

Universidad Autónoma de Ciudad Juárez
Instituto de Ingeniería y Tecnología
Departamento de Física y Matemáticas



**EFFECTO DEL SUSTRATO EN UN SENSOR DE
MICROONDAS INTERDIGITADO PARA DETECCIÓN DE
CONTAMINANTES EN LÍQUIDOS ASISTIDO POR
APRENDIZAJE DE MÁQUINA**

Disertación que presenta

Carlos Roberto Santillán Rodríguez

Como requisito parcial para obtener el grado de
Doctorado en Ciencia de los Materiales

Director de Tesis

Dr. José Trinidad Elizalde Galindo

Co-Director de Tesis

Dr. Sion Federico Olive Méndez

Ciudad Juárez, Chihuahua, junio 2026

**Agregar aquí el formato original de autorización de impresión que se entrega
en la coordinación del programa con las firmas de los sinodales**

Dedicatoria.

A mi madre Luz Rodríguez
García†, quien con su
amor me enseñó el valor
del esfuerzo y
perseverancia. Siempre a
mi lado.

Agradecimientos

Expreso mi agradecimiento a mis directores de tesis, Dr. José Trinidad Elizalde Galindo, Dr. Sion F. Olive Méndez y Dr. José A. Matutes Aquino por su orientación académica, consejos y valiosas observaciones durante cada etapa de este trabajo. Sus conocimientos, experiencia y compromiso con la investigación son un ejemplo a seguir.

Asimismo, mi profundo agradecimiento a mis sinodales, Dr. Oswaldo Sánchez Dena, Dr. Pierre Giovanni Mani González, Dr. José Rurik Farías Mancilla y Dr. José Luis Enríquez Carrejo, por el tiempo dedicado durante estos años, sus sugerencias, observaciones y comentarios en las revisiones me ayudaron a mejorar la calidad científica de este trabajo.

De manera muy especial, agradezco a mi familia, especialmente a mis hermanos Laura Elena Santillán y Juan Santillán por todo su apoyo durante años. A mi esposa Dra. Tania E. Terrazas, gracias por brindarme fortaleza en los momentos difíciles, por motivarme a seguir adelante cuando los desafíos parecían mayores y por compartir conmigo la alegría de cada meta lograda.

A mis amigos Jorge Carrillo F., Joselin Sáenz H., Cristina Grijalva C., Salvador Uribe Ch., Patricia Amezaga M., Trinidad Holguín M., Roal Torres S., entre otros muchos más, quienes compartieron su valioso tiempo para de alguna u otra forma apoyarme.

Agradezco al personal técnico y administrativo de la UACJ y CIMAV, quienes colaboraron en la fabricación, caracterización y soporte técnico necesario para el desarrollo de esta investigación.

Finalmente, doy gracias a las personas que de alguna manera contribuyeron al desarrollo de este trabajo y que, aunque no sean mencionadas, forman parte de este logro académico y personal.

Con todo mi corazón, ¡¡ Gracias a todos!!

Resumen

La detección temprana y oportuna de analitos contaminantes disueltos en agua representa un desafío ambiental y tecnológico. En este trabajo se desarrolla un arreglo de sensores de microondas interdigitados (IDE) fabricados sobre sustratos de poliimida y PTFE con permitividades dieléctricas distintas, con el interés de estudiar su efecto en la sensibilidad electromagnética y clasificación de analitos mediante algoritmos de aprendizaje de máquina. Para establecer la geometría de los sensores, se hicieron simulaciones electromagnéticas en COMSOL Multiphysics aplicando el criterio de máxima transferencia de potencia de Thevenin, con el cual se optimizaron los parámetros geométricos tales como: número de dígitos, ancho, longitud, separación entre las barras detectoras. Posteriormente se fabricaron mediante litografía de escritura directa por láser con el equipo MicroWriter ML3. La caracterización estructural incluyó análisis FTIR, microscopia óptica, tomografía de rayos X y espectroscopia de LIBS. Para la caracterización electromagnética se utilizó un analizador de redes vectorial VNA con un barrido de frecuencia de 0.3 hasta 2.0 GHz, en las cuales se midieron 22 soluciones con diferentes concentraciones, tales como: glifosato, cloruro de potasio, cloruro de manganeso además se utilizó agua tridestilada y desionizada como blancos de referencia. Se obtuvo un conjunto de datos con 44 millones de mediciones del parámetro de reflexión S_{11} para ser procesados mediante algoritmos de aprendizaje de máquina de Naive Bayes, KNN, SVM y árbol de decisión. Como resultado, los modelos de Naive Bayes y KNN obtuvieron una exactitud del 100%, mientras que el modelo de SVM presentaba una baja precisión de hasta 62% en la clasificación de analitos. La simulación demostró que los sensores fabricados en el sustrato de PTFE presentaban una mayor intensidad de campo eléctricos debido a su baja permitividad relativa ($\epsilon_r=2.0$), teniendo una mayor sensibilidad para la detección, generando una mayor diferenciación entre los analitos. Este trabajo establece una metodología que combina el diseño de sensores interdigitados, simulación electromagnética, fabricación y análisis multivariado, aportando un estudio sobre cómo la selección del sustrato puede potenciar la sensibilidad y mejorar la selectividad mediante técnicas de aprendizaje de máquina.

Palabras clave: sensor interdigitado, microondas, aprendizaje de máquina, sustrato.

Abstract

The early and timely detection of dissolved contaminant analytes in water presents an environmental and technological challenge. This work develops an array of interdigitated microwave sensors (IDEs) fabricated on polyimide and PTFE substrates with different dielectric permittivities, with the aim of studying their effect on electromagnetic sensitivity and analyte classification using machine learning algorithms. To establish the sensor geometry, electromagnetic simulations were performed in COMSOL Multiphysics applying Thevenin's maximum power transfer criterion, which optimized geometric parameters such as number of digits, width, length, and spacing between detector bars. Subsequently, the sensors were fabricated using direct laser writing lithography with the MicroWriter ML3. Structural characterization included FTIR analysis, optical microscopy, X-ray tomography, and LIBS spectroscopy. For electromagnetic characterization, a vector network analyzer (VNA) with a frequency sweep from 0.3 to 2.0 GHz was used. Twenty-two solutions with different concentrations were measured, including glyphosate, potassium chloride, and manganese chloride. Triple-distilled and deionized water were used as reference blanks. A dataset of 44 million measurements of the S_{11} reflection parameter was obtained and processed using Naive Bayes, KNN, SVM, and decision tree machine learning algorithms. The Naive Bayes and KNN models achieved 100% accuracy, while the SVM model showed low accuracy, up to 62%, in analyte classification. The simulation demonstrated that the sensors fabricated on the PTFE substrate exhibited higher electric field strength due to their low relative permittivity ($\epsilon_r=2.0$), resulting in greater sensitivity for detection and improved differentiation between analytes. This work establishes a methodology that combines the design of interdigitated sensors, electromagnetic simulation, manufacturing and multivariate analysis, providing a study on how substrate selection can enhance sensitivity and improve selectivity through machine learning techniques.

Keywords: interdigitated sensor, microwave, machine learning, dielectric substrate.

Índice general

1. Introducción.....	1
2. Antecedentes	7
2.1 Planteamiento del problema	11
2.2 Contribución Científica.....	11
2.3 Justificación	12
2.4 Hipótesis	13
2.5 Objetivo general.....	13
2.6 Objetivos específicos	13
3. Marco teórico	14
3.1 Mapeo conforme y Schwarz-Christoffel	14
3.2 Microondas	19
3.2.1 Mecanismos de reflexión de ondas electromagnéticas.....	20
3.2.2 Mecanismos de absorción de ondas electromagnéticas.....	20
3.3 Campo eléctrico de franja.....	21
3.4 Campo eléctrico y mecanismos de interacción.....	23
3.4.1 Efecto pelicular.....	23
3.4.2 Polarización.....	24
3.5 Materiales en las microondas.	24
3.6 Fabricación de sistemas de microondas.....	26
3.6.1 Fotolitografía de escritura directa por láser.	26
3.6.1.1 Preparación del sustrato para la aplicación de la resina fotosensible. ...	26
3.6.1.2 Aplicación del recubrimiento fotosensible.	26
3.6.1.3 Proceso de litografía de escritura directa por láser:	27
3.7 Técnicas de caracterización	28

3.7.1 Microscopia electrónica de barrido.....	28
3.7.2 Caracterización electromagnética	30
3.7.2.1 Parámetros de dispersión S.....	30
3.7.2.2 Medición de la permitividad eléctrica del sustrato.....	32
3.8 Aprendizaje de maquina	34
3.8.1 Algoritmo KNN.....	34
3.8.2 Algoritmo Naive Bayes.	36
3.8.3 Máquina de vectores de soporte (SVM).	37
3.8.4 Árbol de decisiones.	38
3.8.5 Evaluación de algoritmos de aprendizaje de máquina.	40
4. Metodología	42
4.1 Fabricación de electrodos interdigitados en sustratos PTFE y poliimida.	44
4.2 Caracterización electromagnética.....	45
4.2.1 Procedimiento para cambio de analito.	47
4.3 Diseño de experimentos	47
5. Resultados y discusión.....	49
5.1 Diseño y simulación de la geometría del sensor de microondas	49
5.2. Fabricación del sensor interdigitado en sustrato de poliimida y PTFE.....	61
5.3 Caracterización de los sensores de microondas interdigitado.	66
5.3.1 Espectroscopia de Infrarrojo.	66
5.3.2 Microscopia óptica.....	68
5.4 Caracterización electromagnética.....	74
6. Conclusiones.....	78
7. Bibliografía	80

Índice de Tablas

Tabla 1.-	Ventajas y desventajas de sustratos [13, 16].	6
Tabla 2.-	Tipos de algoritmo SVM clasificatorios.	38
Tabla 3.-	Concentraciones para la caracterización de analitos.....	48
Tabla 4.-	Comparación entre algoritmos de aprendizaje de máquina.....	77

Índice de figuras.

Figura 1.- Modificación de capacitor de placas paralelas [8].	3
Figura 2.- Sensor de microondas con electrodos interdigitados.	4
Figura 3.- Líneas de campo eléctrico en sensor interdigitado [13].	5
Figura 4.- Diagrama del análisis capacitivo de electrodos coplanares, a) y d) electrodos externos, b) y c) electrodos internos.	15
Figura 5.- Transformación del plano x al plano z.	16
Figura 6.- Transformación final a placas paralelas en el plano w.	17
Figura 7.- Representación esquemática de la interacción de las ondas electromagnéticas en dos medios.	19
Figura 8.- a) La altura del material es mayor que el campo de penetración, b) el campo eléctrico es mayor que la muestra bajo prueba.	21
Figura 9.- a) Depósito de la solución fotosensible, b) inicio de giro con aceleración y velocidad constante, c) fin de giro, d) evaporación de solventes.	27
Figura 10.- Equipo de litografía de escritura directa por láser.	28
Figura 11.- Principio de la microscopia electrónica de barrido [46].	29
Figura 12.- Conexión de un VNA con guía de onda.	32
Figura 13.- Modelo KNN con a) $K=1$ y b) $K=3$	35
Figura 14.- Clasificador de clases Naive Bayes.	36
Figura 15.- Máquina de vectores de soporte (SVM).	37
Figura 16.- Ejemplo de árbol de decisiones.	39
Figura 17.- Matriz de confusión.	40
Figura 18.- Diagrama de flujo de metodología.	42
Figura 19.- Caracterización electromagnética.	46
Figura 20.- Simulación del cambio de la cantidad de dígitos contra la impedancia del sensor, a diversas frecuencias.	50

Figura 21.- Simulación variando el ancho de dígito a diversas frecuencias para A) N=4 y B) N=5.	52
Figura 22.- Simulación variando la separación entre la barra excitadora y la detectora, para A) N=4 y B) N=5.	53
Figura 23.- Vista lateral de un corte transversal del sensor interdigitado.	54
Figura 24.- Simulación de la norma del campo eléctrico promedio sobre la superficie de sensor interdigitado para A) N=4 y B) N=5 sobre un sustrato de PTFE	55
Figura 25.- Simulación de la norma del campo eléctrico promedio sobre la superficie de sensor interdigitado para A) N=4 y B) N=5 con sustrato de poliimida.	56
Figura 26.- (A-F) Simulación de la norma del campo eléctrico en la superficie al variar la frecuencia de la onda electromagnética.	57
Figura 27.- A) Simulación de la norma del campo eléctrico a lo largo de la línea roja en B).....	58
Figura 28.- A) Simulación de la norma del campo eléctrico entre los dígitos en forma horizontal a lo largo de la línea roja en B).	58
Figura 29.- Vista lateral del sensor interdigitado con la zona de interés expresado por una línea roja de α - β	59
Figura 30.- Simulación de la norma de campo eléctrico para el estudio del efecto del sustrato de A)PTFE y B)Poliimida para un sensor interdigitado.....	60
Figura 31.- Diseño en CleWin del sensor de microondas interdigitado para A) 4 dígitos y B) 5 dígitos	61
Figura 32.- Fotos de la poliimida precursora. A) lámina de poliimida de fábrica, B) protección del cobre C) cortes del sustrato.	62
Figura 33.- Fotos sustratos preparados para fotoresina.	63
Figura 34.- Sensor de A) N=4, B) N=5.	64
Figura 35.- Sensores de poliimida para A) 4 y B) 5 dígitos.	64
Figura 36.- A) Sensor de 4 dígitos, B) sensor de 5 dígitos.	65

Figura 37.- Sensores en sustrato de PTFE para A) 4 dígitos, y B) 5 dígitos.	66
Figura 38.- Medición de espectroscopía de infrarrojo para A) Sustrato PTFE y B) sustrato de poliimida.	67
Figura 39.- Micrografía del sensor en sustrato de poliimida.	68
Figura 40.- Micrografía del sensor en sustrato de PTFE.	69
Figura 41.- Micrografía con corte lateral del sensor en sustrato de PTFE.....	70
Figura 42.- Micrografía con corte lateral del sensor en sustrato de PTFE con microscopio óptico Olympus GX51.	71
Figura 43.- Vista lateral de un dígito de cobre del sensor interdigitado con sustrato de PTFE	71
Figura 44.- Estudio de LIBS de la superficie del cobre del sensor.	72
Figura 45.- Tomografía computarizada de rayos X del sensor interdigitado en sustrato de PTFE.	73
Figura 46.- Matriz de confusión para el algoritmo Naive Bayes.....	75
Figura 47.- Matriz de confusión para el algoritmo KNN.	75
Figura 48.- Matriz de confusión para el algoritmo SVM.....	76
Figura 49.- Matriz de confusión para el algoritmo Árbol de decisiones.	76

1. Introducción

La preservación de la calidad de los recursos hídricos es un tema de investigación en continua evolución, desarrollando estudios para la detección de contaminantes en aguas dulces de fuentes naturales, debido a que representan una amenaza constante en el medio ambiente y el sector salud. La detección temprana y precisa de analitos contaminantes, permitirá preservar la salud de los seres vivos que consumen estas aguas, desde animales y plantas, hasta seres humanos [1].

Desde hace décadas, la detección de contaminantes en estas aguas ha sido un tema fundamental de investigación, encontrando una amplia diversidad de analitos dañinos para la salud, por solo mencionar algunos se encuentran el cloruro de potasio (KCl), cloruro de manganeso $MnCl_2$ [1] y glifosato N-(fosfonometil) glicina [2], siendo estos los casos de estudio debido a su peligrosidad y/o abundancia en este medio. El glifosato es un herbicida de amplio espectro y frecuentemente empleado en el mundo de la agricultura, silvicultura, jardinería e incluso en actividades domésticas, es uno de los analitos más preocupantes que repetidamente aparece en los estudios de la calidad del agua. En particular, el glifosato se considera toxicológicamente dañino y presenta una potencial asociación con enfermedades crónicas, incluidas las conductas mentales y reproductivas, lo cual se relaciona con graves problemas de salud, principalmente por su dificultad para ser detectado en el medio ambiente [3].

Por años, los ensayos de la calidad del agua y detección de estos contaminantes es un tema fundamental de investigación, los métodos convencionales para su caracterización, por mencionar algunos: cromatografía de iones, líquidos y gases, espectroscopía de masas, resonancia magnética nuclear, dispersión de superficie de Raman, resonancia de plasmón de superficie, métodos voltaicos y amperométricos, electroforesis capilar, enzimoimmunoanálisis de adsorción (ELISA), están basados en los análisis de parámetros físicos, químicos y bacteriológicos, requiriendo personal altamente entrenado, equipos de medición que usualmente son de alto costo, tiempos largos de respuesta, aunado a esto la dificultad para la recolección de las muestras en campo y tiempos prolongados para el procesamiento

de los resultados [3]. Estas desventajas representan un nicho de oportunidad para la entrada de tecnologías emergentes. Una solución de las más prometedoras en el desarrollo de nuevos sistemas para la detección de contaminantes en agua, se encuentra el diseño de una estructura funcional que es expuesta a la interacción de la radiación electromagnética de alta frecuencia. Esto debido a la evolución en el desarrollo de sistemas de detección con novedosas funcionalidades. En este sentido, la fabricación de dispositivos activos y/o pasivos con características capaces de detectar y procesar señales en el espectro de las bandas de micro y milimétricas (1 GHz hasta 100 GHz) con bajo consumo de energía. Aunque la investigación en los sensores de microondas es emergente (menos de 20 años) a diferencia de los equipos tradicionales, ha demostrado ser de utilidad en aplicaciones para la detección de gases contaminantes, humedad o un analito en fase líquida [4]. Las aplicaciones de los sensores de microondas incluyen, entre otros, la manufactura automatizada, la biomedicina, estudios ambientales y usos industriales [5].

El desarrollo de sistemas de detección con ondas electromagnéticas de microondas se encuentra en un amplio campo de investigación, por las ventajas que presenta, tales como su potencial aplicación en la detección de variables físicas, no es destructivo ni invasivo, con respuesta en tiempo real al interaccionar las ondas electromagnéticas con el medio bajo prueba, bajo consumo de potencia y bajo costo [6]. Entre los sistemas que cumplen con estas características están los sensores planares con electrodos interdigitados (IDE), los cuales consisten en una barra excitadora (BE) y una barra detectora (BD), ambas con electrodos perpendiculares llamadas peines o dígitos. Estos IDE generan un alto campo eléctrico entre los espacios de los peines, aumentando su sensibilidad para la detección de los materiales bajo estudio [7]. Estos electrodos operan desde el principio básico de un capacitor con placas paralelas separadas por un dieléctrico, esto es, cuando las placas se van abriendo, el campo eléctrico se estira a un espacio más amplio. En la figura 1 se muestra la modificación de un condensador simple de placas paralelas a su forma coplanar [8].

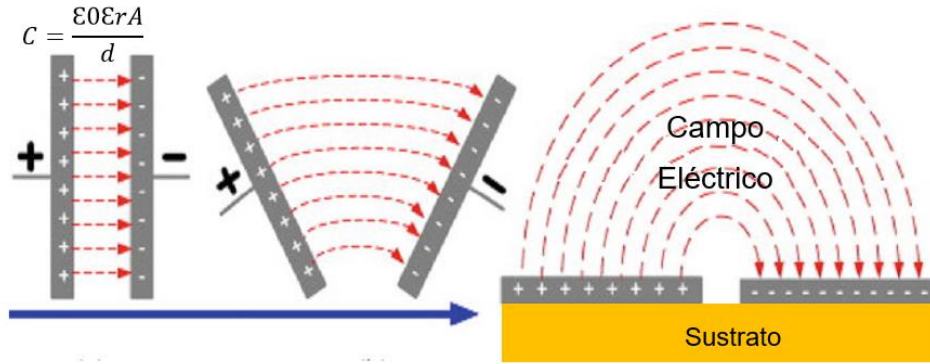


Figura 1.-Modificación de capacitor de placas paralelas [8].

Desde un punto de vista cuasi-estático, la estructura de electrodos interdigitados es considerada como el equivalente a una capacitancia entre dos electrodos paralelos separados una distancia finita [9]. La geometría de los sensores interdigitados influye directamente en la magnitud del campo eléctrico por lo que es crucial en el rendimiento y sensibilidad de los sensores. La idea de colocar ambos electrodos sobre un sustrato, es la base del método de dielectrometría. La figura 2 muestra dos barras de electrodos guías, una detectora y otra excitadora sobre un sustrato dieléctrico con permitividad dieléctrica ϵ_r . Estos electrodos tienen una geometría compuesta por peines interdigitados, generando campos eléctricos uniformes en la dirección Z y presentan un comportamiento periódico sobre la dirección Y con la longitud de onda λ [10]. Los contactos y peines de los sensores de microondas, usualmente son metales con una conductividad eléctrica alta, por mencionar los principales se tiene la plata, el oro, el cobre, etc., permitiendo el desarrollo de sensores de microondas de alta sensibilidad [11]. El área total de los electrodos es [12]:

$$A = N * L(W + 2H) \quad (1)$$

Donde N es el número de electrodos, L es la longitud, W el ancho y H es el espesor de los electrodos.

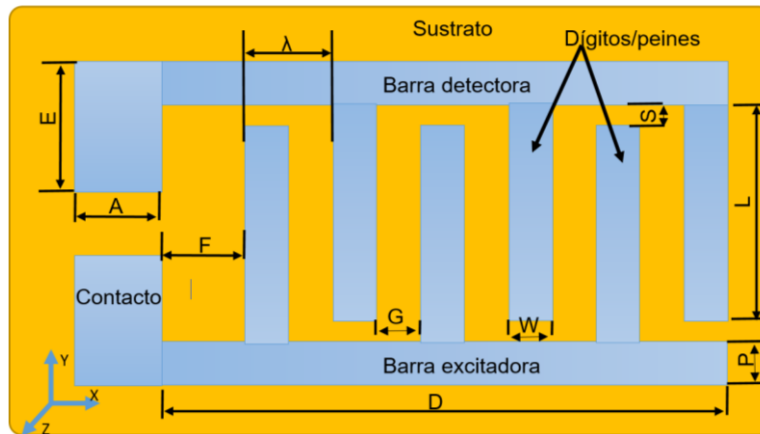


Figura 2.- Sensor de microondas con electrodos interdigitados.

En la figura 3 se observan las formaciones de las líneas de campo eléctrico, entre la superficie del electrodo y el material de prueba. De esta manera, las interacciones de iones y moléculas presentes en la muestra líquidas, provocan la formación de capacitancias, la cuales son proporcionales a la interacción con la zona del campo eléctrico generado sobre los electrodos interdigitados.

Además de la geometría de los electrodos interdigitados, la elección del sustrato influye directamente en la homogeneidad y magnitud del campo eléctrico generado sobre el espacio de interacción del sensor. Al disminuir la permitividad dieléctrica del sustrato, más intenso es el campo eléctrico sobre los contactos, por tanto, mayor será la interacción con el analito que hay en el agua, aumentando la sensibilidad de sensor.

Esto es, el campo eléctrico de una onda electromagnética induce un momento dipolar eléctrico en el medio de prueba, es decir en el agua, en los analitos, en los sustratos y entre más intenso es ese campo, mayor será la intensidad de oscilación de esos dipolos. Cuando los átomos se excitan, reirradian ondas electromagnéticas también y estas excitan a los átomos vecinos.

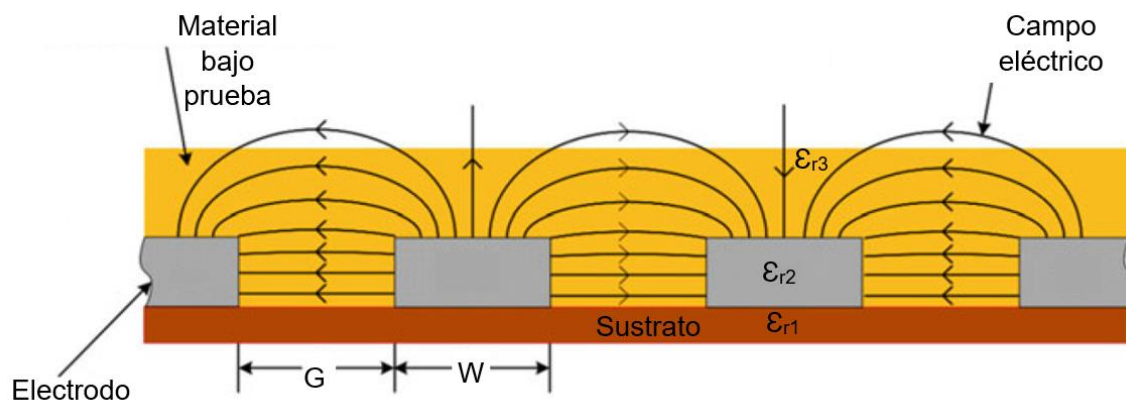


Figura 3.- Líneas de campo eléctrico en sensor interdigitado [13].

Por lo tanto, el patrón de ondas electromagnéticas generado, es la superposición de la onda incidente y la suma de las ondas irradiadas por los dipolos atómicos. Esta superposición, la parte que se reirradia por los átomos, es la que permite caracterizar los materiales bajo prueba. Este patrón de ondas es único, debido a que la iteración de las ondas electromagnéticas con la muestra de analito en el medio, es dependiente de la polarización de las moléculas de agua y del analito, produciendo una señal reflejada y/o transmitida específica, la cual es cuantificada y puede correlacionarse con las propiedades únicas del material bajo prueba. Los espectros electromagnéticos de reflexión y transmisión generados, son dependientes de la conductividad eléctrica y permitividad dieléctrica de los materiales bajo prueba [14].

La estructura mecánica del sustrato también determina las características deseadas de las aplicaciones. Los materiales que usualmente se emplean por mencionar algunos son polímeros, metales o incluso compuestos orgánicos. Estos materiales tienen diferentes propiedades físicas y químicas que afectan directamente el comportamiento de los sensores [15]. El sustrato de poliimida es un candidato favorable en la fabricación de sensores flexibles, tiene alta resistencia a las temperaturas de hasta 350 °C, es mecánicamente fuerte y químicamente inerte, es hidrofóbico absorbiendo solo un 3% de humedad relativa de su peso en seco [16]. La tabla 1 muestra algunas ventajas y desventajas de sustratos comúnmente utilizados en la fabricación de sensores.

Tabla 1.- Ventajas y desventajas de sustratos [13, 16].

Sustrato	ϵ_r	Ventajas	Desventajas
PTFE Politetrafluoroetileno	2.0 a 2.84	Buena resistencia química y a altas temperaturas y alta resistencia eléctrica.	Difícil de moldear y es de costo elevado.
PDMS Polidimetilsiloxano	2.7	Inerte, no tóxico, inflamable, hidrofóbico.	Dificultad para realizar el depósito de electrodos directamente.
PET Polietileno-tereftalato	3.0	Bajo costo, buena resistencia química, resistente a alta temperatura y alta flexibilidad.	Pobre resistencia al impacto.
Poliimida	3.0 a 4.0	Alta flexibilidad, buena resistencia térmica y química, alta dureza mecánica.	Costo elevado y baja resistencia al impacto.
ABS Acrilonitrilo butadieno estireno	2.5	No tóxico, reciclable y de bajo costo.	Poca resistencia a la intemperie y a solventes químicos, con baja rigidez dieléctrica.

Por lo anterior, en este trabajo la investigación se enfoca en estudiar el efecto de las propiedades dieléctricas del sustrato de poliimida y politetrafluoroetileno, en un arreglo de sensores de microondas interdigitados para la detección de analitos de glifosato, cloruro de potasio y cloruro de manganeso disueltos en agua.

