

Кобилянський Р.Р., канд. фіз.-мат. наук^{1,2}

Лисько В.В., канд. фіз.-мат. наук^{1,2}

Бойчук В.В.^{1,2}

¹Інститут термоелектрики НАН та МОН України,

вул. Науки, 1, Чернівці, 58029, Україна;

e-mail: anatysh@gmail.com

²Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича,

вул. Коцюбинського 2, Чернівці, 58012, Україна

КОМП'ЮТЕРНЕ ПРОЕКТУВАННЯ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНИХ МІКРОКАЛОРИМЕТРИЧНИХ СЕНСОРІВ

У роботі виконано проектування і розробку термоелектричних мікрокалориметричних сенсорів для використання в малопотужних реакційних камерах. Досліджено фізичні та математичні аспекти чутливості та швидкодії сенсорів, виготовлених з напівпровідникового матеріалу Ві-Те і металевих віток на основі мідь-константану при відповідних геометричних розміщеннях віток. У роботі представлено алгоритм комп'ютерного проектування, зображений у вигляді блок-схеми, а також продемонстровано розробку програми для автоматизації процесу проектування, з подальшою імплементацією програмного забезпечення. Представлено практичні приклади розробки та аналізу розрахованих параметрів для двох типів сенсорів, щоб виявити їхні переваги у вимірюванні малих теплових потужностей та швидкоплинних процесів відповідно.

Ключові слова: мікрокалориметрія, термоелектричні мікрокалориметричні сенсори, комп'ютерне проектування сенсорів, програмне забезпечення.

Вступ

Вимірювання та керування мікроскопічними тепловими потужностями у таких галузях як мікрокалориметрія, біохімія, фармація та технологічні дослідження займають важливе місце при розробці новітніх технологій та продуктів [1–3]. У цьому контексті точність і чутливість термоелектричних сенсорів [4–29] відіграють ключову роль у моніторингу та контролі процесів у реакційних камерах мікрокалориметрів [30–38]. Розробка подібних сенсорів вимагає інноваційних підходів до вибору матеріалів, розрахунку геометричних параметрів та інтеграції з програмним забезпеченням для автоматизації процесу проектування та оптимізації їхньої працездатності.

Існуючі виклики включають не лише вибір оптимальних матеріалів і конструкцій, але й необхідність розробки програмного забезпечення, яке автоматизує процеси розрахунку та вивчення характеристик сенсорів. Це забезпечить вищу точність і операційну ефективність при мінімальних теплових потужностях, а також зможе прискорити процес адаптації до специфічних умов використання. Потреба в розвитку мікрокалориметричних сенсорів є дуже актуальною для

галузей, де мікроскопічні зміни температури можуть мати значні наслідки для якості та безпеки продукції [1–29].

Метою даної роботи є розробка програмного забезпечення для автоматизації процесу комп'ютерного проектування високочутливих термоелектричних мікрокалориметричних сенсорів. Це, у свою чергу, покращить функціональні можливості таких сенсорів шляхом впровадження авангардних алгоритмів та комп'ютерного моделювання, що забезпечить значний прогрес у точності вимірювань і швидкодії таких пристроїв.

1. Задача проектування термоелектричних сенсорів для мікрокалориметрів

Для постановки задачі проектування термоелектричних сенсорів для мікрокалориметрів розглянемо їх роботу в ізотермічних мікрокалориметрах [30–38].

У загальному ізотермічний мікрокалориметр показано на рис.1.

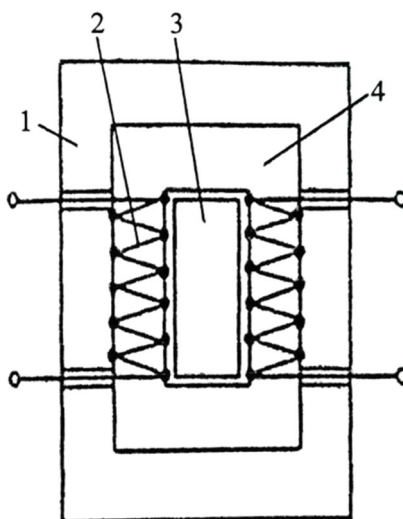


Рис. 1. Ізотермічний мікрокалориметр: 1 – термостатуючий блок; 2 – сенсор;
3 – реакційна камера; 4 – середовище між термостатуючим блоком і реакційною камерою.

Досліджувані об'єкти поміщаються у реакційну камеру 3. Для уникнення обміну тепла з навколишнім середовищем використовують термостатуючий блок 1. Між реакційною камерою і термостатуючим блоком розміщені вимірювальні сенсори 2.

Теплопровідність середовища 4 між реакційною камерою і термостатом має бути досить велика. Тоді тепло не акумулюється в мікрокалориметрі, а переходить до термостатуючого блоку і в ньому розсіюється. Різниця температур при цьому між реакційною камерою і термостатом дуже мала.

Як було встановлено вище, досконалим інструментом для вимірювання потоків тепла є термоелектричні сенсори. Будемо розглядати термоелектричні металеві та напівпровідникові сенсори з розміщенням віток термоелементів зіркою і радіально.

Робота термоелектричних сенсорів характеризується їх основними параметрами, зокрема: чутливість, швидкодія, опір сенсора, кількість віток термоелементів у сенсорі.

При проектуванні термоелектричних сенсорів важливо визначити чутливість та їх швидкодію. Так, наприклад, якщо при проведенні мікрокалориметричних вимірів теплові процеси в реакційній камері відбуваються швидко, то важливо, щоб швидкодія мікрокалориметричних

сенсорів була великою. У випадку, коли в реакційній камері виділяються малі теплові потужності – необхідні високочутливі сенсори.

Встановимо залежність чутливості та швидкодії термоелектричних сенсорів від фізичних властивостей та розмірів матеріалів, з яких вони виготовлені.

Чутливість термоелектричного сенсора визначається за формулою:

$$\gamma = \frac{\alpha}{\chi} \cdot \frac{L}{S} \quad (1)$$

Швидкодія характеризується постійною часу, яка визначається:

$$\tau = \frac{c}{\chi} \cdot \frac{L}{S} \cdot \frac{1}{n} \quad (2)$$

де α – коефіцієнт термоЕРС; χ – теплопровідність; c – теплоємність, теплоємність віток термоелементів відповідно; n – кількість віток термоелементів; L , S – довжина та площа поперечного перерізу вітки термоелементу.

Як відомо метали, з яких виготовляють термодіодні сенсори, мають теплопровідність більшу за теплопровідність напівпровідників. Тому, як видно з формули (1), термоелектричний напівпровідниковий сенсор є високочутливим порівняно з металевим, при умові рівності геометричних розмірів їх віток.

Але відношення $\frac{c}{\chi}$ у металів значно менше, ніж у провідників, тому з формули (2) видно, що при рівності геометричних розмірів віток металевих і напівпровідникових сенсорів, швидкодія металевих сенсорів більша напівпровідникових.

