

[19] 中华人民共和国国家知识产权局

[51] Int. Cl⁷

H05B 6/80

G01N 22/00



[12] 发明专利说明书

[21] ZL 专利号 99816243.4

[45] 授权公告日 2004 年 4 月 14 日

[11] 授权公告号 CN 1146305C

[22] 申请日 1999.12.17 [21] 申请号 99816243.4

[30] 优先权

[32] 1998.12.17 [33] DK [31] PA199801669

[86] 国际申请 PCT/IB1999/002021 1999.12.17

[87] 国际公布 WO00/36880 英 2000.6.22

[85] 进入国家阶段日期 2001.8.17

[71] 专利权人 个人化学第 - 乌普萨拉有限公司

地址 瑞典乌普萨拉

[72] 发明人 M·法格尔

审查员 孙克良

[74] 专利代理机构 中国专利代理(香港)有限公司

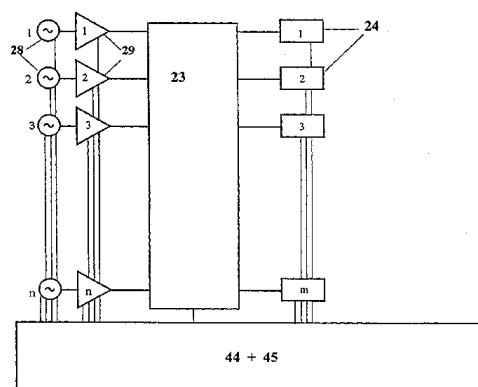
代理人 陈 霁 王忠忠

权利要求书 4 页 说明书 22 页 附图 6 页

[54] 发明名称 进行化学反应的微波装置和方法

[57] 摘要

本发明涉及一种执行化学反应的装置和方法。具体地说, 本发明涉及加热化学反应混合物的装置。该装置应用一个或多个基于半导体的微波发生器使该装置适合于并行处理化学反应混合物。本发明进一步涉及执行化学反应的方法, 例如同时或顺序地加热许多试样的方法、监测微波加热化学反应的方法以及在其中可以确定由装置加试样所组成的系统的参数比如频率和所施加的功率的最佳条件的方法。



ISSN 1008-4274

1. 一种给许多施放器提供电磁辐射的装置，所说的许多施放器中的每个施放器都适合于容纳包含有要进行电磁辐射的试样的一个反应容器，而同时所说的反应容器设置在许多施放器中的一个施放器中，所说的装置包括：

a) 产生电磁辐射波的许多发生装置，所说的许多发生装置中的每个发生装置都能够产生许多频率上产生电磁辐射，

b) 将至少一部分所产生的电磁辐射波导向到许多施放器中的至少一个施放器中的导向装置，以及

10 c) 根据控制信号分别控制许多发生装置的控制装置，所说的控制信号反映在施放器中的试样的状态，

其中许多发生装置在产生电磁辐射波的过程中应用半导体部件。

2. 依据权利要求 1 所述的装置，其中许多发生装置中的每个发生装置都包括一信号发生器和一信号放大器。

15 3. 依据权利要求 1 所述的装置，其中导向装置包括分别控制在许多发生装置和许多施放器之间的波通路的切换装置。

4. 依据权利要求 1 所述的装置，其中许多施放器是从近场、表面场、单模和多模施放器组成的组中选择。

20 5. 依据权利要求 1 所述的装置，其中在产生电磁辐射波的过程中所使用的半导体部件包括碳化硅功率晶体管。

6. 依据权利要求 1 所述的装置，其中根据从来自接收由给定的发生装置所产生的电磁辐射的施放器的第二控制信号改变由给定的发生装置所产生的电磁辐射的功率，所说的第二控制信号通过该控制装置提供。

25 7. 依据权利要求 1 所述的装置，其中许多发生装置在基本相同的频率上产生电磁辐射。

8. 依据权利要求 1 所述的装置，其中根据从来自接收由给定的发生装置所产生的电磁辐射的施放器的第一控制信号改变由给定的发生装置所产生的电磁辐射的频率，所说的第一控制信号通过该控制装置提供。