2. Antecedentes

La amplia diversidad de sustratos y su estudio de la interacción con analitos en medios acuosos, ha presentado una serie de avances significativos con el paso de los años, siendo objeto de estudio de laboratorios desde sus inicios en los 90, constituyendo una categoría importante en la fabricación de sensores. Esto ha permitido estudios que demuestran que, al modificar la composición de los materiales de fabricación, la geometría de los electrodos interdigitados, y su método de elaboración, era permisible generar y alterar los patrones de campos eléctricos que interaccionan con el medio bajo prueba. En sus inicios, en 1994, Sheiretov [10] desarrolló un estudio donde comparó la medición de la permitividad dieléctrica del aire y aceite de transformador, al ser expuestos a un plato de placas paralelas y tres sensores interdigitados con distintas geometrías. El arreglo de los tres sensores interdigitados, consistía en el depósito de una capa conductora de cobre con espesor de 1 μm sobre un sustrato de Kapton (poliimida) con un área efectiva de 2.54 cm por lado, recubiertos de oro y plata para evitar su oxidación. Este estudio demostró que los sensores interdigitados presentaban menores pérdidas y mayor estabilidad en la magnitud de la respuesta al ser sometidos con una frecuencia de excitación de 5 mHz a 10 kHz.

Yamada en 1995 [17] y 1997 [18] publicó un trabajo de sensores planares con geometría de meandro, sobre sustrato de poliimida de 50 μm de espesor, donde se mostró que al aplicar ondas con frecuencia de 5 MHz, es posible detectar defectos en tablillas electrónicas de alta densidad, además muestra que el patrón de ondas obtenido está fuertemente asociada con el tipo de sustrato y la geometría del material bajo prueba.

Posteriormente, en 2005, Mukhopadhyay y Gooneratne et al.[19], desarrollaron un estudio de tres tipos de sensores planares electromagnéticos con diversa configuración geométrica: meandro, malla e interdigitado. Los sensores fueron puestos a prueba para la detección de materiales defectuosos y la existencia de grietas internas en tablillas. La configuración tipo meandro, demostró dificultad para detectar grietas que se encontraban en paralelo a la bobina de excitación. Por otro lado, el sensor planar tipo malla, presentó una respuesta moderada a la detección de

materiales dieléctricos. El sensor electromagnético interdigitado, demostró ser más sensible y tener una mayor área efectiva de campo eléctrico. Al variar la frecuencia de excitación de 100 kHz a 100 MHz, la impedancia de los sensores tipo meandro y malla incrementaban, en cambio para el sensor interdigitado la impedancia eléctrica disminuía. Esto nos lleva a la conclusión de que los sensores con geometría meandro y malla, tienen un comportamiento inductivo y buena respuesta a la detección de materiales magnéticos y conductivos. Mientras que para el sensor interdigitado el comportamiento es tipo capacitivo, teniendo una mejor respuesta a materiales dieléctricos

Por su parte, Mukhopadhyay [20] en 2007, demostró la distribución de la intensidad del campo eléctrico en un sustrato con tres sensores interdigitados de diferentes geometrías. Mukhopadhyay explicó que, al aumentar la separación de los peines y ancho de las líneas de conducción, la magnitud del campo eléctrico disminuye, pero tiene una variación despreciable a lo largo del peine.

Al modificar la estructura de los sensores interdigitados en sustratos de resina epóxica con fibra de vidrio tipo FR4, Syaifudin et al.[21], en 2008 demostró la variación de la sensibilidad mediante una comparación de tres sensores con distintas configuraciones geométricas, se muestran los resultados de la estimación de las propiedades dieléctricas de los materiales de prueba al ser sometidos a las líneas de campo eléctrico generados por el sensor. Esto lo complementó la propia Syaifudin [22] en 2011, desarrollando tres sensores interdigitados para la detección de biotoxinas y otros contaminantes en mariscos. El sustrato era el mismo y los sensores interdigitados presentaban diversas geometrías, pero con la misma área efectiva. La simulación en COMSOL multiphysics, demostró que, al disminuir la distancia de separación entre las líneas de conducción, la homogeneidad e intensidad de la distribución del campo eléctrico aumenta.

En 2011, M. Yunus et al.[23] realizó un estudio mostrando que es posible utilizar sensores interdigitados planares para detectar distintas concentraciones de nitratos disueltos en agua destilada. Para la fabricación de los sensores interdigitados se utilizaron líneas conductoras de cobre sobre un sustrato de politetrafluoroetileno (PTFE) con permitividad dieléctrica de 2.5. Las ondas electromagnéticas al interactuar

con el nitrato de sodio (NaNO_3) y el nitrato de amonio (NH_4NO_3), generaban patrones de señales diferentes.

En 2012, Rahman et al.[24], demostró que al comparar los resultados entre sensores interdigitados con sustrato de silicio, presentan mejor desempeño de sensibilidad a comparación de los sensores con sustrato de resina epóxica reforzada con vidrio (FR4) recubierto con un polímero carboxilo funcional APTES (3-aminopropiltriethoxisilano) y acetato de tionina. Por otro lado, resultados experimentales mostraron que al modificar los espesores del sustrato tienen efecto en la sensibilidad y estabilidad del sensor interdigitado.

Por otro lado, Korostynska [1] en 2013, desarrolló sensores interdigitados de microondas, para indicar la calidad del agua en tiempo real. Estos sensores fueron diseñados sobre sustratos de láminas de poliimida flexibles de 25.4 micras, para evitar daños mecánicos durante su uso y de esta manera proporcionando longevidad de operación. Se demostró que claramente hay corrimientos de los picos de absorción en el rango frecuencia de 8-11 GHz, cuando las muestras de agua desionizada y agua de grifo fueron puestas en contacto con el sustrato y el patrón de los sensores interdigitados.

Zia et al.[25], en el 2014 presentó un estudio de la contaminación del agua por esteres de ftalato. En esta investigación se mostró la detección de los contaminantes mediante una técnica no invasiva con detección en tiempo real, empleando sensores interdigitados planos fabricados sobre un sustrato de silicio con permitividad relativa de 4.2. Estos sensores detectaron distintas concentraciones di-ftalato (DEHP) disueltas en agua desionizada. Se desarrollaron dos sensores interdigitados cambiando la geometría de los electrodos, pero manteniendo el mismo sustrato dieléctrico y su espesor.

La fabricación de un sensor planar interdigitado flexible sobre un sustrato de polidi-metilsiloxano (PDMS) y electrodos de nanotubos de carbono, se desarrolló por Chih-Fan Hu [26] en 2013, mostrando que la variación de la capacitancia es proporcional a la tensión de la flexión de los sensores.

Debido a la importancia de la selectividad en los sensores, en el 2015, Nag et al.[27, 28], desarrolló sensores interdigitados fabricados con polímero de impresión

molecular con y sin recubrimiento de óxido de estaño (SnO_2). El principio de estos sensores se basa en recubrir con una película delgada de SiO_2 sobre la superficie detectora del sensor, mejorando la selectividad de la molécula que se desea detectar, con tiempos de respuesta del orden 12 segundos para el gas del petróleo.

La frecuencia de operación es muy importante para medir las propiedades eléctricas de los materiales. En 2017, Cashman [29], determinó la concentración de glifosato disperso en agua desionizada empleando una cavidad resonante, obteniendo la caracterización de la magnitud y fase del parámetro de dispersión S_{21} con un analizador de redes vectorial, enviando ondas electromagnéticas en un rango de 1 GHz a 10 GHz. En este trabajo se obtuvieron los límites de detección de glifosato de un rango de 1 μg a 100 mg/L.

Posteriormente en 2018, Nag [30], presentó un estudio de sensores interdigitados flexibles, donde se combina el tejido conductor transparente con polidimetilsiloxano (PDMS), el cual es sensible al ser colocado sobre una plataforma suave y con alta repetitividad al largo plazo, permitiendo desarrollar el sistema simple, efectivo, reproducible y potencialmente escalable. El sensor desarrollado con sustrato flexible demostró tener una respuesta elástica lineal hasta un 18% en la prueba de tensión, seguido de una respuesta no lineal antes del fallo del 48.7%.

En 2020, Wang [7], demostró que el campo eléctrico de alta intensidad mejora la interacción entre el sensor interdigitado y la muestra bajo prueba, por tanto se obtiene una alta precisión al caracterizar la permitividad dieléctrica de los materiales sólidos expuestos. El sensor interdigitado fue fabricado sobre un sustrato cerámico-orgánico reforzado con fibra de vidrio y teflón con permitividad dieléctrica de $\epsilon_r=3.5$, denominado comercialmente como RF-35. El diseño de la geometría de las líneas de conducción es dual para mejorar significativamente la magnitud del parámetro de transmisión S_{21} . Como resultado se obtuvo que es posible caracterizar materiales sólidos con permitividad dieléctrica de $\epsilon_r=1, 2.2, 4.0, 6.15, 9.6, 10.5$, con una exactitud de hasta el 99% con este método.

Recientemente, Khalaf et al.[31], en 2022 depositó sobre un sustrato de poliimida y papel brillante marca Epson, electrodos interdigitados recubiertos de

poli(3,4-etilendioxitiofeno) sulfonato de poliestireno (PEDOT:PSS). Las líneas de conducción de los electrodos, fueron impresos con tinta conductora de nanopartículas de plata. La sensibilidad de los sensores fue probada para distintos números de peines, teniendo una respuesta lineal en un rango de temperatura de 25 °C a 50 °C, obteniendo una sensibilidad de 1.462%/°C y 3.202%/°C para el sensor con sustrato de papel brillante y el sustrato de poliimida respectivamente, demostrando que el sustrato de poliimida influye fuertemente en el efecto de la interacción del campo eléctrico con el material bajo prueba.

Por lo anterior, en este trabajo de investigación se propone un estudio del efecto de los sustratos de poliimida y de politetrafluoroetileno en el comportamiento electromagnético de sensores de microondas interdigitados, para su aplicación en la detección de analitos de glifosato, cloruro de manganeso y cloruro de potasio disueltos en agua desionizada.

2.1 Planteamiento del problema

Desde hace un par de décadas, han existido técnicas de caracterización de muestras líquidas basadas en equipos de laboratorio o industriales de un alto costo, con baja selectividad y sensibilidad, con largos tiempos de respuesta, además que requieren de largos tiempos para el procesamiento de los resultados. Es por ello que, en este trabajo de tesis, se centra en el estudio del efecto de sustratos empleados en la fabricación de un arreglo de sensores de microondas que proporcionen una alta sensibilidad y selectividad de analitos contaminantes en medios acuosos.

2.2 Contribución Científica

Este trabajo de tesis muestra teórica y experimentalmente, cómo las propiedades dieléctricas del sustrato influyen en la respuesta electromagnética de los sensores de microondas interdigitados al interactuar con analitos en soluciones acuosas. Se demuestra que al aumentar o disminuir la permitividad eléctrica del sustrato, disminuye o aumenta la intensidad del campo eléctrico respectivamente, afectando la sensibilidad. Además, se integra el análisis de datos mediante algoritmos de aprendizaje de máquina, para establecer la selectividad mediante correlaciones

entre el comportamiento electromagnético y la presencia de los analitos. Aunado a esto, este trabajo proporciona fundamentos para el diseño de sensores de microondas interdigitados con aplicaciones en la detección de analitos contaminantes.

2.3 Justificación

La detección precisa y temprana de contaminantes en fuentes naturales de agua, es esencial para salvaguardar los ecosistemas y la salud de los seres vivos. En este contexto, el desarrollo de nuevas técnicas para la detección de analitos contaminantes con características de alta sensibilidad y selectividad, son algunos de los pilares para el desarrollo de esta propuesta de tesis donde se pretende dar una solución no convencional a esta necesidad. En este trabajo, se integra el análisis del efecto dieléctrico del sustrato para modular la intensidad del campo eléctrico en el espacio de interacción con analitos bajo prueba. Se demuestra que los sustratos con diferentes permitividades dieléctricas inducen variaciones significativas en la sensibilidad electromagnética, generando patrones únicos diferenciados incluso en pequeñas concentraciones del mismo analito. Este efecto diferencial representa una oportunidad para mejorar la selectividad del sistema cuando es asistido por aprendizaje de máquina, con el cual se pueden identificar patrones de onda electromagnética únicos asociados a cada analito. Con esto, este trabajo establece un conjunto entre la permitividad dieléctrica del sustrato y las capacidades computacionales del aprendizaje de máquina, logrando un sistema altamente sensible y selectivo.

Esta investigación implica el uso de tecnologías emergentes para abordar un problema de suma importancia en el ámbito de salud y ambiental. Al mismo tiempo, se aspira a establecer una sólida base científica y tecnológica en la exploración de las propiedades de los sustratos en aplicaciones de sensores de microondas interdigitados. Esta contribución no solo avanza en la ciencia de los materiales, sino que también aporta al esfuerzo continuo de preservación de los recursos hídricos y al progreso general en estos campos de investigación interconectados.

2.4 Hipótesis

La sensibilidad y selectividad de un arreglo de sensores de microondas interdigitados se aumenta a través de la modificación de la permitividad eléctrica del sustrato y algoritmos de aprendizaje de máquina, respectivamente.

2.5 Objetivo general

Demostrar el efecto del sustrato en la sensibilidad de un arreglo de sensores de microondas interdigitados dedicados a la detección de analitos disueltos en agua, con alta selectividad dada por algoritmos de aprendizaje de máquina.

2.6 Objetivos específicos

1. Simular y diseñar un sensor de microondas con sustratos dieléctricos de poliimida y PTFE, utilizando el software de COMSOL Multiphysics.
2. Determinar las propiedades eléctricas y morfológicas de los sustratos dieléctricos de los sensores de microondas.
3. Fabricar sensores con sustratos dieléctricos con diferente permitividad dieléctrica.
4. Determinar el comportamiento electromagnético de los sensores de microondas en presencia de un analito en agua desionizada.
5. Identificar el efecto del sustrato dieléctrico en la sensibilidad y selectividad de los sensores de microondas.

3. Marco teórico

3.1 Mapeo conforme y Schwarz-Christoffel

El análisis de ondas electromagnéticas variantes en el tiempo es complejo, por lo que han surgido técnicas que ayudan a comprender mejor estos sistemas, uno de ellos es el mapeo conforme en conjunto con la transformada de Schwarz–Christoffel.

Con esta técnica, la forma geométrica puede modificarse, pero las propiedades eléctricas (permitividad, conductividad), magnéticas y mecánicas se mantienen invariantes, esto nos permite analizar un arreglo de electrodos interdigitados coplanares a través de su transformación a dos placas paralelas separadas por un dieléctrico [32].

Para el desarrollo de esta técnica, se inicia analizando la figura 4, en la cual se muestra un potencial eléctrico $V = (+V, -V)$ aplicado en un arreglo de N peines conformados por dos electrodos externos con capacitancia C_E y 2 electrodos internos con capacitancias C_I . Los peines de cada barra detectora o excitadora tienen un ancho W , separadas una distancia G y la distancia entre los electrodos de la misma barra se denomina distancia espacial λ_E . Se analizan por separado debido a que los electrodos externos presentan un comportamiento similar al tener solo un capacitor conectado a un potencial virtual de cero, en cambio, los electrodos internos tienen dos capacitores conectados al potencial de cero.

El parámetro adimensional η , también llamado relación de metalización [33], representa la dependencia que existe entre el ancho del electrodo y el espacio entre los peines, expresado por la ecuación (2).

$$\eta = \frac{W}{W + G} \quad (2)$$

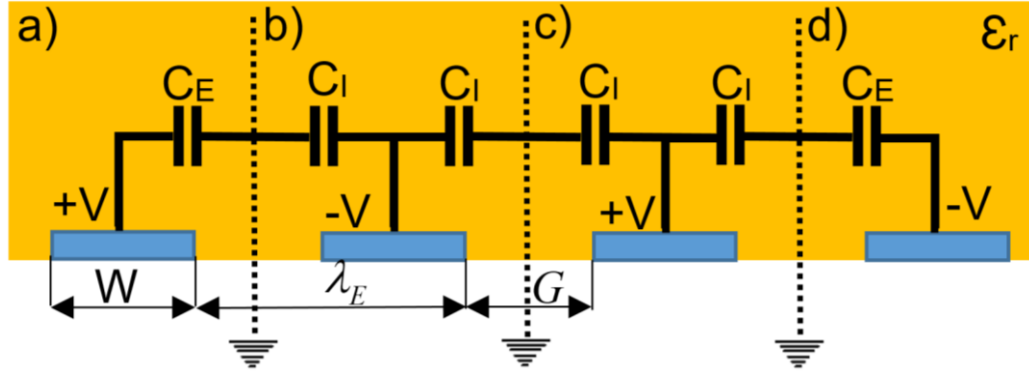


Figura 4.- Diagrama del análisis capacitivo de electrodos coplanares, a) y d) electrodos externos, b) y c) electrodos internos.

Analizando la sección a) de la figura 4, la longitud espacial λ_E entre los electrodos es dada por $\lambda_E = 2(W + G)$. En esta sección a) se representa como un plano complejo x que se transforma a un plano z empleando la ecuación (3), donde x representa un punto en el espacio del plano x , como se muestra en la figura 5.

$$z = \frac{4K(k)}{\lambda_E} x \quad (3)$$

Donde $K(k)$ es la integral elíptica de primer orden con modulo k donde vale $|k| \leq 1$, el valor de k' es el módulo complementario $k' = \sqrt{1 - k^2}$ y r representa la relación de la altura del dieléctrico h con la longitud de onda espacial $r = h/\lambda_E$ para resolver la integral elíptica dada en la ecuación (4) [32], donde v es una variable evaluada de $0 \leq v \leq 1$

$$K(k) = \int_0^1 \frac{dv}{\sqrt{(1-v^2)(1-k^2v^2)}} \quad (4)$$

Cumpliendo con la condición del módulo (5).

$$4r = \frac{K(k')}{K(k)} \quad (5)$$

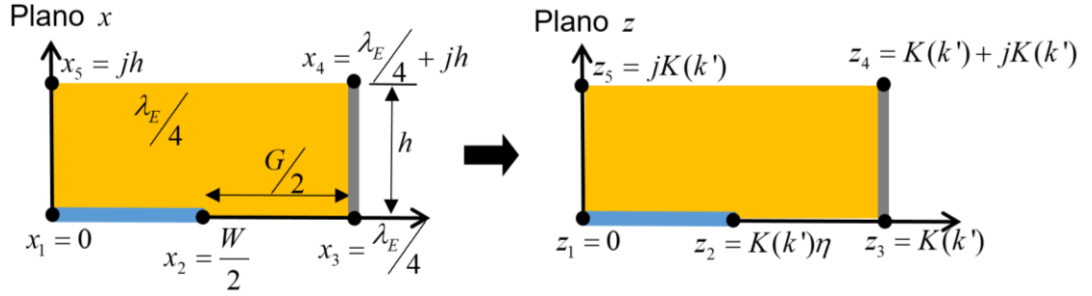


Figura 5.- Transformación del plano x al plano z .

Resolviendo la ecuación (3) para los puntos del plano complejo x , se obtiene la primera transformación, donde para cada valor correspondiente del plano x se tiene un punto en el espacio del plano complejo z expresado en $z = x + jy$.

Como se observa en la figura 5, los valores de cada punto del plano x , transformados en cada punto del plano complejo z , resulta en

$$\begin{aligned}
 z_1|_{x_1=0} &= \frac{4K(k)}{\lambda_E}(0) \Rightarrow z_1 = 0 \\
 z_2|_{x_2=\frac{W}{2}} &= \frac{4K(k)}{\lambda_E}\left(\frac{W}{2}\right) = \frac{4K(k)}{2(W+G)}\left(\frac{W}{2}\right) \Rightarrow z_2 = \eta K(k) \\
 z_3|_{x_3=\frac{\lambda_E}{4}} &= \frac{4K(k)}{\lambda_E}\left(\frac{\lambda_E}{4}\right) \Rightarrow z_3 = K(k) \\
 z_4|_{x_4=\frac{\lambda_E}{4}+jh} &= \frac{4K(k)}{\lambda_E}\left(\frac{\lambda_E}{4} + jh\right) = \frac{4K(k)}{\lambda_E}\left(\frac{\lambda_E}{4}\right) + \frac{4K(k)}{\lambda_E}(jr\lambda_E) \Rightarrow z_4 = K(k) + jK(k') \\
 z_5|_{x_5=jh} &= \frac{4K(k)}{\lambda_E}(jh) = \frac{4K(k)}{\lambda_E}(jr\lambda_E) = 4K(k)j \frac{K(k')}{4K(k)} \Rightarrow z_5 = jK(k')
 \end{aligned} \tag{6}$$

En la figura 6, se muestra la forma geométrica rectangular conformada por los puntos del plano z , se transforman en puntos geométricos del plano t , donde cada punto de este plano se obtiene gracias a la función seno inversa elíptica dada por (7), para $i=1,2,3,4$ para este caso en particular.

$$t_i = sn(z_i, k) \tag{7}$$

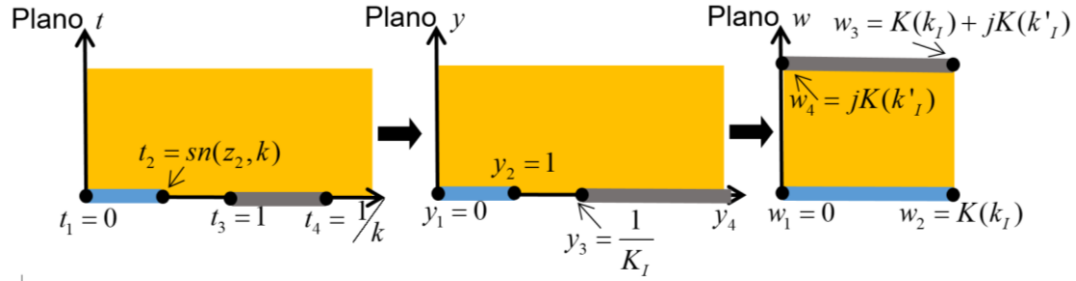


Figura 6.- Transformación final a placas paralelas en el plano w .

En la tercera transformación, los puntos del plano t son modificados al plano y , en el cual se hace una extensión del electrodo definido por los puntos t_3 a t_4 , a un electrodo semi-infinito por medio de las relaciones de (8) y (9).

$$y = \frac{t}{t_2} \sqrt{\frac{t_4^2 - t_2^2}{t_4^2 - t^2}} \quad (8)$$

$$k_I = t_2 \sqrt{\frac{t_4^2 - 1}{t_4^2 - t_2^2}} \quad (9)$$

Algunos ejemplos de aplicar la ecuación (8) para transformar los valores del plano t , resultando en puntos equivalentes del plano y tales como se muestran a continuación.

$$\begin{aligned} y_1|_{t=0} &= \frac{0}{t_2} \sqrt{\frac{t_4^2 - t_2^2}{t_4^2 - t^2}} \Rightarrow y_0 = 0 \\ y_3|_{t=1} &= \frac{1}{t_2} \sqrt{\frac{t_4^2 - t_2^2}{t_4^2 - 1}} \Rightarrow y_3 = \frac{1}{k_I} \end{aligned} \quad (10)$$

La ultima transformación es dada por Schwarz-Christoffel, donde finalmente resulta un rectángulo generado desde un cuadrante del plano y , obtenido por

$$w = \int_0^y \frac{dw'}{\sqrt{(1-w'^2)(1-k_I^2 w'^2)}} \quad (11)$$

Con esta última transformación, los electrodos del plano x , se modifican a un capacitor de placas paralelas en el plano w como se observa en la figura 6, el cual es sencillo de analizar con las siguientes fórmulas, donde la permitividad dieléctrica del material juega un papel muy importante [33].

$$C_I = \varepsilon_0 \varepsilon_r L \frac{K(k_I)}{K(k'_I)} \quad (12)$$

$$C_E = \varepsilon_0 \varepsilon_r L \frac{K(k_E)}{K(k'_E)} \quad (13)$$

El análisis del campo eléctrico para esta transformada no es válido para todo el espectro electromagnético. Una aproximación válida para determinar la frecuencia máxima de operación, es a través de la ecuación de campo eléctrico total E para altas frecuencias en placas paralelas [34], donde E_0 es la amplitud del campo eléctrico en el centro de las placas, r es la longitud de las placas y c es la velocidad de propagación de la luz con un valor de 2.99×10^8 m/s y la frecuencia angular es $\omega = 2\pi f$.

$$E = E_0 e^{j\omega t} \left[1 - \frac{1}{2^2} \left(\frac{r\omega}{c} \right)^2 + \frac{1}{(2^2)(4^2)} \left(\frac{r\omega}{c} \right)^4 \right] \quad (14)$$

Para el caso donde se tiene que el valor de $r \ll 1$, al elevarlo a mayores potencias se reduce en gran manera, por lo que se puede despreciar el tercer término de la ecuación. Para un análisis en campos eléctricos quasi-estáticos, es requerido que

$$\frac{1}{2^2} \left(\frac{\omega r}{c} \right)^2 \ll 1 \quad (15)$$

Resultando finalmente la ecuación (16)

$$\begin{aligned} \frac{1}{2^2} \left(\frac{2\pi f r}{c} \right)^2 &\ll 1 \\ f &\ll \sqrt{\frac{c^2}{\pi^2 r^2}} \end{aligned} \quad (16)$$

En este protocolo de tesis, se tiene que $r = 0.02$ m, al sustituir en la ecuación (16), se obtiene que la frecuencia máxima de las ondas de propagación donde es válido esta transformación, resultando que $f \ll 4.75 \times 10^9$ Hz.

3.2 Microondas

La irradiación de las ondas electromagnéticas en el rango de frecuencia de 0.3 GHz a 300 GHz, con longitud de onda de 1 m a 1 mm respectivamente, se le denomina irradiación de microondas. Las bandas de frecuencia típicamente aprobadas en aplicaciones industriales son de 915 MHz y 2450 MHz, esta última, con longitud de onda de 12.24 cm, es la más utilizada en equipos químicos comerciales actualmente. La razón principal de utilizar una frecuencia de 2450 MHz, es que cerca de este valor, se encuentra la máxima absorción de energía de microondas por el agua [35].

La interacción de los materiales dieléctricos al ser expuestos a ondas electromagnéticas de microondas, se produce un calentamiento dieléctrico debido a la polarización neta del material bajo prueba. Cuando estas ondas interactúan en un espacio deseado, pasando de un medio a otro, se generan diversos mecanismos, algunos de ellos son de reflexión, absorción y transmisión, como se observa en la figura 7.

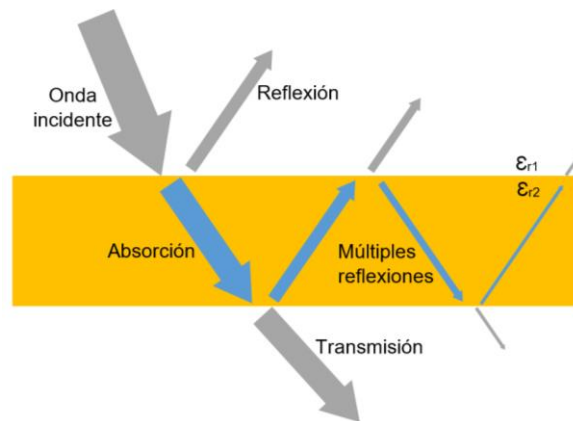


Figura 7.- Representación esquemática de la interacción de las ondas electromagnéticas en dos medios.