З вище встановленої залежності чутливості і швидкодії від фізичних властивостей матеріалів слідує, що для мікрокалориметричних вимірювань теплових процесів з підвищеною швидкістю треба використовувати металеві термоелектричні сенсори, а при вимірюванні теплових процесів виділення понижених теплових потужностей – напівпровідникові.

Може статися, що високочутливі напівпровідникові сенсори, можуть мати швидкодію меншу, ніж потрібно для деякого швидкоплинного теплового процесу в реакційній камері. Навпаки, металеві сенсори з великою швидкодією не виявляють процеси з виділенням малої теплової потужності.

Крім фізичних властивостей матеріалів, з яких виготовляються термоелектричні сенсори, на значення їх чутливості та швидкодії впливають також геометричні розміри віток термоелементів. З формул (1) і (2) слідує, що на чутливість і швидкодію впливає довжина віток термоелементів L . При збільшенні L чутливість сенсорів зростає, але швидкодія зменшується.

Така залежність приводить до питання: якою має бути довжина віток термоелементів для того, щоб параметри термоелектричного сенсора були оптимальними?

Важливим параметром термоелектричного сенсора є його опір. Для узгодження роботи мікрокалориметричних сенсорів з електричними вимірювальними приладами, ввімкненими в їхнє електричне коло, необхідно підібрати опір сенсора близький опору вимірювального приладу.

Таким чином, задача проектування термоелектричних сенсорів для мікрокалориметрів зводиться до знаходження оптимальних значень наступних параметрів:

- кількість віток термодіодної конструкції термоелектричної батареї,
- опір сенсора,
- довжина віток термоелементів, при якій значення параметрів термоелектричного сенсора будуть оптимальними.

Для рішення даної задачі, перш за все, необхідно задати робочий діапазон вимірювальних потужностей у реакційній камері. В залежності від цього діапазону можна вибрати конструкцію термоелектричного сенсора.

Для даної конструкції сенсора необхідно задати наступні параметри:

- висота реакційної камери мікрокалориметра;
- діаметр реакційної камери мікрокалориметра;
- площа поперечного перерізу вітки термоелемента;
- геометрія розташування віток (відстань або кут між вітками термоелементів);
- відстань між батареями;
- фізичні властивості матеріалу, з якого виготовлені вітки;
- значення термоЕРС;
- теплоємність;
- теплопровідність;
- електропровідність,

а також рівняння, які пов'язують ці дані з параметрами термоелектричних сенсорів.

Знаючи висоту та діаметр реакційної камери, а також геометричні розміри віток термоелементів, їх розташування можна визначити щільність розташування віток навколо реакційної камери (щільність упаковки).

Оскільки опір сенсора складається з опорів всіх віток термоелементів, тоді необхідно знати кількість віток у сенсорі. Щільність упаковки віток термоелементів, як видно з формули (2), також впливає на значення швидкодії.

2. Розрахунок основних параметрів термоелектричних мікрокалориметричних сенсорів

Параметри, які необхідно визначити, можна обчислити наступним чином:

1) За означенням вольтватна чутливість – це відношення ЕРС мікрокалориметричного сенсора E до теплової потужності W , що виділяється в реакційній камері мікрокалориметра, В/Вт.

$$\gamma = \frac{E}{W} \quad (3)$$

ТермоЕРС віток термоелементів n

$$E = \alpha \Delta T n \quad (4)$$

де α – коефіцієнт термоЕРС.

Теплова потужність, що виділяється в реакційній камері мікрокалориметра:

$$W = \chi \frac{S}{L} \Delta T n \quad (5)$$

де χ – теплопровідність, S – площа поперечного перерізу вітки, L – довжина вітки.

Отже,

$$\gamma = \frac{\alpha}{\chi} \cdot \frac{L}{S} \quad (6)$$

2) Опір термоелектричної батареї R розраховується за формулою:

$$R = \frac{1}{\sigma} \cdot \frac{L}{S} \cdot n \quad (7)$$

де σ – електропровідність.

3) Швидкодія термоелектричної батареї τ :

$$\tau = \frac{c}{\chi} \cdot \frac{L}{S} \cdot \frac{1}{n} \quad (8)$$

де c – теплоємність.

4) У даній роботі розглядаються термоелектричні металеві та напівпровідникові сенсори з розміщенням термоелементів зіркою та радіально. Кількість віток термоелементів n для конструкції розраховується індивідуально.

Розрахуємо щільність упаковки металевого (термопарного) термоелектричного сенсора з радіальним розміщенням віток (рис. 2 і рис. 3).

На рис 2 показано вигляд зверху даного сенсора. Пластинки 1 з термопарами радіально розміщені навколо реакційної камери 2. Підрахуємо кількість пластинок.

$$n_1 = \frac{\pi d}{a+c} \quad (9)$$

На рис. 3 показана вимірювальна комірка з монтажем сенсора з радіальним розміщенням віток термопар. Вітки термопар в пластинці 3 з'єднані змійкою.

Кількість віток термопар n_2 , в кожній такій пластинці:

$$n_2 = \frac{h}{L \cdot \sin \frac{\varphi}{2}} \quad (10)$$

Таким чином, кількість віток термопар в такому сенсорі:

$$n = n_1 \cdot n_2 = \frac{\pi d}{a+c} \cdot \frac{h}{L \cdot \sin \frac{\varphi}{2}} \quad (11)$$

Оскільки кількість віток термопар має бути цілим числом, то при знаходженні щільності упаковки n в значеннях n_1 , і в n_2 , слід залишити тільки цілу частину.

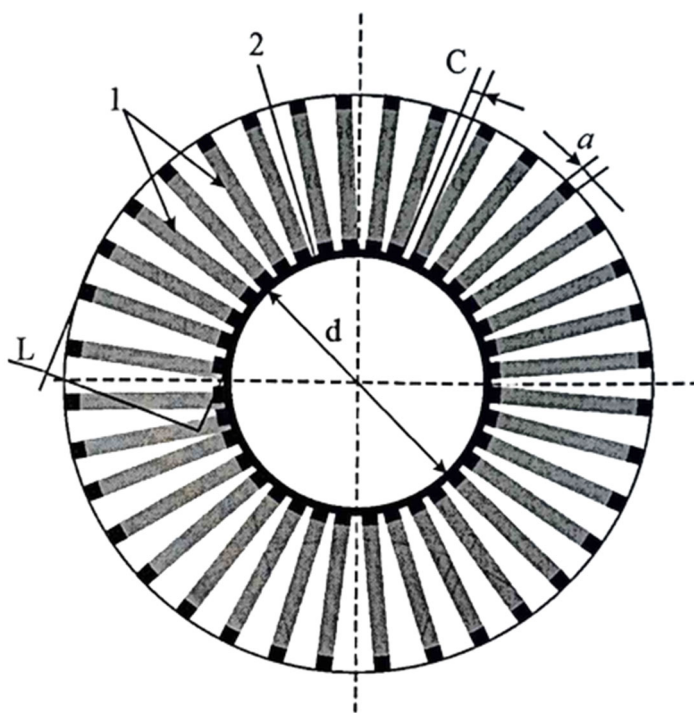


Рис. 2. Термопарний сенсор з радіальним розміщенням віток (вигляд зверху): 1 – пластинки з термопарами, 2 – реакційна камера, a – товщина вітки термопари, c – відстань між вітками з боку камери, L – ефективна довжина вітки.

