

DESARROLLO DE UN SENSOR DE MICROONDAS BASADO EN
UN RESONADOR *CIRCULAR-SRR* MODIFICADO CON UN *IDC*
COMO ESTRATEGIA DE AUMENTO DE SENSITIVIDAD EN LA
DETECCIÓN DE CONTAMINANTES ORGÁNICOS EN AGUA

Tesis

QUE PARA OBTENER EL GRADO ACADEMICO DE

Maestro en Ciencia y Tecnología
en la Especialidad de Ingeniería Ambiental

PRESENTA

Abigail González Zea



Santiago de Querétaro, Qro., México, 11 de noviembre del 2022.

**Centro de Investigación y Desarrollo Tecnológico en
Electroquímica S.C.**

REALIZADO POR:

Ing. Abigail González Zea

DIRIGIDA POR:

Dr. José Luis Herrera Celis

Dr. Abraham Ulises Chávez Ramírez

SINODALES

Presidente

Dr. José Antonio Ávila Niño

Secretario

Dr. Carolina Martínez Sánchez

Vocal

Dr. José Luis Olvera Cervantes



Este trabajo fue realizado en el Centro de Investigación y Desarrollo Tecnológico en Electroquímica, S.C. (CIDETEQ), bajo la dirección del Dr. José Luis Herrera Celis y la co-asesoría del Dr. Abram Ulises Chávez Ramírez financiado por proyectos con financiamiento por parte de The University of Texas en Austin y el CONACYT a través del 2020 CONTEX-076B Award.

Resumen

En este trabajo se presenta el diseño, fabricación, optimización y caracterización de un sensor basado en el principio de resonancia a una frecuencia de operación de 1.8 GHz dentro del rango de las microondas. El sensor permite detectar los cambios en la permitividad de una muestra líquida al estar en contacto con el área de mayor intensidad del campo eléctrico. El diseño del sensor está basado en un resonador circular de doble anillo dividido con un capacitor interdigitado insertado en la brecha del anillo externo. La adición del capacitor interdigitado permitió concentrar el campo eléctrico y definir el área de sensado.

El sensor es de dos puertos, los cuales se conectan a un analizador vectorial de redes para poder obtener los parámetros de transmisión S_{21} en un rango de frecuencias que incluya las frecuencias de resonancia de las muestras que se van a medir.

La caracterización del sensor se realizó mediante mediciones con diferentes concentraciones de metanol-agua y etanol-agua. A partir de estas mediciones, se determinaron las permitividades reales e imaginarias mediante un ajuste lineal de la relación entre las fracciones de etanol o metanol y la frecuencia de resonancia, así como la relación con la amplitud del parámetro de transmisión S_{21} .

Finalmente, se realizaron mediciones con los contaminantes orgánicos triclosán y glifosato a concentraciones de hasta 5 $\mu\text{g/mL}$, mostrando una alta sensibilidad del sensor en comparación con trabajos recientes. Por esta razón se concluye que este tipo de sensores pueden ser utilizados en la detección de contaminantes debido a su bajo costo, fácil fabricación y el posible monitoreo en tiempo real.

Abstract

This work presents the design, fabrication, optimization, and characterization of a sensor based on the resonance principle at an operating frequency of 1.8 GHz within the microwave range. The sensor allows detecting changes in the permittivity of a liquid sample when it is put into contact with the area of highest electric field intensity. The design of the sensor is based on a split double ring circular resonator with an interdigitated capacitor inserted in the gap of the outer ring. The addition of the interdigitated capacitor allowed to concentrate the electric field and define the sensing area.

The sensor has two ports, which are connected to a vector network analyser to obtain the transmission parameters S_{21} in a frequency range that includes the resonance frequencies of the samples to be measured.

The characterization was carried out with different concentrations of methanol-water and ethanol-water. From these measurements, the real and imaginary permittivities were determined through a linear fit of the relationship between the fractions of ethanol or methanol and the resonance frequency, as well as the relationship with the amplitude of the transmission parameter S_{21} .

Finally, measurements using triclosan and glyphosate as organic contaminants at concentrations of up to 5 $\mu\text{g/mL}$ were made, showing a high sensitivity of the sensor compared to recent works. For this reason, it is concluded that this type of sensor can be used in the detection of contaminants due to its low cost, easy manufacturing, and the possible real-time monitoring.

Agradecimientos

Agradezco al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por la beca otorgada, al Centro de Investigación y Desarrollo Tecnológico en Electroquímica S.C. (CIDETEQ) por permitirme cursar la maestría en el Programa Interinstitucional en Ciencia y Tecnología con Especialidad en Ingeniería Ambiental y al Laboratorio Nacional de Micro y Nanofluídica por el acceso a las instalaciones y equipos. También, agradezco al Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica (INAOE) por permitirme llevar a cabo las mediciones de caracterización de las muestras líquidas.

También agradezco a las siguientes personas que colaboraron en la realización del proyecto:

- A mi asesor el Dr. José Luis Herrera Celis.
- A mi co-asesor el Dr. Abraham Ulises Chávez Ramírez.
- A los integrantes de mi comité tutorial: el Dr. Jannú Ricardo Casanova Moreno, la Dra. Linda Gonzalez Victoria Gonzalez Gutiérrez y al Dr. Jose Luis Olvera Cervantes.
- Al Dr. Arcesio Arbeláez Nieto por su apoyo en el desarrollo del proyecto.

ÍNDICE

Capítulo 1. Antecedentes.....	15
1.1 INTRODUCCIÓN.....	16
1.1.1 Antecedentes.....	17
1.2 HIPÓTESIS.....	23
1.3 OBJETIVOS	24
1.3.1 Objetivo general	24
1.3.2 Objetivos específicos.....	24
1.4 JUSTIFICACIÓN	24
1.5 FUNDAMENTOS	26
1.5.1 Sensores.....	26
1.5.2 Dispositivos en Radiofrecuencia	26
1.5.3 Líneas de transmisión y guías de onda.....	29
1.5.4 Análisis de redes de microondas	32
1.5.5 Resonadores.....	33
1.5.6 Propiedades electromagnéticas de los materiales.....	35
1.5.7 Polarización.....	37
1.5.8 Métodos de medición de la permitividad dieléctrica.....	38
1.5.9 Métodos resonantes para medir las propiedades dieléctricas	39
1.5.10 Resonadores de anillo basados en líneas microstrip.....	39
1.5.11 Capacitores interdigitados	40
1.5.12 Contaminantes orgánicos de interés	41
1.5.13 Simulación de dispositivos de radiofrecuencia	42
1.5.14 Métodos de medición.....	43

Capítulo 2. Diseño y simulaciones	46
2.1 Cálculos de diseño	47
2.2 Modelado del resonador en HFSS	48
2.1 Simulación del resonador.....	49
2.2 Resultados de las simulaciones.....	50
2.2.1 Parámetro de transmisión S_{21}	51
2.2.2 Estudio de la intensidad de campo eléctrico.....	53
2.3 Incorporación de capacitores interdigitados	55
2.4 Definición del ancho de los interdigitados.....	57
2.5 Efecto de la altura del canal.....	59
2.5.1 Sensibilidad del resonador.....	61
2.5.2 Pruebas con metanol.....	63
2.6 Conclusiones del capítulo	65
Capitulo 3	66
Fabricación y calibración del sensor	66
3.1 Fabricación de la estructura del resonador.....	67
3.2 Fabricación de la tapa de PDMS.....	67
3.3 Mediciones con soluciones de referencia.....	70
3.4 Método de calibración.....	74
3.5 Análisis de sensibilidad.....	77
Capitulo IV	80
Mediciones con contaminantes orgánicos	80
4.1 Mediciones con acetato de sodio	81
4.2 Mediciones con triclosán	85
4.3 Mediciones con glifosato.....	87

4.4	Limites de detección y sensibilidad del triclosán y glifosato.....	88
4.5	Propiedades dieléctricas de los contaminantes	89
4.5.1	Incertidumbre de la sonda.....	95
4.6	Conclusiones del capítulo	95
4.7	Hallazgos.....	96
4.8	Trabajos a futuro.....	97
	Conclusiones generales.....	97
	Bibliografía.....	100
	ANEXOS A	107

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Distribución porcentual de los sitios de monitoreo de calidad del agua (de acuerdo al indicador DQO en 2021) [23].....	25
Figura 2. (a) Ejemplos de aplicaciones inalámbricas (b) componentes en RF y propagación de ondas electromagnéticas [25].....	27
Figura 3. Representación de una onda electromagnética sinusoidal en la dirección positiva x con una rapidez c [26].	28
Figura 4. Geometría de la línea de transmisión <i>microstrip</i> [31].....	29
Figura 5. Líneas del campo magnético y eléctrico de la línea de transmisión <i>microstrip</i> [31].	30
Figura 6. Resonador en serie y su respuesta. a) Circuito de resonador RLC serie. b) Magnitud de impedancia de entrada versus frecuencia [30].	34
Figura 7. Resonador paralelo RLC y su respuesta a) Circuito paralelo RLC b) Magnitud de Impedancia de Entrada y su Respuesta (Pozar, David, 2011).	34
Figura 8. Ilustración de la distribución de cargas en un material polarizado.	36
Figura 9. Mecanismos de polarización para diferentes rangos de frecuencia [34].....	38
Figura 10. Estructura de un capacitor interdigitado [39].....	40
Figura 11. Estructura química del Triclosán.	41
Figura 12. Estructura química del glifosato.....	42
Figura 13. Diagrama a bloques de un analizador de redes.	44
Figura 14. Fotografía de sonda coaxial conectada al VNA.	45
Figura 15. Geometría del resonador Circular- SRR y sus dimensiones.	48
Figura 16. Construcción del resonador en HFSS.	49
Figura 17. Ilustración de la caja de radiación usada en las simulaciones.	49
Figura 18. Herramienta <i>Result</i> para la presentación de resultados.....	50
Figura 19. Ventana de configuración del gráfico de resultados.	51
Figura 20. Parámetro de transmisión S_{21} para el resonador circular-SRR con un <i>gap</i> exterior de 2 mm e interior de 0.9 mm.....	53
Figura 21. <i>Plot fields</i> : herramienta para generar un campo.....	54