3.2.1 Mecanismos de reflexión de ondas electromagnéticas.

Este mecanismo se presenta cuando los portadores de carga del material, tales como electrones libres o huecos, interactúan con las ondas electromagnéticas y estos portadores de carga libre o electrones, generan una pérdida de acoplamiento de impedancias, resultando en una reflexión de radiación de las ondas incidentes. Mientras más alto sea el número de portadores de carga libre en el material que interactúa con la onda electromagnética, mayor será la atenuación de la onda incidente, tanto por los mecanismos de reflexión como los mecanismos de absorción. Existen factores que contribuyen en la reflexión de la onda de propagación, por ejemplo: el ángulo de la onda incidente, el índice de refracción, la geometría del material, la frecuencia, la superficie del material, si es lisa o rugosa, provocando que la reflexión de la onda puede ser en diversas direcciones, entre otros más. La ecuación (17), nos ayuda a determinar el coeficiente de reflexión, el cual se refiere a la magnitud de energía reflejada en una interfaz de dos medios [36].

$$\Gamma = \left| \frac{\text{Energía reflejada}}{\text{Energía incidente}} \right| \quad (17)$$

Cuando la onda electromagnética pasa de un medio a otro, si hay buen acoplamiento de impedancias, el coeficiente de reflexión debería ser cerca de cero. En sistemas de microondas, las pérdidas de retorno se expresan como [37]:

$$RL = 10 \log_{10} \left(\frac{1}{\Gamma^2} \right) \quad (18)$$

3.2.2 Mecanismos de absorción de ondas electromagnéticas.

Cuando un material con dipolos eléctricos o magnéticos, interactúa con un campo electromagnético, existe un mecanismo llamado de absorción. Si este material tiene una alta constante dieléctrica o alta permeabilidad magnética, tendrán mayor cantidad de dipolos eléctricos y dipolos magnéticos respectivamente, aumentando la absorción de las ondas de programación que llegan al material. Esta radiación absorbida en los materiales, se presenta en forma de calor y depende de la composición, geometría y de la frecuencia de onda electromagnética incidida [36].

3.3 Campo eléctrico de franja.

Estudiando la configuración más sencilla de un sustrato dieléctrico donde solo se tienen dos electrodos interdigitados, esto es, un peine en la barra excitadora (BE) y un peine en la barra detectora (BD), ambos con longitud L y ancho W , separadas una distancia G , en la cual se genera un campo eléctrico E con una máxima altura h , cuyas líneas eléctricas interactúan con un material bajo prueba (MBP) de espesor T , como se muestra en la figura 8. Aquí, una de las condiciones para este análisis, es que el ancho del peine sea mayor que el espacio entre los peines $W \gg 2G$. Una solución para obtener la distribución de campo eléctrico en dos dimensiones es con la técnica de mapeo conforme, la cual se desarrolló previamente. El uso adecuado de esta técnica, nos permite obtener la ecuación para una aproximación del valor de la capacitancia C .

Las coordenadas x, y en el plano del campo eléctrico se representan:

$$x = g \cos \left[\frac{\pi}{2V_0} (V_0 - \alpha) \right] \cosh \left(\frac{\pi}{2V_0} \beta \right) \quad (19)$$

$$y = g \sin \left[\frac{\pi}{2V_0} (V_0 - \alpha) \right] \sinh \left(\frac{\pi}{2V_0} d\beta \right) \quad (20)$$

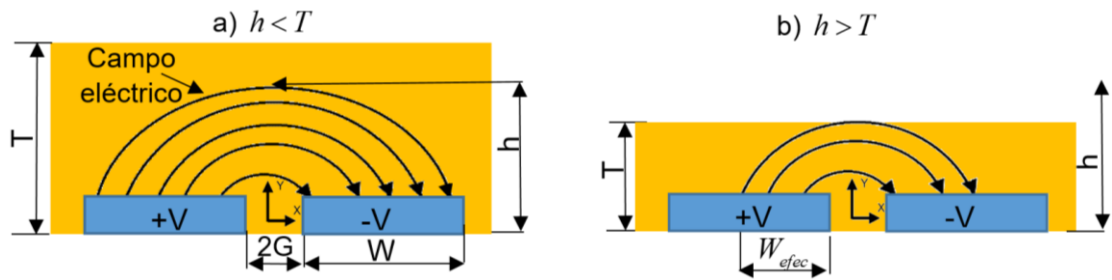


Figura 8.- a) La altura del material es mayor que el campo de penetración,
b) el campo eléctrico es mayor que la muestra bajo prueba.

Donde la función del potencial eléctrico viene dada por α , la función de flujo eléctrico es β , la diferencia del potencial eléctrico entre los peines de la barra excitadora y la barra detectora es $2V_0$. Asumiendo que la longitud de los dígitos es mucho mayor que el espacio entre los electrodos $L \gg G$ y que todas las cargas están en la superficie de los electrodos, es decir, en el plano $y = 0$, se obtiene de Ramo [38] que a partir del desplazamiento eléctrico D , que la carga total Q es:

$$Q = \iint D \cdot dA = 2L \int_G^{G+W} |D(y=0)| = \frac{4\epsilon_r \epsilon_0 V_0 L}{G\pi} \int_G^{G+W} \frac{1}{\sinh\left(\frac{\pi}{2V_0} \beta\right)} dx \quad (21)$$

Sustituyendo en la ecuación (19) y (20), se tiene

$$Q = \frac{4\epsilon_r \epsilon_0 V_0 L}{G\pi} \int_G^{G+W} \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{x}{G}\right)^2 - 1}} dx = \frac{4\epsilon_r \epsilon_0 V_0 L}{\pi} \ln \left[\left(1 + W/G\right) + \sqrt{\left(1 + W/G\right)^2 - 1} \right] \quad (22)$$

Resultando que la capacitancia total de un sistema de placas paralelas transformado a placas coplanares, se obtiene resolviendo las ecuaciones (12) y (13) resultando [39] en la ecuación(23)

$$C = \frac{Q}{2V_0} = \frac{2\epsilon_r \epsilon_0 L}{\pi} \ln \left[\left(1 + W/G\right) + \sqrt{\left(1 + W/G\right)^2 - 1} \right] \quad (23)$$

En el diseño de electrodos interdigitados, al tener N pares de dígitos, es decir, el número de peines de la barra detectora es igual al número de peines de la barra excitadora, la ecuación (23) se modifica a:

$$C_T = \frac{2\epsilon_r \epsilon_0 (N-1)L}{\pi} \ln \left[\left(1 + W/G\right) + \sqrt{\left(1 + W/G\right)^2 - 1} \right] \quad (24)$$

Esta ecuación nos ayuda a determinar la profundidad de penetración del campo eléctrico H_f al interactuar sobre el material bajo prueba. Cuando las líneas de campo eléctrico no cubren por completo el material, es decir $T > H_f$ y el máximo desplazamiento del campo es en el eje vertical $x = 0$, se calcula mediante

$$H_f = G \sinh \left[\cosh^{-1} \left(1 + \frac{W}{G} \right) \right] = G \sqrt{1 + \left(\frac{W}{G} \right)^2 - 1} \quad (25)$$

En caso contrario, cuando la altura de la muestra es menor que la altura del campo eléctrico, la capacitancia es determinada por las líneas del campo generadas solo por una parte del peine efectiva, identificado como W_{efec} , modificando la ecuación (25), para obtener una relación que solo es aplicable cuando la permitividad del material bajo prueba es mucho mayor que la permitividad del aire [39].

$$\frac{W_{efec}}{G} = \cosh \left[\sinh^{-1} \left(\frac{H_f}{G} \right) \right] - 1 = \sqrt{1 + \left(\frac{H_f}{G} \right)^2} - 1 \quad (26)$$

Al analizar esta relación, entre menor sea G , la relación de (26) aumentará, y al sustituir en la ecuación (25) aumenta el campo eléctrico efectivo, por lo que se demuestra que el espacio entre los peines debe ser el mínimo posible por las técnicas de fabricación. Por otro lado, el ancho de los peines debe ser similar a la altura del material, para aumentar interacción de la magnitud del campo eléctrico efectivo con la muestra bajo prueba. Para este caso, la capacitancia es dada por la ecuación (27)

$$C = \frac{\epsilon_r \epsilon_0 L (N-1)}{\pi} \ln \left[\sqrt{1 + \left(\frac{H_f}{G} \right)^2} + \frac{H_f}{G} \right] \quad (27)$$

3.4 Campo eléctrico y mecanismos de interacción

3.4.1 Efecto pelicular.

Este fenómeno es más predominante en sistemas de alta frecuencia, su efecto se presenta cuando las ondas electromagnéticas se propagan y la corriente eléctrica fluye por la superficie del material conductor, reduciendo la penetración de la sección transversal efectiva. La distancia en la cual penetra la energía de microonda sobre el conductor, se llama profundidad δ_E [40]. Esta profundidad es dependiente del material conductor empleado y de la frecuencia de operación. La profundidad se calcula con la ecuación (28).

$$\delta_E = \sqrt{\frac{\rho}{\omega \mu_r \mu_o}} \quad (28)$$

Donde ρ es la resistividad del material, $\omega = 2\pi f$ es la frecuencia angular, μ_r es la permeabilidad relativa del material, μ_o es la permeabilidad del vacío con valor de $4\pi \cdot 10^{-7}$ y f es la frecuencia de propagación de la onda.

3.4.2 Polarización.

Cuando las líneas de un campo eléctrico, interactúan con un sistema de cargas libres o ligadas (ejemplo dipolos), tenderán a alinearse en la dirección del campo. Esto es, para el caso de cargas libres, las cargas positivas se alinean en dirección del campo eléctrico y las cargas negativas en la dirección opuesta. Para el caso de las cargas ligadas, el campo eléctrico induce una rotación tal que el dipolo se alinea en paralelo al campo. La orientación de las cargas en la dirección del campo eléctrico aplicado, origina que el material dieléctrico presente un momento dipolar macroscópico $\langle M \rangle$ distinto de cero, es cuando se dice que el material está polarizado [41]. Al tomar en cuenta el volumen total V del material se puede representar la polarización P dada la ecuación (29).

$$P = \frac{\langle M \rangle}{V} \quad (29)$$

La polarización involucra la orientación de partículas cargadas, estos desplazamientos de cargas incluyen el tipo de almacenamiento de energía y existen de tres tipos: desplazamiento de cargas, orientación de cargas y transportación de cargas. Cuando el campo eléctrico es de alta frecuencia, las cargas ligadas o dipolos tienen poco tiempo para alinearse en la dirección con el campo variante en el tiempo, por lo que se genera un desfase entre ambos, provocando choques internos entre sí, lo que genera el aumento de temperatura dentro del material.

3.5 Materiales en las microondas.

La selección del material del sustrato utilizado en dispositivos de microondas, es una parte integral en el diseño de sistemas de alta frecuencia, afectando

considerablemente el comportamiento de la interacción de las ondas electromagnéticas con el medio de prueba. Las propiedades dieléctricas del material son caracterizadas por el concepto macroscópico de la permitividad relativa, permeabilidad y conductividad. Para su aplicación, deben tomar a consideración las propiedades de la constante dieléctrica, factor de disipación, espesor dieléctrico, anisotropía, el coeficiente de expansión térmica entre otras más [40]. Algunas propiedades afectan más en la interacción con el campo eléctrico que otras, tal es el caso del factor de disipación δ_r , el cual se refiere a las pérdidas que se generan en el material al interactuar con la energía de las microondas. Mientras más bajo es el factor de disipación, más bajas son las pérdidas de energía y mayor es la conducción del material, teniendo así un mejor sustrato para dispositivos en microondas. Este factor es una pérdida de energía y está en función de la frecuencia de las ondas, es decir, al aumentar la frecuencia aumenta el factor de disipación, pero no linealmente.

Por otro lado, la constante dieléctrica o permitividad dieléctrica ε_r también es dependiente de la frecuencia del campo eléctrico aplicado. Cuando el campo eléctrico es variante en el tiempo $E(t)$, si sus cambios son lentos a comparación con el movimiento de las partículas microscópicas, hay tiempo suficiente para que la polarización aumente, entonces para casos cuasi-estáticos, con dieléctricos lineales e isotrópicos, se tiene [41]:

$$P(t) = \varepsilon_0 \chi E(t) \quad (30)$$

$$D(t) = \varepsilon_0 \varepsilon_r \chi E(t) \quad (31)$$

$$\varepsilon_r = 1 + \chi \quad (32)$$

Donde χ es la susceptibilidad, ε_r es la permitividad dieléctrica del material, $P(t)$ es la polarización variante en el tiempo, $D(t)$ es el desplazamiento eléctrico del campo y ε_0 es la permitividad dieléctrica del vacío.

3.6 Fabricación de sistemas de microondas.

El uso de materiales dieléctricos en la fabricación de los sensores de microondas se limitaba a tecnologías comunes de silicio o placas de circuitos impresos (PCB por sus siglas en inglés). Uno de los mayores desafíos en la fabricación, es lograr una alta selectividad y sensibilidad, por lo cual se han desarrollado técnicas avanzadas de fabricación, como el depósito de capas finas por evaporación catódica y litografía de escritura directa por láser entre otros más.

3.6.1 Fotolitografía de escritura directa por láser.

Una técnica escalable y altamente eficiente es la escritura directa de láser, la cual es una herramienta versátil para la fabricación de dispositivos sobre un sustrato a pequeña escala y a nivel laboratorio, con resolución del orden de micras y con gran área de trabajo [42].

3.6.1.1 Preparación del sustrato para la aplicación de la resina fotosensible.

Los problemas de adherencia de la fotoresina sobre el sustrato usualmente se deben a que existe contaminación sobre el material. Esta contaminación también genera las llamadas estelas de cohete, que son patrones no deseados que se producen depositar la fotoresina. Es por esto, que el proceso de limpieza del sustrato es un paso importante en la fabricación, para esto, es recomendable sumergir el sustrato durante pocos minutos en solventes que no lo dañen. El tiempo de sumersión o el tipo de solvente, varían según el sustrato seleccionado, mientras algunos requieran solventes como los alcoholes, metanol, etanol, otros requieren ácidos o incluso solo agua desionizada [43].

3.6.1.2 Aplicación del recubrimiento fotosensible.

La capa fotosensible aplicada sobre el sustrato para ser expuesta al haz del láser del equipo de litografía, usualmente es una solución sensible a una longitud de onda específica. Esta solución es depositada por distintas técnicas, una de ellas es a través del centrifugado, con la cual se logran obtener capas uniformes y delgadas sobre el sustrato, del orden de micras.

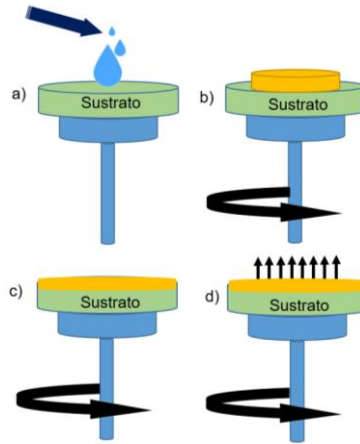


Figura 9.- a) Depósito de la solución fotosensible, b) inicio de giro con aceleración y velocidad constante, c) fin de giro, d) evaporación de solventes.

Esta técnica se basa inicialmente en colocar el sustrato en el equipo de centrifugado, posteriormente se deposita una pequeña cantidad de la solución fotosensible en el centro del material, usualmente mililitros, para luego hacerlo girar a altas velocidades durante un tiempo hasta lograr dispersar toda la solución. La figura 9, muestra el proceso donde en el paso final se observa la evaporación de los solventes residuales de la capa fotosensible [44]. La velocidad angular y el tiempo de centrifugado, determinan el espesor final, donde entre mayor sea la velocidad de rotación o el tiempo de centrifugado, menor será el espesor de la capa fotosensible y viceversa, por lo que estos parámetros se ajustan según las necesidades requeridas.

3.6.1.3 Proceso de litografía de escritura directa por láser:

- 1.- Diseño del patrón personalizado. - El patrón es diseñado en un software especializado, donde se genera un archivo digital modificable, el cual se descarga en el equipo para su exposición.
- 2.- Operación del haz del láser.- El principio de este equipo, se basa en hacer incidir un láser a través de un arreglo de lentes o un fotomodulador controlados por una computadora, para proyectar el patrón de exposición directamente sobre el sustrato que está recubierto en su superficie por una fotoresina [45] como se

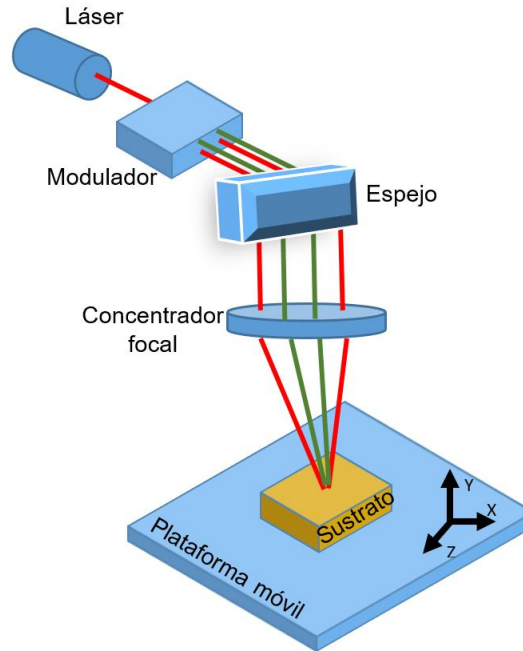


Figura 10.- Equipo de litografía de escritura directa por láser.

muestra en la figura 10. La amplitud de la intensidad del láser es modulada según los requerimientos del patrón o la fotoresina empleada.

3.- Reacción fotoquímica. - Las áreas expuestas del material fotosensible, presentan reacciones fotoquímicas debido a la absorción de la luz.

4.- Revelado del patrón. - Una vez que el láser termina de incidir el patrón, el sustrato se somete a una reacción química denominada revelador, la cual elimina las zonas no expuestas, dejando las estructuras deseadas.

5.- Post-procesamiento. - En ocasiones se requiere de refinamiento o modificación de las estructuras creadas, por lo que se reinicia el ciclo de este proceso.

3.7 Técnicas de caracterización

3.7.1 Microscopia electrónica de barrido.

La técnica de caracterización estructural por microscopio electrónico de barrido (SEM por sus siglas en ingles), es empleada cuando se requiere la visualización de aspectos de tamaño inferior al rango de longitud de la onda que abarca la luz visible. El principio se basa en acelerar un haz de electrones a través un campo eléctrico, para posteriormente enfocarlos mediante un arreglo de lentes electromagnéticas los cuales

están focalizados sobre la muestra. Este haz de electrones de alta energía, escanea finamente la superficie de una muestra en alto vacío, detectando la información a través de señales derivadas de la interacción que se genera entre el electrón y la muestra [46], ver figura 11.

Los modos de operación de este microscopio, se basan en las formas de interacción que tienen los electrones con la muestra, por mencionar algunos están los Auger, rayos X, catodoluminiscencia, fotones, electrones secundarios y electrones dispersados, siendo estos dos últimos los comúnmente empleados. El modo de electrones secundarios, es utilizado para obtener la morfología y topografía de las muestras, debido a que son electrones de baja energía y son el resultado de la interacción por parte de los átomos cercanos a la superficie.

Por otro lado, al utilizar los electrones dispersados las reflexiones de los electrones tienen una energía hasta máximo de 20 keV, este modo es empleado cuando se requiere mostrar los contrastes en la composición de las muestras, debido a que la interacción del haz con el material, entre mayor sea el número atómico mayor será la intensidad del haz reflejado, por lo que las zonas se verán más iluminadas, por el contrario, las zonas más oscuras representan átomos con menor número atómico.

Una técnica derivada del principio de microscopia electrónica de barrido, es la llamada espectroscopia de energía dispersa o EDS por sus siglas en ingles. Esta técnica permite identificar la composición de los elementos que se encuentran en la muestra bajo prueba.

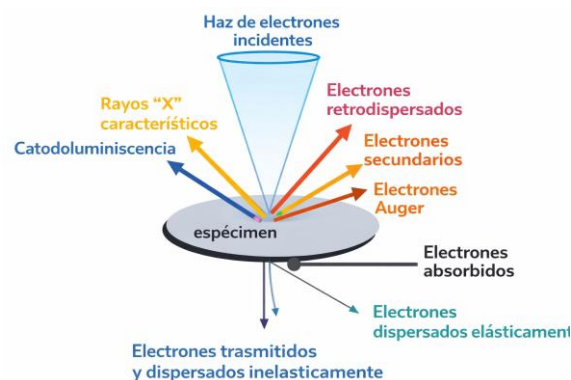


Figura 11.- Principio de la microscopia electrónica de barrido [46].

El principio de operación se basa en hacer incidir el haz de electrones acelerados sobre la superficie de la muestra, expulsando un electrón del núcleo, liberando la diferencia de energía como una fluorescencia de rayos X, donde la energía de cada fotón es propia de cada elemento. Un receptor mapea esta información y la clasifica por energía, generando un espectro característico por cada elemento, donde la ubicación de los picos representa un elemento y la magnitud de la señal representa la concentración.

3.7.2 Caracterización electromagnética

Los equipos comúnmente utilizados para desempeñar las mediciones de los parámetros electromagnéticos, son los analizadores de redes vectoriales o VNA por sus siglas en inglés. El término vector nos indica que el equipo tiene la habilidad de medir en términos de magnitud y fase. Estos equipos emplean internamente un generador de microondas que es ajustable en un amplio rango de frecuencia, los cuales, al enviar una onda electromagnética por un puerto, la onda interactúa con el medio bajo prueba. Una parte de esa onda se refleja para ser medida por el mismo puerto adquiriendo la magnitud y fase de la onda de reflexión. La fracción de la onda que atraviesa el material es enviada a otro puerto del equipo, obteniendo la lectura del valor de la onda transmitida. Estas magnitudes de onda reflejada y transmitida son expresadas en términos de los parámetros de dispersión S [47] cuyas unidades de medición son los decibeles dB. Esta unidad llamada decibel, es un término importante en las microondas, debido a que representa la relación entre las ondas de transmisión y reflexión, dando información sobre su crecimiento o disminución, donde si este valor es positivo es una ganancia, en cambio si el valor es negativo es una pérdida de la magnitud [40].

3.7.2.1 Parámetros de dispersión S.

Cuando se está trabajando en el rango de frecuencias de las microondas, existe un problema práctico al medir las corrientes y voltajes, debido a que las mediciones directas involucran la magnitud y fase de una onda que viaje en una dirección determinada en tiempos muy cortos. En el rango de microondas, es más conveniente medir los campos electromagnéticos en términos de parámetros de dispersión S en

lugar de expresar en términos de los tradicionales voltajes, corrientes, inductancias o capacitancias [48]. Una representación aceptable a esta situación, es mediante la matriz de dispersión. Esta matriz muestra una descripción completa de la red vista desde N puertos, relacionando las ondas incidentes con las reflejadas en los puertos. La matriz de dispersión o matriz [S], es definida como una relación entre la onda incidente y la onda reflejada de la siguiente manera [47], donde V_i^+ representa el potencial eléctrico de la onda incidente y V_j^- es el potencial eléctrico de la onda reflejada para N puertos.

$$\begin{bmatrix} V_1^- \\ V_2^- \\ \vdots \\ V_N^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots & S_{1N} \\ S_{21} & \cdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \cdots & \cdots & \vdots \\ S_{N1} & \cdots & \cdots & S_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_1^+ \\ V_2^+ \\ \vdots \\ V_N^+ \end{bmatrix} \rightarrow [V^-] = [S][V^+] \quad (33)$$

Para obtener un parámetro determinado, al resolver la ecuación(33), se tiene como resultado:

$$S_{ij} = \left. \frac{V_i^-}{V_j^+} \right|_{V_k^+ = 0 \text{ para } k \neq j} \quad (34)$$

Mediante la ecuación (35) , a partir de la matriz de dispersión se obtiene la matriz de impedancia $[Z]$ o admitancias y viceversa, donde $[U]$ es la matriz unitaria.

$$[S] = ([Z] + [U])^{-1}([Z] - [U]) \quad (35)$$

Al requerir el parámetro de reflexión de onda a través del puerto 1, la ecuación anterior se reduce a:

$$S_{11} = \frac{Z_{11} - 1}{Z_{11} + 1} \quad (36)$$

La relación del parámetro de reflexión S_{11} con el coeficiente de reflexión de la ecuación (17), viene dada por:

$$S_{ij} = \frac{1 + |\Gamma|}{1 - |\Gamma|} \quad (37)$$

$$|\Gamma| = \frac{S_{ij} - 1}{S_{ij} + 1} \quad (38)$$

3.7.2.2 Medición de la permitividad eléctrica del sustrato

La medición de la permitividad dieléctrica de los materiales en microondas es de sumo valor. Existen diversas técnicas para su caracterización dependiendo de la aplicación. Cuando se opera en bajas frecuencias se encuentra el método comúnmente utilizado de placas paralelas. Por otro lado, si se está trabajando en altas frecuencias, existen los métodos de guías de onda, cavidad resonante, cable coaxial, onda de espacio libre, entre otros más.

El método con guía de onda es uno de los más comunes por su alta eficiencia y bajo costo a comparación de los otros métodos. Una de las ventajas de este método, es que el campo eléctrico se propaga perpendicular a la dirección de la onda incidente, interactuando con el material bajo prueba.

La medición consiste en colocar la muestra bajo prueba dentro de una guía de onda como se observa en la figura 12. Posteriormente el VNA envía una onda a través de la guía y mide los parámetros de reflexión S_{11} y transmisión S_{21} , por lo que se requiere de un analizador de redes vectorial con dos puertos.

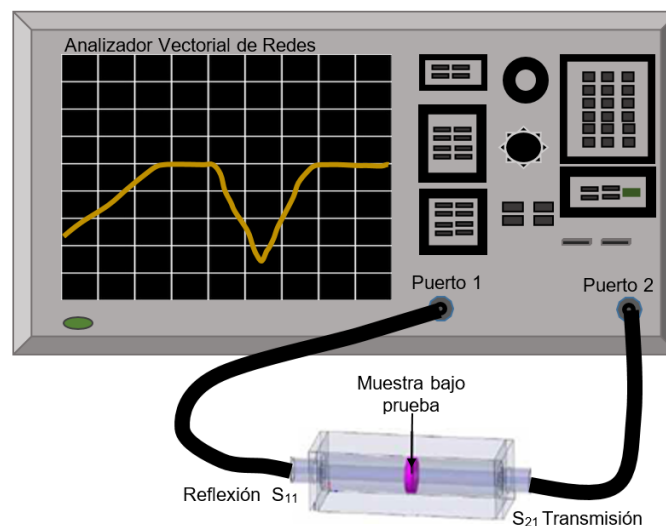


Figura 12.- Conexión de un VNA con guía de onda.

Existen diversas técnicas para la obtención de una aproximación de la permitividad eléctrica del sustrato a partir de los parámetros S_{11} y S_{21} . El método de Nicholson-Ross-Weir (NRW) [49], permite obtener directamente la permitividad y permeabilidad, con restricción de que sean muestras pequeñas con una relación máxima del espesor de $\lambda/4$, donde λ es la longitud de onda de la frecuencia.