30 9. 依据权利要求 1 所述的装置，其中通过许多发生装置所产生的电磁辐射的频率在 300 兆赫兹-300 千兆赫兹范围内。

10. 依据权利要求 9 所述的装置, 其中电磁辐射的频率在 0.5-3 千兆赫兹的范围内。

11. 依据权利要求 9 所述的装置, 其中电磁辐射的频率在 50-100 千兆赫兹的范围内。

5 12. 依据权利要求 1 所述的装置, 其中控制装置包括通用计算机。

13. 依据权利要求 1 所述装置的用途, 使 PCR 混合物进行温度循环。

14. 依据权利要求 13 的用途, 用于在试样中进行化学反应, 其中通过在所述的化学反应中的存储在与控制装置相连的存储装置中的
10 预设值, 确定施加在施放器中的试样中的电磁辐射的频率、所辐射的功率等级以及所施加的电磁辐射的周期。

15. 依据权利要求 13 的用途, 其中和频率及反射系数的相关数据存储在存储器中以进一步处理。

16. 依据权利要求 15 的用途, 其中在神经网络中进行进一步的
15 处理。

17. 一种装置, 该装置包括:

a) 产生电磁辐射波的许多发生装置, 所说的许多发生装置中的每个发生装置都能够许多频率上产生电磁辐射,

b) 将至少一部分所产生的电磁辐射波导向到许多施放器中的至少一个施放器中的导向装置, 以及
20

c) 根据控制信号分别控制许多发生装置的控制装置, 所说的控制信号反映在施放器中的试样的状态,

其中许多发生装置在产生电磁辐射波的过程中应用半导体部件,

并且其中所述装置的应用结合一种在可选择地在催化剂的作用下
25 使化学物种与试剂进行化学反应的设备来实现, 所述设备包括:

d) 包括至试剂和可选的催化剂中至少一个的试样盒,

e) 电子存储装置, 该电子存储装置包括涉及在可选的催化剂的作用下在化学物种和试剂之间的化学反应的数据, 所说的电子存储装置和设备适合于从该存储装置中检索数据并处理所说的数据以控制将
30 电磁辐射施加到所说的试样盒中。

18. 依据权利要求 17 的装置, 其中的设备进一步包括关于将化学物种添加到该试样盒中的指令。

19. 一种同时进行许多化学反应的方法，所说的方法包括如下的步骤：

- a) 将第一试样提供到第一施放器中，
- b) 将第二试样提供到第二施放器中，
- 5 c) 从第一发生装置给在第一施放器中的第一试样施加电磁辐射，所说的第一发生装置能够产生许多频率上的电磁辐射，
- d) 从第二发生装置给在第二施放器中的第二试样施加电磁辐射，所说的第二发生装置能够产生许多频率上的电磁辐射，以及
- e) 根据来自第一和第二施放器的控制信号通过分别且单独地控
- 10 制第一和第二发生装置来分别地控制施放到第一和第二施放器的电磁辐射，

其中第一和第二发生装置在产生电磁辐射波的过程中应用半导体部件。

20. 依据权利要求 19 的方法，其中施放到第一试样的电磁辐射取具有预定形状的第一脉冲的形式，所述方法进一步包括以下步骤：

- a) 通过进行数学运算，从第一施放器中获得反射脉冲的特征，由此获得第一反射频谱；
- b) 改变第一试样的物理和/或化学特性，
- c) 以具有预定形状的第二脉冲的形式给该第一试样施加电磁辐射，并通过进行数学运算，从第一施放器中获得反射脉冲的特征，由此获得第二反射频谱，以及
- 20 d) 重复步骤 b) 和 c)，直到按在第一和第二反射频谱之间相减得到的数学差计算的在第一和第二反射频谱之间的差值处于预定的范围内。