Figura 22. Ventana de configuración de los parámetros del gráfico de campo eléctrico.....	54
Figura 23. Distribución de la intensidad de campo eléctrico del resonador seleccionado. ..	55
Figura 24. Parámetro de transmisión S_{21} colocando interdigitados en las tres combinaciones posibles del resonador.	56
Figura 25. Distribución de campo eléctrico: a) con interdigitados en el anillo interior (83 dB), b) con interdigitados en el anillo exterior (115.92 dB) y c) con interdigitados en ambos anillos (117 dB).....	57
Figura 26. Factor de calidad en función del ancho de los interdigitados.	58
Figura 27. Ilustración de los parámetros geométricos principales del capacitor interdigitado.	59
Figura 28. Resultados de las simulaciones del resonador con interdigitados de 110 μm . a) Parámetro de transmisión S_{21} y b) distribución de la intensidad de campo eléctrico.....	59
Figura 29. Distribución de la intensidad del campo E en planos a diferentes alturas.....	61
Figura 30. Cambio de frecuencia respecto al cambio en la permitividad relativa del MUT .62	
Figura 31. Sensibilidad del resonador en función de la permitividad relativa.	62
Figura 32. Sensibilidad normalizada con respecto al volumen de muestra en función de la permitividad relativa.....	63
Figura 33. Ilustración de la construcción del resonador con la tapa de PDMS en HFSS.....	64
Figura 34. Espectros del parámetro de transmisión S_{21} para concentraciones de metanol en agua del 10% al 100%.....	64
Figura 35. Sensibilidad del resonador en función de la permitividad relativa de la muestra.	65
Figura 36. Resonador fabricado: a) vista completa, b) foto microscópica en el área de los interdigitados.....	67
Figura 37. Fotografía de la pieza de PMDS después de removerla del molde.....	68
Figura 38. Fotografía del equipo 6800 Spin Coater Series.....	68
Figura 39. Fotografía del equipo de plasma PDC-001-LD.	69
Figura 40. Prueba de fugas del canal microfluídico sobre la zona de sensado del resonador.	69
Figura 41. Parámetro de transmisión S_{21} para el resonador con tapa de PDMS y canal libre de muestra líquida.....	70

Figura 42. Capas de materiales del resonador.....	70
Figura 43. Fotografía del prototipo conectado al VNA, y este a la computadora.	71
Figura 44. Fotografía del prototipo con las mangueras acopladas a los puertos de entrada y salida de las muestras líquidas.....	71
Figura 45. Respuesta espectral del parámetro de transmisión S_{21} para muestras de metanol en agua con diferentes fracciones de volumen.....	72
Figura 46. Pico de atenuación (a) y frecuencia de resonancia (b) para diferentes fracciones de volumen de metanol en agua.	72
Figura 47. Respuesta espectral del parámetro de transmisión S_{21} para muestras de etanol en agua con diferentes fracciones de volumen.....	73
Figura 48. Frecuencia de resonancia(a) y pico de atenuación (b) para diferentes fracciones de volumen de etanol en agua.	73
Figura 49. Permitividad relativa de diferentes fracciones de metanol en agua calculada en comparación con [53]. a) Parte real. b) Parte imaginaria.	76
Figura 50. Permitividad relativa de diferentes fracciones de etanol en agua calculada comparada con [53]. a) Parte real. b) Parte imaginaria.....	76
Figura 51. Sensitividad del prototipo para diferentes permitividades.....	78
Figura 52. Cambio en la frecuencia de resonancia del acetato de sodio a diferentes concentraciones.	82
Figura 53. Relación entre la concentración de acetato de sodio y la transmisión en dB.....	83
Figura 54. Relación entre la concentración de acetato de sodio y la transmisión en dB.....	83
Figura 55. Parametro de transmision S_{21} para diferentes concentraciones de triclosán.....	86
Figura 56. Relación entre la concentración de triclosán y la transmisión.....	86
Figura 57. Parametro de transmision S_{21} para diferentes concentraciones de glifosato.....	87
Figura 58. Relación entre la concentración de glifosato y el pico de atenuación.....	88
Figura 59. Foto de la sonda coaxial midiendo la permitividad del agua para su calibración.	90
Figura 60. Permitividad del triclosán a diferentes concentraciones (parte real).....	91
Figura 61. Permitividad del triclosán a diferentes concentraciones (parte imaginaria).	91
Figura 62. Tangente de pérdidas del triclosán a diferentes concentraciones.....	92
Figura 63. Permitividad del glifosato a diferentes concentraciones (parte real).....	93

Figura 64. Permitividad del glifosato a diferentes concentraciones (parte imaginaria).....	93
Figura 65. Tangente de perdidas del glifosato.....	94

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Sensores de especies orgánicas [7].....	19
Tabla 2. Denominación de frecuencia de acuerdo a la ITU [27].....	28
Tabla 3. Parámetros de la línea <i>microstrip</i>	47
Tabla 4. Configuración de la simulación.....	50
Tabla 5. Factor de Calidad Q_1 (primera resonancia) y Q_2 (segunda resonancia) para diferentes combinaciones de separación.	52
Tabla 6. Variación de la frecuencia de resonancia al pasar de agua a metanol.....	60
Tabla 7. Permitividad relativa reportada para metanol en agua a diferentes concentraciones con los valores de frecuencia de resonancia y pico de atenuación medidos.	74
Tabla 8. Comparación de este prototipo con varios sensores microfluídicos planos basados en resonancia en términos de frecuencia de resonancia ($f_{vacío}$), volumen de muestra (V.M.) y sensibilidad promedio (Sens. Prom).....	78
Tabla 9. Comparación de los parámetros de medición calculados para el triclosán y el glifosato.....	89
Tabla 10. Propiedades dieléctricas del triclosán a 500 MHz.....	92
Tabla 11. Propiedades dieléctricas del glifosato a 500 MHz.	94

Capítulo 1. Antecedentes

El conocimiento de las propiedades dieléctricas de un material es una herramienta muy útil para la investigación de mecanismos intermoleculares e intramoleculares de los materiales compuestos. Por ello, los dispositivos de microondas tienen numerosas aplicaciones. En el caso de los sensores, éstos tienen importantes ventajas en comparación con otros principios de sensado, como la realización de medidas no destructivas y no intrusivas, son de bajo coste y fácil fabricación. Sin embargo, uno de los principales retos de este tipo de tecnologías es que no han logrado mostrar una alta sensibilidad para cumplir con los límites de detección de las normas para contaminantes en agua. En este sentido, en este proyecto se plantea la mejora de dicha sensibilidad mediante el análisis de la estructura.

El propósito de este capítulo es hacer una introducción al tema de microondas y dispositivos en radiofrecuencia (RF); la aplicación en el sensado de químicos en agua; los principales y recientes avances en los dispositivos de microondas para sensar diferentes compuestos, así como sus límites de detección y sensibilidad. En consecuencia, se plantearon los objetivos y la hipótesis para dar inicio al desarrollo del diseño del sensor y la metodología experimental que se presentan en el capítulo 2.

En este capítulo se presentan los antecedentes, objetivos, hipótesis y la justificación del proyecto. También se mencionan los conceptos teóricos más relevantes que enmarcan el desarrollo de la tesis.

1.1 INTRODUCCIÓN

Se estima que para el 2030, el mundo registrará un 40% de déficit hídrico de no cambiar la tendencia actual según el *Water Resources Group* (2009). Al hablar de calidad del agua nos referimos a sus características físicas, químicas y biológicas. Su calidad, por lo tanto, debe ser monitoreada constantemente para poder determinar el uso que se le debe dar. Se estima que a nivel global el 80% de todas las aguas residuales industriales y municipales se vierten al ambiente sin ningún tipo de tratamiento previo, con efectos nocivos para la salud humana y los ecosistemas [1]. Esta proporción es mucho mayor en los países desarrollados que

carecen en gran parte de instalaciones de saneamiento y de tratamiento de aguas residuales [2].

Los métodos de medición tradicionales como las pruebas de carbón orgánico total (COT) en laboratorio requieren de una metodología rigurosa y costosa. Por esa razón, los sensores han despertado interés científico y tecnológico, ya que dependiendo de su principio de sensado pueden alcanzar resultados similares a las pruebas tradicionales.

Este trabajo propone el desarrollo de un sensor de microondas basado en el principio de resonancia para medir concentraciones de contaminantes emergentes como: atrazin, triclosán y clordano. El propósito es lograr un diseño que nos permita realizar mediciones dentro de los límites máximos permisibles por las normas mexicanas y la *Environmental Protection Agency* (EPA), así como generar un prototipo de bajo costo con aplicaciones *in situ*.

1.1.1 Antecedentes

Los métodos de detección de materia orgánica en el agua se pueden ser los tradicionales que se realizan *ex situ* como el Carbón Orgánico Total (COT), la Demanda Química de Oxígeno (DQO) y la Demanda Biológica de Oxígeno (DBO), los cuales son efectivos en la detección de materia orgánica pero no proporcionan información específica acerca de un contaminante, para esto se realizan métodos de cromatografía líquida de alta resolución. Por otro lado, tenemos los sensores, los cuales permiten obtener datos en el lugar de la muestra y se clasifican según su principio de funcionamiento en ópticos, mecánicos, electroquímicos, biológicos y basados en microondas.

1.1.1.1 Carbón Orgánico Total

El COT (Carbón Orgánico Total) es un método que permite medir el contenido total de carbono presente en el agua, ya sea como compuestos orgánicos fijos o volátiles, naturales o sintéticos, especialmente para indicar bajas concentraciones de materia orgánica. En general, este método se lleva a cabo inyectando una cantidad de muestra en un horno a alta temperatura o en un medio químicamente oxidante. En presencia de un catalizador, el carbono orgánico se oxida a anhídrido carbónico. En aguas residuales urbanas la

concentración de COT puede fluctuar entre los 80-290 mg/L [3]. Los métodos más comunes para la medición del COT están basados en la aplicación de calor y oxígeno, irradiación ultravioleta (UV), oxidantes químicos, o combinaciones de estos, para convertir el carbono orgánico en CO₂ [4].