El valor de la permitividad se obtiene primero obteniendo el factor de corrección X en términos del parámetro S . Este factor nos ayuda a calcular el coeficiente de reflexión Γ como se observa en la ecuación (40).

$$X = \frac{S_{11}^2 - S_{21}^2 + 1}{2S_{11}} \quad (39)$$

$$\Gamma = X \pm \sqrt{X^2 - 1} \quad (40)$$

El coeficiente de transmisión T , es dado por

$$T = \frac{S_{11} + S_{21} - \Gamma}{1 - (S_{11} + S_{21})\Gamma} \quad (41)$$

Cuando el valor de la onda cae por debajo del 50% o -3 dB, se le llama frecuencia de corte F_c , de donde se obtiene la longitud de onda de corte λ_c por la ecuación (42), donde c es la velocidad de la propagación de la onda. Al tomar en cuenta la longitud de la muestra L , permite obtener el coeficiente de relación de ondas Λ con la ecuación (43).

$$\lambda_c = \frac{c}{F_c} \quad (42)$$

La permeabilidad μ_r se obtiene en la ecuación (44)

$$\frac{1}{\Lambda^2} = -\left(\frac{2}{2\pi L} \ln\left(\frac{1}{T}\right)\right)^2 \quad (43)$$

$$\mu_r = \frac{1 + \Gamma_1}{\Lambda(1 - \Gamma) \sqrt{\frac{1}{\lambda^2} - \frac{1}{\lambda_c^2}}} \quad (44)$$

Finalmente se obtiene la permitividad por la ecuación (45)

$$\varepsilon_r = \frac{\lambda^2}{\mu_r} \left(\frac{1}{\lambda_c^2} - \left[\frac{1}{2\pi L} \ln \left(\frac{1}{T} \right) \right]^2 \right) \quad (45)$$

3.8 Aprendizaje de maquina

El procesamiento de los datos para reconocimiento de patrones por métodos tradicionales resulta insuficiente, ya que implica un alto consumo de recursos, tiempo y tienen perdida de información, por lo que es necesario recurrir a técnicas modernas como el aprendizaje de máquina. En la última década, el aprendizaje de máquina ha revolucionado diversos campos tecnológicos, abarcando desde el procesamiento de datos, la electrónica avanzada, la robótica y el reconocimiento de patrones. Esto se debe al desarrollo de modelos con la capacidad de predecir resultados a partir de nuevos datos [50]

El aprendizaje de máquina es un subconjunto de la inteligencia artificial que se enfoca en enseñar a las computadoras a tomar decisiones basadas en datos de entrada sin una programación explícita [51]. Esto se logra mediante algoritmos matemáticos que descubren relaciones y patrones en los datos. Hay varios métodos de análisis del aprendizaje de máquina, incluyendo el lenguaje supervisado, el lenguaje no supervisado y el lenguaje de refuerzo.

El lenguaje supervisado se utiliza para predecir salidas conocidas a partir de datos de entrada. Incluye la clasificación y la regresión, que emplean algoritmos matemáticos como KNN, clasificador Naive Bayes, decisiones de árboles, redes neuronales entre otros más.

El lenguaje no supervisado se aplica cuando no se conocen las salidas posibles, se enfoca en procesar los datos de entrada y obtener información de ellos. Incluye la transformación de conjuntos de datos y la agrupación de datos para simplificar la interpretación humana.

3.8.1 Algoritmo KNN.

El modelo de “K- vecino más cercano” (KNN por sus siglas en ingles), es uno de los algoritmos más empleados para para la clasificación de clases. En el algoritmo

KNN cada objeto se representa en un espacio de características multidimensionales, donde cada característica corresponde a una dimensión en ese espacio. Al tener un patrón de datos para clasificarse, este algoritmo calcula la distancia entre ese objeto y los objetos en el espacio multidimensional. El parámetro K, representa el número de vecinos más cercanos que se analizan para tomar la decisión del clasificador. La etiqueta o valor del nuevo patrón se obtiene de acuerdo a la mayoría de las etiquetas de los vecinos más cercanos. No solo se puede considerar el valor más cercano al punto de prueba, K=1, incluso se pueden seleccionar K valores. Cuando se consideran más vecinos cercanos, se usa la votación para seleccionar la etiqueta, esto es, que, para cada punto de prueba, se cuentan los K vecinos que pertenezcan a esa clase. Con esto se asigna la clase que es más frecuente entre los K vecinos cercanos [51], ver figura 13.

La distancia entre el punto de interés y los puntos de las clases para datos no correlacionados se determina mediante Mahalanobis:

$$dist(x, y) = \sqrt{\sum_{i=1}^n \frac{(x_i - y_i)^2}{\sigma_i^2}} \quad (46)$$

Para el escenario donde los datos sean correlacionados, la distancia de Mahalanobis se determina:

$$dist(x, y) = \sqrt{(x - y)\Sigma^{-1}(x - y)} \quad (47)$$

Donde, los valores de x, y son los puntos dentro de la clase, σ es la desviación estándar y Σ es la matriz de covarianza.

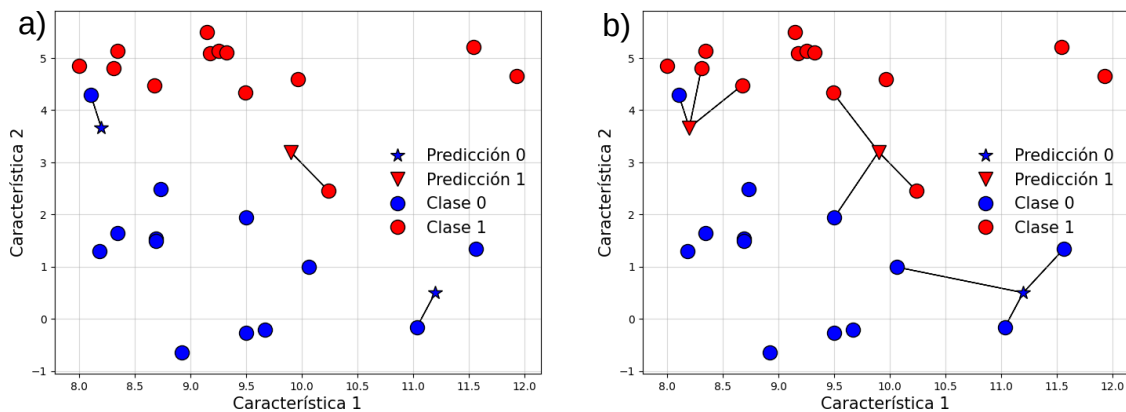


Figura 13.-Modelo KNN con a) K=1 y b) K=3.

3.8.2 Algoritmo Naive Bayes.

Por otro lado, el clasificador o técnica Naive Bayes es una metodología estadística estándar usada para resolver problemas de clasificación que se basa en el teorema de Bayes, el cual calcula la probabilidad de que un evento ocurra dado que otro evento ha ocurrido (ver figura 14), es decir, determina la probabilidad de que un patrón pertenezca a una clase tomando en cuenta el conjunto de patrones observados o sus características, para asignarle la clase con la probabilidad más alta [52], esto es dado por:

$$P(A|B) = \frac{P(B|A)P(A)}{P(B)} \quad (48)$$

Donde:

$P(A|B)$ es la probabilidad del evento A dado el evento B.

$P(B|A)$ es la probabilidad del evento B dado el evento A.

$P(A)$ es la probabilidad del evento A.

$P(B)$ es la probabilidad del evento B.

El clasificador Naive Bayes asume que la presencia de una característica en una clase no influye la presencia de otra característica, por lo que es un buen clasificador de clases en un conjunto de datos tipo multiclase, pero no es eficaz en manejando las características entre sí [53].

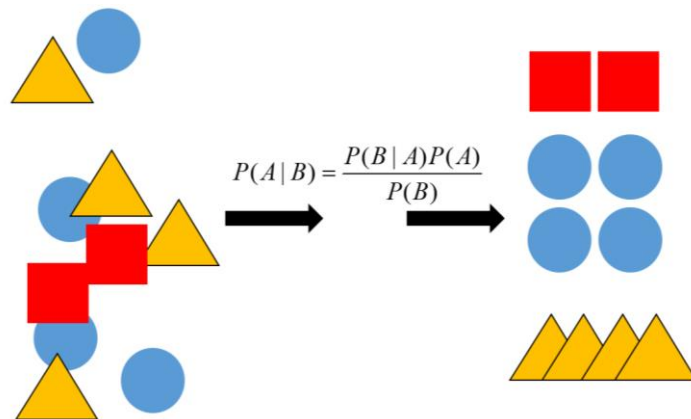


Figura 14.- Clasificador de clases Naive Bayes.

3.8.3 Máquina de vectores de soporte (SVM).

Este modelo proyecta los datos en un espacio dimensional más grande, creando nuevas dimensiones a partir de características similares de las clases, posteriormente aplica un separador lineal optimizado entre las clases. Para esto se utilizan técnicas de clasificación lineal basadas en la separación máxima entre clases para generar clasificadores que separan las clases en los datos, esto es, con suficientes dimensiones adicionales se pueden separar las todas las clases [54]. Esto es, existen modelos donde los datos no son linealmente separables, por lo que SVM se presenta como una solución poderosa permitiendo analizar zonas de decisión clara en casos con datos complejos.

Unas de las principales características de SVM es su notable capacidad de utilizar menor cantidad de muestras para lograr una precisión superior a otros algoritmos de clasificadores.

La figura 15 muestra un conjunto de datos con dos clases separadas por sus respectivos vectores de soporte, con un total de n puntos de entrenamiento que van de $i=1, 2, 3, \dots, n$. La asignación de las clases $[y_i]$ está formada por un vector definido por las características propias de cada clase $[x_i]$, y todos esos vectores juntos forman el conjunto de entrenamiento con el que SVM se entrena. Para determinar la frontera entre las dos clases, se emplea el algoritmo óptimo (ver tabla 2), de esta forma el algoritmo de SVM no ve clases, sino vectores y con ellos calcula la mejor forma para separarlos por grupos [55].

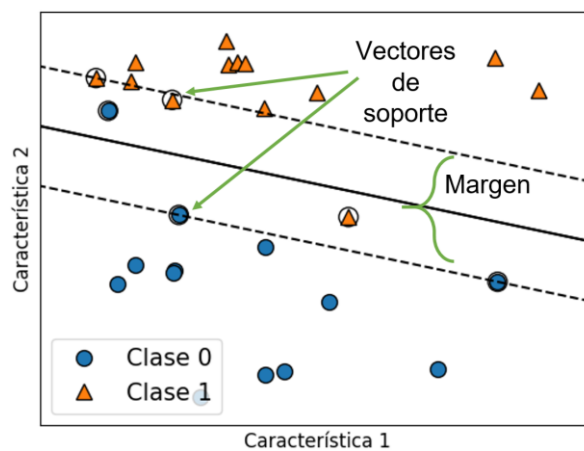


Figura 15.- Máquina de vectores de soporte (SVM).

Tabla 2.- Tipos de algoritmo SVM clasificatorios.

Tipo de SVM	Algoritmo	Características
SVM Lineal	Programación cuadrática (QP)	Maximiza el margen entre clases. Preciso, pero costoso en conjunto de datos grandes.
	Optimización mínima secuencial (SMO)	Divide el problema grande en problemas más pequeños y fáciles de resolver. Eficiente.
SVM No lineal (kernels)	Kernel lineal	Similar a la SVM lineal, pero usando el truco del kernel.
	Kernel polinomial	Fronteras curvas basadas en polinomios.
	Kernel RBF (gaussiano)	Frontera flexible que se adapta a formas complejas.
	Kernel sigmoide	Similar a una red neuronal de activación sigmoideal.

3.8.4 Árbol de decisiones.

Este modelo, es empleado en técnicas de clasificación y de regresión. Las reglas de clasificación de este algoritmo, permiten separar N clases mediante una serie de nodos definidos por reglas de comparación, donde una regla es generada para cada condición (también llamada hoja), para esto, se basa en la representación de una estructura jerárquica mediante un proceso de toma de decisiones con la lógica de “si entonces”.

El árbol se crea por medio de nodos conectados por ramas, y cada parte del árbol tiene una interpretación matemática para el usuario. La raíz o nodo raíz, tiene el 100% del conjunto de datos de entrenamiento, y se selecciona la variable y el umbral que mejor separa las clases minimizando el error de predicción.

Los nodos, son los puntos medios dentro del árbol donde se ejecutan las comparaciones u operaciones lógicas tomando en cuenta los valores de cada característica y se ejecutan las condiciones de acuerdo al umbral establecido. El nodo

se divide en una o más caminos llamados ramas, y éstas describen la secuencia de decisiones que se toman en el modelo. Cada rama del árbol, describe un subconjunto de datos en el espacio y su dirección depende del resultado de la decisión (verdadero o falso) evaluada en el nodo anterior.

Finalmente las hojas son los nodos finales del árbol y cada una contiene una predicción de la etiqueta de las clases analizadas (clasificación) o un valor promedio (regresión)[56]. La figura 16 muestra un ejemplo sencillo de la ramificación de árbol de decisiones.

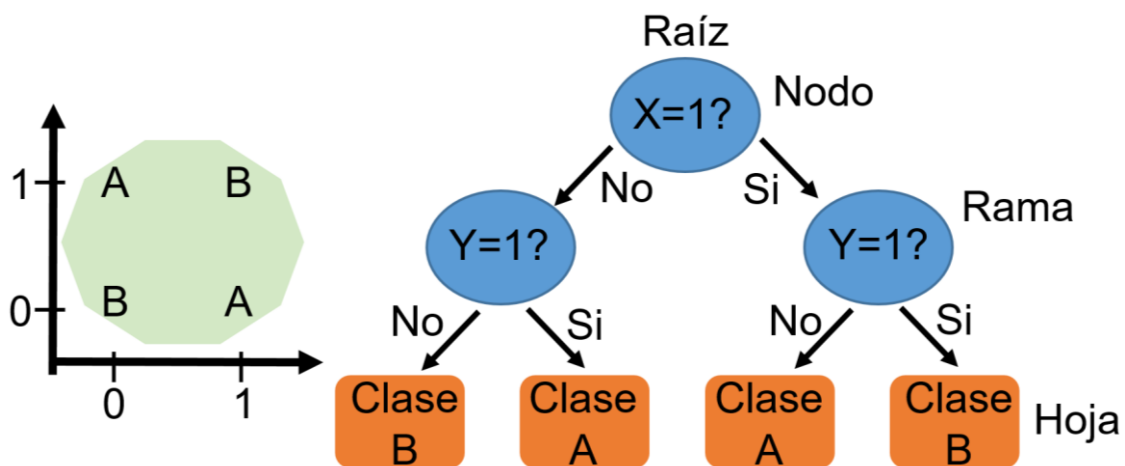


Figura 16.- Ejemplo de árbol de decisiones.

3.8.5 Evaluación de algoritmos de aprendizaje de máquina.

Una de las técnicas de evaluación de modelos de aprendizaje de máquina, es la matriz de confusión, la cual se basa en la clasificación de los blancos acertados y no acertados, donde los cuatro resultados posibles pueden formularse con una matriz de confusión de 2x2 como se muestra en la figura 17.

		Predicción	
		Positivo (PP)	Negativo (PN)
Estado actual	Población total =P + N		
	Positivo P	Verdadero positivo (VP)	Falso negativo (FN)
	Negativo N	Falso positivo (FP)	Verdadero negativo (VN)

Figura 17.- Matriz de confusión.

Este tipo de análisis permite calcular la sensibilidad (o *recall*) del modelo seleccionado, la cual se refiere a la capacidad de predecir los casos positivos y es calculada como una proporción entre la predicción de los verdaderos positivos (VP) y el conjunto de todas las predicciones positivas.

$$\text{Sensibilidad} = \frac{VP}{VP + FN} \quad (49)$$

La especificidad es la capacidad del modelo seleccionado para predecir los casos negativos, esto es, es una razón entre las predicciones verdaderamente negativas y el conjunto de todas las predicciones negativas.

$$\text{Especificidad} = \frac{VN}{VN + FP} \quad (50)$$

La precisión es la medida para evaluar los casos relevantes entre los casos recuperados. Se calcula como una razón entre las predicciones verdaderamente positivas y el conjunto de los valores positivos reales.

$$\text{Precisión} = \frac{VP}{VP + FP} \quad (51)$$

La exactitud es la proporción de las predicciones correctas y determina que tan bien un clasificador predice una condición.

$$Acc = \frac{VP + VN}{VP + VN + FP + FN} \quad (52)$$

El F1-Score, es una métrica que toma en cuenta la precisión y la sensibilidad en la misma manera. Esta métrica se utiliza especialmente donde hay un desbalance entre las métricas, con el fin de combinar en un solo valor dos métricas fundamentales, la precisión y la sensibilidad. El resultado va de 0 a 1, donde entre más cerca este del cero refleja un desempeño deficiente, por el contrario, un valor más cercano a 1 indica una alta sensibilidad y precisión [57].

$$F1Score = \frac{2 * (Precisión * Sensibilidad)}{Precisión + Sensibilidad} \quad (53)$$

Otro criterio de evaluación utilizado para evaluar los modelos de aprendizaje de máquina, es el error cuadrático medio (MSE), el cual denota la diferencia entre el valor actual y el valor esperado. Por otro lado, el RMSE solo se refiere a la raíz cuadrada de MSE y entre más cerca a cero significa un mejor ajuste del modelo [55].

$$MSE = \frac{1}{n} = \sum_{i=1}^n (\text{Valor Actual} - \text{Valor predicho})^2 \quad (54)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\text{Valor Actual} - \text{Valor predicho})^2}{n}} \quad (55)$$

4. Metodología

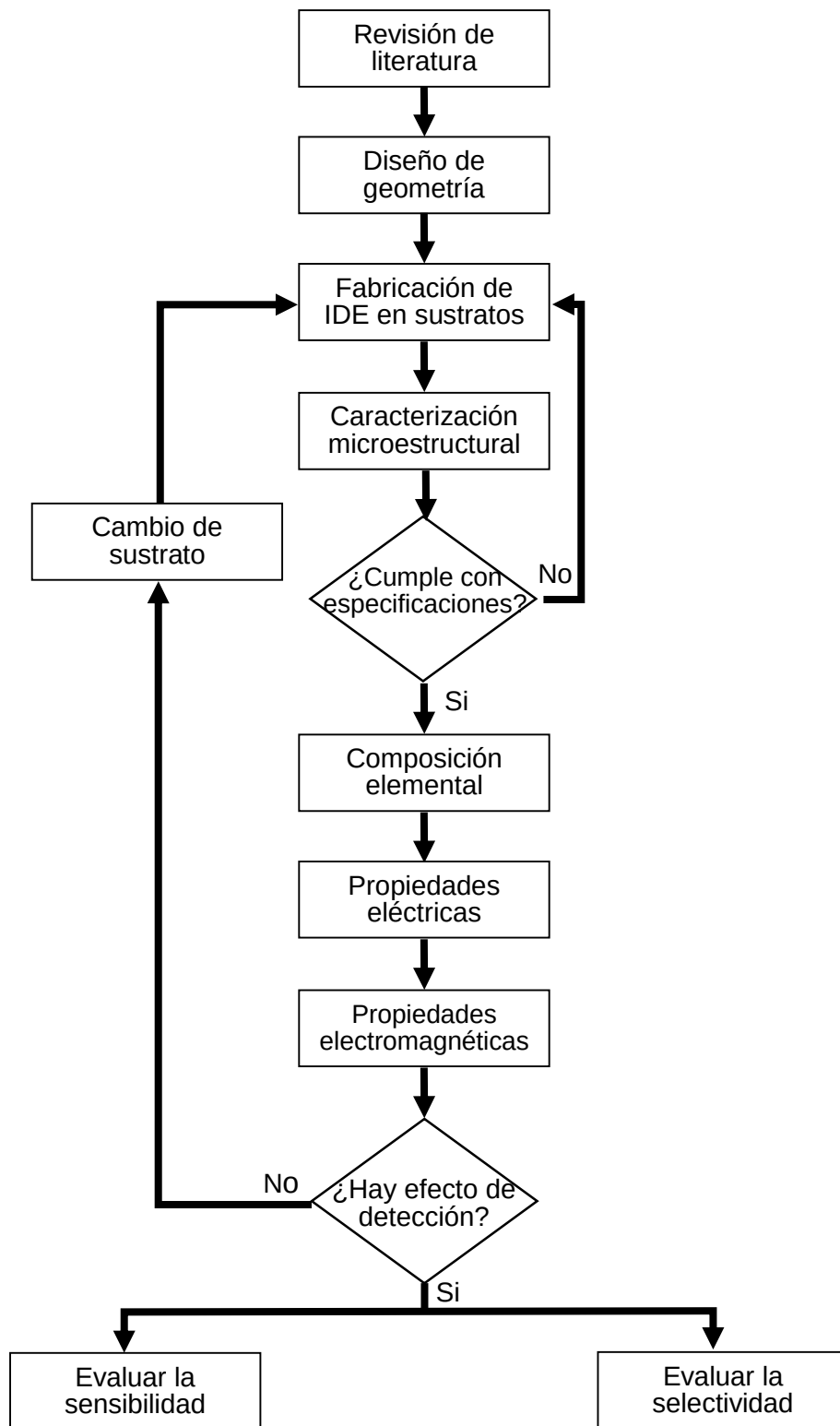


Figura 18.-Diagrama de flujo de metodología.

La figura 18 muestra el diagrama de flujo de la metodología que se desarrolló en este trabajo, más adelante en esta sección se describe a detalle cada paso. El proceso comienza con una revisión de la bibliografía. A partir de esta revisión se procedió al diseño de la geometría de los electrodos interdigitados y la selección de los sustratos que se utilizaron en la fabricación por fotolitografía de escritura directa por láser. Se desarrolló una simulación de los campos eléctricos de cada sensor interdigitado fabricado en el sustrato de poliimida y PTFE.

Una vez fabricado los electrodos interdigitados, se evaluó su geometría mediante microscopia electrónica de barrido, contrastando con el diseño original. Se fabricaron varios sensores hasta eliminar las líneas de conducción o peines en mal estado, es decir, discontinuos, con huecos o cortocircuitos, errores de diseño, con daño químico o cualquier otro tipo de desperfecto, esto con el fin de lograr obtener el diseño deseado sin imperfecciones.

Una vez adquirida la geometría deseada, se obtuvo la composición elemental de las líneas de conducción, las propiedades eléctricas y electromagnéticas, posteriormente se procedió a determinar el efecto del sustrato en los sensores de microondas interdigitados mediante la sensibilidad en la detección de analitos diluidos en agua desionizada.

Finalmente, el análisis a detalle de los datos obtenidos en la caracterización electromagnética, nos permitió evaluar si el efecto del sustrato en los sensores de microondas aumenta o disminuye la sensibilidad, durante la interacción del campo eléctrico con los analitos bajo prueba. La selectividad se evaluó con algoritmos de aprendizaje de máquina.

4.1 Fabricación de electrodos interdigitados en sustratos PTFE y poliimida.

El diseño de la geometría de los electrodos interdigitados que se fabricaron sobre los sustratos de PTFE y poliimida, fue con el programa de diseño asistido por computadora llamado CleWin en conjunto con Solid Works.

Se utilizaron sustratos de poliimida con permitividad eléctrica de 3.2, marca DuPont™, modelo Pyralux® AG. Por otro lado, la comparación del efecto se determinó con el sustrato de PTFE de la marca Rogers Corporation, modelo RT/duroid® 5880LZ con permitividad eléctrica de 2. Estos sustratos cuentan con una capa conductora de cobre que conforman las líneas de conducción.

Para la preparación de estos sustratos, primero se cortaron piezas de los materiales precursores. Estas piezas fueron rectángulos de 2.5 cm ancho por 4 cm de largo obtenidos con la cortadora de hilo marca South Bay Technology modelo 850. Para la limpieza de estos sustratos de forma rectangular, fueron sumergidos en alcohol isopropílico durante 10 min en el equipo de ultrasonido marca Branson modelo 2510.

Posteriormente, en el centro de cada pieza de sustrato se depositaron 4 ml de resina fotosensible positiva, marca Allresist modelo AR-P-3120, para ser colocadas dentro del equipo de centrifugado marca APT GmbH, modelo SPIN150i. En este equipo se hicieron girar los sustratos a una velocidad angular de 4500 rpm durante 120 s, para obtener una capa de resina fotosensible homogénea con espesor de 3 μm . Una vez recubiertos, se colocarán en una parrilla calentadora a 120 °C durante 60 s, para eliminar los solventes y promover el entrecruzamiento de la fotoresina, mejorando su adherencia al sustrato.

Para la exposición de los patrones de electrodos interdigitados sobre los sustratos recubiertos, estos se colocaron dentro del equipo de fotolitografía de escritura directa modelo MicroWriter ML3 de la compañía de Durham Magneto Optics Ltd. Este equipo proyectó el patrón de los electrodos interdigitados sobre el sustrato, barriendo la superficie con el haz del láser de diámetro de 2 μm y longitud de onda de 365 nm, aplicando una dosis de exposición de 60 mJ/cm² sobre la capa de la fotoresina.

El sustrato expuesto al láser se sumergió en el líquido revelador marca Allresist modelo AR-300-26 durante 40 s, dejando las zonas no deseadas expuestas y protegiendo solo el patrón de los electrodos interdigitados. Las zonas expuestas se removieron mediante una reacción química, sumergiendo el sustrato en un baño de cloruro férrico durante 20 min o hasta observar claramente que las líneas de los peines y contactos no presentan residuos. La fotoresina que cubre los electrodos interdigitados se removió sumergiendo el sustrato en acetona con ultrasonido durante 3 min.

A cada uno de los electrodos interdigitados fabricados, se les soldó en sus dos contactos metálicos un conector tipo SMA de 50 Ω para alta frecuencia, modelo 73251-1150 marca Molex para su caracterización electromagnética. Estos pasos se repitieron para cada uno de los sustratos y así se obtuvieron finalmente los sensores de microondas interdigitados.

Cada patrón interdigitado obtenidos sobre los sustratos, se caracterizó su microestructura con el microscopio electrónico de barrido marca JEOL, modelo JSM-7401F, por el modo de electrones secundarios. La composición elemental de los peines se determinó con el detector Ocatane Elect, de la marca EDAX. La estructura interna de los sensores se hizo mediante tomografía computarizada de rayos X, con el equipo tomógrafo marca Nikon modelo XT H 225.

4.2 Caracterización electromagnética.

La medición del parámetro de reflexión S_{11} se hizo con el analizador de redes vectorial (VNA) modelo ENA E5063A de la compañía Keysight, el cual cuenta con dos puertos de medición que operan en un rango de frecuencias de 100 kHz a 14 GHz. En la calibración del VNA se empleó el aditamento ECAL N7553A marca Keysight, en el cual se conectaron electrónicamente tres estándares de calibración: corto circuito, circuito abierto y carga de 50 Ω de impedancia, esto permitió eliminar los errores durante las mediciones que son generados por los cables de conexión, adaptadores, voltaje de alimentación y conectores.

Una vez calibrado el analizador de redes vectorial, se conectó un sensor interdigitado en cada puerto mediante un cable coaxial tipo SMA de 50 Ω , para posteriormente ser sumergido en las soluciones de glifosato, cloruro de potasio y cloruro de manganeso preparadas en agua desionizada.