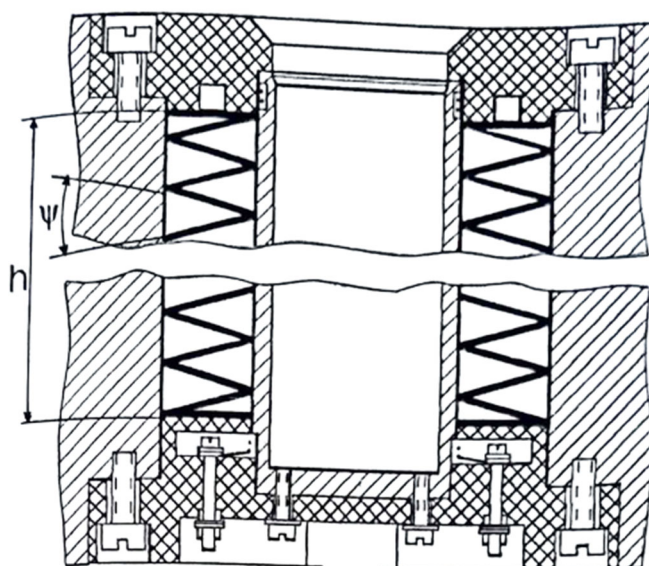


Рис. 3. Вимірювальна комірka з монтажем сенсора з радіальним розміщенням віток термопар (вигляд збоку): h – висота сенсора; ψ – кут між вітками термопар у випадку їх вертикального розміщення.

Конструкція термоелектричного металевого сенсора з розміщенням віток зіркою представлена на рис. 4 і рис. 5.

На рис. 4 показано конструкцію термоелектричного металевого сенсора з розміщенням віток зіркою (вигляд зверху).

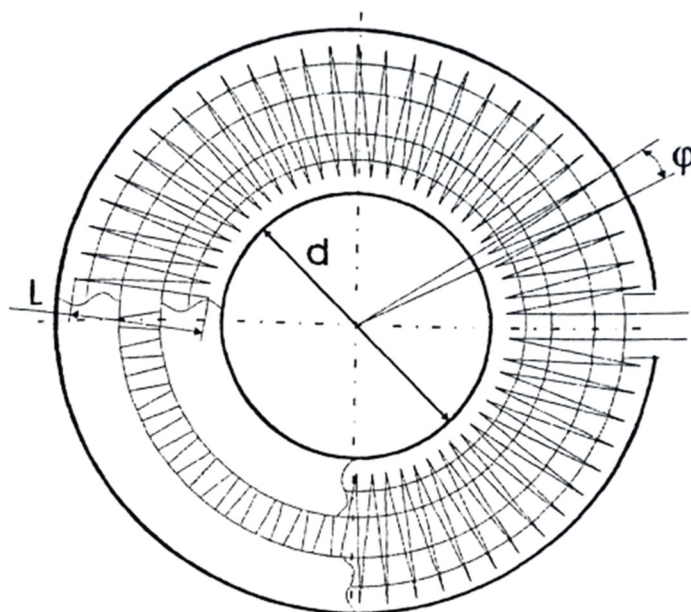


Рис. 4. Термопарний сенсор з розміщенням віток зіркою (вигляд зверху): d – діаметр камери; L – довжина вітки термопар; ϕ – кут між вітками термопар у випадку їх вертикального розміщення.

На рис. 5 показано розташування батарей вздовж висоти реакційної камери. Кількість віток термопар однієї батареї конструкції термоелектричного металевого сенсора з розміщенням віток зіркою розраховуємо за формулою:

$$n_1 = \frac{\pi d}{L \cdot \sin \frac{\psi}{2}} \quad (12)$$

Кількість батарей:

$$n_2 = \frac{h}{b+k} \quad (13)$$

Щільність упаковки такого сенсора розраховується за формулою:

$$n = \frac{\pi d}{L \cdot \sin \frac{\psi}{2}} \cdot \frac{h}{b+k} \quad (14)$$

Далі розрахуємо щільність упаковки для напівпровідникових мікрокалориметричних сенсорів з розташуванням віток напівпровідників зіркою та радіально.

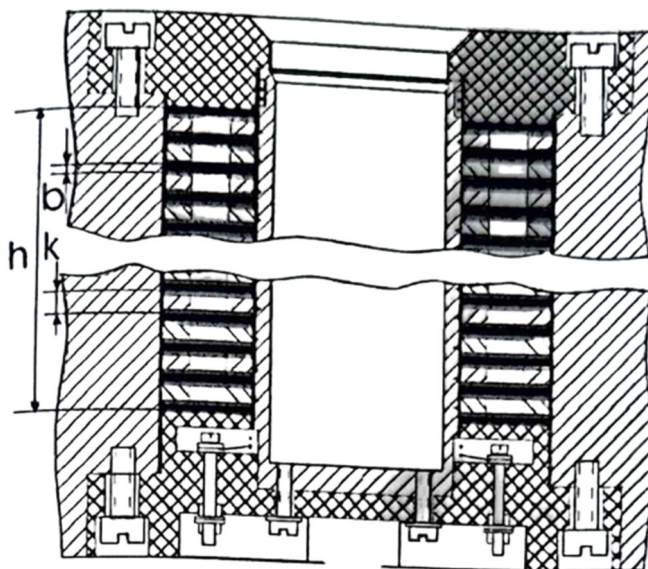


Рис. 5. Вимірвальна комірка з монтажем сенсора з розміщенням віток термопар зіркою (вид збоку): h – висота сенсора; b – товщина ізоляції; k – товщина термопар.

Конструкцію напівпровідникових сенсорів з радіальним розташуванням віток напівпровідників показано на рис. 6 і рис. 7.