1.1.1.2 Métodos cromatográficos

La cromatografía es esencialmente un método físico de separación en el cual los componentes a ser separados son distribuidos entre dos fases, una de las cuales no se mueve (aparentemente llamada la fase estacionaria) y otra que se mueve a través en una dirección definida (comúnmente descrita como fase móvil) [5]. Los métodos cromatográficos tienen los mismos principios fundamentales, aunque se suelen clasificar según el estado físico de la fase móvil.

La cromatografía de gases tiene aplicaciones ambientales en la detección de contaminantes orgánicos en agua y suelos, tales como pesticidas, herbicidas e hidrocarburos. Una de las metodologías más comunes en la extracción líquido-líquido utiliza solventes de acetonitrilo y q-dodecanol, obteniendo porcentajes de recuperación de 90-99% y bajos límites de detección (5×10^{-4} - 5×10^{-1} mg/L), empleando para la separación y detección cromatografía líquida con detección DAD [6].

1.1.1.3 Sensores de calidad del agua

Los sensores son dispositivos diseñados con la capacidad de responder a un estímulo externo y transformarlo en una respuesta eléctrica. Algunas características que deben cumplir son: el contacto directo con el sujeto a investigar, una rápida respuesta, la operación continua, son pequeños y económicos.

Es muy común que los contaminantes orgánicos se analicen por alguna de las técnicas mencionadas en el subtema anterior, sin embargo, los sensores también se han convertido en una opción más económica, fácil y rápida de obtener los datos de concentraciones de contaminantes orgánicos. El principio de operación de los sensores puede ser electroquímico, óptico y mecánico, entre otros. La Tabla 1 muestra los tipos de sensores reportados y el rango de concentraciones de especies de contaminantes que se han detectado.

Tabla 1. Sensores de especies orgánicas [7].

Especies	Rango	Principio
Ftalatos	2 ppb-2ppm	Electroquímico (Impedancia)
Triclosán	10^{12} - 10^{-6} M	Electroquímico (Impedancia)
Dodecil Sulfato De Sodio (SDS)	10^{-6} - 10^{-3} M	Electroquímico (Potenciométrico)
Surfactantes Catiónicos	10^{-6} - 10^{-3} M	Electroquímico (Conductometrico)
Sodio Dodecil Sulfato (SDS)	>0.25 μ M	Óptico (Fluorescente)
Atrazina	0.1- 100 μ M	Electroquímico (Potenciométrico)
Cianazina, Simazina, Atrazina	0.1-6.6 nM	Optical (Spr)
Atrazina	>0.01 nM	Eléctrico (Quimiresistor)
Atrazina	0.08-1.5nM	Mecánico (Qcm)
Nitrobenzeno	10-100 ppm	Óptico (Fluorescente)
Hexaclorobenceno	> 10^{-12} M	Mecánico (QCM)
Benzo(A) Pierno	>10 ppb	Óptico (Fluorescente)
Tricloroetileno, Tetracloroetileno, Tetracloruro De Carbón	>2 ppm	Óptico (Absorción Infrarroja)
TOC	0.5-3 g/L	Óptico (Absorción Infrarroja)
Formaldehido	>30 ppb	Electroquímico (Amperométrico)

Formaldehido	0.9-130 μ M	Óptico (Fluorescente)
Formaldehido	1 μ m-16 mM	Electroquímico (Amperométrico)
Formaldehido	10-100 ppm	Óptico (Fluorescente)
Trinitrotolueno	>0.01 ppb	Eléctrico (Quimio-resistivo)

1.1.1.4 Sensores de microondas

En 2011 Jordi Naqui, M. Duran- Sindreu y Freran M. estudiaron las propiedades simétricas del resonador SRRs (*split ring resonator*) para su implementación en dispositivos de sensado, demostrando que la rotación de la geometría influye en la sensibilidad del resonador. La estructura consiste en una guía de onda coplanar (*CPW*) cargada con un SRRs movable en el lado del sustrato [8].

Se han reportado diferentes sensores basados en microondas para el monitoreo de la calidad del agua en tiempo real. G.Gennarelli y F. Soldovieri en 2013 desarrollaron un sensor basado en un resonador de cavidad compacta a una frecuencia de 1.91 GHz. El principio de sensado se basa en la respuesta del dispositivo en términos de potencia de transmisión, frecuencia de resonancia y amplitud de banda. La variación de estos parámetros causa un cambio en la permeabilidad y la conductividad de las muestras de agua contaminadas. El sistema es capaz de detectar la presencia de nitratos y sulfatos disueltos en agua en concentraciones sobre 10 mg/L [9][10].

Ortoneda *et al.* en 2013 aplicaron un sensor de microondas para detectar concentraciones de 0.1 M y 0.01 M de NaCl en tiempo real en agua con volúmenes de 20 μ L. El material utilizado fue una lámina flexible de 2 mm de espesor con un sustrato de plata de 35 μ m con un patrón planar en la superficie. El cambio de frecuencia reportado durante las pruebas fue de 0-15 GHz.

Otro tipo de estructura desarrollada es la *complementary split-ring resonator* (CSRR). Ebrahimi *et al.* en el artículo “*High-Sensitivity Metamaterial-inspired Sensor for*

Microfluidic Dielectric Characterization” del 2014 muestran este tipo de resonador con un canal microfluídico. Las propiedades dieléctricas de una muestra líquida pueden ser determinadas estableciendo una relación empírica entre la resonancia característica y la permitividad compleja de la muestra. El sensor se calibra con fracciones porcentuales de metanol-agua de 10%-100%.

En 2015 Zarifi *et al.* presentaron un resonador de microondas cubierto con una capa de PDMS Polidimetilsiloxano (PDMS), que actúa como un absorbente del compuesto. La inducción-absorción del PDMS hinchado cambia la permeabilidad y resulta en variaciones de la reproductibilidad de la frecuencia de resonancia del resonador. Se detectaron concentraciones de acetona de 0 a 265 ppt [13].

Otra de las aplicaciones de los sensores de microondas acoplados a un canal microfluídico es la detección de glucosa en pacientes diabéticos. Cheretiennot, Dubuc y Grenier en 2016 reportaron la detección de concentraciones de glucosa en el rango de 80 g/L hasta 0.3 g/L y obtuvieron una sensibilidad del sensor de 7.6×10^{-3} dB/(g/L) así como una resolución de 0.4 g/L. Ilaria Frau *et al.* en 2016 lograron la detección de metales como Zinc usando un sensor tipo plano funcionalizado con una película basada en β - Bi_2O_3 de 60 μm de espesor, el cual ofrece un rendimiento mejorado en comparación con los sensores sin recubrimiento [14].

Muhammad y Sungjoon en 2016 presentaron otro tipo de sensor de microondas, los *Substrate-interdigitated waveguide (SIW)*. La frecuencia de resonancia del sensor *SIW* se cambia llenando una cantidad muy pequeña de producto químico dentro del canal fluídico, lo que también causa una diferencia en la permitividad efectiva. La cantidad máxima de producto químico después de la inyección se mantiene en el centro de la estructura *SIW*, que tiene la magnitud máxima de distribución del campo eléctrico. En 2018 los mismos autores publicaron *Microfluidic High-Q Circular substrate-integrated waveguide (SIW) cavity for RF chemical liquid sensing*, donde comparan el factor de calidad Q de una estructura circular con una cuadrada, mostrando un mayor factor Q la circular de 1080. El método para determinar las diferentes permitividades de los materiales líquidos es por perturbación del campo eléctrico y la frecuencia de operación va de 5.26 a 5.34 GHz mostrando un cambio de frecuencia de 5.26 a 5.18 GHz cuando el micro canal contiene etanol [15].

Velez *et al.* en 2018 presentaron otro tipo de configuración es la de los sensores de permitividad diferencial basados en un par de líneas de microbanda desacopladas cada uno cargado con un resonador de Anillo Dividido Complementario Abierto (OCSRR por sus siglas en inglés). El principio de detección se basa en la medición de la pérdida de inserción en modo cruzado, muy sensible a la carga asimétrica. Así, al cargar uno de los OCSRR con la muestra de referencia, y el otro con la muestra bajo prueba (SUT por sus siglas en inglés), la diferencia en la permitividad compleja entre ambas muestras genera una asimetría que da lugar a la conversión de modo. Al agregar canales fluídicos en la parte superior de los OCSRR, el sensor propuesto es útil para la medición de la constante dieléctrica compleja de líquidos y obtención de resultados experimentales en mezclas de etanol y agua desionizada (DI) y metanol en agua DI [16].

Xingyun *et al.* en 2019 propusieron un resonador en espiral circular complementario (CCSR por sus siglas en inglés) que funciona a alrededor de 2,4 GHz para identificar muestras líquidas y determinación de sus constantes dieléctricas. El sensor propuesto fue fabricado y probado para identificar eficazmente diferentes líquidos comúnmente utilizados en la vida diaria y determinar las concentraciones de varias mezclas de etanol-agua midiendo la frecuencia de resonancia del CCSR [17].

Los sensores de microondas funcionalizado con revestimientos a base de l-cisteína, quitosano y bismuto, zinc, cobalto, han mostrado una mejora en el rendimiento de la detección como se presenta en [18]. Esta funcionalización de sensores ofrecen la posibilidad de monitorear *in situ* las concentraciones de metales tóxicos en el agua impactada por la minería, como el cobre y zinc [18].

1.1.1.5 Sensores de microondas con capacitores interdigitados

El capacitor interdigital (o interdigitado) es un elemento para producir una característica de paso alto similar a un condensador utilizando líneas microstrip [19]. Porwal *et al.* en 2017 diseñaron un sensor en RF para la detección de permeabilidad compleja y permitividad de muestras desconocidas usando una técnica no invasiva ya que no modifica las propiedades de dicha muestra. Se colocaron capacitores interdigitados (*IDC*) y un inductor en espiral. La frecuencia a la cual opera es de 2.2-2.8 GHz. Se calculó la permitividad y permeabilidad

relativa de muestras como magnetita, cobalto, ferrita, caucho, plástico y madera. El sensor presentó un error promedio de 2% en las mediciones realizadas.