La figura 19 muestra el montaje experimental donde se observa el sensor de microondas interdigitado conectado al VNA sumergido en un vaso precipitado con la solución en prueba. Estas soluciones fueron concentraciones molares al 1, 0.8, 0.6, 0.4, y 0.2 en un contenedor de 10 ml.

En la caracterización electromagnética, se configuró el VNA para obtener el parámetro de reflexión S_{11} . Una vez que el sustrato con el patrón de electrodos interdigitados fue sumergido en la solución, se adquirió una medición cada 60 s durante 50 min para cada uno de los 4 sensores y las 22 concentraciones de los analitos bajo prueba. Los valores obtenidos de las magnitudes y fases del parámetro S_{11} , nos ayudaron a determinar el efecto del sustrato en la detección de analitos disueltos en agua desionizada, esto permitió obtener la sensibilidad de cada sustrato. Los datos obtenidos se sometieron a algoritmos de aprendizaje de máquina para su evaluación. Se utilizarán los algoritmos de KNN y Naive Bayes, árbol de decisiones y máquina de vectores de soporte (VSM por sus siglas en ingles) para el procesamiento de los datos y determinar la selectividad del arreglo sustratos con patrones de electrodos interdigitados.

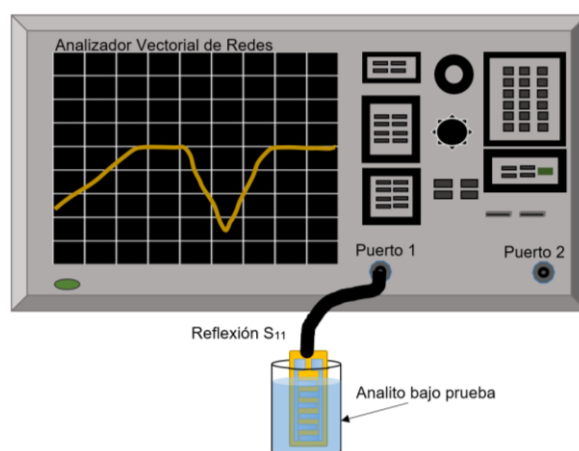


Figura 19.- Caracterización electromagnética.

4.2.1 Procedimiento para cambio de analito.

Para la caracterización electromagnética de cada uno de los 22 analitos, se estableció un procedimiento experimental para controlar dentro de lo posible las variables entre cada medición. Como primer paso se llenó el vaso de precipitado hasta la marca de los 10ml con el analito bajo prueba, asegurando un volumen uniforme en cada medición. A continuación, el sensor interdigitado fue sumergido dentro del analito hasta el último de los dígitos, para cubrir por completo la zona activa del sensor. Finalmente se obtenía el patrón electromagnético mediante la medición del parámetro de reflexión S_{11} con el VNA. Para generar el conjunto de medición de cada analito, se adquirieron 50 mediciones consecutivas con intervalo de 60 segundos entre medición y medición sin modificar las condiciones del sistema. Una vez obtenidas el conjunto de mediciones, el sensor era extraído del recipiente cuidadosamente, para enjuagarlo con agua destilada y eliminar residuos. Este procedimiento se repitió para cada sensor sumergido en cada analito de prueba.

4.3 Diseño de experimentos

Se utilizaron dos sustratos para la fabricación de los electrodos interdigitados, poliimida y PTFE, con 4 y 5 dígitos, dando un total de 4 sensores. Estos sensores se sometieron a la caracterización electromagnética de analitos de prueba, tales como: Cloruro de potasio (KCl), Cloruro de Manganeseo ($MnCl_2$), glifosato comercial (Gly), agua destilada (DT) y agua desionizada (DI). Cada uno de estos analitos tendrá 5 concentraciones de prueba y combinaciones entre ellas, obteniéndose la tabla 3.

Tabla 3.- Concentraciones para la caracterización de analitos.

Sustrato	Solución	Repeticiones	Frec	Sustrato	Solución	Repeticiones	Frec
PTFE	DI	50	0.3-2 GHz	Poliimida	DI	50	0.3-2 GHz
PTFE	DT	50	0.3-2 GHz	Poliimida	DT	50	0.3-2 GHz
PTFE	KCl, X=0.2	50	0.3-2 GHz	Poliimida	KCl, X=0.2	50	0.3-2 GHz
PTFE	KCl, X=0.4	50	0.3-2 GHz	Poliimida	KCl, X=0.4	50	0.3-2 GHz
PTFE	KCl, X=0.6	50	0.3-2 GHz	Poliimida	KCl, X=0.6	50	0.3-2 GHz
PTFE	KCl, X=0.8	50	0.3-2 GHz	Poliimida	KCl, X=0.8	50	0.3-2 GHz
PTFE	KCl, X=1.0	50	0.3-2 GHz	Poliimida	KCl, X=1.0	50	0.3-2 GHz
PTFE	MnCl ₂ , X=0.2	50	0.3-2 GHz	Poliimida	MnCl ₂ , X=0.2	50	0.3-2 GHz
PTFE	MnCl ₂ , X=0.4	50	0.3-2 GHz	Poliimida	MnCl ₂ , X=0.4	50	0.3-2 GHz
PTFE	MnCl ₂ , X=0.6	50	0.3-2 GHz	Poliimida	MnCl ₂ , X=0.6	50	0.3-2 GHz
PTFE	MnCl ₂ , X=0.8	50	0.3-2 GHz	Poliimida	MnCl ₂ , X=0.8	50	0.3-2 GHz
PTFE	MnCl ₂ , X=1.0	50	0.3-2 GHz	Poliimida	MnCl ₂ , X=1.0	50	0.3-2 GHz
PTFE	Gly, X=0.01	50	0.3-2 GHz	Poliimida	Gly, X=0.01	50	0.3-2 GHz
PTFE	Gly, X=0.1	50	0.3-2 GHz	Poliimida	Gly, X=0.1	50	0.3-2 GHz
PTFE	Gly, X=1.0	50	0.3-2 GHz	Poliimida	Gly, X=1.0	50	0.3-2 GHz
PTFE	Gly50-MnCl50	50	0.3-2 GHz	Poliimida	Gly50-MnCl50	50	0.3-2 GHz
PTFE	Gly50-KCl50	50	0.3-2 GHz	Poliimida	Gly50-KCl50	50	0.3-2 GHz
PTFE	Gly25-KCl75	50	0.3-2 GHz	Poliimida	Gly25-KCl75	50	0.3-2 GHz
PTFE	Gly75-KCl25	50	0.3-2 GHz	Poliimida	Gly75-KCl25	50	0.3-2 GHz
PTFE	Gly25-MnCl75	50	0.3-2 GHz	Poliimida	Gly25-MnCl75	50	0.3-2 GHz
PTFE	Gly75-MnCl25	50	0.3-2 GHz	Poliimida	Gly75-MnCl25	50	0.3-2 GHz
PTFE	Gly33-MnCl33-KCl33	50	0.3-2 GHz	Poliimida	Gly33-MnCl33-KCl33	50	0.3-2 GHz

5. Resultados y discusión

5.1 Diseño y simulación de la geometría del sensor de microondas

El diseño de la geometría en sensores de microondas interdigitados es complejo, ya que involucra numerosos parámetros que afectan directamente el desempeño del sensor. Entre estos parámetros se encuentran:

la permitividad eléctrica (ϵ_r), la cantidad de dígitos (N), el ancho de cada dígito (ad), la distancia entre dígitos (G), la separación entre las barras sensoras (S) y la longitud de los dígitos (L), entre otros.

La selección adecuada de estos parámetros es fundamental, ya que impacta directamente en la intensidad del campo eléctrico de la onda electromagnética generada por el sensor.

Con el objetivo de optimizar el diseño, se aplicó el criterio de máxima transferencia de potencia, basado en el teorema de Thevenin. Según este teorema, para maximizar la transferencia de potencia entre dos sistemas, sus impedancias deben coincidir. En este caso, el diseño del sensor debe asegurar que su impedancia sea igual a la impedancia de salida del analizador de redes vectorial ENA E5063A, es decir, ambas deben ser de 50 Ω . Su explicación es clave para entender el diseño y ajuste fino del sensor, ya que permite controlar la impedancia del sistema mediante la modificación de sus parámetros geométricos. Así, el ajuste adecuado de la cantidad de dígitos no solo contribuye a la optimización de la transferencia de potencia, sino también a la sensibilidad del sensor para detectar cambios en el medio circundante o en la presencia de contaminantes.

Para evaluar la relación entre los parámetros geométricos del sensor y su impedancia, se realizaron simulaciones en el software COMSOL Multiphysics. Siguiendo el criterio de coincidencia de impedancias, en una primera etapa se variaron la cantidad de dígitos del sensor interdigitado mientras se mantenían constantes otros parámetros de la geometría, $ad=0.5$ mm, $G=0.5$ mm, $L=10$ mm, sustrato de PTFE con $\epsilon_r=2.0$. Los resultados de esta serie de simulaciones, presentados en la figura 20, muestran una disminución de la impedancia del sensor al incrementar el número de dígitos.

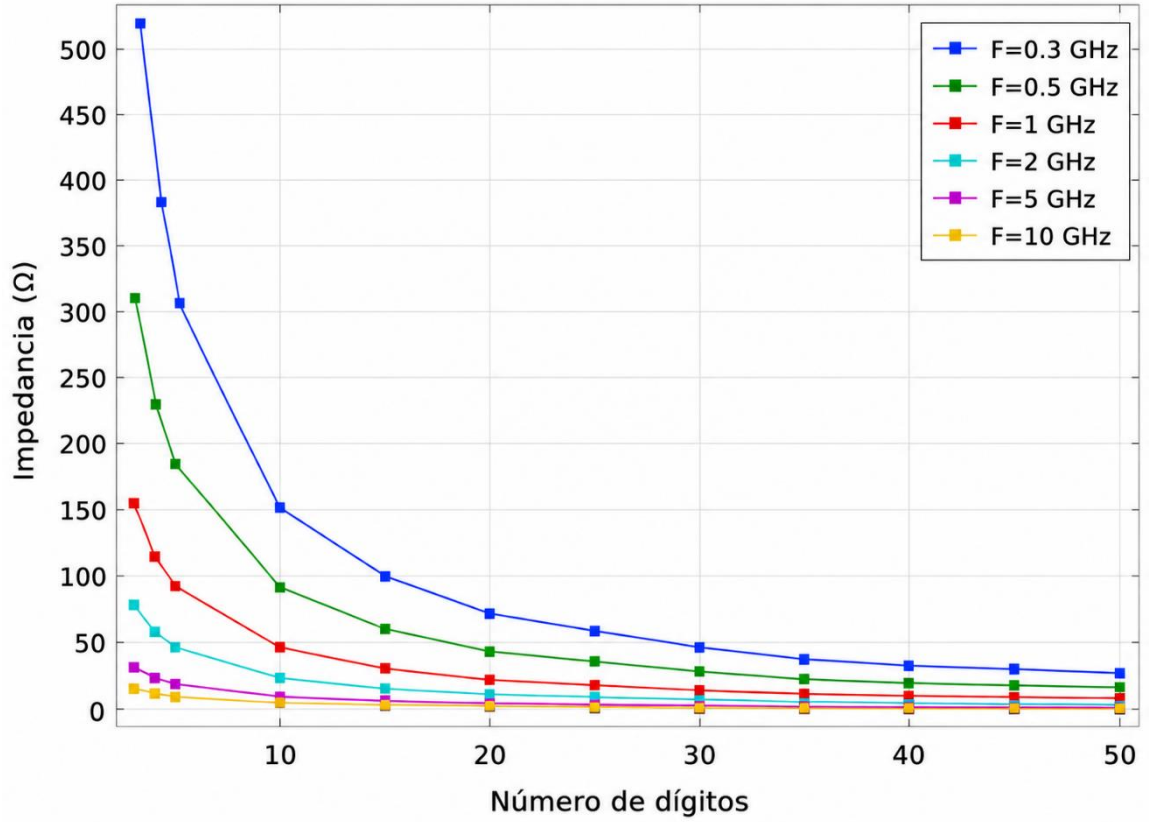


Figura 20.- Simulación del cambio de la cantidad de dígitos contra la impedancia del sensor, a diversas frecuencias.

Este comportamiento es característico de los sensores interdigitados y se explica mediante la teoría de circuitos equivalentes. En un sensor interdigitado, cada dígito adicional puede interpretarse como un elemento capacitivo añadido en paralelo. A medida que aumenta el número de dígitos, también lo hace la capacitancia total (C_T) del sistema. Esta mayor capacitancia genera una disminución en la reactancia capacitiva (X_C), por lo que provoca una reducción en la impedancia total (Z) del sensor, ya que la impedancia en un circuito con elementos en paralelo disminuye al añadir más elementos capacitivos. De la ecuación 24 de capacitancia para placas coplanares

$$C_T = \frac{2\epsilon_r\epsilon_0(N-1)L}{\pi} \ln \left[\left(1 + \frac{W}{G}\right) + \sqrt{\left(1 + \frac{W}{G}\right)^2 - 1} \right] \text{ permite calcular los terminas de } X_C \text{ y}$$

Z de acuerdo a las ecuaciones siguientes:

$$X_C = \frac{1}{2\pi F C_T} \quad (56)$$

$$Z = \sqrt{R^2 + Xc^2} \quad (57)$$

Analizando a detalle la simulación de la figura 13, el valor de la impedancia cercano a 50 Ω , se tiene en el sensor interdigitado con 4 y 5 dígitos a una frecuencia de 2 GHz, 10 dígitos a frecuencia de 1GHz, 20 dígitos con frecuencia de 0.5 GHz y 30 dígitos a frecuencia de 0.3 GHz. Seleccionándose el primero para la reducción tanto de la longitud como de los efectos capacitivos del sensor.

A continuación, se realizaron simulaciones en las que se variaba el ancho de los dígitos (ad) en sensores interdigitados configurados con N=4 y N=5 dígitos, manteniendo una longitud de los dígitos de L = 10 mm, un sustrato de PTFE con una permitividad relativa de $\epsilon_r=2.0$ y una separación entre dígitos de G = 0.5 mm.

La figura 21 presenta los resultados de estas simulaciones, mostrando cómo la variación del ancho del dígito impacta en la impedancia del sensor. En la figura 21A, se observa la magnitud de la impedancia para el sensor con N=4 dígitos al modificar el ancho de cada dígito, mientras que la figura 21B muestra el cambio de impedancia al realizar la misma variación de ancho en el sensor con N=5 dígitos. Los resultados indican que, para ambos valores de N, el sensor logra una impedancia cercana a los 50 Ω a una frecuencia de operación de 2 GHz cuando el ancho de los dígitos es de ad= 0.5 mm. El valor de la impedancia se reduce al aumentar el ancho de dígito, debido a que la separación (G) entre las placas va disminuyendo, con esto aumentando la capacitancia de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$C = \frac{\epsilon_0 A}{d} \quad (58)$$

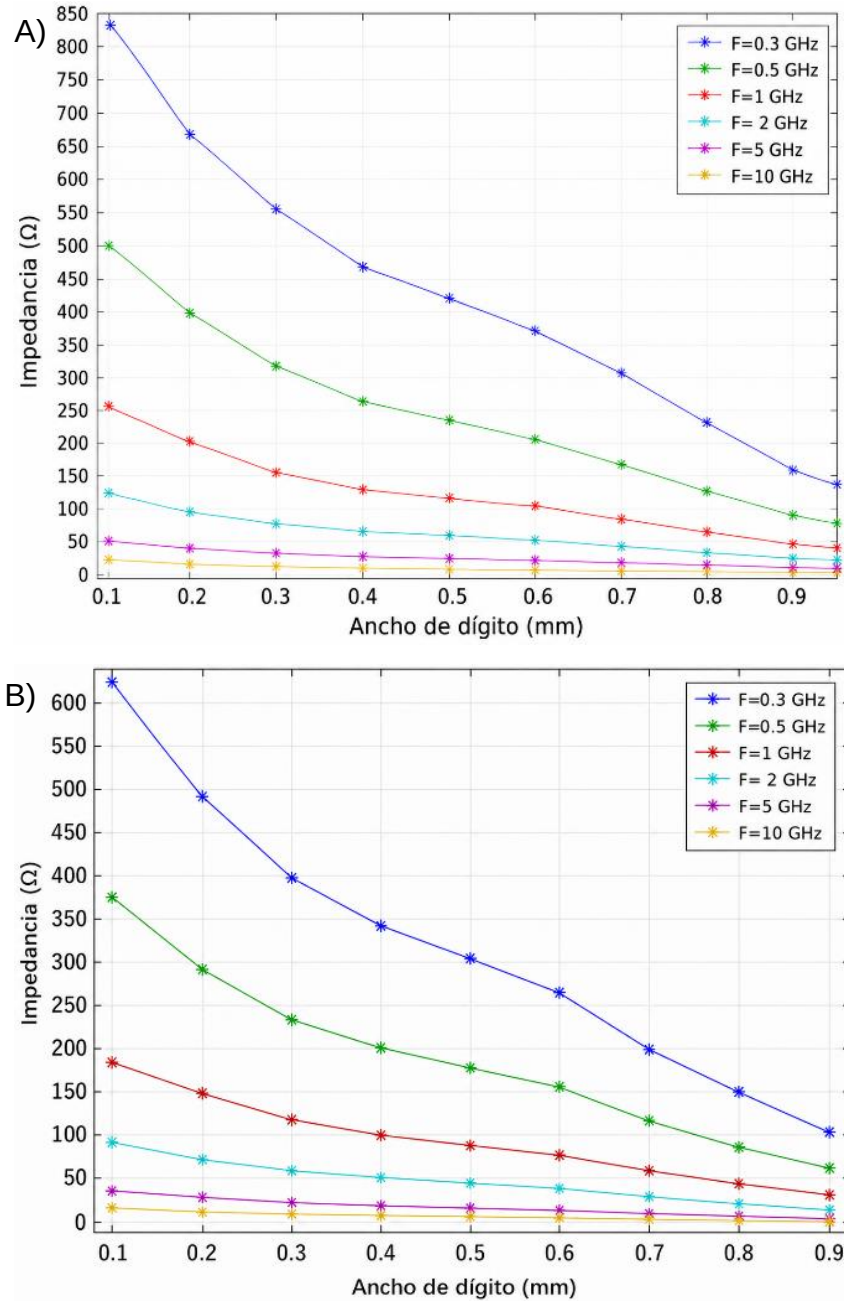


Figura 21.-Simulación variando el ancho de dígito a diversas frecuencias para A) N=4 y B) N=5.

La simulación de la separación entre las barras de conducción se muestra en la figura 22A y 22B para N=4 y N=5 respectivamente. Para esto se mantuvo constante el ancho de dígito $ad=0.5\text{mm}$, $L=100\text{ mm}$, con un sustrato de PTFE de permitividad relativa de $\epsilon_r=2.0$. Los resultados de la simulación revelan cómo la variación en la

separación entre las barras de conducción afecta la impedancia del sensor. En ambos casos (N=4 y N=5), se observa que a medida que se ajusta esta separación, la impedancia se aproxima a los 50 Ω a una frecuencia de 2 GHz, lo cual es ideal para la máxima transferencia de potencia. Además, se observa que las variaciones en la impedancia debidas a cambios en la separación entre barras son mínimas y, por lo tanto, despreciables en el diseño final del sensor.

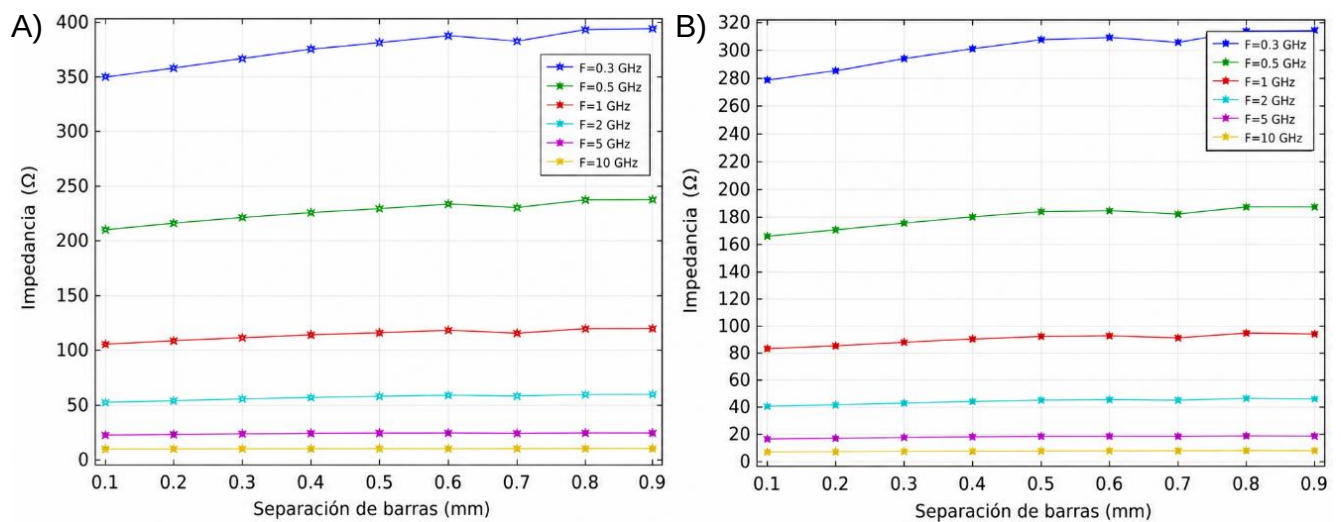


Figura 22.- Simulación variando la separación entre la barra excitadora y la detectora, para A) N=4 y B) N=5.

Con estas simulaciones, se determina que las mejores condiciones para el diseño de la geometría del sensor interdigitado con sustrato de PTFE, son las siguientes:

L=10 mm, G=0.5 mm, ad=0.5mm, S=0.5mm.

Esta geometría se utiliza para la simulación de la norma del campo eléctrico generada por la onda electromagnética del sensor de microondas interdigitado. Para optimizar el diseño de la geometría del sensor, se realizaron simulaciones enfocadas en la distribución e intensidad de la norma del campo eléctrico, variando tanto el ancho de los dígitos como el tipo de sustrato empleado. Estas simulaciones tienen como objetivo comprender cómo influyen estos parámetros en la eficiencia del sensor y su

capacidad para generar un campo eléctrico adecuado para la detección de contaminantes en líquidos.

La figura 23, muestra una vista lateral de un corte transversal del sensor interdigitado. En esta simulación se muestra una línea de color rojo, la cual representa el valor promedio de la norma del campo eléctrico sobre la superficie del sensor.

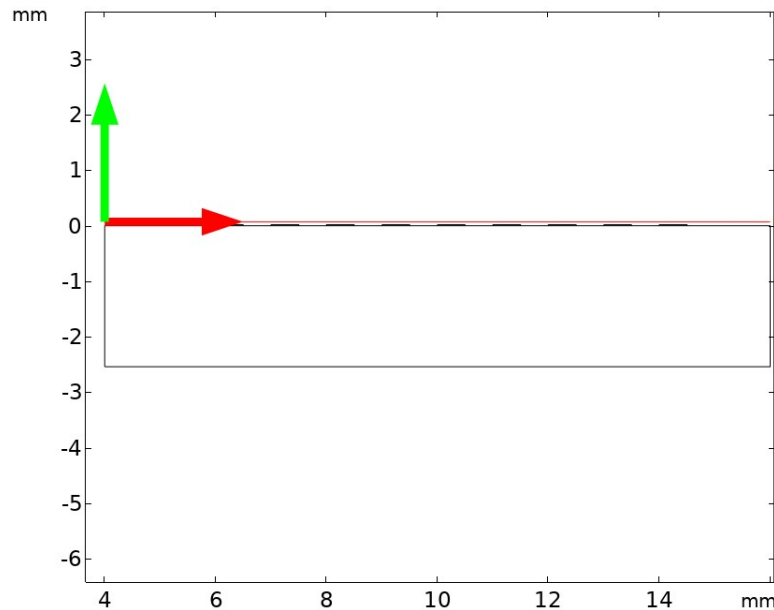


Figura 23.- Vista lateral de un corte transversal del sensor interdigitado.

La simulación de las figuras 24A, 24B con $N=4$ y $N=5$ respectivamente, muestran el promedio de la norma de campo eléctrico sobre la superficie del sensor al variar el ancho de dígito. Se observa que existe una máxima intensidad cuando el ancho del dígito $a_d=0.5\text{mm}$ y al comparar ambas gráficas bajo las mismas condiciones, se tiene que la norma del campo eléctrico es mayor 24B, es decir, con $N=5$ donde la cantidad de dígitos es mayor.

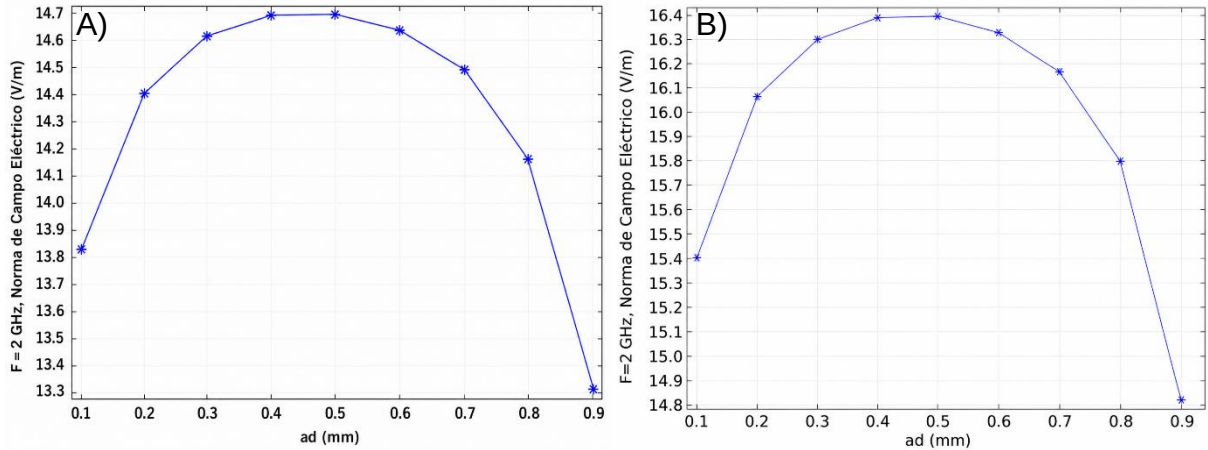


Figura 24.- Simulación de la norma del campo eléctrico promedio sobre la superficie de sensor interdigitado para A) N=4 y B) N=5 sobre un sustrato de PTFE

Para el diseño de esta misma geometría, se desarrollaron simulaciones de la norma de campo eléctrico variando el ancho del dígito, modificando el tipo sustrato. En las figuras 25A y 25B se observan los resultados de estas simulaciones para N=4 y N=5 respectivamente, demostrando la intensidad de la norma del campo eléctrico sobre la superficie del sensor cuando se utiliza poliimida como sustrato, en lugar de PTFE.

La poliimida tiene una permitividad relativa $\epsilon_r=3.4$, lo que implica una mayor capacidad para almacenar energía eléctrica en comparación con el PTFE, que tiene una permitividad relativa de $\epsilon_r=2.0$.