Кількість батарей в такому сенсорі:

$$n_1 = \frac{\pi d}{a+c} \quad (15)$$

Кількість блоків:

$$n_2 = \frac{h}{b+k} \quad (16)$$

Щільність упаковки:

$$n = \frac{\pi d}{a+c} \cdot \frac{h}{b+k} \quad (17)$$

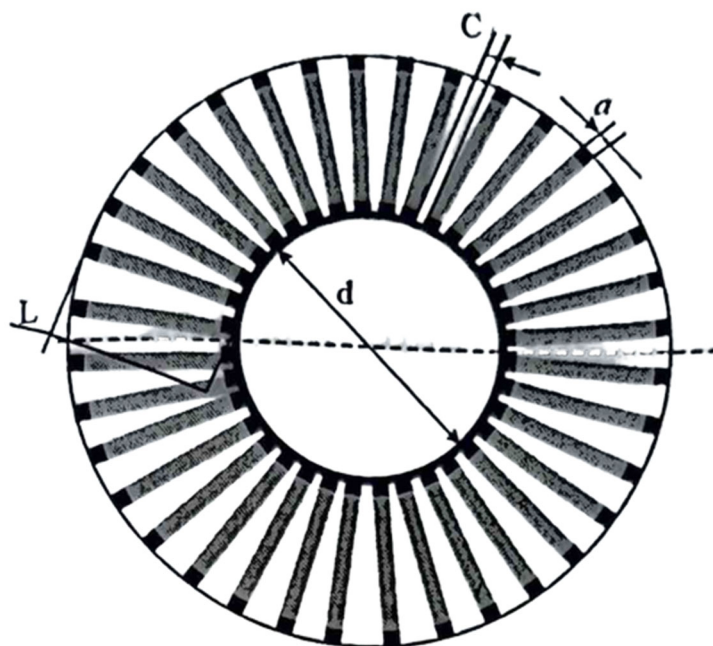


Рис. 6. Напівпровідниковий сенсор з радіальним розміщенням віток (вигляд зверху): a – товщина вітки термопар; c – відстань між вітками; L – довжина вітки.

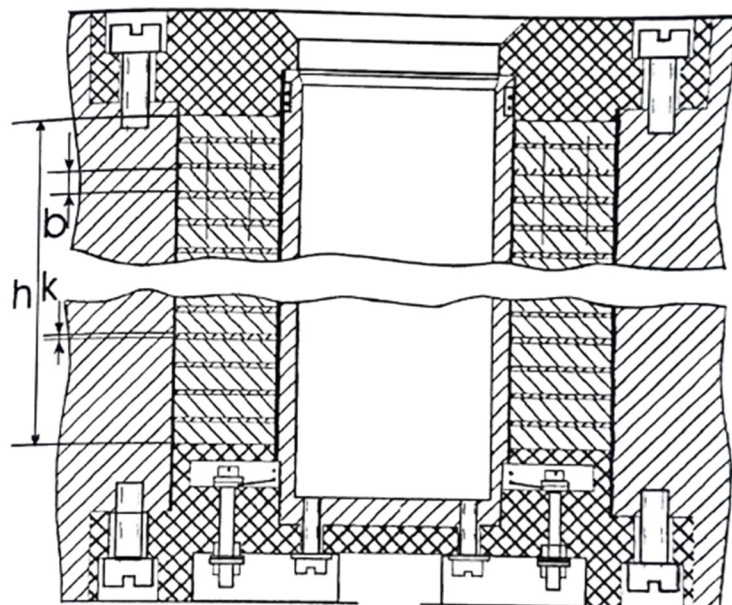


Рис. 7. Вимірювальна комірка з монтажем сенсора з радіальним розміщенням віток напівпровідників (вигляд збоку): h – висота сенсора; b – товщина ізоляції; k – товщина термопар.

Конструкцію напівпровідникових сенсорів з розташуванням віток напівпровідників зіркою показано на рис. 8 і рис. 9.

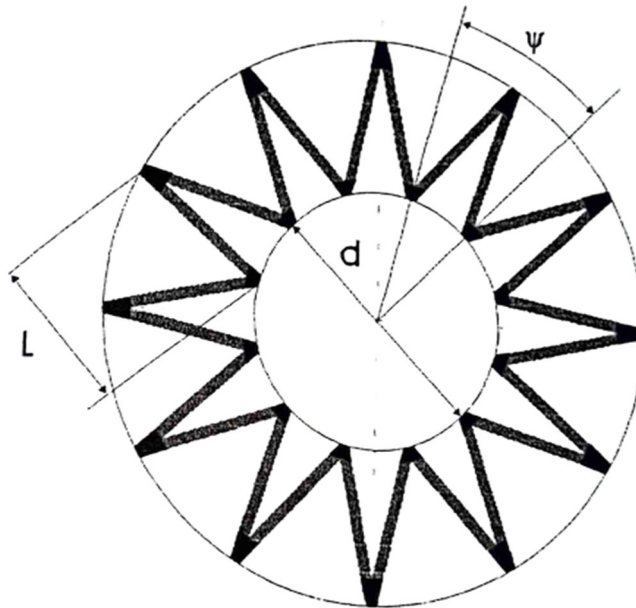


Рис. 8. Напівпровідниковий сенсор з розміщенням віток зіркою (вигляд зверху): d – діаметр камери; L – довжина вітки терморпарі; ψ – кут між вітками.

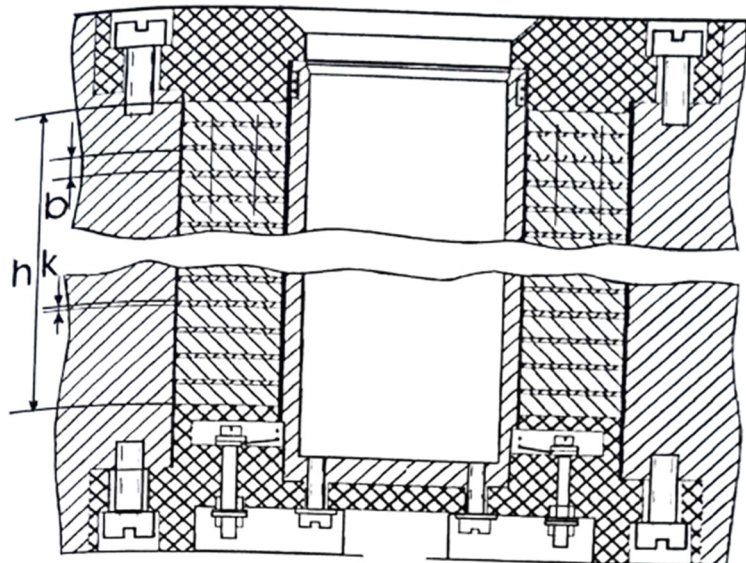


Рис. 9. Вимірювальна комірка з монтажем сенсора з розміщенням віток напівпровідників зіркою (вигляд збоку): h – висота сенсора; b – товщина ізоляції; k – товщина терморпар.

Кількість батарей в такому сенсорі:

$$n_1 = \frac{360}{\psi/2} \quad (18)$$

Кількість блоків:

$$n_2 = \frac{h}{b+k} \quad (19)$$

Щільність упаковки:

$$n = \frac{360}{\psi/2} \cdot \frac{h}{b+k} \quad (20)$$

Таким чином, в залежності від конструкції термоелектричного сенсора щільність упаковки розраховується за формулами (11), (14), (17), (20).