En un estudio de Yeo y Lee en 2019 se propusieron un sensor de microondas basado en capacitores interdigitados en una línea de transmisión de microcinta para la caracterización de materiales planos. El sistema operaba a 1.5 GHz bajo condiciones de descarga. Se testaron muestras con constantes dieléctricas de 2.17 a 10.2 para comparar la sensibilidad, la cual se midió por el cambio de la frecuencia de resonancia del coeficiente de transmisión. La sensibilidad del sensor calculada fue de 0.067 GHz [10].

En 2018 Reinecke desarrolló un resonador Split ring como un biosensor funcionalizado con aptámeros registrando un cambio en la frecuencia por cambios en la permitividad de una proteína. Se adicionaron capacitores interdigitados en el *gap* del anillo exterior, lo que permitió concentrar el campo eléctrico. El ancho de los dedos de los capacitores fue de 500 μm [20].

1.2 HIPÓTESIS

Es posible detectar variaciones en la concentración de contaminantes orgánicos en agua mediante un resonador *Circular-SRR* modificado con un *IDC* debido a que al aumentar la capacitancia se mejora el factor de calidad y se concentra el campo eléctrico. A su vez, aumenta la sensibilidad del resonador, haciéndolo factible para aplicaciones en el sensado de contaminantes.

1.3 OBJETIVOS

1.3.1 Objetivo general

Estudiar, diseñar y construir un resonador circular SRR con un canal microfluídico acoplado capaz de detectar variaciones en la concentración de contaminantes orgánicos (CO) en muestras de agua simuladas con una sensibilidad mayor a 1 mdB/($\mu\text{g}/\text{mL}$).

1.3.2 Objetivos específicos

- Estudiar las estructuras de resonadores empleados en las técnicas de caracterización de materiales dieléctricos. Realizar comparaciones entre ellos y seleccionar el más adecuado.
- Diseñar un resonador a partir de las técnicas estudiadas y realizar su simulación en el *software* Ansys HFSS.
- Construir el sensor diseñado utilizando métodos de termotransferencia de patrones e impresión 3D.
- Calibrar el dispositivo con muestras cuya permitividad haya sido reportada en la literatura para establecer una relación entre la permitividad la muestra y la respuesta del resonador.
- Realizar pruebas con muestras de agua simulada y estimar la sensibilidad y los límites de detección para el glifosato y triclosán.

1.4 JUSTIFICACIÓN

En México, según la Organización de las Naciones Unidas para la Alimentación y la Agricultura (*FAO*), se usaron en promedio 4.55 toneladas de plaguicidas (fungicidas, herbicidas e insecticidas) por cada 1000 hectáreas entre el año 2009 y 2010, y solo en 2018 se emplearon 12,991 toneladas de insecticidas, 11,552 toneladas de herbicidas y 28,601 toneladas de fungicidas [21]. Sin embargo, debido a la falta de regulación y monitoreo en el país, no se tiene información detallada sobre el uso de estas sustancias y cuáles son [22]. Únicamente se cuenta con el catálogo oficial de plaguicidas que no ha sido actualizado en más de una década, y excluye información sobre los recientes descubrimientos de peligrosidad de estos tóxicos. Existen alrededor de 30 plaguicidas permitidos en México y

que están prohibidos en otros países. A esto se suma que no existe un control de la información para identificar si se usan de manera clandestina los ya regulados. Es por ello que es necesario establecer actividades de investigación y monitoreo para evaluar adecuadamente los riesgos ambientales y a la salud asociados a los COP en México. Actualmente no se tienen datos estadísticos sobre la cantidad de cuerpos de agua que están contaminados por plaguicidas, por lo que este proyecto tiene como objetivo plantear trabajos a futuro para determinar diferentes tipos de contaminantes orgánicos, especialmente los contaminantes orgánicos persistentes donde los plaguicidas representan la mayor cantidad de éstos:

La Figura 1 muestra los porcentajes de cuerpos de agua como ríos, lagos y cuencas del país de acuerdo con la demanda química de oxígeno (DQO) reportado en el año 2021 por el Sistema de Información Nacional de Agua, donde se observa que el 31% del agua está contaminada y el 5% fuertemente contaminada, vale la pena mencionar que dentro de estos contaminantes se encuentran compuestos orgánicos e inorgánicos.

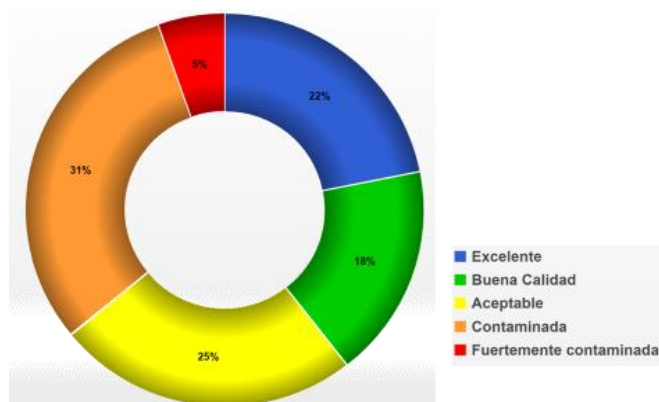


Figura 1. Distribución porcentual de los sitios de monitoreo de calidad del agua (de acuerdo al indicador DQO en 2021) [23].

1.5 FUNDAMENTOS

1.5.1 Sensores

El término “sensor” empezó a utilizarse durante los 70s. Podemos comparar un sensor con organismos vivos adquiriendo y procesando una señal, primero encontramos un receptor el cual es la parte técnica del sistema de sensado. El receptor responde a los parámetros ambientales mediante un cambio de sus propiedades inherentes, en el transductor adyacente, la información primaria es transformada en señales eléctricas. Frecuentemente, los sistemas modernos de sensado contienen partes adicionales para la amplificación o condicionado. Al final de la cadena, encontramos una microcomputadora trabajando como el sistema nervioso central en un organismo vivo [24].

Los sensores deber contar con ciertos atributos como: estar en contacto directo con el sujeto a investigar, transformar la información no-eléctrica en señales eléctricas, tener respuesta rápida, operar continuamente o al menos en repetidos ciclos, ser pequeños y económicos [24].

1.5.2 Dispositivos en Radiofrecuencia

La Figura 2 muestra algunas de estas aplicaciones de la radiofrecuencia, como la comunicación sin cable, la navegación, aplicaciones de identificación y detección.

El termino Radiofrecuencia o RF, se refiere a la porción del espectro electromagnético en el cual se pueden producir ondas electromagnéticas, una onda electromagnética propaga simultáneamente campos eléctricos (\vec{E}) y magnéticos (\vec{B}) producidos por una carga eléctrica en movimiento y son capaces de viajar en el vacío a diferencia de las ondas mecánicas que necesitan un medio (ver Figura 3). El flujo de energía de una fuente en forma de ondas electromagnéticas se denomina radiación electromagnética.

La tecnología de RF siempre ha tenido una gran importancia en el campo de aplicaciones de radio, aunque recientemente a través de métodos de diseño de RF han empezado a desarrollarse como un factor crucial con circuitos digitales rápidos. Debido a la creciente velocidad de procesamiento de los circuitos digitales se producen señales de alta frecuencia

que, a su vez, generan demanda de métodos de diseño de RF. Además, la proximidad de la tecnología de alta frecuencia a la teoría de campo electromagnético se superpone con aspectos de la compatibilidad electromagnética (*EMC*). Si los dispositivos no cumplen con los límites de *EMC* en general, se requerirá un análisis cuidadoso de las circunstancias para lograr mejoras [25].

Para una mejor orientación, el espectro electromagnético se divide en bandas de frecuencia. De acuerdo con la recomendación de la Unión Internacional de Telecomunicaciones (*ITU*) el espectro que va de 3 Hz a 300 GHz se divide en ocho décadas de frecuencia como se muestra en la Tabla 2.

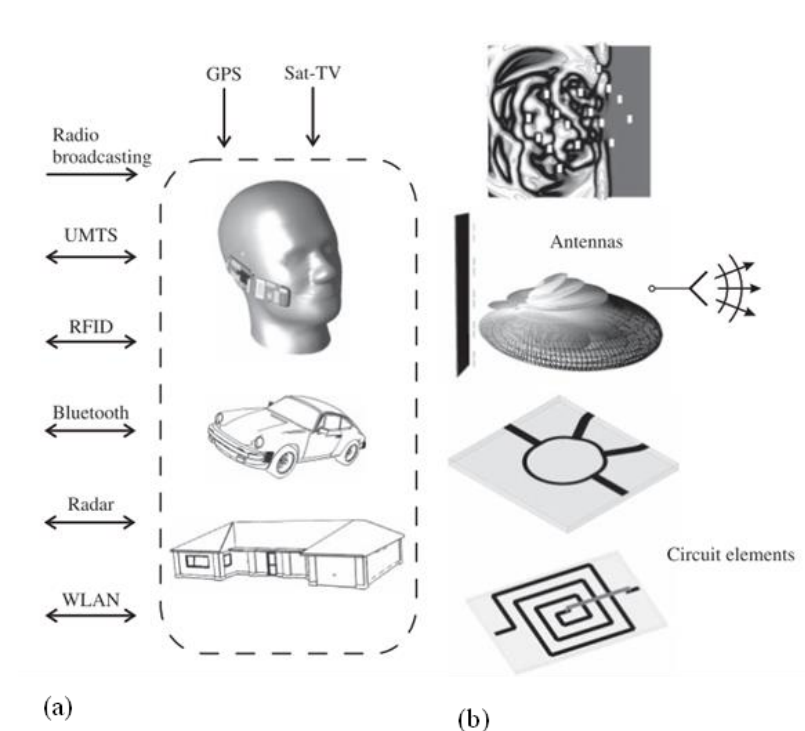


Figura 2. (a) Ejemplos de aplicaciones inalámbricas (b) componentes en RF y propagación de ondas electromagnéticas [25].