Estas simulaciones demuestran que la intensidad de la norma de campo eléctrico es mayor para N=5. Al comparar las simulaciones de las figuras 24B y 25B para los sustratos de PTFE y poliimida respectivamente, se demuestra la magnitud de la norma del campo eléctrico es mayor para el sensor interdigitado con sustrato de PTFE.

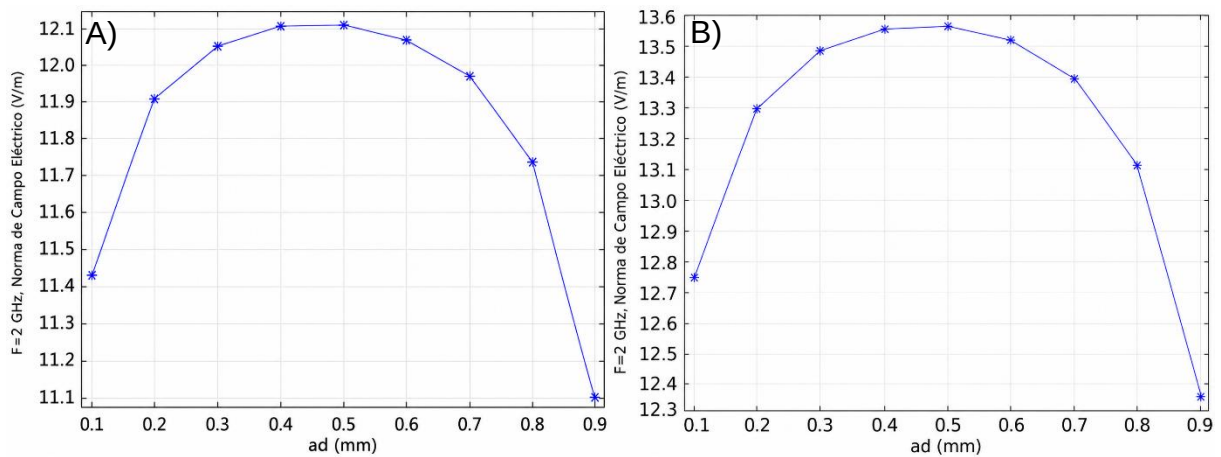


Figura 25.-Simulación de la norma del campo eléctrico promedio sobre la superficie de sensor interdigitado para A) $N=4$ y B) $N=5$ con sustrato de poliimida.

Con la geometría y el sustrato óptimos establecidos para el sensor de microondas interdigitado, se analiza el comportamiento de la norma del campo eléctrico sobre la superficie del sensor, evaluando cómo varía con la frecuencia de la onda electromagnética incidente.

La figura 26 A-F muestra una disminución progresiva en la intensidad del campo eléctrico sobre la superficie del sensor a medida que aumenta la frecuencia de la onda electromagnética. Este fenómeno puede explicarse en términos de los efectos en los dominios eléctricos y las pérdidas dieléctricas asociadas a frecuencias elevadas.

A medida que la frecuencia incrementa, el material del sustrato experimenta una mayor cantidad de pérdidas energéticas debido a la polarización de los dominios eléctricos, lo que conduce a una menor eficiencia en la propagación y la concentración del campo eléctrico.

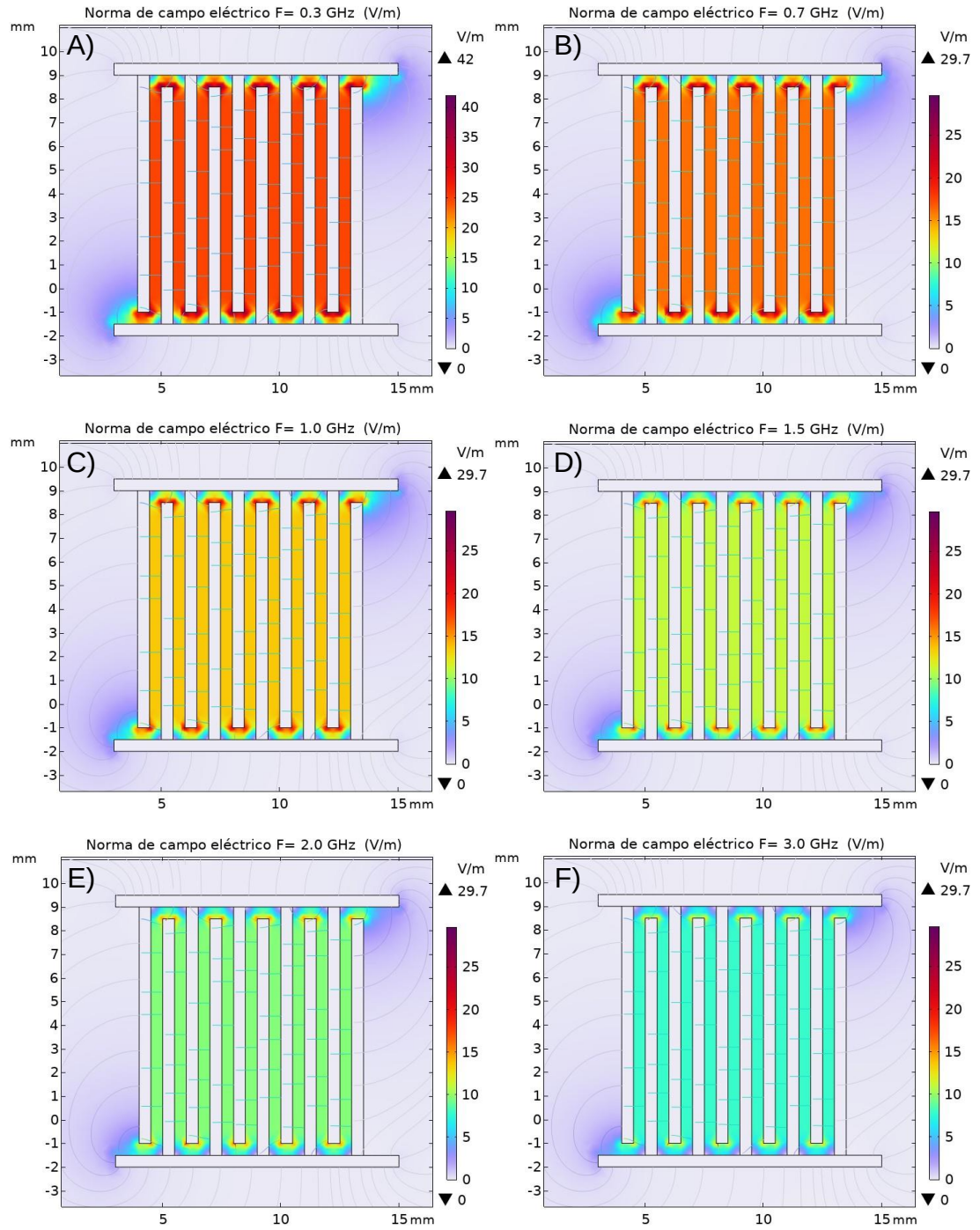


Figura 26.- (A-F) Simulación de la norma del campo eléctrico en la superficie al variar la frecuencia de la onda electromagnética.

La simulación de la figura 27A muestra la intensidad de la norma del campo eléctrico entre los dígitos ubicados en la superficie del sensor interdigitado, el cual es mapeado por una línea roja en la figura 27B. En esta simulación se observa la norma del campo eléctrico con un comportamiento homogéneo a lo largo de los dígitos, pero con ciertas perturbaciones en los extremos.

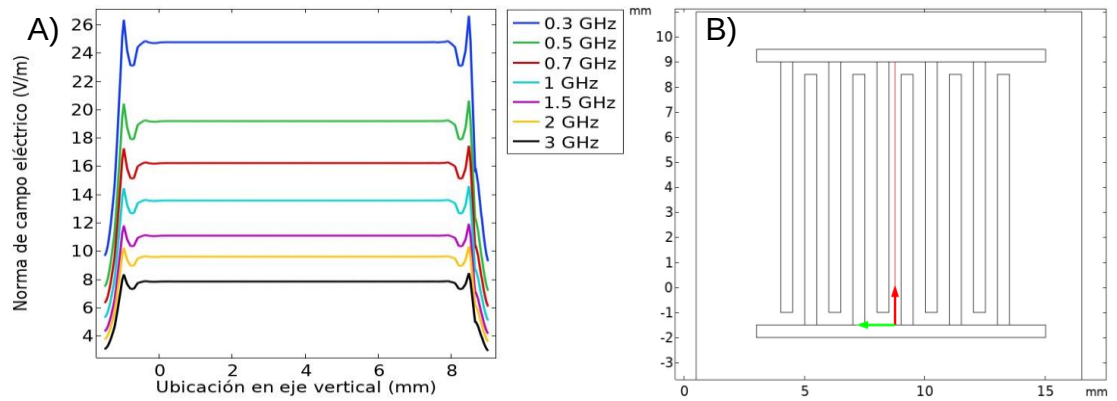


Figura 27.- A) Simulación de la norma del campo eléctrico a lo largo de la línea roja en B).

Para continuar con el análisis de la norma de campo eléctrico sobre la superficie del sustrato, la simulación de la figura 28A muestra su intensidad a lo largo del mapeo de la línea roja ubicada en la figura 28B, donde la zona de interés es de forma horizontal entre los dígitos del sensor interdigitado.

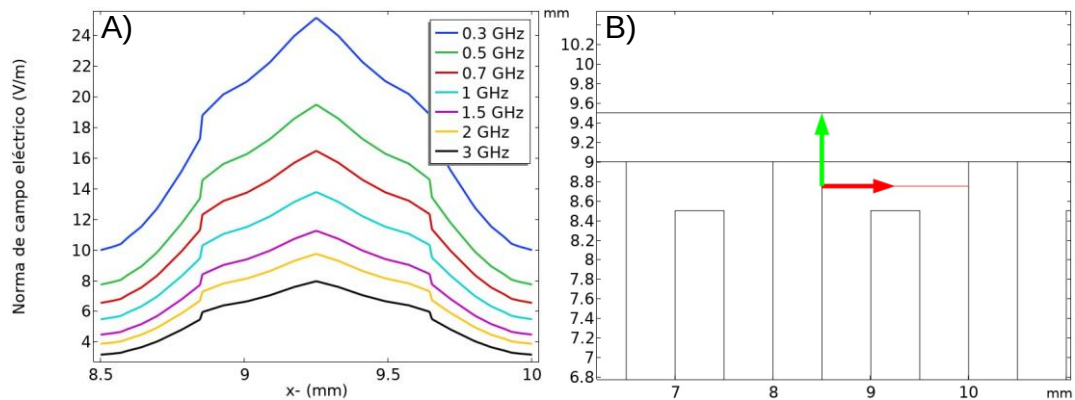


Figura 28.- A) Simulación de la norma del campo eléctrico entre los dígitos en forma horizontal a lo largo de la línea roja en B).

Una comparación interesante en el efecto del sustrato para el sensor interdigitado, es ver la intensidad y el comportamiento del campo eléctrico de la onda electromagnética por fuera del sensor en ambos sustratos, tanto para PTFE como para la poliimida. Para esto se realizó una simulación con vista lateral como se muestra en la figura 29, donde la línea roja representa la zona de interés para mapear la norma del campo eléctrico.

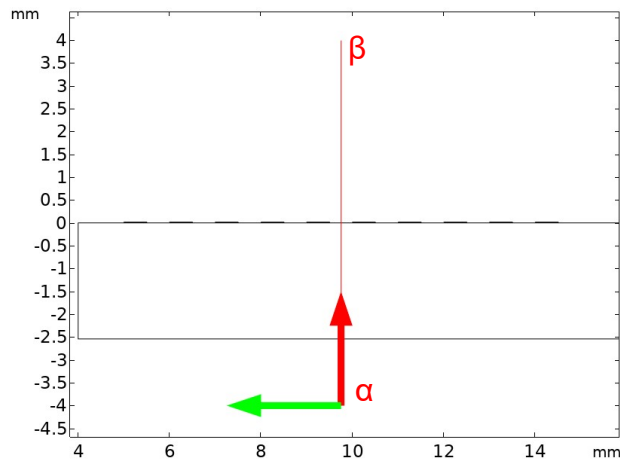


Figura 29.- Vista lateral del sensor interdigitado con la zona de interés expresado por una línea roja de α - β

El resultado de la simulación se observa en la figura 30A para el sustrato de PTFE y 30B para el sustrato de la poliimida. En ambas simulaciones se muestra un pico, el cual es atribuido a que ahí se encuentra la máxima intensidad del campo eléctrico generado en la superficie de los dígitos.

Al comparar ambas magnitudes de 30A y 30B, resulta una mayor intensidad para el sustrato con menor permitividad eléctrica $\epsilon_r=2.0$, es decir la de PTFE. Esta comparación muestra también la variación de la intensidad del campo eléctrico al variar la frecuencia de la onda electromagnética y como disminuye al aumentar esta última.

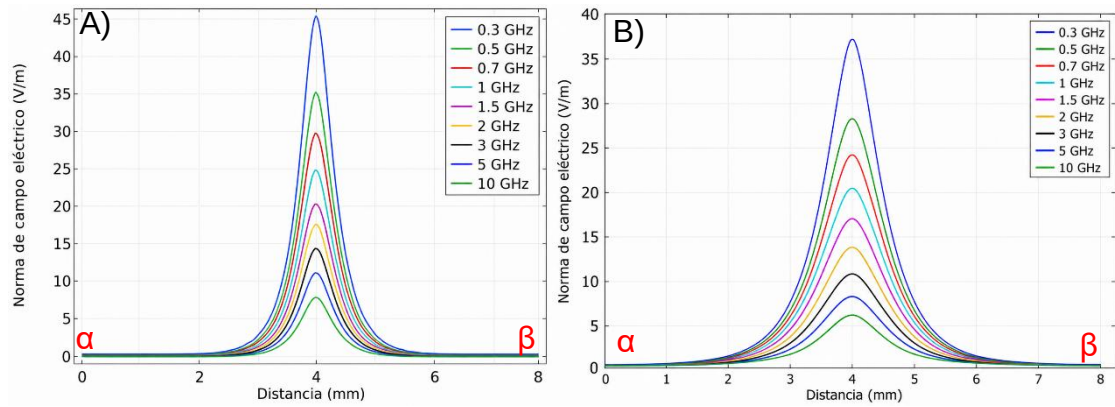


Figura 30.- Simulación de la norma de campo eléctrico para el estudio del efecto del sustrato de A)PTFE y B)Poliimida para un sensor interdigitado

Este fenómeno se atribuye al comportamiento de los dominios eléctricos y pérdidas generadas a altas frecuencias. Estas pérdidas son típicas en materiales dieléctricos sometidos a frecuencias altas y se deben al retardo en la respuesta de los dominios eléctricos frente al cambio rápido de dirección del campo electromagnético. Además, la disipación de energía en forma de calor, asociada con las pérdidas dieléctricas, contribuye a una reducción en la intensidad de la norma del campo eléctrico.

5.2. Fabricación del sensor interdigitado en sustrato de poliimida y PTFE

La fabricación de los sensores de microondas interdigitados se realizó mediante fotolitografía de escritura directa por láser, la cual es una técnica que permite la creación de patrones complejos con alta resolución, en el orden de micras, sobre áreas de trabajo relativamente grandes. Esta técnica tiene una capacidad para generar los patrones de los electrodos interdigitados con alta precisión sobre diversos sustratos con flexibilidad de modificar los parámetros y un ajuste fino de la geometría en cada fabricación a través de un paquete computacional.

Para el diseño de la geometría del sensor interdigitado, se utilizó el paquete computacional asistido por computadora llamado CleWin, el cual está especializado en la creación de patrones geométricos para aplicaciones de fotolitografía. La figura 31 muestra el diseño final del sensor interdigitado con dos configuraciones: A) 4 dígitos y B) 5 dígitos.

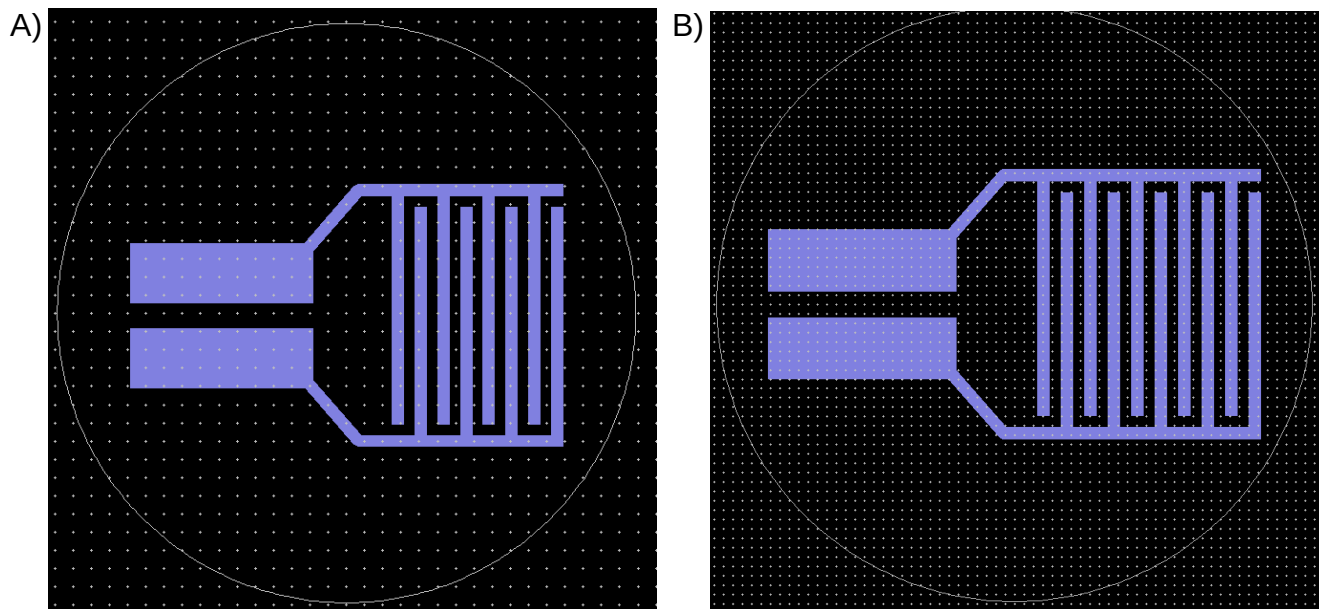


Figura 31.- Diseño en CleWin del sensor de microondas interdigitado para
A) 4 dígitos y B) 5 dígitos

Posteriormente se preparan los materiales precursores, para la fabricación de los sensores. Se seleccionaron los siguientes materiales: Poliimida DuPont™, Pyralux® AG, con $\epsilon_r=3.4$ y PTFE, Rogers Corporation, $\epsilon_r=2.0$. Ambos sustratos se encuentran en presentación en forma de láminas recubiertas de cobre con una pureza del 99.9%.

La figura 32A presenta la foto del sustrato tal como se recibe de fábrica. Posteriormente la foto de la figura 32B muestra la preparación del sustrato, recubriendo el cobre de para su protección del ataque químico. La figura 32C, muestra los sustratos recortados con las dimensiones requeridas para su fabricación.

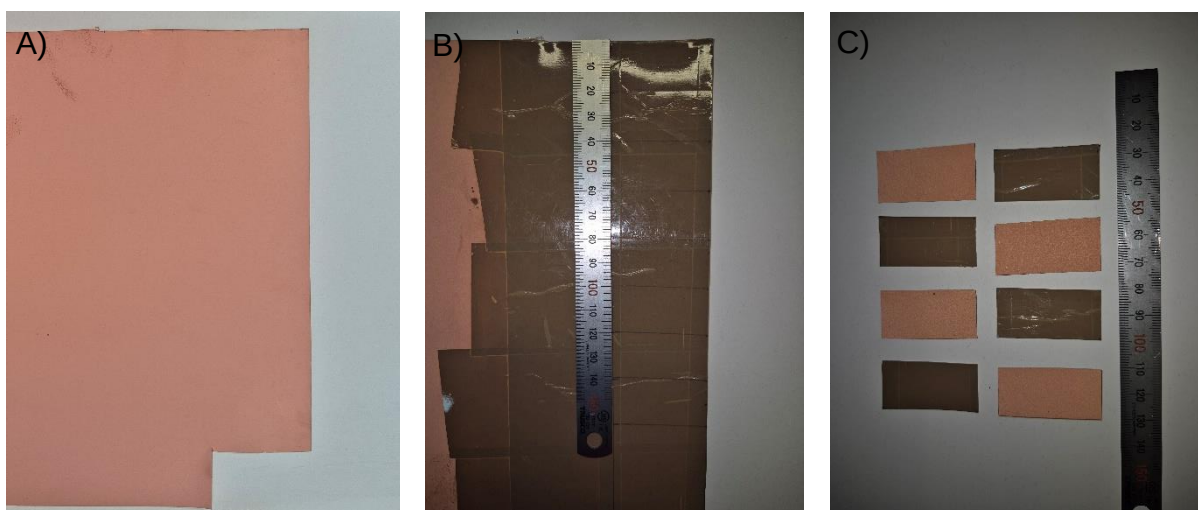


Figura 32.- Fotos de la poliimida precursora. A) lámina de poliimida de fábrica, B) protección del cobre C) cortes del sustrato.

Para la preparación de los sustratos de poliimida, estos se fijaron en un portamuestra (ver Figura 33), lo que permitió una colocación estable en el equipo de recubrimiento por centrifugado (SpinCoating). El proceso de recubrimiento se llevó a cabo utilizando el equipo Spin-I10, el cual es adecuado para aplicar capas uniformes de fotoresina sobre superficies planas y asegurando una distribución homogénea.

Se utilizó la fotoresina Allresist AR-P-3120, elegida por sus propiedades de adherencia y uniformidad al ser aplicada sobre la poliimida. Para alcanzar un espesor uniforme de 35 micras en la capa de fotoresina, el sustrato se hizo girar a una velocidad angular de 4500 RPM durante un tiempo de centrifugado de 60 segundos. Este proceso permite que la fotoresina se distribuya de manera homogénea sobre la superficie del sustrato

Los sustratos recubiertos con la solución fotosensible, son expuestos en el equipo de fotolitografía por escritura directa con láser modelo ML3, de la compañía de Durham Magneto Optics. El haz utilizado durante la exposición tiene una longitud de onda de 385 nm, con una resolución de 0.5 μm , con una potencia de 110 mJ/cm². Posteriormente cada sustrato expuesto es sometido a un líquido revelador marca Allresist, modelo AR-300-26, durante 40 segundos, teniendo como resultado las imágenes de las figuras 34A y 34B, donde se muestran fotos de los sensores interdigitados.



Figura 33.- Fotos sustratos preparados para fotoresina.

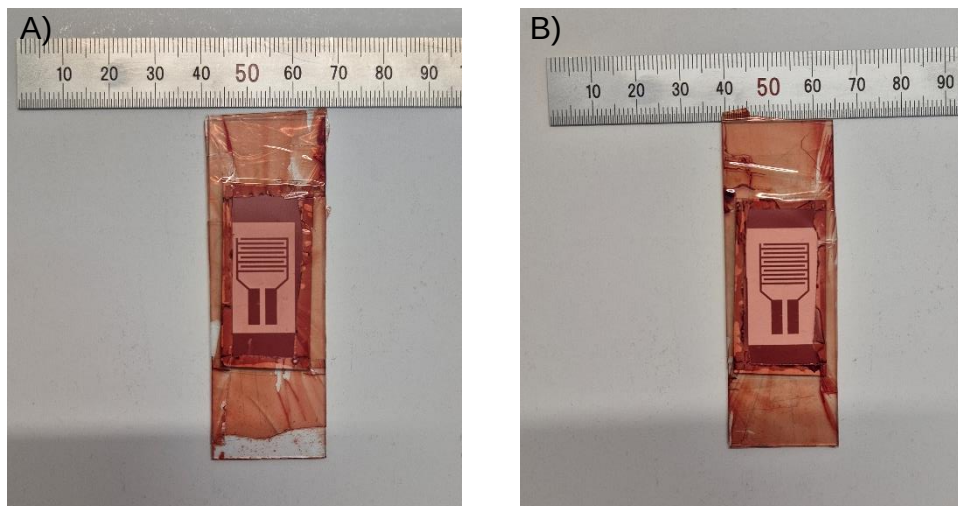


Figura 34.- Sensor de A) N=4, B) N=5.

Posteriormente son sometidos a un ataque químico con cloruro férrico durante 30 minutos para la remoción del cobre excedente. La fotoresina restante se remueve con acetona grado industrial. Finalmente, la figura 35A y 34B muestra los sensores de poliimida para N=4 y N=5 respectivamente.

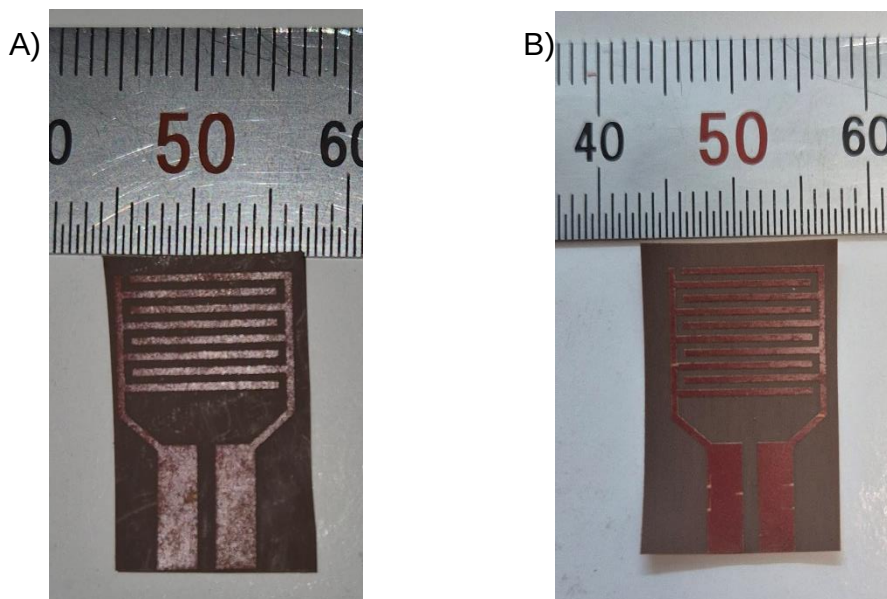


Figura 35.- Sensores de poliimida para A) 4 y B) 5 dígitos.

Este procedimiento para la fabricación de sensores de microondas interdigitados se realizó bajo las mismas condiciones para el sustrato de PTFE, donde finalmente se obtuvieron dos sensores expuestos a litografía de escritura directa por láser, para 4 y 5 dígitos como se muestra en las figuras 36A y 36B respectivamente.