21. 依据权利要求 20 中所述的方法，其中获得第一和第二反射频谱的数学运算包括傅立叶变换。

22. 依据权利要求 19 所述的方法，其中所施加的电磁辐射在 300 兆赫兹-300 千兆赫兹的范围内。

23. 依据权利要求 19 所述的方法，其中施放到第一和第二试样的电磁辐射具有基本相同的频率和基本相同的功率级以使第一和第二试样暴露在基本相同的条件下。

24. 依据权利要求 19 所述的方法，其中第一和第二试样都是 PCR

混合物。

25. 依据权利要求 19 所述的方法，其中以至少两步的循环方式将电磁辐射施加到试样中，其中至少在每个循环周期中的一部分中冷却试样。

5 26. 依据权利要求 19 所述的方法，其中由一种装置提供电磁辐射，该装置包括：

a) 产生电磁辐射波的许多发生装置，所说的许多发生装置中的每个发生装置都能够在许多频率上产生电磁辐射，

b) 将至少一部分所产生的电磁辐射波导向到许多施放器中的至少一个施放器中的导向装置，以及

10 c) 根据控制信号分别控制许多发生装置的控制装置，所说的控制信号反映在施放器中的试样的状态，

其中许多发生装置在产生电磁辐射波的过程中应用半导体部件。

进行化学反应的微波装置和方法

本发明涉及一种加热化学反应混合物的装置。具体地说，本发明
5 涉及一种应用一个或多个基于半导体的微波发生器使该装置适合于并
行处理化学反应混合物的装置。本发明进一步涉及执行化学反应的方
法，例如同时或顺序地加热许多试样的方法、监测微波加热化学反应
的方法以及在其中可以确定关于频率和所施加的功率的最佳条件的方
法。

10 如今对于有机化学家来说一个主要的障碍是在有机合成中找到有
效的线路所需的时间。例如，在几十年前在医药行业中平均生产率是
大约每年每位化学家完成 25-50 种物质，由此有相同数量的化学物质
可以作为新药的候选对象。如今该数字为每年 100 种并有望迅速达到
每年约 1000 种。

15 因此，医药行业和有机化学家所面临的挑战包括找到降低药物的
开发时间的方法、产生化学物质多样性的方法、新的合成线路的研究
以及可能的再引进老的“不可能”的合成线路。此外，实现全新的化
学物质的实体一直是人们的挑战。

正如从下文中所知，有助于化学反应的微波提供了一种至少能够
20 避免上文所述的一些问题的方法，即

- 使反应时间加速几个数量级，
 - 提高化学反映的产量，
 - 由于快速加热并由此避免了副反应带来的杂质从而使化合产品的
纯度更高，以及
- 25 · 进行采用常规的技术不大可能实现的反应。

促进化学反应的微波已经使用了好几年。然而，这些装置和方法在
很大的程度上依赖于常规的家用微波炉。家用微波炉具有多模空腔谐
振器并以在 915 兆赫兹或 2450 兆赫兹（取决于所在的国家）的固定频
率施加能量。也有使用单模空腔谐振器的报道，例如参见 US5,393,492
30 和 US4,681,740。

市场上的微波发生器全部是磁控管型。在有些情况下使用行波管
（TWT）来放大微波信号。这种常规的装置有几个缺点。下文中列出了

这些缺点中的一些:

缺点之一是在常规的微波炉中的能量分布是非均匀的。这就导致根据在微波炉中试样的不同位置试样的温度不同。此外, 由于非均匀的能量分布所以很难实现可重复的结果。如果使用阵列试样盒比如微滴板 (microtiter plate) (例如具有 96 井孔) 则这种效果特别显著。在微波炉中旋转试样并不能显著地改善重复性。

在常规的系统输送给在试样阵列中的每个试样中的能量仅通过如下的方式计算: 通过所测量的输入能量除以试样的总数作为每试样的平均能量。由于在微波腔中的非均匀的能量分布因此这种计算仅能够粗略地估计施加到每个试样中的能量。

控制该反应的一种方法是监测在所有的单个的井孔中的压力和温度。这就可以在特定运行中得到在指定的井孔中的状态信息。改变该位置能够得到不同的结果但导致了较差的重复性。试图获得均匀的能量分布的变型的方法是在微波腔中放置较大的载荷以吸收更均匀的能量。

单模空腔谐振器能够在较小的载荷中提供较高的效率和受控制的加热模式。然而由于使用基本恒定的频率微波发生器, 而载荷的电介质的特性常常随着温度变化非常大, 所以导致功率吸收的变化极大。因此该过程变得很难预测。

常规系统的进一步缺点是涉及磁控管通常只提供固定的频率或该频率仅在磁控管的中心频率附近有较小的调整。此外, 磁控管具有不可预期的特性和对温度非常敏感, 特别是在随着接近“寿命”的终点效率降低时。

TWT 可用作可变频率放大器。然而, TWT 相当昂贵并且通常使用起来很复杂。此外, 在启动之前 TWT 要求预热时间, 这意味着 TWT 不能快速地启动和关闭。此外, TWT 的老化造成了较高的维护成本。

磁控管和 TWT 都要求较高的电源, 这就带来了复杂和危险的缺点。

在 US5,521,360 中描述了在微波炉中产生微波的可变频率加热装置。该装置包括电压控制微波发生器、电压控制前置放大器和功率放大器。该功率放大器可以是 TWT。TWT 可运行地连接到炉腔。应用功率表通过测量从炉子反射的功率来确定输送到炉子的功率。一旦将试样放置在炉腔中, 耦合到试样的功率就使试样的温度变化。