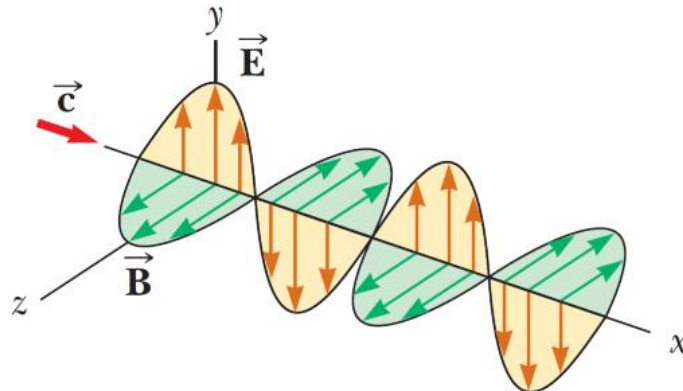


Figura 3. Representación de una onda electromagnética sinusoidal en la dirección positiva x con una rapidez c [26].

Tabla 2. Denominación de frecuencia de acuerdo a la ITU [27].

Rango de frecuencia	Denominación	Subdivisión métrica correspondiente
3-30 KHz	VLF (<i>Very Low Frequency</i>)	Ondas milimétricas
30-300 KHz	LF (<i>Low Frequency</i>)	Ondas kilométricas
300-3 000 KHz	MF (<i>Medium Frequency</i>)	Ondas hectométricas
3-30 MHz	HF (<i>High Frequency</i>)	Ondas decamétricas
30-300 MHz	VHF (<i>Very High Frequency</i>)	Ondas métricas
300 MHz-3 GHz	UHF (<i>Ultra High Frequency</i>)	Ondas decimétricas
3-30 GHz	SHF (<i>Super High Frequency</i>)	Ondas centimétricas
30-300 GHz	EHF (<i>Extremely High Frequency</i>)	Ondas milimétricas

1.5.2.1 Microondas

Las microondas son la porción del espectro electromagnético que cubre el rango de frecuencias entre 3 a 30 GHz, que corresponde a la longitud de onda en vacío ($\lambda = c/f$) entre 100 cm y 1 cm [4]. Las señales con longitudes de onda del orden de milímetros se refieren a menudo como ondas milimétricas que varían desde los 30 hasta los 300 GHz. Estas señales por su comportamiento similar a las microondas aún pueden considerarse dentro de la banda de las microondas [28].

Una característica relevante del rango de microondas es que las longitudes de onda son comparables con las dimensiones físicas de los sistemas; debido a esta peculiaridad, las microondas reciben un tratamiento diferente al usado con las ondas en las bandas de frecuencia con las que limita, que son la radiofrecuencia (RF) y la de infrarrojo [29]. En RF, las longitudes de onda son mayores a las de los dispositivos y no es posible tener en cuenta la forma de propagación de la onda en el dispositivo; por el contrario, en frecuencias superiores a las de microondas se aplican métodos de tipo óptico debido a que las longitudes de onda son mucho menores frente a las dimensiones de los dispositivos.

1.5.3 Líneas de transmisión y guías de onda

1.5.3.1 Microstrip

La línea *microstrip* es uno de los tipos más populares de líneas de transmisión planas, principalmente porque pueden ser fabricadas por procesos de fotolitografía y son fácilmente miniaturizadas e integradas con dispositivos de microondas activos y pasivos. La geometría de una línea *microstrip* se muestra en la Figura 4 y las líneas de campo magnético y eléctrico en la Figura 5. Un conductor de ancho W se imprime sobre un sustrato dieléctrico delgado, puesto a tierra, de espesor d y permitividad relativa ϵ_r [30].

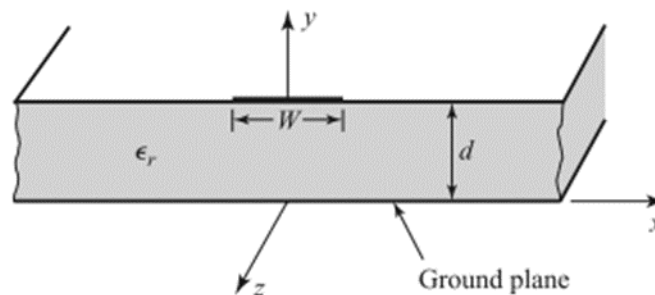


Figura 4. Geometría de la línea de transmisión *microstrip*[31].

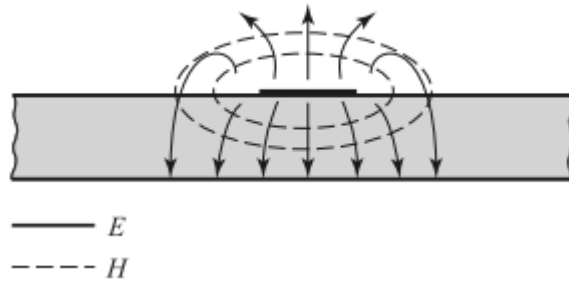


Figura 5. Líneas del campo magnético y eléctrico de la línea de transmisión *microstrip* [31].

Las líneas de transmisión *microstrip* no permiten la propagación de un modo de transmisión transversal electromagnético (*TEM*) puesto que el sustrato no cubre la parte superior del conductor y da como resultado un medio no homogéneo en el que las ondas del sustrato se propagan a una velocidad diferente a la que se propaga por el aire. Aunque se propaguen modos híbridos transversal eléctrico (*TE*) y transversal magnético (*TM*) podemos decir que el modo de propagación es *quasi-TEM*. Esto significa que es posible conocer las frecuencias de corte aproximadas de la línea, así como la velocidad de propagación de la onda y la constante de propagación mediante las ecuaciones 1 y 2.

$$v_p = \frac{c}{\sqrt{\epsilon_e}} \quad (1)$$

$$\beta = K_0 \sqrt{\epsilon_e} \quad (2)$$

donde v_p la velocidad de propagación, c la velocidad de la luz en el vacío, β es la constante de propagación de la línea *microstrip*, K_0 es la constante de propagación en el vacío y ϵ_e la constante dieléctrica efectiva.

La longitud de onda en el modo de propagación *TEM* está dado por la siguiente ecuación:

$$\lambda = \frac{\lambda_0}{\sqrt{\epsilon_e}} \quad (3)$$

siendo λ_0 la longitud de onda en el vacío.

El sustrato tiene una constante dieléctrica relativa, a menos que sea aire, ésta va a ser $\epsilon_r > 1$, de modo que la constante dieléctrica efectiva de todo el conjunto tendrá un valor diferente al de ambos medios, pero relacionado con ϵ_r :

$$\epsilon_e = \frac{\epsilon_r + 1}{2} + \frac{\epsilon_r - 1}{2} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{12d}{W}}} \quad (4)$$

Las dimensiones de línea *microstrip* 'd' y 'W' determinan el parámetro de impedancia característica Z_0 , así como la constante ϵ_r previamente calculada Z_0 .

$$Z_0 = \begin{cases} \frac{60}{\sqrt{\epsilon_e}} \ln \left(\frac{8d}{W} + \frac{W}{4d} \right) & , \text{ para } W/d \leq 1 \\ \frac{120\pi}{\sqrt{\epsilon_e} [W/d + 1.393 + 0.667 \ln (W/d + 1.444)]} & , \text{ para } W/d \geq 1 \end{cases} \quad (5)$$

Así mismo, conociendo Z_0 y ϵ_r van a condicionar las dimensiones de la línea *microstrip* tal que:

$$\frac{W}{d} = \begin{cases} \frac{8e^A}{e^{2A} - 2} & , \text{ para } W/d < 2 \\ \frac{2}{\pi} \left[B - 1 - \ln(2B - 1) + \frac{\epsilon_r - 1}{2\epsilon_r} \left\{ \ln(B - 1) + 0.39 - \frac{0.61}{\epsilon_r} \right\} \right] & , \text{ para } W/d > 2 \end{cases} \quad (6)$$

donde las constantes A y B son:

$$A = \frac{Z_0}{60} \sqrt{\frac{\epsilon_r + 1}{2} + \frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 1} \left(0.23 + \frac{0.11}{\epsilon_r} \right)} \quad (7)$$

$$B = \frac{337\pi}{2Z_0\sqrt{\epsilon_r}} \quad (8)$$

La atenuación por pérdidas dieléctricas se calcula con la siguiente ecuación:

$$\alpha_d = \frac{k_0 \epsilon_r (\epsilon_e - 1) \tan \delta}{2\sqrt{\epsilon_e} (\epsilon_e - 1)} Np/m \quad (9)$$

donde $\tan\delta$ es la tangente de pérdidas del dieléctrico. También debemos considerar que no existe un conductor perfecto, de modo que las pérdidas por el conductor (α_c) serán:

$$\alpha_c = \frac{R_s}{Z_0 W} Np/m \quad (10)$$

donde R_s es la resistividad superficial del conductor calculada por medio de la ecuación 9.

$$R_s = \sqrt{\frac{\omega\mu_0}{2\sigma}} \quad (11)$$

1.5.4 Análisis de redes de microondas

Los circuitos eléctricos de los dispositivos actuales operan a bajas frecuencias y pueden representarse como una interconexión de puertos pasivos o componentes activos con voltajes y corrientes únicas definidas en cada punto del circuito. Las dimensiones del circuito son suficientemente pequeñas tal que el retardo de fase es despreciable de un punto del circuito a otro [32]. Los campos pueden ser considerados como *TEM*, esto conduce a soluciones quasi-estáticas de las ecuaciones de Maxwell, las leyes del voltaje y corriente de Kirchoff y los conceptos de teoría de circuitos. Debido a esto, es más conveniente resolver los problemas de guía de onda por teoría de circuitos, ya que nos dan la información necesaria sobre el voltaje y corriente en las terminales.