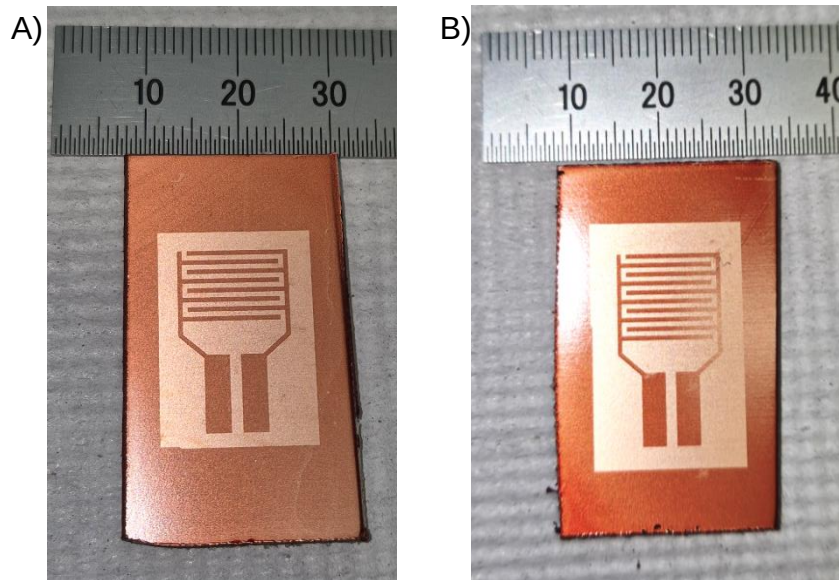


Figura 36.-A) Sensor de 4 dígitos, B) sensor de 5 dígitos.

Para la fabricación de los sensores interdigitados con el sustrato de PTFE con los patrones impresos de los electrodos interdigitados fueron sometidos a un proceso de ataque químico. Este proceso consistió en sumergir los sustratos de PTFE en una solución de cloruro férrico durante un tiempo de 30 minutos, con el objetivo de eliminar el cobre excedente presente en la superficie del sustrato. El objetivo del cloruro férrico es disolver toda la zona de cobre no deseado, dejando únicamente el patrón interdigitado del sensor, teniendo como resultado de este paso el grabado de los sensores de microondas interdigitados

En la figura 37A y 37B se observan los sensores con configuraciones de $N=4$ y $N=5$ dígitos respectivamente. Estas imágenes permiten observar los patrones interdigitados finales, donde los parámetros geométricos previamente optimizados, como el ancho, la separación de los dígitos y la configuración general del sensor, se encuentran definidos sobre el sustrato.

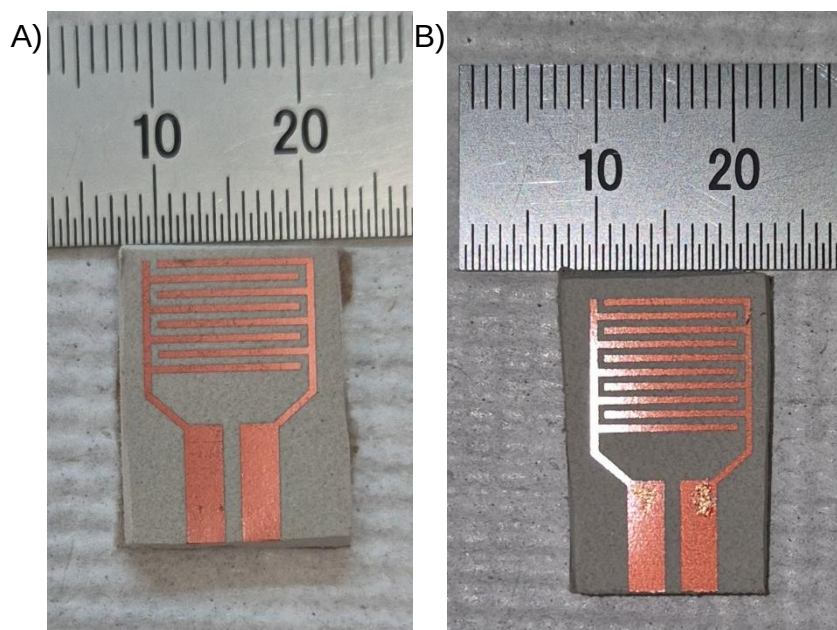


Figura 37.- Sensores en sustrato de PTFE para A) 4 dígitos, y B) 5 dígitos.

5.3 Caracterización de los sensores de microondas interdigitado.

5.3.1 Espectroscopia de Infrarrojo.

Para el análisis de espectroscopía infrarrojo por transformada de Fourier (FT-IR) para ambos sustratos, se utilizó un espectrómetro modelo IRAffinity 1S de la empresa Shimadzu. Este equipo tiene una alta precisión y capacidad para obtener espectros detallados en muestras de materiales. Para realizar el análisis, se empleó la técnica de reflectancia con el accesorio de Reflectancia Total Atenuada (ATR, por sus siglas en inglés) de la marca Smiths, modelo Quest, equipado con una ventana de diamante.

El rango de barrido para la obtención del espectro fue de 4000 cm^{-1} hasta 400 cm^{-1} , permitiendo capturar tanto las regiones del infrarrojo medio como las bandas características de vibración de los enlaces en el material estudiado. La figura 38 muestra los espectros obtenidos, donde se pueden identificar los picos correspondientes a las distintas vibraciones moleculares de los sustratos de A) PTFE y de B) poliimida.

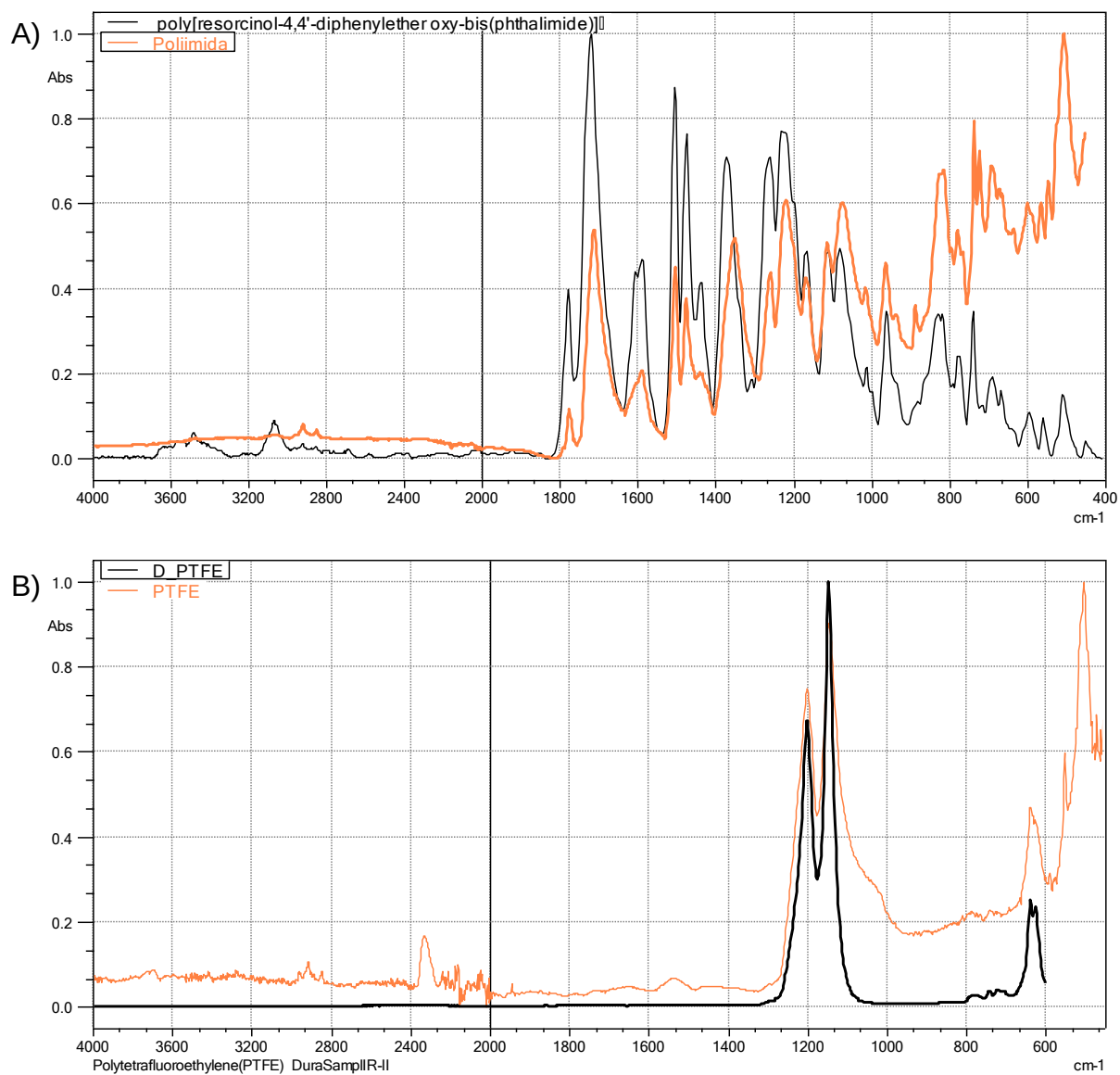


Figura 38.- Medición de espectroscopía de infrarrojo para A) Sustrato PTFE y B) sustrato de poliimida.

5.3.2 Microscopia óptica.

La caracterización microestructural del sensor interdigitado, se utilizó un microscopio óptico de alta precisión, marca Keyence, modelo VHX-7000. Este equipo permite obtener micrografías detalladas con gran resolución, para evaluar la estructura morfológica de los elementos conductores del sensor, como los dígitos, la barra excitadora y la barra detectora. La figura 39 y 40 muestran micrografía del sensor de microondas interdigitado en sustrato de poliimida y de PTFE respectivamente, en las cuales se aprecia una morfología bien definida de los dígitos y de las barras ya mencionadas.

También se observa una ligera erosión superficial en algunos de los dígitos. Este desgaste se atribuye a un exceso de tiempo de exposición durante el proceso de ataque químico, realizado para eliminar el cobre sobrante en la fabricación del sensor. Aunque esta erosión es visible en la micrografía, se determinó que no afecta significativamente el rendimiento ni el funcionamiento del sensor de microondas interdigitado. La funcionalidad de los elementos activos se mantiene, asegurando que el sensor interdigitado conserve su capacidad para detectar contaminantes en líquidos de manera eficiente.

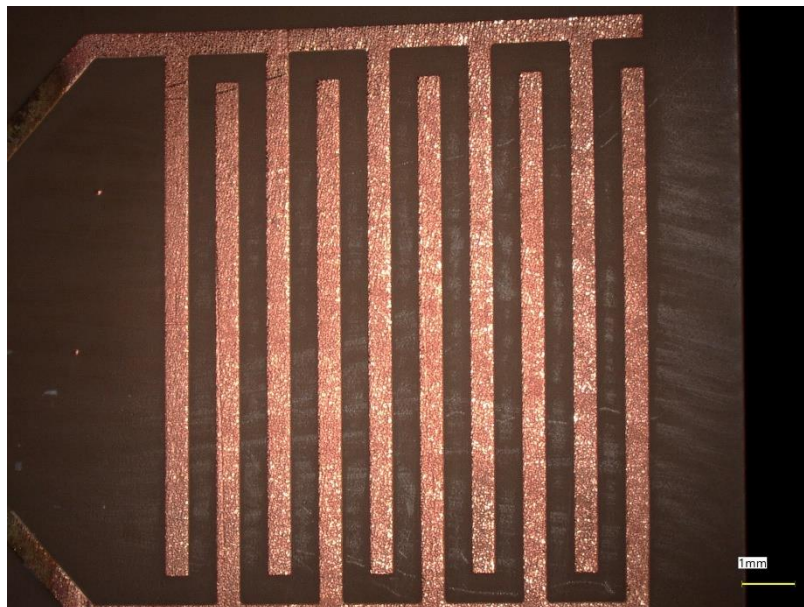


Figura 39.-Micrografía del sensor en sustrato de poliimida.

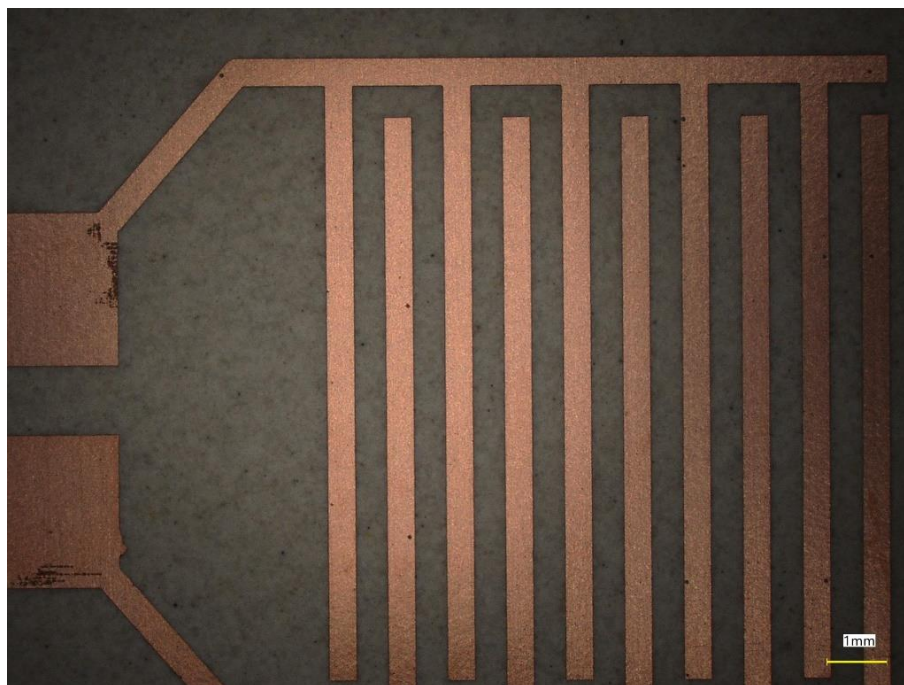


Figura 40.- Micrografía del sensor en sustrato de PTFE.

Para realizar el análisis de espesor de la capa conductora, la muestra se preparó mediante un corte transversal del sensor interdigitado. Primero la muestra fue posicionada en una cápsula de plástico y sumergida en resina líquida. Esta resina fue mezclada previamente con un catalizador, utilizado para acelerar el proceso de polimerización, lo cual garantiza un endurecimiento. Tras la inmersión, se dejó reposar la muestra durante 24 horas para asegurar la completa solidificación de la resina, creando así un bloque que ayuda al manejo de la muestra.

Para la preparación metalográfica de la cara de interés, es decir el dígito del sensor interdigitado, se sometió a un proceso de desbaste y pulido. Inicialmente, se utilizó una lija de grano grueso para eliminar material superficial y exponer las zonas de interés. A medida que avanzó el desbaste, se emplearon lijas con granos cada vez más finos, hasta obtener una superficie más uniforme. Finalmente, se procedió al pulido con un paño especializado y una suspensión de óxido de aluminio de $1\ \mu\text{m}$ como abrasivo, para alcanzar un acabado de espejo. Este acabado es esencial para obtener una superficie lisa y pulida, esto para mejorar la visibilidad de las capas en el microscopio óptico antes mencionado.

En la figura 41 se observa la micrografía del sensor de microondas interdigitado con sustrato de PTFE, con un corte lateral en un dígito de cobre, obteniéndose un espesor promedio de 21.47 μm .

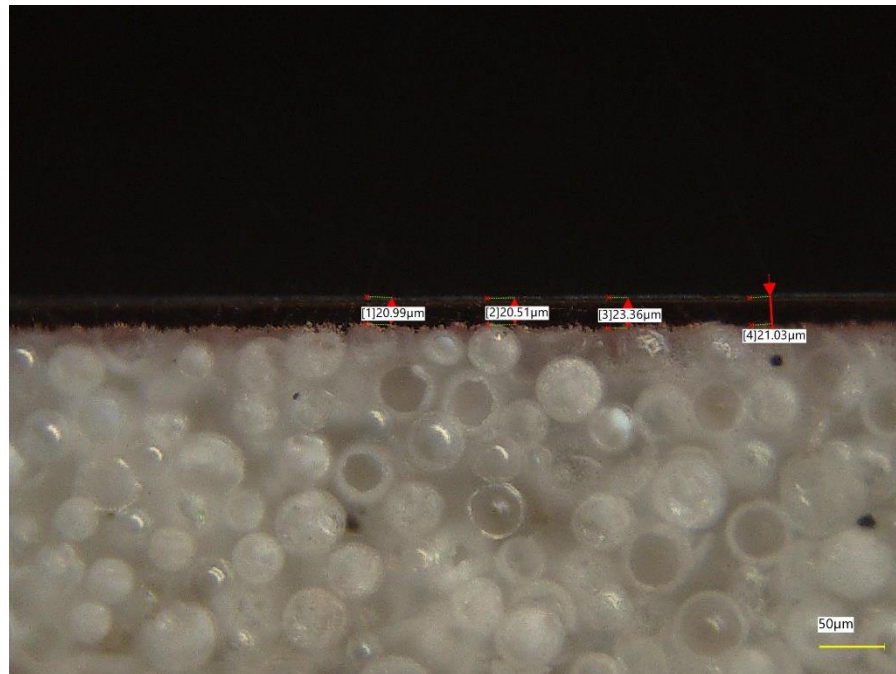


Figura 41.-Micrografía con corte lateral del sensor en sustrato de PTFE.

La micrografía en la figura 42 muestra la morfología detallada del sensor de microondas interdigitado, utilizando un microscopio óptico marca Olympus, modelo GX51. En esta imagen se puede observar la estructura de los dígitos conductores de cobre, así como su espesor sobre el sustrato de PTFE en la superficie del sensor. El valor del espesor estimado es de aproximadamente 20 μm , lo cual resulta adecuado para las aplicaciones de transmisión de microondas de este diseño en particular, debido a que está dentro del efecto pelicular.

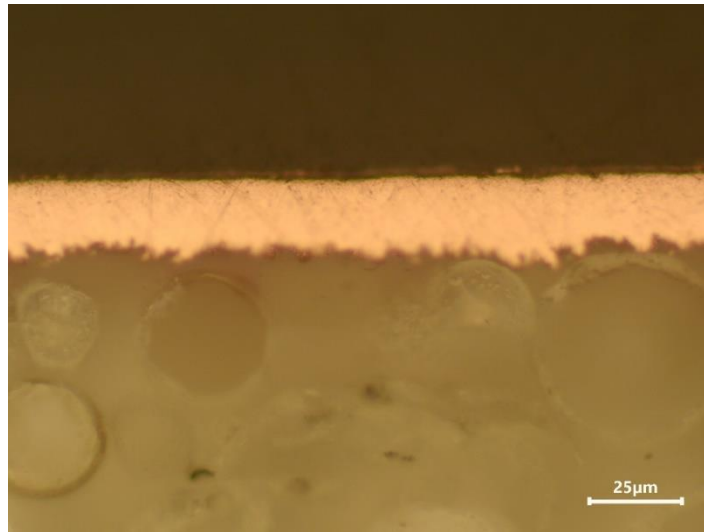


Figura 42.-Micrografía con corte lateral del sensor en sustrato de PTFE con microscopio óptico Olympus GX51.

La figura 43, muestra la vista lateral del dígito de cobre del sensor interdigitado fabricado sobre un sustrato de PTFE. Se observa que, en los extremos de cada lado del dígito presenta una transición suave sin irregularidades geométricas, demuestran que el ataque químico con cloruro férrico no generó desgaste ni sobregrabado. Este acabado es importante ya que minimiza posibles perturbaciones en el campo eléctrico durante la caracterización electromagnética garantizando una respuesta estable.

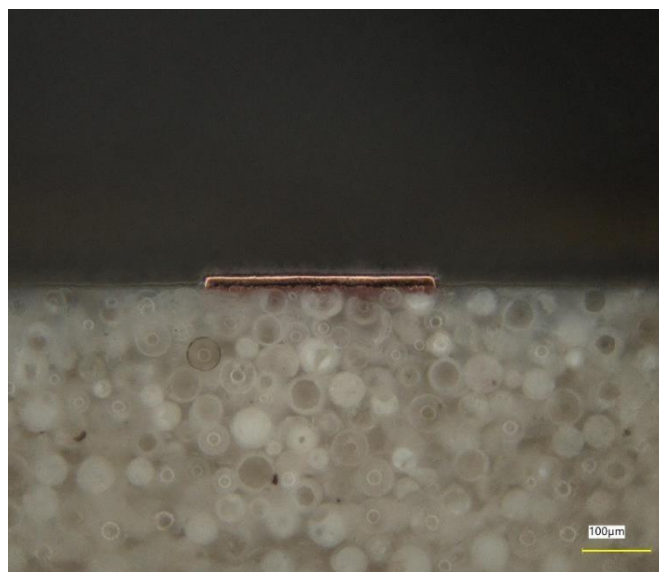


Figura 43.- Vista lateral de un dígito de cobre del sensor interdigitado con sustrato de PTFE

Para el análisis composicional del cobre en la superficie del sensor, se utilizó la técnica de espectroscopía de plasma inducido por láser (LIBS, por sus siglas en inglés: *Laser Induced Breakdown Spectroscopy*). Esta técnica es altamente efectiva para identificar elementos en la superficie de materiales, ya que permite obtener un análisis rápido y preciso de la composición química.

En la figura 44 se presenta el análisis composicional realizado, el cual indica que aproximadamente el 90% de la superficie estudiada corresponde a cobre puro, mientras que el 10% restante corresponde a la presencia de oxígeno. La detección de oxígeno se atribuye a la formación de una capa delgada de óxido de cobre en la superficie, posiblemente generada durante el proceso de fabricación o por exposición al ambiente. Sin embargo, la baja proporción de esta capa oxidada (10%) sugiere que no afectará significativamente la funcionalidad del sensor interdigitado de microondas, ya que la capa de óxido es superficial y no interfiere con los elementos conductores principales.

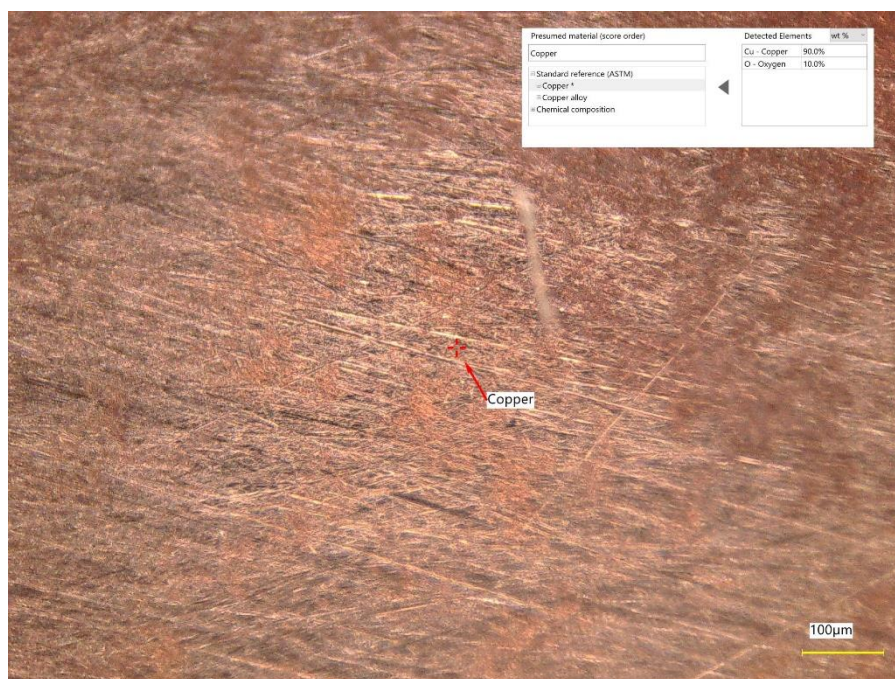


Figura 44.- Estudio de LIBS de la superficie del cobre del sensor.

La figura 45 muestra una tomografía de rayos X del sensor interdigitado en sustrato de PTFE. Esta imagen permite realizar la inspección de la estructura interna del IDE en acoplamiento con el conector Molex, observándose la transición que conecta la parte activa del sensor con el sistema de alimentación electromagnético. En esta transición dada a través de la soldadura, se observa una soldadura uniforme sin rupturas, además de que no existen deformaciones.

El patrón interdigitado sobre el sustrato, las líneas de conducción y las barras detectoras, no presentan discontinuidades visibles. Esta tomografía permite verificar que el patrón interdigitado fue transferido de una forma correcta y que las uniones entre los materiales no presentan fallos que puedan comprometer la transmisión o la recepción de las señales electromagnéticas durante la caracterización.

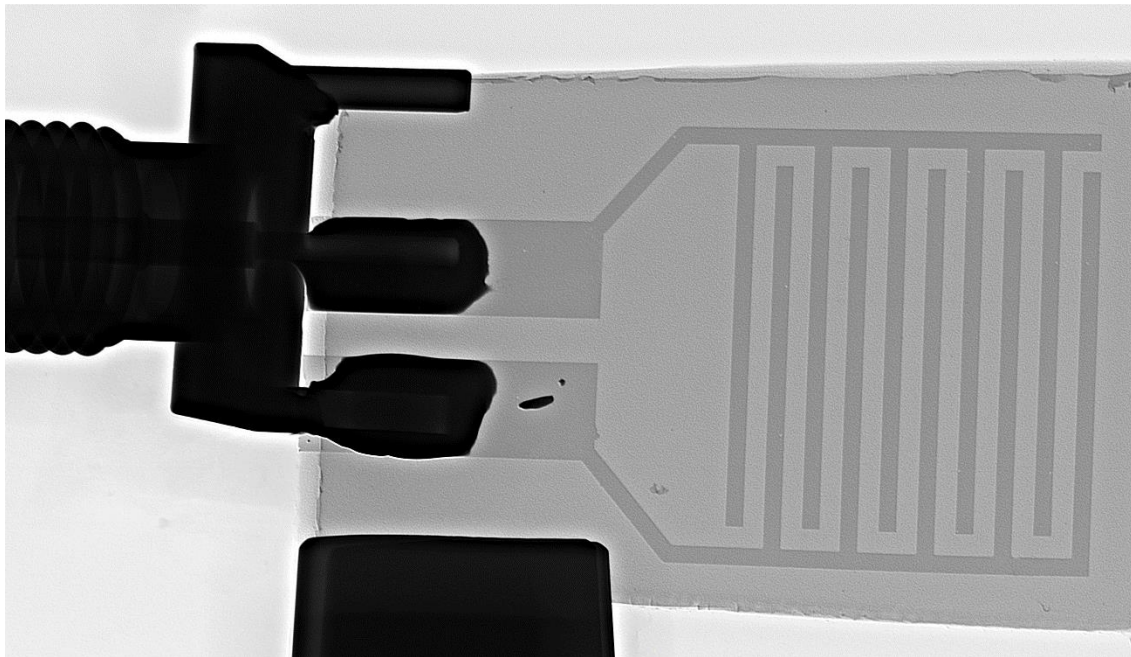


Figura 45.-Tomografía computarizada de rayos X del sensor interdigitado en sustrato de PTFE.

5.4 Caracterización electromagnética.

El parámetro de dispersión S_{11} se midió a través del puerto 1 del analizador vectorial de redes. El analizador genera una señal de microondas de amplitud, fase y frecuencia conocidas, que se propaga desde el puerto 1 hacia el sensor. La onda reflejada se detecta en el mismo puerto 1. Esta onda reflejada proporciona información valiosa sobre la interacción del sensor con la muestra líquida. El parámetro de dispersión por reflexión S_{11} se define mediante la fórmula $S_{11}=20\log_{10}/R/$, donde $R=A_{ref}/A_{inc}$ es el coeficiente de reflexión, y A_{inc} y A_{ref} son las amplitudes de las ondas incidente y reflejada, respectivamente. Con el analizador vectorial de redes, se midieron 22 analitos en total, y para cada muestra y sensor se realizaron 50 mediciones del parámetro S_{11} en un rango de frecuencia de 0.3 a 2 GHz, una medición cada minuto, manteniendo activa la señal de microondas durante todo el tiempo de medición. Esto significa que se realizaron un total de 44 E+06 mediciones del parámetro de dispersión S_{11} dado por la siguiente fórmula:

$$N= (4 \text{ sensores} * 22 \text{ sustancias} * 50 \text{ repeticiones} * 10000 \text{ frecuencias}) = 44 \text{ E}+06.$$

La matriz del conjunto de datos medidos por cada uno de los cuatro sensores contiene los valores de cada una de las cuatro variables originales correlacionadas para ser procesada por los algoritmos de aprendizaje de máquina.