3. Алгоритм проектування термоелектричних мікрокалориметричних сенсорів

Алгоритм проектування термоелектричних сенсорів показано у вигляді блок-схеми на рис. 10.

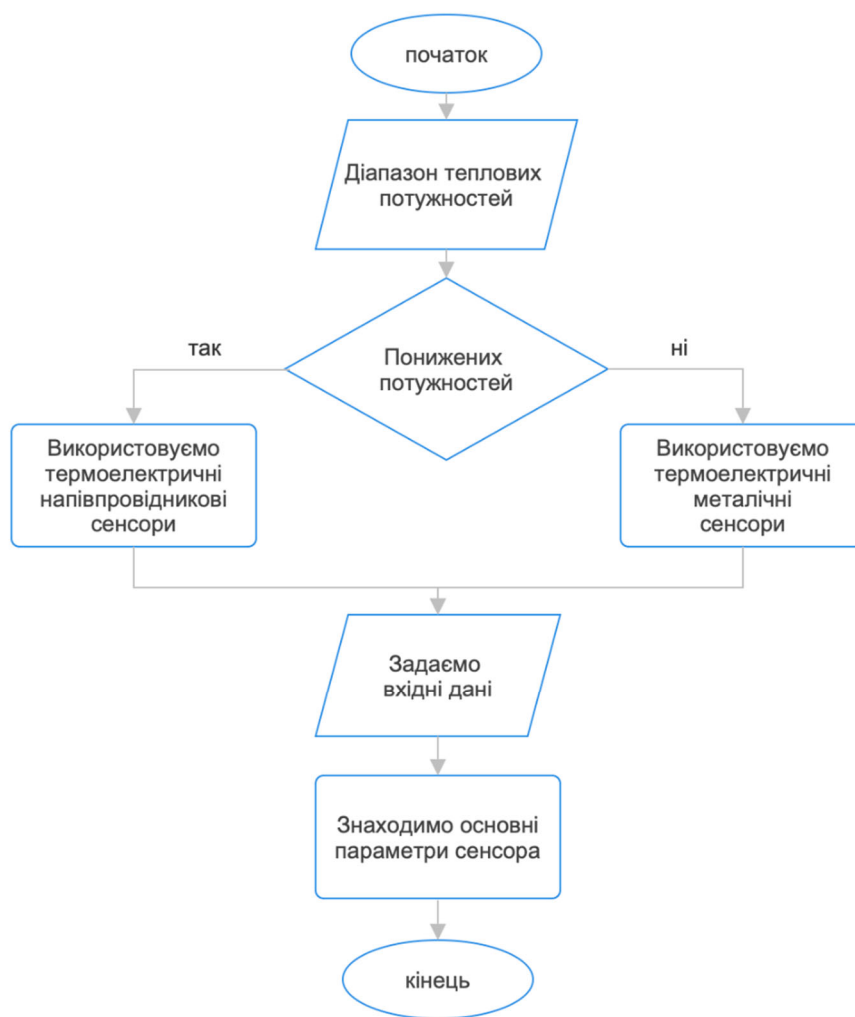


Рис. 10. Блок-схема проектування термоелектричних мікрокалориметричних сенсорів.

4. Комп'ютерне проектування термоелектричних сенсорів для мікрокалориметрів

З метою автоматизації проектування термоелектричних сенсорів для мікрокалориметрів було розроблено комп'ютерну програму. Алгоритм програми представлено на рис. 11 у вигляді блок-схеми.

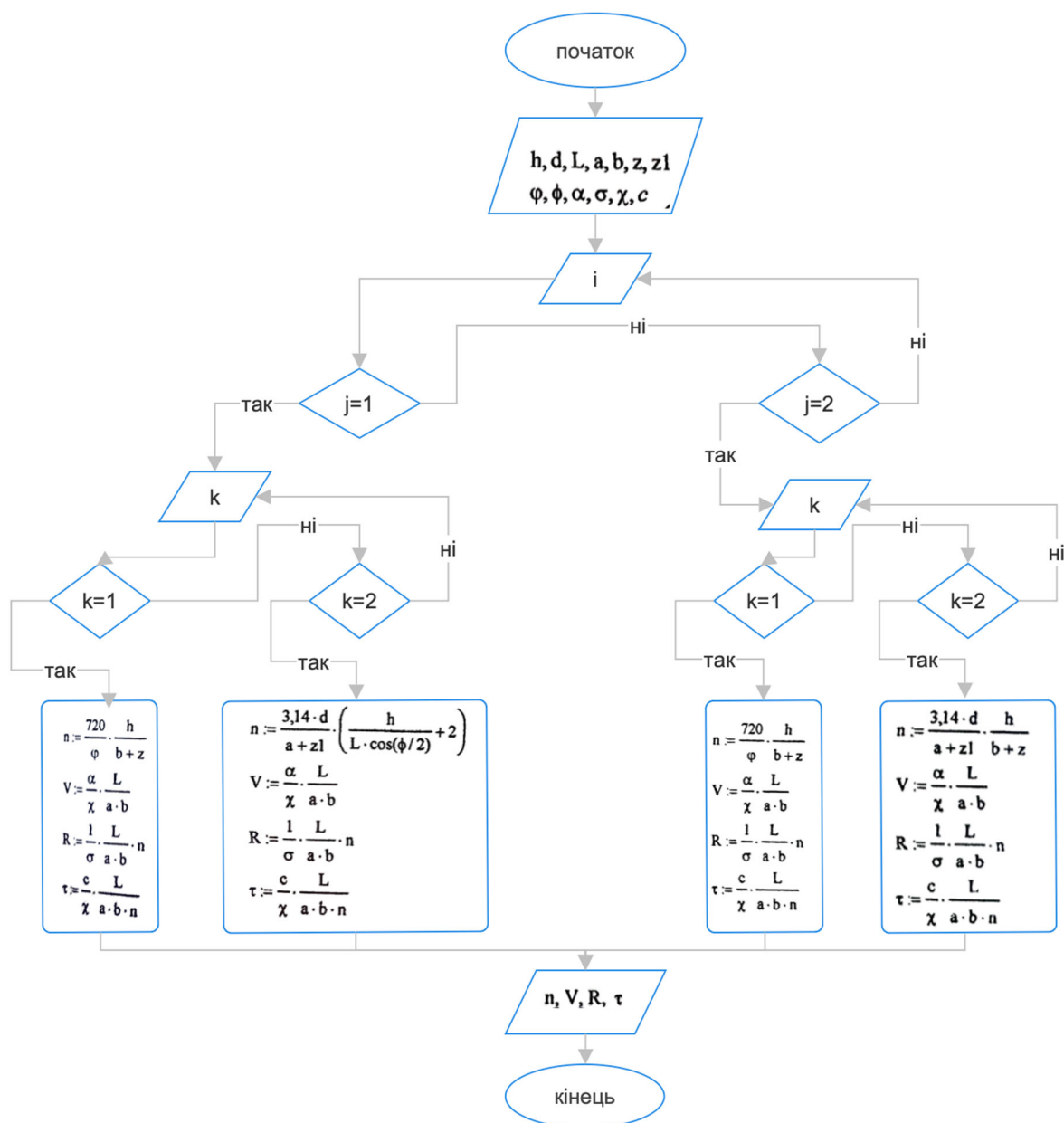


Рис. 11. Блок-схема розрахунку оптимальних значень основних параметрів термоелектричних сенсорів для мікрокалориметрів.