1.5.4.1 Parámetros S

Los parámetros S o de dispersión representan los coeficientes de reflexión y transmisión entre la onda incidente y reflejada. Este parámetro nos permite medir las propiedades eléctricas de componentes y equipos que operan en el rango de radiofrecuencia y describen el comportamiento de un dispositivo bajo condiciones lineales en un determinado rango de frecuencia. Cada parámetro S se caracteriza por una magnitud, una ganancia o pérdidas en decibels y una fase. A continuación, se presenta la matriz de dispersión para una red de dos puertos:

$$[V_1^- \ V_2^-] = [S_{11} \ S_{12} \ S_{21} \ S_{22}] [V_1^+ \ V_2^+] \quad (12)$$

S_{11} es el coeficiente de reflexión a la entrada o coeficiente de reflexión.

S_{12} es el coeficiente de transmisión o ganancia con la tensión inversa.

S_{21} es el coeficiente o ganancia de transmisión directa.

S_{22} es el coeficiente de reflexión a la salida o también llamado coeficiente de reflexión inversa.

V_N^- Es la amplitud del voltaje de la onda reflejada en el puerto N.

V_N^+ es la amplitud del voltaje de la onda incidente en el puerto N.

1.5.5 Resonadores

Un resonador es una estructura con al menos una frecuencia natural de oscilación o resonancia. Cuando un dispositivo resuena, significa que su energía es convertida alternativamente de un tipo a otro, eléctrica y magnética, según la frecuencia de dicha oscilación. Si se le entrega más energía al resonador, esta será almacenada en el mismo. Por lo tanto, el resonador tiene la capacidad de almacenar energía en constante conversión.

Todos los resonadores que actualmente se usan como sensores pueden pensarse como una sección de guía de onda, limitada por discontinuidades en sus extremos. La línea de transmisión puede ser de cualquier tipo; coaxial, hueca, bilineal, *stripline*, *microstrip*, etc. El rol de las discontinuidades es el de causar que las ondas viajeras se reflejen en ellas. En un punto donde la línea de transmisión esté abierta, el coeficiente de reflexión es unitario, y la onda reflejada está en fase con la onda incidente a la discontinuidad. Si la línea se encuentra cerrada, la reflexión es total y en contrafase, y el coeficiente de reflexión es igual a -1. Esto es porque necesariamente existe un mínimo de campo eléctrico en este punto, donde el plano equipotencial de masa (conductor) establece la condición de contorno $E=0$. Cualquier otro tipo de discontinuidad genera una reflexión parcial, lo que se traduce en pérdidas adicionales.

1.5.5.1 Circuito resonante en serie

Denominada resonancia serie o circuito resonante: en sus bornes el voltaje es mínimo y la corriente máxima, lo que supone mínimo del módulo de la impedancia. La configuración del circuito en serie y su representación se ven en la Figura 6.

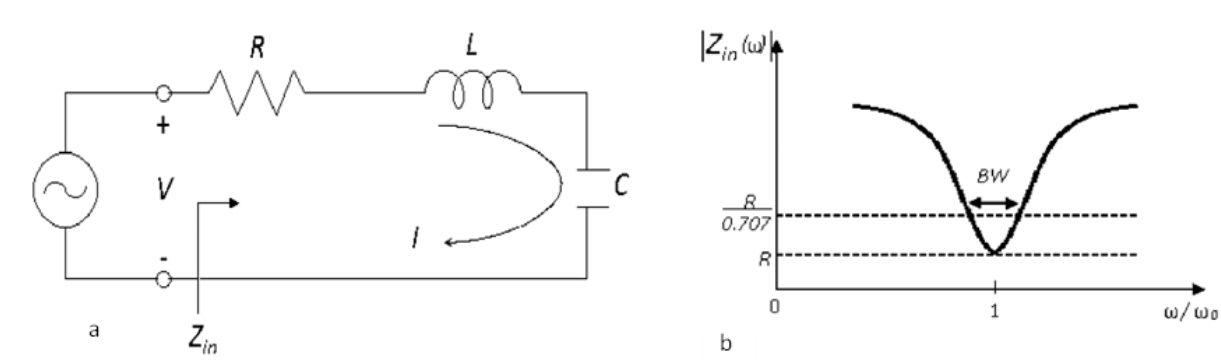


Figura 6. Resonador en serie y su respuesta. a) Circuito de resonador RLC serie. b) Magnitud de impedancia de entrada versus frecuencia [30].

1.5.5.2 Circuito resonante en paralelo

En la resonancia en paralelo o circuito antiresonante, en sus bornes el voltaje es máximo y la corriente es mínima, lo que supone un máximo del módulo de la impedancia. La configuración se ve en la Figura 7.

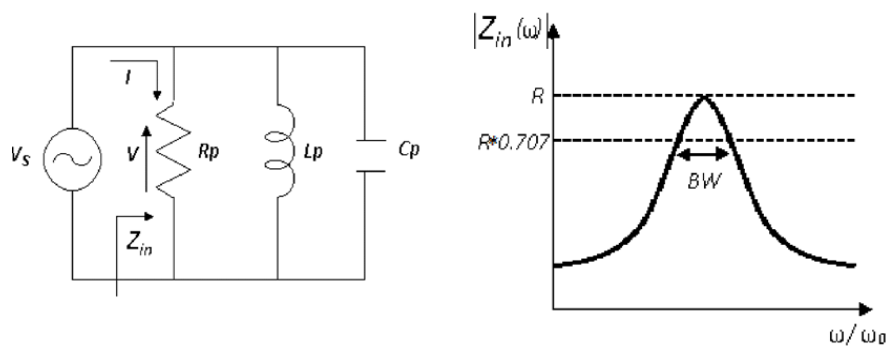


Figura 7. Resonador paralelo RLC y su respuesta a) Circuito paralelo RLC b) Magnitud de Impedancia de Entrada y su Respuesta (Pozar, David, 2011).

1.5.5.3 Frecuencia de resonancia

La respuesta del resonador se basa en la capacitancia efectiva distribuida con la inductancia del sensor diseñado en la propagación de fase, obteniendo generalmente la frecuencia de resonancia (f_0) por medio de la siguiente ecuación [30]:

$$f_0 = \frac{1}{2\pi\sqrt{L_C C_T}} \quad (13)$$

donde L_C y L_T son inductancias y capacitancias distribuidas totales.

1.5.5.4 Factor de calidad

La energía almacenada es única, por lo que la variación del factor de calidad está ligada a la variación en las pérdidas que pueda haber. Si pudieran separarse los efectos de las pérdidas dependiendo de si la causa fuera interna o externa al circuito tendríamos [29]:

- Factor de calidad aislado o en el vacío, Q , las pérdidas se deben exclusivamente al circuito resonador.
- Factor de calidad exterior, Q_{ext} , las pérdidas se deben a los circuitos exteriores a los que se conecta el resonador.
- Factor de calidad cargado: incluye todos los efectos de pérdidas, internos y externos, y es el que realmente se puede medir, Q_L .

1.5.6 Propiedades electromagnéticas de los materiales

Todos los materiales tienen propiedades que determinan su comportamiento ante una excitación electromagnética. Algunas de éstas son la permitividad dieléctrica (ϵ) y la permeabilidad magnética (μ), que hacen referencia a la forma en la que interactúan los campos eléctricos y magnéticos con los materiales.

1.5.6.1 Permitividad dieléctrica

La permitividad dieléctrica (ϵ) es una cantidad absoluta que representa la capacidad de un material para almacenar energía. Los materiales se componen normalmente de partículas con

carga eléctrica dispuestas de forma que cualquier región macroscópica del material es eléctricamente neutra. Cuando se aplica un campo eléctrico externo sobre el material, dicho campo actúa ejerciendo una fuerza sobre cada carga individual, y la deslaza ligeramente de su posición de equilibrio anterior, haciendo que el material adquiera una determinada polarización. La polarización adquirida compensa en parte el campo eléctrico del exterior, esto genera un campo eléctrico en el interior del material (Figura 8). Cuanto mayor es la permitividad eléctrica mayor es el campo de polarización y la energía almacenada en el material, por lo que el campo eléctrico neto en su interior es tanto menor. La permitividad del material está en función de varias variables como concentración, orientación, presión, temperatura y frecuencia de excitación.

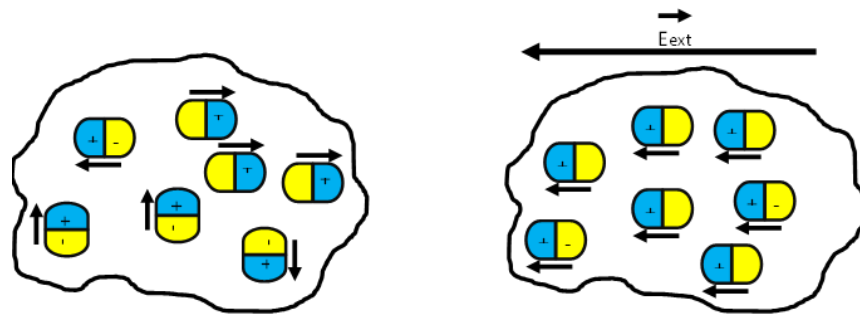


Figura 8. Ilustración de la distribución de cargas en un material polarizado.

1.5.6.2 La permeabilidad magnética

La permeabilidad magnética (μ) es una cantidad absoluta que describe la interacción de un material con un campo magnético externo. De forma análoga a la permitividad, describe la cantidad de energía (magnética) que se puede almacenar en el material, y es un número complejo cuya parte imaginaria representa las pérdidas. Sus unidades son el Henry sobre metro (H/m), la permeabilidad en el vacío es aproximadamente de 1.2566×10^{-6} H/m.

Los pesticidas se pueden considerar como materiales no magnéticos, entonces, su permeabilidad se puede tomar igual a la permeabilidad en el espacio libre (μ_0), mientras que su permitividad absoluta (ϵ_a) se representa mediante una expresión compleja:

$$\epsilon_a = \epsilon'_a - j\epsilon''_a \quad (14)$$

Así, su permitividad relativa (ϵ_0) en el espacio libre está dada por:

$$\epsilon = \frac{\epsilon_a}{\epsilon_0} = \epsilon' - j\epsilon'' \quad (15)$$

La constante dieléctrica, es decir la parte real de la permitividad (ϵ_r'), está asociada con la capacidad del material para almacenar energía en forma de campo eléctrico, mientras que la constante de pérdidas (ϵ_r'') está asociada con la capacidad el material para disipar energía, y puede ser asociada con todos los mecanismos de relajación dieléctrica y conducción iónica.