Al procesar el conjunto de datos originales a través de los algoritmos de aprendizaje de máquina se evaluaron con un conjunto de prueba del 30%, esto es, se sometió a evaluación una tercera parte del conjunto total de datos para determinar su selectividad.

Las figuras 46-49 muestran las matrices de confusión para el análisis de los datos con los algoritmos de aprendizaje de Naive Bayes, KNN, máquina de vectores de soporte (SVM) y Árbol de decisiones. Como se muestra en los segmentos de la matriz, se observa la gran exactitud que hay para los algoritmos de Naive Bayes, KNN y Árbol de decisiones. Por otro lado, el algoritmo de SVM presenta una exactitud de solo el 62.12% de predicciones correctas.

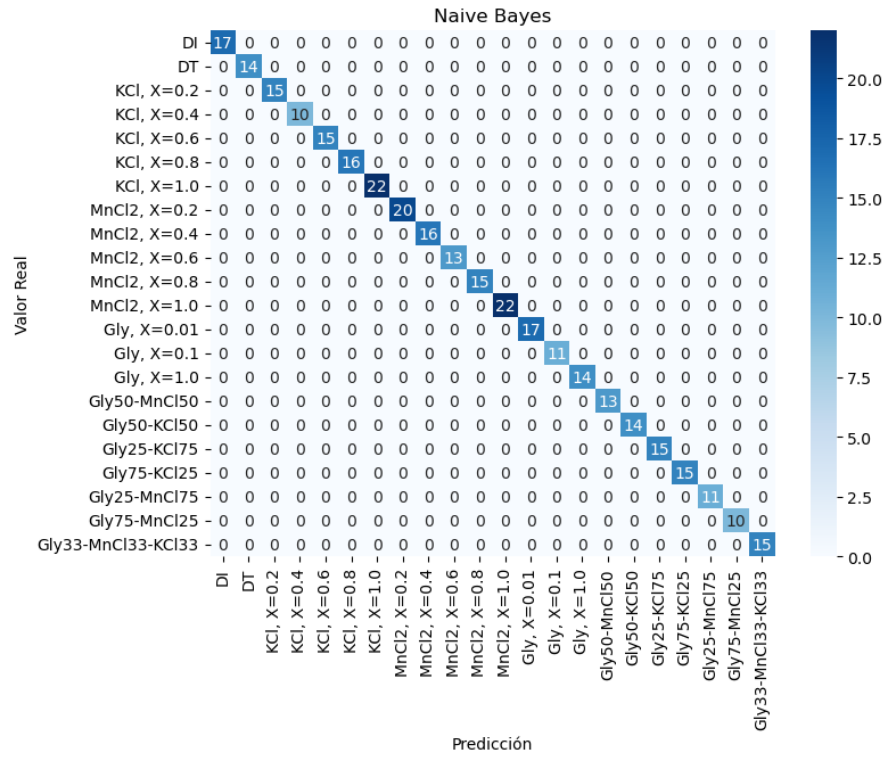


Figura 46.- Matriz de confusión para el algoritmo Naive Bayes.

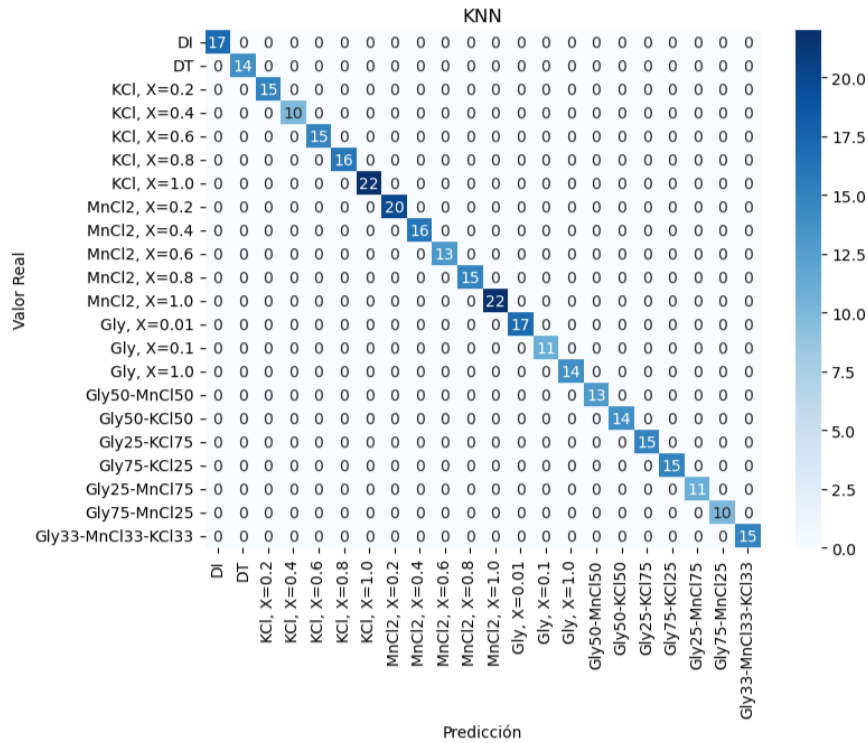


Figura 47.- Matriz de confusión para el algoritmo KNN.

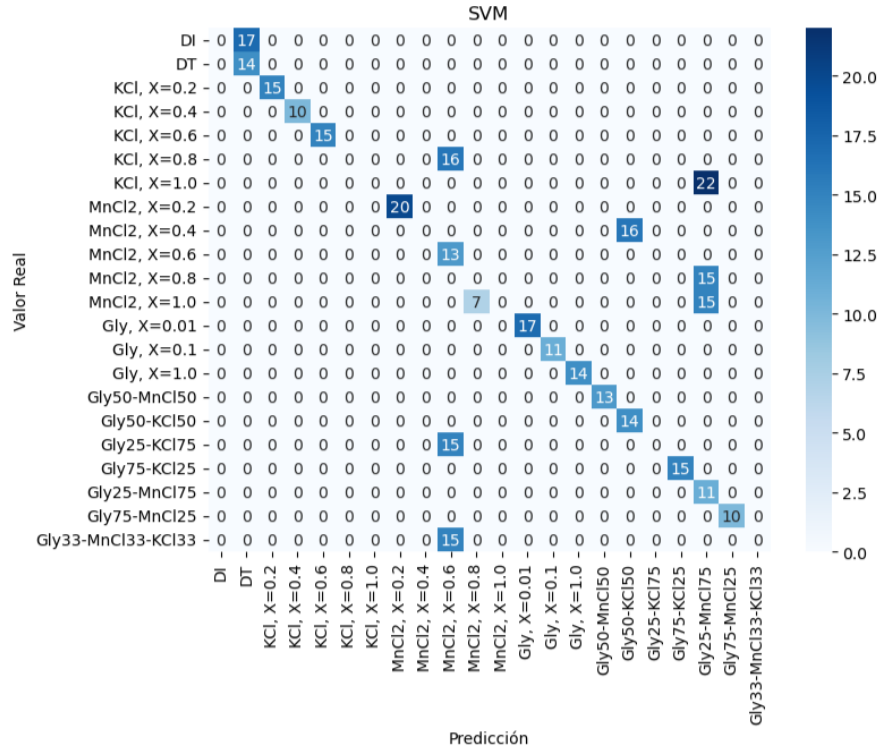


Figura 48.- Matriz de confusión para el algoritmo SVM.

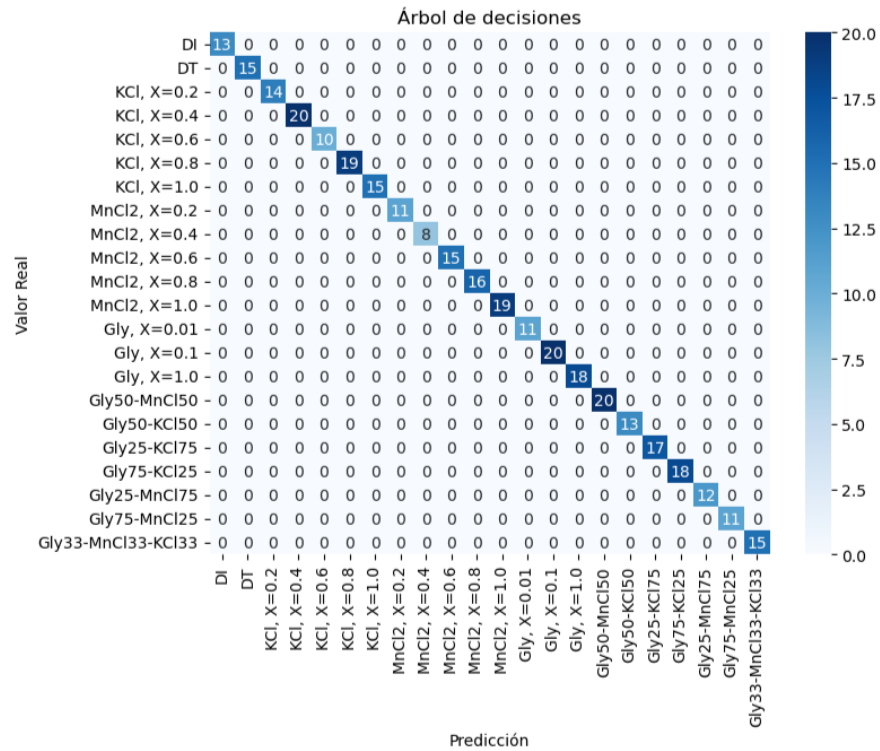


Figura 49.- Matriz de confusión para el algoritmo Árbol de decisiones.

La tabla 4 muestra los valores calculados para terminar el mejor algoritmo para la selectividad. Como se observa, los valores del análisis presentan que los mejores algoritmos para la selectividad son Naive Bayes y KNN, destacando el primero debido a que la suma del tiempo de entrenamiento y tiempo de predicción son menores durando solo de 1.59923E-02 s, a diferencia de algoritmo de KNN que dura un tiempo total de 4.19779E-02 s.

Tabla 4.- Comparación entre algoritmos de aprendizaje de máquina.

Modelo	Exactitud	Precisión	Recall o sensibilidad	F1 Score	Tiempo de entrenamiento	Tiempo de predicción
Naive Bayes	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0995E-02s	4.9973e-03s
KNN	1.0	1.0	1.0	1.0	7.0019e-03s	3.4976e-02s
SVM	0.6212	0.8737	0.6212	0.53	6.2967e-02s	8.9953e-03s
Árbol de decisiones	0.997	0.9971	0.997	0.997	5.0025e-03s	9.9611e-04s

6. Conclusiones

Este trabajo permitió demostrar tanto de manera teórica como experimental el efecto del sustrato en el desarrollo de sensores de microondas interdigitados aplicados para la detección de analitos contaminantes en líquidos. Gracias al desarrollo de este sistema, desde el diseño, simulación, fabricación y caracterización de los dispositivos, se obtienen las siguientes conclusiones:

Se comprobó en la simulación, que la permitividad dieléctrica del sustrato tiene un impacto directo con la intensidad del campo eléctrico generado por el sensor interdigitado. Se demuestra que el sensor fabricado sobre el sustrato de PTFE ($\epsilon_r=2.0$) presenta mayor intensidad del campo eléctrico en la zona de interacción con el analito bajo prueba en comparación con el sensor con sustrato de poliimida ($\epsilon_r=3.4$), lo que representa una mayor sensibilidad para la detección de contaminantes.

El criterio de máxima transferencia de potencia permitió establecer la geometría de los sensores interdigitados, logrando un acoplamiento de impedancias ($\approx 50 \Omega$) con el analizador de redes vectorial. Se determinó que la modificación de los parámetros de: número de dígitos, ancho, separación de barras, en otros, influyen en la impedancia y por tanto la respuesta del sensor.

La fabricación y geometría de los sensores se confirmaron mediante las técnicas de caracterización de microscopia óptica, FTIR, LIBS y tomografía de rayos X, resultando geometrías bien definidas, composición predominante de cobre en las líneas conductoras con una cantidad de oxígeno despreciable.

La fabricación de un conjunto de datos del parámetro de dispersión, en particular el parámetro de reflexión S11, que fue generado a través de la caracterización electromagnética de 22 analitos en diferentes concentraciones, fue clave para el entrenamiento y análisis de modelos de aprendizaje de máquina.

Los sensores interdigitados en sustratos de poliimida y PTFE en conjunto con los algoritmos de aprendizaje de máquina, demostraron ser una herramienta muy eficaz para mejorar la selectividad en la clasificación de analitos contaminantes.

El modelo de Naive Bayes y el KNN alcanzaron una exactitud de 100%, demostrando que los patrones electromagnéticos generados por los sensores interdigitados contienen información suficiente para diferenciar de manera precisa

entre distintos analitos. Por otro lado, el modelo SVM presento un desempeño inferior, lo que se puede atribuir a la naturaleza de los datos que no favorece a este tipo de modelos.

Los resultados obtenidos permiten validar la hipótesis, demostrando que la sensibilidad de los sensores de microondas interdigitados depende de las propiedades dieléctricas del sustrato usado. Por otro lado, se compró que el uso de algoritmos de aprendizaje de maquina aumenta la selectividad del sistema al permitir la clasificación de los diferentes tipos de analitos a partir de los patrones electromagnéticos.

Este trabajo permite establecer una metodología integral que consta de la combinación de simulación, diseño, fabricación mediante litografía de escritura directa por láser, caracterización experimental y procesamiento de datos por aprendizaje de máquina, proporcionando resultados de que la selección del sustrato es un parámetro critico en el diseño de los sensores de microondas interdigitados.

Los resultados permiten colocar a este tipo de sistema como una alternativa confiable para el desarrollo de tecnologías para monitoreo de analitos contaminantes.

7. Bibliografía

- [1] O. Korostynska, A. Mason, and A. I. Al-Shamma'a, "Flexible microwave sensors for real-time analysis of water contaminants," *Journal of Electromagnetic Waves and Applications*, vol. 27, no. 16, pp. 2075-2089, (2013).
- [2] J. S. Noori, M. Dimaki, J. Mortensen, and W. E. Svendsen, "Detection of glyphosate in drinking water: A fast and direct detection method without sample pretreatment," *Sensors*, vol. 18, no. 9, p. 2961, (2018).
- [3] A. Valle, F. Mello, R. Alves-Balvedi, L. Rodrigues, and L. Goulart, "Glyphosate detection: methods, needs and challenges," *Environmental chemistry letters*, vol. 17, pp. 291-317, (2018).
- [4] A. Lasserre, L. Grzelak, J. Rossignol, O. Brousse, D. Stuerger, and M. Paindavoine, "From microwave gas sensor conditioning to ammonia concentration prediction by machine learning," *Sensors and Actuators B: Chemical*, vol. 367, p. 132138, (2022).
- [5] O. Malyuskin "Microplastic detection in soil and water using resonance microwave spectroscopy: A feasibility study," *IEEE Sensors Journal*, vol. 20, no. 24, pp. 14817-14826, (2020).
- [6] O. Mohammadi, A. V. Nadaraja, D. J. Roberts, and M. H. Zarifi, "Real-time and hazard-free water quality monitoring based on microwave planar resonator sensor," *Sens. Actuators A Phys.*, vol. 303, (2020).
- [7] C. Wang, Wang, Cong Ali, Luqman Meng, Fan-Yi Adhikari, Kishor Kumar Zhou, Zhong Liang Wei, Yu Chen Zou, Dan Qing Yu, "High-accuracy complex permittivity characterization of solid materials using parallel interdigital capacitor-based planar microwave sensor," *IEEE Sensors Journal*, vol. 21, no. 5, pp. 6083-6093, (2020).
- [8] K. Chetpattananondh, T. Tapoanoi, P. Phukpattaranont, and N. Jindapetch, "A self-calibration water level measurement using an interdigital capacitive sensor," *Sensors and Actuators A: Physical*, vol. 209, pp. 175-182, (2014).
- [9] A. V. Mamishev, K. Sundara-Rajan, F. Yang, Y. Du, and M. Zahn, "Interdigital sensors and transducers," *Proceedings of the IEEE*, vol. 92, no. 5, pp. 808-845, (2004).
- [10] Y. Sheiretov and M. Zahn, "Dielectrometry measurements of moisture dynamics in oil-impregnated pressboard," *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation*, vol. 2, no. 3, pp. 329-351, (1994).
- [11] A. R. Francisco J. Romero, Alfonso Salinas-Castillo, Akiko Ohata, Diego P. Morales, Markus Becherer, Noel Rodriguez, "Design, fabrication and characterization of capacitive humidity sensors based on emerging flexible technologies," *Sensors and Actuators B: Chemical*, vol. 287, pp. 459-467, (2019).
- [12] A. Dizon and M. E. Orazem, "On the impedance response of interdigitated electrodes," *Electrochimica Acta*, vol. 327, p. 135000, (2019).

- [13] A. Nag and S. C. Mukhopadhyay, "Fabrication and implementation of printed sensors for taste sensing applications," *Sensors and Actuators A: Physical*, vol. 269, pp. 53-61, (2018).
- [14] O. Korostynska, A. Mason, and A. I. Al-Shamma'a, "Flexible microwave sensors for real-time analysis of water contaminants," *J. Electromagn. Waves Appl*, vol. 27, pp. 2075–2089, (2013).
- [15] V. A. M. Nguyen Van Quy, Nguyen Van Luan, Vu Ngoc Hung, Nguyen Van Hieu, "Gas sensing properties at room temperature of a quartz crystal microbalance coated with ZnO nanorods," *Sensors and Actuators B: Chemical*, vol. 153, no. 188-193, (2011).
- [16] T. Islam and S. C. Mukhopadhyay, "Wearable sensors for physiological parameters measurement: physics, characteristics, design and applications," in *Wearable sensors: applications, design and implementation*: IOP Publishing Bristol, UK, (2017), pp. 1-1-1-31.
- [17] S. Yamada, M. Katou, M. Iwahara, and F. Dawson, "Eddy current testing probe composed of planar coils," *IEEE Transactions on Magnetics*, vol. 31, no. 6, pp. 3185-3187, (1995).
- [18] S. Yamada, H. Fujiki, M. Iwahara, S. Mukhopadhyay, and F. P. Dawson, "Investigation of printed wiring board testing by using planar coil type ECT probe," *IEEE Transactions on Magnetics*, vol. 33, no. 5, pp. 3376-3378, (1997).
- [19] S. Mukhopadhyay, C. Gooneratne, G. S. Gupta, and S. Yamada, "Characterization and comparative evaluation of novel planar electromagnetic sensors," *IEEE Transactions on Magnetics*, vol. 41, no. 10, pp. 3658-3660, (2005).
- [20] S. C. Mukhopadhyay and C. P. Gooneratne, "A novel planar-type biosensor for noninvasive meat inspection," *IEEE Sensors Journal*, vol. 7, no. 9, pp. 1340-1346, (2007).
- [21] A. Syaifudin, K. Jayasundera, and S. Mukhopadhyay, "Initial investigation of using planar interdigital sensors for assessment of quality in seafood," *Journal of Sensors*, vol. 2008, (2008).
- [22] A. Mohd Syaifudin, S. Mukhopadhyay, and P. Yu, "Modelling and fabrication of optimum structure of novel interdigital sensors for food inspection," *International Journal of Numerical Modelling: Electronic Networks, Devices and Fields*, vol. 25, no. 1, pp. 64-81, (2011).
- [23] M. M. Yunus and S. Mukhopadhyay, "Development of planar electromagnetic sensors for measurement and monitoring of environmental parameters," *Measurement Science and Technology*, vol. 22, no. 2, p. 025107, (2011).
- [24] M. S. A. Rahman, Mohd Syaifudin Abdul, Mukhopadhyay, Subhas Chandra, Yu, Pak-Lam, Goicoechea Javier, Matias Ignacio R, Gooneratne Chinthaka, P Kosel Jürgen, "Detection of bacterial endotoxin in food: New planar interdigital sensors based approach," *Journal of Food Engineering*, vol. 114, no. 3, pp. 346-360, (2013).
- [25] Asif I, Rahman Mohd, Syaifudin Abdul Mukhopadhyay, Subhas Chandra, Yu Pak-Lam, Al-Bahadly Ibrahim H, Gooneratne Chinthaka P., Kosel Jürgen, Liao Tai-Shan, "Technique for rapid detection of phthalates in water and

- beverages," *Journal of Food Engineering*, vol. 116, no. 2, pp. 515-523, (2013).
- [26] C.-F. Hu, J.-Y. Wang, Y.-C. Liu, M.-H. Tsai, and W. Fang, "Development of 3D carbon nanotube interdigitated finger electrodes on polymer substrate for flexible capacitive sensor application," *Nanotechnology*, vol. 24, no. 44, p. 444006, (2013).
 - [27] A. Nag, A. I. Zia, X. Li, S. C. Mukhopadhyay, and J. Kosel, "Novel sensing approach for LPG leakage detection: Part I—Operating mechanism and preliminary results," *IEEE Sensors journal*, vol. 16, no. 4, pp. 996-1003, (2015).
 - [28] A. Nag, A. I. Zia, X. Li, S. C. Mukhopadhyay, and J. Kosel, "Novel sensing approach for LPG leakage detection—Part II: Effects of particle size, composition, and coating layer thickness," *IEEE Sensors Journal*, vol. 16, no. 4, pp. 1088-1094, (2015).
 - [29] S. Cashman, O. Korostynska, A. Shaw, P. Lisboa, and A. Mason, "Detection of glyphosate in deionised water using machine learning techniques with microwave spectroscopy," in *2017 IEEE First Ukraine Conference on Electrical and Computer Engineering (UKRCON)*, 2017: IEEE, pp. 253-256.
 - [30] A. Nag, *Simorangkir Roy BVB, Valentin Elizabeth, Björninen Toni, Ukkonen Leena, Hashmi Raheel M, Mukhopadhyay Subhas Chandra*, "A transparent strain sensor based on PDMS-embedded conductive fabric for wearable sensing applications," *IEEE Access*, vol. 6, pp. 71020-71027, (2018).
 - [31] A. M. Khalaf, J. L. Ramírez, S. A. Mohamed, and H. H. Issa, "Highly sensitive interdigitated thermistor based on PEDOT: PSS for human body temperature monitoring," *Flexible and Printed Electronics*, vol. 7, no. 4, p. 045012, (2022).
 - [32] A. K. Verma, *Introduction to modern planar transmission lines: physical, analytical, and circuit models approach*. John Wiley & Sons,(2021).
 - [33] R. Igreja and C. Dias, "Analytical evaluation of the interdigital electrodes capacitance for a multi-layered structure," *Sensors and Actuators A: Physical*, vol. 112, no. 2-3, pp. 291-301, (2004).
 - [34] R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands, "The Feynman lectures in physics, mainly electromagnetism and matter, vol," II Redwood City: Addison Wesley.[Google Scholar], (1963).
 - [35] V. G. Gude, P. Patil, E. Martinez-Guerra, S. Deng, and N. Nirmalakhandan, "Microwave energy potential for biodiesel production," *Sustainable Chemical Processes*, vol. 1, pp. 1-31, (2013).
 - [36] M. Jaroszewski, S. Thomas, and A. V. Rane, "Advanced Materials for Electromagnetic Shielding."
 - [37] R. J. Collier and A. D. Skinner, *Microwave measurements*. IET,(2007).
 - [38] S. Ramo, J. R. Whinnery, and T. Van Duzer, *Fields and waves in communication electronics*. John Wiley & Sons,(1994).
 - [39] J. Z. Chen, A. A. Darhuber, S. M. Troian, and S. Wagner, "Capacitive sensing of droplets for microfluidic devices based on thermocapillary actuation," *Lab on a Chip*, vol. 4, no. 5, pp. 473-480, (2004).
 - [40] T. S. Laverghetta, *Microwaves and wireless simplified*.(2005).
 - [41] V. Raicu and Y. Feldman, *Dielectric relaxation in biological systems: Physical principles, methods, and applications*. Academic,(2015).

- [42] L. Ruo-Zhou , J. Junhui , L. Leilei , W. Zheyuan, and D. Daye "A high-sensitive microwave humidity sensor based on one-step laser direct writing of dielectric silver nanoplates," *Sensors and Actuators B: Chemical*, vol. 370, (2022).
- [43] S. Kalpakjian and S. R. Schmid, *Manufactura, ingeniería y tecnología*. Pearson educación,(2002).
- [44] B. S. Yilbas, A. Al-Sharafi, and H. Ali, *Self-cleaning of surfaces and water droplet mobility*. Elsevier,(2019).
- [45] D. M. O. L. Company, "Microwriter ML3 Pro." [Online]. Available: <https://www.durhammagnetooptics.com/>
- [46] G. González Mancera and M. E. Noguez Amaya, *Principios de microscopía electrónica de barrido y microanálisis por rayos X característicos*. Universidad Nacional Autónoma de México,(2006).
- [47] D. M. Pozar, *Microwave engineering*. John wiley & sons,(2011).
- [48] S. C. Mukhopadhyay, B. George, J. K. Roy, and T. Islam, *Interdigital Sensors: Progress Over the Last Two Decades*. Springer Nature,(2021), vol. 36, p. 10.
- [49] S. Dubrovskiy and K. Gareev, "Measurement method for detecting magnetic and dielectric properties of composite materials at microwave frequencies," in *2015 IEEE NW Russia Young Researchers in Electrical and Electronic Engineering Conference (EIConRusNW)*, 2015: IEEE, pp. 24-26.
- [50] J. Grus, *Data science from scratch: first principles with python*. O'Reilly Media,(2019).
- [51] A. Müller and S. A. Guido, "Introduction to Machine Learning with Python. O'Reilly Media," (2016).
- [52] A. Géron, *Hands-on machine learning with Scikit-Learn, Keras, and TensorFlow*. " O'Reilly Media, Inc.",(2022).
- [53] T. Wahyuningsih, D. Manongga, I. Sembiring, and S. Wijono, "Comparison of effectiveness of logistic regression, naive bayes, and random forest algorithms in predicting student arguments," *Procedia Computer Science*, vol. 234, pp. 349-356, (2024).
- [54] G. Bradski and A. Kaehler, *Learning OpenCV: Computer vision with the OpenCV library*. " O'Reilly Media, Inc.",(2008).
- [55] W. Zhou, H. Liu, R. Zhou, J. Li, and S. Ahmadi, "An optimal method for diagnosing heart disease using combination of grasshopper evolutionary algorithm and support vector machines," *Heliyon*, vol. 10, no. 9, (2024).
- [56] I. H. Witten and E. Frank, "Data mining: practical machine learning tools and techniques with Java implementations," *Acm Sigmod Record*, vol. 31, no. 1, pp. 76-77, (2002).
- [57] D. Valero-Carreras, J. Alcaraz, and M. Landete, "Comparing two SVM models through different metrics based on the confusion matrix," *Computers & Operations Research*, vol. 152, p. 106131, (2023).