5. Приклади проектування термоелектричних мікрокалориметричних сенсорів

Виконаємо проектування сенсора для понижених значень теплових потужностей, що виділяються у реакційній камері, чутливість якого 25 В/Вт. Приведемо приклад розрахунку напівпровідникового мікрокалориметричного сенсора з радіальним розміщенням термоелементів, виготовленого на основі екструдованого термоелектричного матеріалу *Bi-Te*.

Вхідні дані:

- висота реакційної камери – 90 мм,
- діаметр реакційної камери – 10 мм,
- площа поперечного перерізу вітки термопарі – $0.9 \times 0.9 \text{ мм}^2$,
- відстань між батареями – 0.2 мм,

- відстань між вітками – 0.2 мм.

Фізичні властивості пари віток напівпровідників Bi_2Te_3 :

$$\alpha = 0.00018 \text{ В/К};$$

$$\sigma = 9000 \text{ м}^{-1}\text{см}^{-1};$$

$$\chi = 0.018 \frac{\text{Дж}}{\text{К} \cdot \text{см} \cdot \text{с}}$$

$$c = 0.15 \frac{\text{Дж}}{\text{К} \cdot \text{г}}$$

Розраховані параметри:

- кількість віток термоелементів – 1755,
- довжині вітки – 10 мм,
- швидкодія – 28.93 с,
- опір – 487 Ом.

Наступним розрахуємо термоелектричний металевий сенсор з чутливістю 0.25 В/Вт, вітки якого виготовлені на основі матеріалів мідь-константан.

Вхідні дані:

- висота реакційної камери – 90 мм,
- діаметр реакційної камери – 10 мм,
- площа поперечного перерізу гілки термопари – $0.9 \times 0.9 \text{ мм}^2$,
- відстань між батареями – 0.2 мм,
- кут між вітками – 10° .

Фізичні властивості пари віток напівпровідників Bi_2Te_3 :

$$\alpha = 0.00041 \text{ В/К};$$

$$\sigma = \text{м}^{-1}\text{см}^{-1};$$

$$\chi = 0.23 \frac{\text{Дж}}{\text{К} \cdot \text{см} \cdot \text{с}}$$

$$c = 0.31 \frac{\text{Дж}}{\text{К} \cdot \text{г}}$$

Розраховані параметри:

- кількість віток термоелементів – 2730,
- довжині вітки – 10 мм,
- швидкодія – 1.2 с,
- опір – 252 Ом.

На основі розрахованих параметрів для напівпровідникового мікрокалориметричного сенсора з радіальним розміщенням термоелементів, виготовлених на основі екструдованого матеріалу $Bi-Te$, а також для металевого сенсора з радіальним розміщенням віток термопар, виготовлених на основі міді-константану можна зробити висновок, що при однаковій довжині віток термоелементів чутливість напівпровідникового сенсора в 100 раз більша, ніж в металевого, але швидкодія металевого сенсора – у 23 рази більша, ніж в напівпровідникового.

Тому можна зробити висновок, що при вимірюванні в реакційній камері мікрокалориметра малих теплових потужностей краще використовувати напівпровідникові сенсори, оскільки вони мають високу чутливість, а при вимірюванні швидкоплинних процесів краще використовувати металеві термоелектричні сенсори.

Висновки

1. Розроблено комп'ютерну програму для автоматизації проектування термоелектричних мікрокалориметричних сенсорів, яка забезпечує можливість вводу ключових параметрів і отримання розрахунку оптимальних значень основних характеристик сенсорів, що спрощує і прискорює процес проектування дослідницького обладнання та мікрокалориметрів.

2. Розроблено програмне забезпечення для автоматизації процесу комп'ютерного проектування високочутливих термоелектричних мікрокалориметричних сенсорів, що дає можливість покращити функціональні можливості таких сенсорів шляхом впровадження авангардних алгоритмів та комп'ютерного моделювання, а також забезпечує значний прогрес у точності вимірювань і швидкодії таких пристроїв.

3. Виконано проектування і розробку термоелектричних мікрокалориметричних сенсорів для використання в малопотужних реакційних камерах. Досліджено фізичні та математичні аспекти чутливості та швидкодії сенсорів, виготовлених з напівпровідникового матеріалу *Bi-Te* і металевих віток на основі мідь-константану при відповідних геометричних розміщеннях віток.

4. Встановлено, що напівпровідникові сенсори мають значно вищу чутливість у порівнянні з металевими сенсорами при однаковій довжині віток термоелементів, тому їх використання є більш ефективним при вимірюванні малих теплових потужностей. З іншого боку, металеві сенсори демонструють значно кращу швидкодію, що робить їх перспективними для застосування у швидкоплинних процесах.

5. Отримані результати є фундаментом подальшого розвитку і вдосконалення термоелектричних сенсорів для мікрокалориметричних вимірювань, забезпечуючи високу чутливість і точність у роботі з малопотужними енергетичними процесами.

Література

1. Anatyshuk L.I. (2003). Thermoelectricity. Vol. 2. Thermoelectric power converters. Kyiv, Chernivtsi: Institute of Thermoelectricity.
2. Anatyshuk L.I. (1998). Thermoelectricity. Vol.1. Physics of Thermoelectricity. Kyiv, Chernivtsi: Institute of Thermoelectricity.
3. Anatyshuk L.I. (2007). Current status and some prospects of thermoelectricity. *J. Thermoelectricity*, 2, 7–20.
4. Smith S.J., Adams J.S., Bandler S.R., Borrelli R.B., Chervenak J.A., Cumbee R.S. et al. (2023). Development of the microcalorimeter and anticoincidence detector for the Line Emission Mapper X-ray probe. *J. Astron. Telesc. Instrum. Syst.* 9 (4) 041005 <https://doi.org/10.1117/1.JATIS.9.4.041005>.
5. Mantegazzini F., Kovac N., Enss C., Fleischmann A., Griedel M., Gastaldo L. (2023). Development and characterisation of high-resolution microcalorimeter detectors for the ECHO-100k experiment. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, Vol. 1055, 168564, <https://doi.org/10.1016/j.nima.2023.168564>.
6. Biffi V., ZuHone J.A., Mroczkowski T., Bulbul E., Forman W. (2022). The velocity structure of the intracluster medium during a major merger: Simulated microcalorimeter observations. *A&A* 663 A76 Published online: 2022-07-14 DOI: <https://doi.org/10.1051/0004-6361/202142764>
7. Zhao Yue, Wang Hubing, Gao Bo, Wang Zheng (2023). Characterizations of the electrothermal