1.5.7 Polarización

Los dieléctricos, a diferencia de los conductores, no poseen electrones libres para conducir. Sin embargo, exhiben propiedades conductivas bajo un campo aplicado. En aplicación de un campo eléctrico, las cargas positivas en el dieléctrico se desplazan en dirección del campo eléctrico y las cargas negativas se desplazan en la dirección opuesta. La propiedades de conducción se atribuyen a la separación neta de estas cargas [33]. La polarización es esta ordenación en el espacio de las cargas eléctricas en respuesta a un campo eléctrico externo y se puede clasificar en: polarización iónica, dipolar y de distorsión. La polarización de distorsión puede ser clasificada en polarización electrónica y atómica.

La diferencia entre la dinámica de los mecanismos de polarización es que en la polarización de distorsión, el campo eléctrico trata de cambiar la distancia entre las cargas involucradas y en respuesta actúa una fuerza restauradora, se comporta como un resonador y presenta una frecuencia de resonancia [34]. Como se ve en la Figura 9, se caracteriza por un pico en la parte imaginaria (ϵ'') y un pico seguido de un valle en la parte real (ϵ'). En el caso de las polarizaciones iónicas, interfaciales y dipolares, no hay fuerza mecánica directa que fuerce los dipolos a regresar a una orientación aleatoria y se caracteriza por una fuerza de relajación, vista como una caída en ϵ' y un pico en ϵ'' [33].

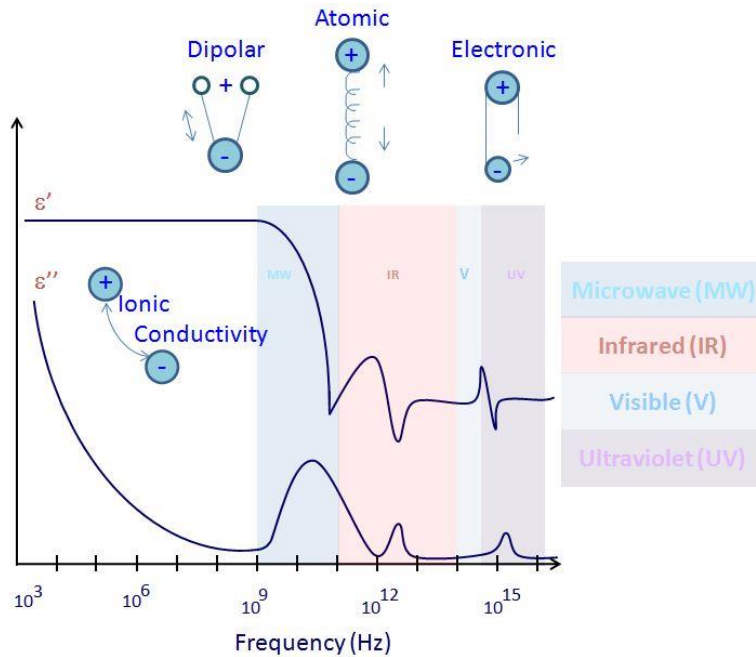


Figura 9. Mecanismos de polarización para diferentes rangos de frecuencia [34].

De todos los mecanismos, el que predomina en el rango de las microondas es el de relajación dipolar. Esta se refiere a la respuesta que presentan los dipolos eléctricos presentes en un material, que tienden a alinearse con la dirección del campo eléctrico cuando se les aplica un campo electromagnético alterno.

1.5.8 Métodos de medición de la permitividad dieléctrica

Los métodos de medida de la permitividad dieléctrica de los materiales se pueden dividir en dos grupos:

- Técnicas en las que las propiedades dieléctricas se miden en términos de la impedancia (Z), o como una admitancia de (Y). Este grupo de técnicas reciben el nombre de “métodos basados en circuitos concentrados”, y se utilizan para caracterizar materiales a frecuencias bajas (del orden de los MHz).
- Técnicas en las que se consideran materiales dieléctricos que están interactuando con las ondas electromagnéticas estacionarias o que se propagan. Engloban aquellas

técnicas basadas en la propagación por líneas de transmisión, y las basadas en la propagación de la onda por el espacio libre.

La elección de una técnica u otra depende de una serie de factores: el margen de frecuencias en el que se desea caracterizar el material, el valor esperado de la permitividad, la precisión de medida requerida, etc. [35].

1.5.9 Métodos resonantes para medir las propiedades dieléctricas

Los métodos de resonancia han demostrado tener mayor exactitud y sensibilidad que los no resonantes. Son ampliamente usados para muestras de bajas pérdidas y pueden caracterizar el material de forma simple con puntos de frecuencia discretos. En este método un material dieléctrico es utilizado como elemento resonante pero limitado solo para muestras de prueba de baja pérdida, algunos ejemplos son los métodos de resonadores planos y divididos. Otro método es el de perturbación, en el cual se coloca una muestra en una cavidad resonante que causa la perturbación, resultando en un desplazamiento de la frecuencia [36].

El método que mejor se ajusta a los objetivos del presente trabajo es el de líneas de transmisión, donde la *microstrip* es la que presenta las características similares al diseño del sensor. Las principales ventajas de este método es que puede aplicarse a altas frecuencias y a materiales anisotrópicos.

1.5.10 Resonadores de anillo basados en líneas microstrip

Los métodos basados en líneas de transmisión se dividen en dos: los de transmisión y los de reflexión. En los métodos de transmisión, el material se coloca en una celda dividida de tal forma que la onda lo atraviesa. Se utilizan celdas de dos puertos, y se extrae el valor de permitividad generalmente a partir de la medida del parámetro S_{21} (potencia que se recibe en el puerto 2 entre la potencia que se inyecta en el puerto 1).

Para realizar las mediciones, la constante dieléctrica efectiva se determina en condición de descarga después de que la muestra colocada en la línea *microstrip*, esto cambia la constante

dieléctrica efectiva y la impedancia característica del material bajo prueba (MUT, por sus siglas en inglés) [36].

1.5.11 Capacitores interdigitados

El capacitor interdigitado (IDC) es una estructura periódica de varios dedos y utiliza elementos de circuito agrupados para el desarrollo RF/microondas. Los *IDC* usan la capacitancia que ocurre a través de un estrecho espacio entre los conductores de cobre [37]. Estos espacios son esencialmente muy largos y están plegados para usar una pequeña cantidad de área. La estructura de un capacitor interdigital está diseñada usando cobre como material conductor.

Los capacitores interdigitados planares son preferidos para aplicaciones de altas frecuencias. La eficiencia de los *IDC* varía con respecto al cambio en sus parámetros físicos como: el número de dedos (N), el ancho de los dedos (W), largo de dedos (P) y el espacio entre los dedos (S) como se muestra en la Figura 10. Estos parámetros se varían de acuerdo con la capacitancia deseada del capacitor para una aplicación es particular. Cuando dichos parámetros son variados se incrementa el valor de la capacitancia y disminuye el factor de calidad debido al incremento en la resistencia reactiva y la inductancia. Se ha demostrado que el diseño de estructuras pequeñas son flexibles para usarse en aplicaciones a altas frecuencias [38].

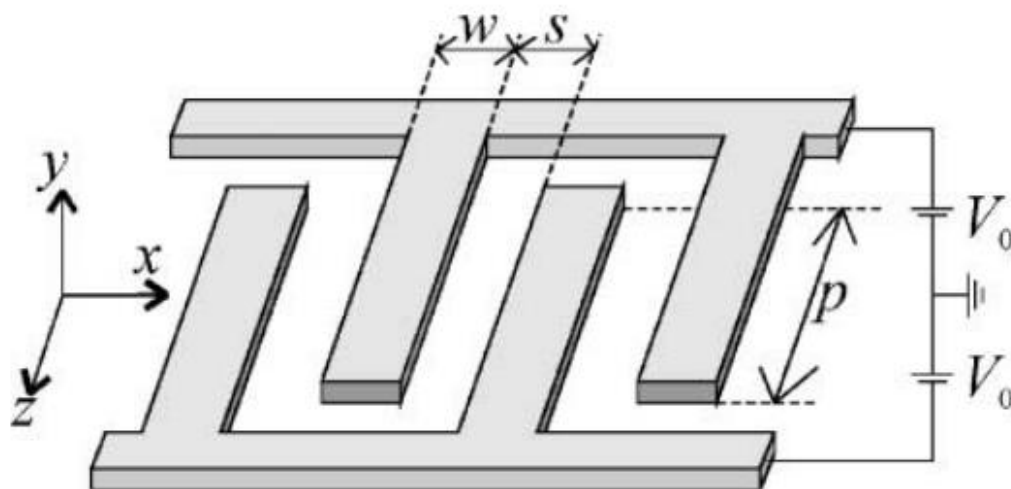


Figura 10. Estructura de un capacitor interdigitado [39].

1.5.12 Contaminantes orgánicos de interés

1.5.12.1 Triclosán

El 2,4,4'-tricloro-2'-hidroxidifenil éter (triclosán) es un ingrediente activo antimicrobiano incorporado en una variedad de productos para retardar o detener el crecimiento de bacterias, hongos y moho, su estructura química se muestra en la Figura 11.

La prevalencia de triclosán en las vías fluviales de la nación es motivo de preocupación, ya que el triclosán se convierte en dioxina, un compuesto altamente tóxico, cuando se expone a la luz solar en un ambiente acuoso. El triclosán también puede combinarse con el cloro en el agua del grifo para formar cloroformo, que está catalogado como probable carcinógeno humano[40]. Se ha descubierto que el triclosán es altamente tóxico para diferentes tipos de algas, organismos clave para ecosistemas acuáticos complejos, y se ha detectado en altas concentraciones en lombrices de tierra. En México se han reportado concentraciones de 2.4 y 23 ng/mL en cuerpos de agua superficiales [41] siendo toxico en concentraciones de 0.1-0.45 mg/mL [42]. Al ser un contaminante emergente el triclosán, no se encuentra normado o restringido en su uso.