在 US5, 521, 360 中所描述的系统具有例如与 TWT 相关的上述缺点。

在 US5, 521, 360 中所描述的装置的进一步的缺点是它仅使用一个炉腔，即不可能以不同的加热参数同时加热许多试样。

5 本发明的另一个目标是提供一种包括基于半导体的第一电磁发生器和保持试样的第一施放器，这些装置能够可控制地对试样进行加热。

本发明的另一个目的是提供一种能够以不同的设置的处理参数（比如频率、功率、温度、压力等）并行处理许多试样的装置。

本发明的进一步的发明目的是提供一种能够以分别监视的处理参数（比如频率、功率、温度、压力等）并行监测试样的装置。

10 本发明的进一步目的是提供一种能够以分别调整的处理参数（比如频率、功率、温度、压力等）同时控制许多试样的装置。

本发明的进一步目的是提供一种装置，在该装置中通过应用不同的施放器能够均匀地加热试样。

15 本发明的进一步目的是提供一种装置，在该装置中可以改变所施加的能量的频率。

本发明的进一步目的是提供一种装置，在该装置中能够对试样的电磁吸收能力和特性的热和化学效应进行估计和分离。

20 本发明的进一步目的是提供一种装置，在该装置中能够通过监测引入到反应室中的第二种材料的谐振频率的变化来测量在反应容器中的温度。这种材料可以是晶体、半导体或其温度依赖于谐振频率的任何其它的固态材料。

在第一方面中通过将电磁辐射提供到第一施放器中的装置来实现上述的目的，所说的装置包括：

- 25 a) 产生电磁辐射的第一发生装置，
- b) 放大所产生的电磁辐射的第一放大装置，
- c) 将所放大的电磁辐射导向到第一施放器中的导向装置，以及
- d) 控制第一发生装置和第一放大装置的装置，

其中所产生的电磁辐射包括许多频率，以及其中第一发生装置和第一放大装置基本由半导体部件组成。

30 “基本由半导体部件组成”意味着产生电磁辐射的部件比如所要求的功率晶体管都是基于半导体的功率晶体管。

在本文中，导向装置应该解释成能够导向电磁辐射的任何装置比

如金属通道或电缆，比如同轴电缆或波导管。导向装置还可以包括有源部件和/或无源部件比如耦合器、分频器、分解器、组合器、隔离器、功率表、模拟负载、频谱分析器等。

5 为了对许多试样进行并行处理，该装置可以包括第二施放器和适合的导向装置以将至少一部分放大的电磁辐射导向到第二施放器。通常比较有利于的是以不同的频率将电磁辐射提供给第一和第二施放器。因此，该装置可以包括产生许多频率的电磁辐射的第二发生装置和放大通过该第二发生装置所产生的电磁辐射的第二放大装置。为了提供具有许多频率的电磁辐射，第二发生装置和第二放大装置优选由10 半导体部件组成，比如基于半导体的功率晶体管。这种功率晶体管的实例有碳化硅功率晶体管。很显然在第一发生装置和第一放大装置中可以使用相同类型的晶体管。

15 为了增加该装置的灵活性，导向装置可以包括将通过第二放大装置所产生的电磁辐射导向到第二施放器的装置。此外，导向装置可以进一步包括将通过第二放大装置所放大的至少一部分电磁辐射导向到第一施放器的装置。

此外，为了进一步增加该装置的灵活性，该导向装置可以包括在第一和第二施放器之间切换通过第一放大装置所放大的电磁辐射的装置。此外，该导向装置可以包括在第一和第二施放器之间切换通过第20 二放大装置所放大的电磁辐射的装置。

第一和第二施放器可以是各种类型。可取的是第一和第二施放器是从准静态的、近场、表面场、单模腔体和多模腔体施放器中选择。

25 通过第一和第二发生装置所产生的电磁辐射的频率可以分别依据第一和第二控制信号改变。这些第一和第二控制信号可以通过控制装置提供。类似地，第一和第二放大装置的放大系数可以分别根据第一和第二控制信号改变。这些信号也可以通过控制装置提供。该控制装置可以包括通用计算机。这种通用计算机可以形成神经网络的一部分。