- parameters of a transition edge sensor microcalorimeter and its energy resolution. *Superconductivity*, 7, 100051, <https://doi.org/10.1016/j.supcon.2023.100051>.
8. Choiński D., Wodołański A., Skupin P., Malcher A., Bernacki K. (2021). Modeling and CFD simulation of an isothermal heat flow microcalorimeter. *Sensors and Actuators A: Physical*, 331, 112999, <https://doi.org/10.1016/j.sna.2021.112999>.
 9. Wang Ye, Zhu Hanliang, Feng Jianguo, Neuzil Pavel. (2021). Recent advances of microcalorimetry for studying cellular metabolic heat. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 143, 116353, <https://doi.org/10.1016/j.trac.2021.116353>.
 10. Feng J., Podesva P., Zhu H., Pekarek J., Mayorga-Martinez C.C., Chang H., Pumera M., Neuzil P. (2020). Droplet-based differential microcalorimeter for real-time energy balance monitoring. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 312, 127967, <https://doi.org/10.1016/j.snb.2020.127967>.
 11. Feng J., Zhu H., Lukeš J., Korabečná M., Fohlerová Z., Mei T., Chang H., Neuzil P. (2021). Nanowatt simple microcalorimetry for dynamically monitoring the defense mechanism of *Paramecium caudatum*. *Sensors and Actuators A: Physical*, 323, 112643, <https://doi.org/10.1016/j.sna.2021.112643>.
 12. O'Connor C.T., Taguta J., McFadzean B. (2024). A review of the use of microcalorimetry to determine the enthalpies of immersion and adsorption on various minerals and their relationship to flotation performance. *Minerals Engineering*, 207, 108552, <https://doi.org/10.1016/j.mineng.2023.108552>.
 13. Anatyчук L.I., Ivaschuk O.I., Kobyliański R.R., Postev I.D., Boiaka V.Yu., Huschul I.Ya. (2016). Thermoelectric device for measuring the temperature and density of heat flux “Altec-10008”. *J. Thermoelectricity*, 1, 76–84.
 14. Anatyчук L.I., Luste O.J., Kobyliański R.R. (2017). Information-energy theory of medical-purpose thermoelectric temperature and heat flux sensors, *J. Thermoelectricity*, 4, 5–20.
 15. Anatyчук L.I., Ivaschuk O.I., Kobyliański R.R., Postevka I.D., Bodiaka V.Yu., Hushul I.Ya., Chuprovskaya Yu.Ya. (2018). On the effect of ambient temperature on the readings of thermoelectric medical-purpose sensors. *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*, 15 (1), 17–29.
 16. Anatyчук L.I., Kobyliański R.R., Konstantynovych I.A., Lysko V.V., Pugantseva O.V., Rozver Yu.Yu., Tiumentsev V.A. (2016). Calibration bench for thermoelectric heat flux converters. *J. Thermoelectricity*, 5, 71–79.
 17. Anatyчук L.I., Kobyliański R.R., Konstantynovych I.A., Kuz R.V., Manyk O.M., Nitsovych O.V., Cherkez R.G. (2016). Technology for manufacturing thermoelectric microthermopiles. *J. Thermoelectricity*, 6, 49–54.
 18. Wang Chunzhi, Jiao Hongzhe, Anatyчук Lukyan, Pasychnikova Nataliya, Naumenko Volodymyr, Zadorozhnyy Oleg, Vikhor Lyudmyla, Kobyliański Roman, Fedoriv Roman, Kochan Orest (2022). Development of a temperature and heat flux measurement system based on microcontroller and its application in ophthalmology. *Measurement Science Review*, 22 (2), 73–79.
 19. Kobyliański R.R., Prybyla A.V., Konstantynovych I.A., Boychuk V.V. (2022). Results of experimental research on thermoelectric heat flux medical sensors. *J. Thermoelectricity*, 3-4, 68–81.
 20. Anatyчук L.I., Kobyliański R.R., Prybyla A.V., Konstantynovych I.A., Boychuk V.V. (2022). Computer simulation of the thermoelectric heat flow sensor on the surface of the human body. *Journal of Thermoelectricity*, (2), 46–60.

21. L.I. Anatyshchuk, R.R. Kobylianskyi, R.V. Fedoriv, I.A. Konstantynovych (2023) On the prospects of using thermoelectric cooling for the treatment of cardiac arrhythmia. *Journal of Thermoelectricity*, (2), 5–17.
22. Yuryk O., Anatyshchuk L., Kobylianskyi R., Yuryk N. (2023). Measurement of heat flux density as a new method of diagnosing neurological diseases. Kharkiv: PC Technology Center, 31–68.
23. R.R. Kobylianskyi, V.V. Lysko, A.V. Prybyla, I.A. Konstantynovych, A.K. Kobylianska, N.R. Bukharaeva, V.V. Boychuk (2023) Technological modes of manufacturing thermoelectric sensors for medical purposes. *Journal of Thermoelectricity*, (4), 49–63.
24. L.I. Anatyshchuk, R.R. Kobylianskyi, V.V. Lysko, A.V. Prybyla, I.A. Konstantynovych, A.K. Kobylyanska, M.V. Havrylyuk, V.V. Boychuk (2023) Method of calibration of thermoelectric sensors for medical purposes. *Journal of Thermoelectricity*, (3), 37–49.

Надійшла до редакції: 14.02.2024.

R.R. Kobylianskyi, *Cand.Sc.(Phys-Math)*^{1,2}

V.V. Lysko, *Cand. Sc (Phys-Math)*^{1,2}

V.V. Boychuk²

¹Institute of Thermoelectricity of the NAS and MES of Ukraine,

1 Nauky str., Chernivtsi, 58029, Ukraine;

e-mail: anatysh@gmail.com

²Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University,

2 Kotsiubynskyi str., Chernivtsi, 58012, Ukraine

COMPUTER-AIDED DESIGN OF THERMOELECTRIC MICROCALORIMETRIC SENSORS

The paper deals with the design and development of thermoelectric microcalorimetric sensors for use in low-power reaction chambers. The physical and mathematical aspects of the sensitivity and response speed of sensors made of Bi-Te semiconductor material and copper-constantan-based metal legs with appropriate geometric arrangements of the legs are investigated. The paper presents a computer design algorithm, depicted as a block diagram, and also demonstrates the development of a program for automating the design process with subsequent implementation of the software. Practical examples of the development and analysis of the calculated parameters for two types of sensors are presented to identify their advantages in measuring low thermal powers and fast processes, respectively.

Key words: microcalorimetry, thermoelectric microcalorimetric sensors, computer-aided design of sensors, software.