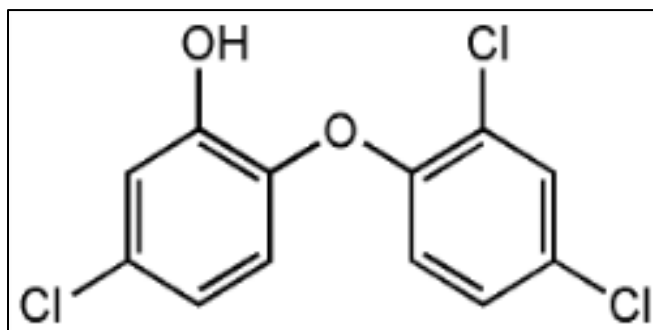


Figura 11. Estructura química del Triclosán.

1.5.12.2 Glifosato

El glifosato es un herbicida sistémico de nombre N-fosfometil-glicina y su fórmula es $C_3H_8NO_5P$ como muestra su estructura en la Figura 12. Su principal aplicación es el control de malezas y la desecación de cereales y otros granos. Existen varias rutas para

contaminación de aguas superficiales por glifosato; principalmente a través de la deriva durante la aplicación o como la escorrentía superficial después de la aplicación [43].

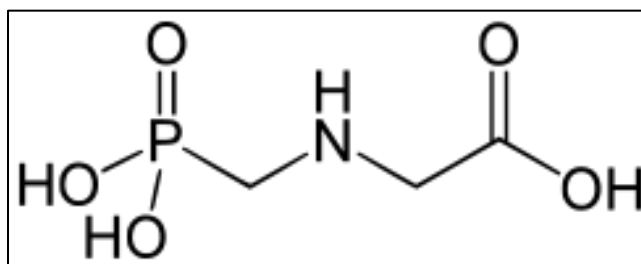


Figura 12. Estructura química del glifosato.

En el 2015 el glifosato fue clasificado como una sustancia activa, siendo declarado como un probable cancerígeno por la *World Health Organization* (OMS) después de una publicación por la *International Agency for Research on Cancer* (IACR). En general, estudios publicados por 17 expertos señalan la relación de esta sustancia con cuatro tipos de cáncer: hepático, pulmonar, de páncreas y linfoma [44]. Este compuesto ha demostrado tener efectos nocivos en los organismos acuáticos en concentraciones de 0.01- 50 mg/mL [43].

1.5.13 Simulación de dispositivos de radiofrecuencia

1.5.13.1 Método de elementos finitos

Los procedimientos por métodos de elementos finitos son ampliamente utilizados en análisis de ingeniería en el análisis de sólidos, estructuras y de transferencia de fluidos. En este método la geometría de la pieza, sometida a cargas y restricciones, se subdivide en partes más pequeñas, conocidas como “elementos”, que representan el dominio continuo del problema. La división de la geometría en pequeños elementos resuelve un problema complejo, al subdividirlo en problemas más simples.

El conjunto de elementos finitos forma una subdivisión del dominio también denominada discretización. Dentro de cada elemento se distinguen una serie de puntos representativos llamados «nodos». Dos nodos son adyacentes si pertenecen al mismo elemento finito; además, un nodo sobre la frontera de un elemento finito puede pertenecer a varios elementos. El conjunto de nodos considerando sus relaciones de adyacencia se llama «malla». Los

cálculos se realizan sobre una malla de puntos (llamados nodos), que sirven a su vez de base para discretización del dominio en elementos finitos. La generación de la malla se realiza usualmente con programas especiales llamados generadores de mallas, en una etapa previa a los cálculos que se denomina preproceso. De acuerdo con estas relaciones de adyacencia o conectividad se relaciona el valor de un conjunto de variables incógnitas definidas en cada nodo y denominadas grados de libertad. El conjunto de relaciones entre el valor de una determinada variable entre los nodos se puede escribir en forma de sistema de ecuaciones lineales (o linealizadas). La matriz de dicho sistema de ecuaciones se llama matriz de rigidez del sistema. El número de ecuaciones de dicho sistema es proporcional al número de nodos y al número de grados de libertad de cada nodo [45].

1.5.13.2 Ansys HFSS

El *software* Ansys es una herramienta comercial que resuelve estructuras electromagnéticas por el método de elementos finitos. El acrónimo HFSS significa *High-Frequency Structure Simulator*. El método de elementos finitos es un método numérico que permite generar aproximaciones de soluciones de ecuaciones diferenciales parciales complejas relacionadas con un problema físicos de ingeniería sobre geometrías complicadas. Este programa sirve para diseñar y simular productos electrónicos de alta frecuencia como antenas, conjuntos de antenas, componentes de RF o microondas, interconexiones de alta velocidad, filtros, conectores, paquetes de circuitos integrados y placas de circuitos impresos.

1.5.14 Métodos de medición

1.5.14.1 VNA

Un analizador de redes vectoriales (*VNA* por sus siglas en inglés) es un instrumento que permite analizar diferentes propiedades de una instalación y combina distintos componentes de microondas para realizar una gran variedad de mediciones. Por ejemplo, el generador de señales (sintetizador) es un componente de microondas. Éste es un dispositivo de vital importancia para el correcto funcionamiento del analizador. Los analizadores, en general, necesitan de un procedimiento de calibración para la eliminación de errores [46].

Hay dos tipos de analizadores: escalares y vectoriales. Un analizador de redes escalar mide y muestra sólo la amplitud de la señal que está siendo estudiada. Ésta es mostrada en función de la frecuencia. El analizador de redes vectorial mide y muestra la amplitud y la fase. Éstas son también mostradas en función de la frecuencia y en escala lineal. Las mediciones pueden ser desplegadas en una carta de Smith. Todos los parámetros S pueden ser obtenidos con un analizador de redes vectorial [47]. El diagrama de bloques simplificado de una VNA típico se ilustra en la Figura 13.

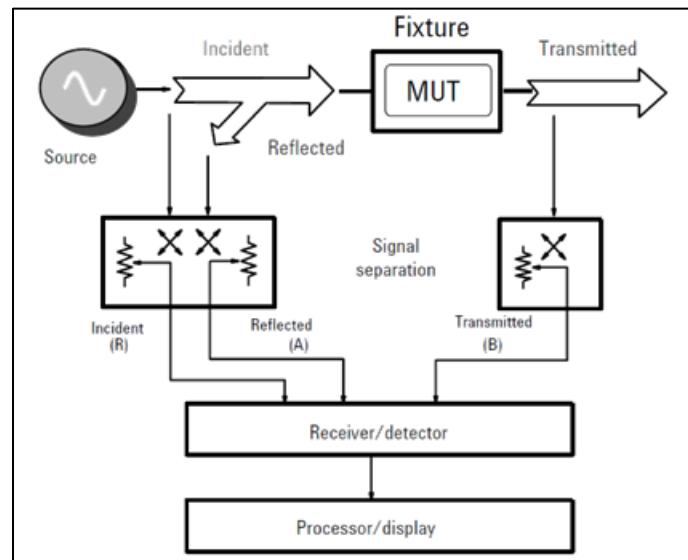


Figura 13. Diagrama a bloques de un analizador de redes.

1.5.14.2 Sonada coaxial

El kit de sonda dieléctrica permite medir la permitividad compleja para una amplia gama de semi-sólidos, sólidos flexibles, y líquidos. Realiza todas las funciones necesarias de control, cálculo y presentación de datos del analizador de red. El *software* controla el analizador de red para medir el coeficiente de reflexión complejo del material bajo prueba (MUT). Luego convierte el coeficiente de reflexión en la permitividad compleja del MUT.

Finalmente, muestra los resultados de la medición en una variedad de formatos gráficos y tabulares. El *software* también facilita la impresión o el trazado de los resultados, el almacenamiento de los resultados en el disco y el almacenamiento de las configuraciones de

prueba en el disco. La sonda dieléctrica proporciona un método conveniente y repetible para medir varios materiales dieléctricos. La medición se realiza introduciendo la sonda en el MUT para hacer una medición. La sonda se utiliza con un analizador de red vectorial para aprovechar la medición del analizador flexibilidad, velocidad y precisión. El uso del analizador de red vectorial permite que el *software* se calibre (como se detalla más tarde) una variedad de errores de medición y, por lo tanto, mejora la precisión [10]. La Figura 14 muestra una fotografía de la sonda coaxial conectada a un VNA.

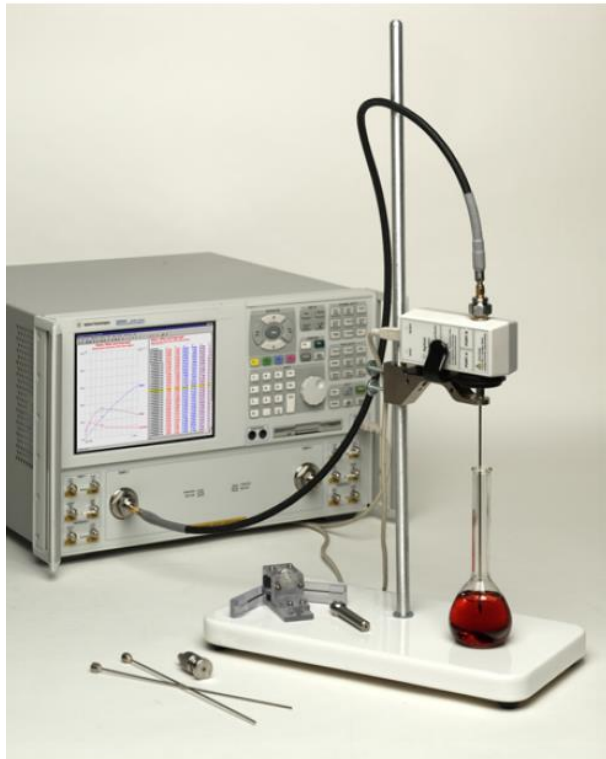


Figura 14. Fotografía de sonda coaxial conectada al VNA.