільшує загальний час вимірювання на відміну від настройки кожного резонансу окремо.

Продемонстровано можливість використання сенсору на основі МШГ резонатора для діелектрометрії біологічних рідин з маленькою концентрацією (близько 5 ммоль/л) та малого об'єму (приблизно 400 нл). Ця методика є дуже перспективною з огляду на це, адже може дозволити досліджувати релаксаційні процеси високо вартісних та складно видобутих рідин, наприклад, таких як ДНК.

У ході виконання магістерської роботи було експериментально оцінено діелектричні проникності 16 амінокислот при кімнатній температурі, а також визначено параметри, які можуть бути використані для пошуку оптимальних параметрів для функції підгонки Коула-Коула.

Використана методика передбачає також наступні можливі шляхи її вдосконалення. В майбутньому планується проводити дослідження в діапазоні низьких температур (нижче 0 °C), де діелектричні втрати, які вносяться кристалом води, стають на порядок нижчими порівняно з тими, які вода вносить при кімнатній температурі (близько 3.15 для реальної та 0.0024 для уявної частин діелектричної проникності для льоду при -10 °C та 22.128 та 30.247 для реальної та уявної частин діелектричної проникності води при кімнатній температурі відповідно). Це може дозволити відокремлювати відгук від більш низьких концентрацій досліджуваного матеріалу та оцінювати з вищою точністю величину проникності.

## ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ

1. Schrader B. Infrared and Raman Spectroscopy: Methods and Applications. – Weinheim, 1995. – 788 p.
2. Dressel M., Gruner G. Electrodynamics of Solids. – Cambridge University Press, 2002. – 474 p.
3. Mittleman D. Sensing with Terahertz Radiation. – Springer, 2007. – 337 p.
4. Яненко О. П., Перегудов С. М., Шевченко К. Л. Радіометричні НВЧ методи та засоби вимірювання фізичних величин [Електронний ресурс]: навч. посіб. для студ. спеціальності 172 «Телекомунікації та радіотехніка» / О. П. Яненко, С. М Перегудов, К. Л. Шевченко. – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2021. – с. 205.
5. Bibi F., Villain M., Guillaume C., Sorli B., Gontard N.A. Review: Origins of the Dielectric Properties of Proteins and Potential Development as Bio-Sensors // Sensors. 2016. Vol. 16. P. 1232.
6. Bakewell D.J., Vergara-Irigaray N., Holmes D. Dielectrophoresis of Biomolecules // JSM Nanotechnology and Nanomedicine. 2014. Vol. 1(1).
7. Shaforost O.N. Microwave whispering-gallery resonators for nanolitre liquid sensing. –Jülich, 2009. – 135 p.
8. Takashima S. Electrical properties of biopolymers and membranes. – Philadelphia, 1989. – 416 p.
9. Debye P. Polar Molecules. – New York, 1929. – 172 p.
10. Hasted J.B. Aqueous Dielectrics. // Since. 1975. Vol. 187(4174). P. 314.
11. Ellison W.J., Lamkaouchi K., Moreau J.M. Water: A dielectric reference // Journal of Molecular Liquids. 1996. Vol. 68(2-3). P. 171-279
12. Rodriguez Arteché I. Dynamics of Amino Acid Water Solutions as studied by Dielectric Spectroscopy. – Leioa, 2011. – 94 p.
13. Cole K., Cole R. Dispersion and Absorption in Dielectrics I. Alternating Current Characteristics // Journal of Chemical Physics. Vol. 10(2). 1942. P. 98-105.

14. Davidson D.W., Cole R.H. Dielectric Relaxation in Glycerine // J. Chem. Phys. Vol. 18(1). 1950. P. 1417.
15. Havriliak S., Negami S. A complex plane representation of dielectric and mechanical relaxation processes in some polymers // Polymer. Vol. 8. P. 161-210.
16. Batyuk L., Kizilova N. Modeling of dielectric permittivity of the erythrocytes membrane as a three-layer model. – In book: Development trends in medical science and practice: the experience of countries of Eastern Europe and prospects of Ukraine, 2018. – P. 18-37.
17. Brosseau Ch., NDong W., Castel V., Ben Youssef J., Vidal A. Electromagnetomechanical coupling characteristics of plastroferrites // J. Appl. Phys. 2007; Vol. 102(2). P. 024907.
18. Hölzel R. Dielectric and dielectrophoretic properties of DNA // IET Nanobiotechnology. Vol. 3(2). 2009. P. 28-45.
19. Mashimo S., Umehara T., Kuwabara S., Yagihara S. Dielectric Study on Dynamics and Structure of Water Bound to DNA Using a Frequency Range  $10^7$ - $10^{10}$  Hz // J. Phys. Chem. Vol. 93. 1989. P. 4963-4967.
20. Mughal U. N., Virk M. S., Mustafa M. Y. Dielectric based sensing of atmospheric ice. 39th International conference applications of mathematics in engineering and economics. Vol. 1570(1). 2013. – P. 212 – 220.
21. Проценко І.О. Мікрохвильовий відгук квазіоптичних діелектричних резонаторів із сильнопоглинаючою рідиною: Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису. Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.03 «Радіофізика». Харків, 2017. 130 с.
22. Hlukhova H. Development and Fabrication of Functional Layers for Cardiac Biosensor Application. – TU Dortmund, 2019. – 150 p.
23. Gubin O. et al. Single Whispering-Gallery-Mode Resonator With Microfluidic Chip as a Basis for Multifrequency Microwave Permittivity Measurement of Liquids. IEEE transactions on microwave theory and techniques. Vol. 70(6). 2022. – P.3310-3318.

24. Krupka J et al. Complex permittivity of some ultralow loss dielectric crystals at cryogenic temperatures. *Measurement Science and Technology*. Vol. 10(5). 1999. – P. 387–392.

25. Skresanov V. N., Glamazdin V. V. and Cherpak N. T. The novel approach to coupled mode parameters recovery from microwave resonator amplitude-frequency response. 2011 41st European Microwave Conference. 2011. – P. 826-829.