References

1. Anatyshchuk L.I. (2003). Thermoelectricity. Vol. 2. Thermoelectric power converters. Kyiv, Chernivtsi: Institute of Thermoelectricity.
2. Anatyshchuk L.I. (1998). Thermoelectricity. Vol.1. Physics of Thermoelectricity. Kyiv, Chernivtsi: Institute of Thermoelectricity.

3. Anatyshuk L.I. (2007). Current status and some prospects of thermoelectricity. *J. Thermoelectricity*, 2, 7 – 20.
4. Smith S.J., Adams J.S., Bandler S.R., Borrelli R.B., Chervenak J.A., Cumbee R.S. et al. (2023). Development of the microcalorimeter and anticoincidence detector for the Line Emission Mapper X-ray probe. *J. Astron. Telesc. Instrum. Syst.* 9 (4) 041005 <https://doi.org/10.1117/1.JATIS.9.4.041005>.
5. Mantegazzini F., Kovac N., Enss C., Fleischmann A., Griedel M., Gastaldo L. (2023). Development and characterisation of high-resolution microcalorimeter detectors for the ECHO-100k experiment. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, Vol. 1055, 168564, <https://doi.org/10.1016/j.nima.2023.168564>.
6. Biffi V., ZuHone J.A., Mroczkowski T., Bulbul E., Forman W. (2022). The velocity structure of the intracluster medium during a major merger: Simulated microcalorimeter observations. *A&A* 663 A76 Published online: 2022-07-14 DOI: <https://doi.org/10.1051/0004-6361/202142764>
7. Zhao Yue, Wang Hubing, Gao Bo, Wang Zheng (2023). Characterizations of the electrothermal parameters of a transition edge sensor microcalorimeter and its energy resolution. *Superconductivity*, 7, 100051, <https://doi.org/10.1016/j.supcon.2023.100051>.
8. Choiński D., Wodołański A., Skupin P., Malcher A., Bernacki K. (2021). Modeling and CFD simulation of an isothermal heat flow microcalorimeter. *Sensors and Actuators A: Physical*, 331, 112999, <https://doi.org/10.1016/j.sna.2021.112999>.
9. Wang Ye, Zhu Hanliang, Feng Jianguo, Neuzil Pavel. (2021). Recent advances of microcalorimetry for studying cellular metabolic heat. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 143, 116353, <https://doi.org/10.1016/j.trac.2021.116353>.
10. Feng J., Podesva P., Zhu H., Pekarek J., Mayorga-Martinez C.C., Chang H., Pumera M., Neuzil P. (2020). Droplet-based differential microcalorimeter for real-time energy balance monitoring. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 312, 127967, <https://doi.org/10.1016/j.snb.2020.127967>.
11. Feng J., Zhu H., Lukeš J., Korabečná M., Fohlerová Z., Mei T., Chang H., Neuzil P. (2021). Nanowatt simple microcalorimetry for dynamically monitoring the defense mechanism of *Paramecium caudatum*. *Sensors and Actuators A: Physical*, 323, 112643, <https://doi.org/10.1016/j.sna.2021.112643>.
12. O'Connor C.T., Taguta J., McFadzean B. (2024). A review of the use of microcalorimetry to determine the enthalpies of immersion and adsorption on various minerals and their relationship to flotation performance. *Minerals Engineering*, 207, 108552, <https://doi.org/10.1016/j.mineng.2023.108552>.
13. Anatyshuk L.I., Ivaschuk O.I., Kobylanskyi R.R., Postev I.D., Boiaka V.Yu., Hushul I.Ya. (2016). Thermoelectric device for measuring the temperature and density of heat flux “Altec-10008”. *J. Thermoelectricity*, 1, 76–84.
14. Anatyshuk L.I., Luste O.J., Kobylanskyi R.R. (2017). Information-energy theory of medical-purpose thermoelectric temperature and heat flux sensors, *J. Thermoelectricity*, 4, 5–20.
15. Anatyshuk L.I., Ivaschuk O.I., Kobylanskyi R.R., Postevka I.D., Bodiaka V.Yu., Hushul I.Ya., Chuprovskaya Yu.Ya. (2018). On the effect of ambient temperature on the readings of thermoelectric medical-purpose sensors. *Sensor Electronics and Microsystem Technologies*, 15 (1), 17–29.
16. Anatyshuk L.I., Kobylanskyi R.R., Konstantynovych I.A., Lysko V.V., Pugantseva O.V.,

- Rozver Yu.Yu., Tiumentsev V.A. (2016). Calibration bench for thermoelectric heat flux converters. *J. Thermoelectricity*, 5, 71–79.
17. Anatyshuk L.I., Kobylianskyi R.R., Konstantynovych I.A., Kuz R.V., Manyk O.M., Nitsovych O.V., Cherkez R.G. (2016). Technology for manufacturing thermoelectric microthermopiles. *J. Thermoelectricity*, 6, 49–54.
18. Wang Chunzhi, Jiao Hongzhe, Anatyshuk Lukyan, Pasychnikova Nataliya, Naumenko Volodymyr, Zadorozhnyy Oleg, Vikhor Lyudmyla, Kobylianskyi Roman, Fedoriv Roman, Kochan Orest (2022). Development of a temperature and heat flux measurement system based on microcontroller and its application in ophthalmology. *Measurement Science Review*, 22 (2), 73–79.
19. Kobylianskyi R.R., Prybyla A.V., Konstantynovych I.A., Boychuk V.V. (2022). Results of experimental research on thermoelectric heat flux medical sensors. *J. Thermoelectricity*, 3-4, 68–81.
20. Anatyshuk L.I., Kobylianskyi R.R., Prybyla A.V., Konstantynovych I.A., Boychuk V.V. (2022) Computer simulation of the thermoelectric heat flow sensor on the surface of the human body. *Journal of Thermoelectricity*, (2), 46–60.
21. L.I. Anatyshuk, R.R. Kobylianskyi, R.V. Fedoriv, I.A. Konstantynovych (2023) On the prospects of using thermoelectric cooling for the treatment of cardiac arrhythmia. *Journal of Thermoelectricity*, (2), 5–17.
22. Yuryk O., Anatyshuk L., Kobylianskyi R., Yuryk N. (2023). Measurement of heat flux density as a new method of diagnosing neurological diseases. Kharkiv: PC Technology Center, 31–68.
23. R.R. Kobylianskyi, V.V. Lysko, A.V. Prybyla, I.A. Konstantynovych, A.K. Kobylianska, N.R. Bukharaeva, V.V. Boychuk (2023) Technological modes of manufacturing thermoelectric sensors for medical purposes. *Journal of Thermoelectricity*, (4), 49–63.
24. L.I. Anatyshuk, R.R. Kobylianskyi, V.V. Lysko, A.V. Prybyla, I.A. Konstantynovych, A.K. Kobylyanska, M.V. Havrylyuk, V.V. Boychuk (2023) Method of calibration of thermoelectric sensors for medical purposes. *Journal of Thermoelectricity*, (3), 37–49.

Submitted: 14.02.2024.