通过第一和第二发生装置所产生的电磁辐射的频率在 300 兆赫兹-300 千兆赫兹范围内比如在 0.5-3 千兆赫兹或在 50-100 千兆赫兹内。

30 在第二方面，本发明还涉及一种同时或顺序地执行化学反应的方法，所说的方法包括如下的步骤：

a) 在第一施放器中提供第一试样，

b) 在第二施放器中提供第二试样, 以及

c) 同时或顺序地将电磁辐射提供到第一和第二施放器中预定的时间, 所说的电磁辐射具有在 300 兆赫兹-300 千兆赫兹范围内的频率。

可以特别地和独立地将电磁辐射提供给每个试样。此外, 所施加的电磁辐射可以包括一个或多个脉冲。该试样可以集中在包括至少两个试样盒的试样盒组中。试样本身可以是 PCR 混合物。在试样曝光的过程中可以以至少两步的循环的方式施加电磁辐射, 其中至少在每个循环周期中的一部分中冷却试样。

优选地, 应用依据本发明的第一方面的装置提供电磁辐射。

10 在第三方面中, 本发明涉及执行化学反应的方法, 所说的方法包括如下的步骤:

a) 在施放器中提供试样,

b) 以第一功率级给该试样施加电磁辐射第一预定的时间并以预定分辨率在两个预定值之间改变该电磁辐射的频率, 以及通过确定反
15 馈的信号的电平确定在由两个预定值的范围所覆盖的至少某些(两个)频率上试样的电磁辐射反射系数, 由此获得第一组反射系数。

c) 改变试样的物理和/或化学特性,

d) 以第二功率级给该施放器施加电磁辐射并以预定分辨率在两个预定值之间改变该电磁辐射的频率, 该预定值所确定的范围被包括
20 在由在步骤 b) 中的预定值所确定的范围内, 以及通过确定反馈的信号的电平确定在由两个预定值的范围所覆盖的至少某些(两个)频率上试样的电磁辐射反射系数, 由此获得第二组反射系数, 以及

e) 重复步骤 c) 和 d) 直到作为在与第一和第二组反射系数相关的频率之间的数学差(相减)计算的反射系数的差值在预定的范围内。

25 步骤 c) 可以包括施加电磁辐射以加热试样。作为变型, 还可以冷却该试样和/或给该试样添加试剂。此外, 如果在执行步骤 c) 和 d) 之后反射系数之差在预定范围内, 则步骤 e) 就不再执行。此外, 如果该差值接近于该预定的范围, 执行步骤 e) 可能不经济, 也可以省去它。

在第四方面, 本发明还涉及一种执行化学反应的方法, 所说的方法
30 包括如下的步骤:

a) 在施放器中提供试样,

b) 给该试样施加电磁辐射, 该电磁辐射具有起始频率,

c) 以预定分辨率在两个预定值之间改变所施加的电磁辐射的频率,

d) 在至少部分地改变电磁辐射的频率的过程中通过确定反馈的信号的电平确定试样的电磁辐射反射系数, 以及

5 e) 从反馈信号的电平中确定反射系数落在预定的范围内的电磁辐射的频率。

在第五方面, 本发明还涉及一种执行化学反应的方法, 所说的方法包括如下的步骤:

a) 在施放器中提供试样,

10 b) 给该试样施加电磁辐射, 该电磁辐射具有起始频率,

c) 在起始频率附近递增地改变电磁辐射的频率,

d) 通过确定在起始频率、低于起始频率递增的频率和高于起始频率递增的频率上的反馈的信号的电平确定试样的电磁辐射反射系数, 以及

15 e) 重复步骤 b) 至 d) 直到反射系数最小。

在第六方面, 本发明还涉及一种执行化学反应的方法, 所说的方法包括如下的步骤:

a) 在施放器中提供试样,

b) 给该试样施加电磁辐射, 该电磁辐射具有起始频率,

20 c) 在起始频率附近递增地改变电磁辐射的频率,

d) 通过确定在起始频率、低于起始频率递增的频率和高于起始频率递增的频率上的反馈的信号的电平确定试样的电磁辐射反射系数, 以及

e) 将所确定的反射系数与预定的反射系数进行比较,

25 f) 将起始频率调整到某一频率以使所确定的反射系数在预定的反射系数附近的预定范围内, 以及

g) 以所需的频度重复步骤 c) 至 f)。

起始频率可以在 300 兆赫兹-300 千兆赫兹的范围中。在其中电磁辐射的频率可以改变的预定值可以是在 300 兆赫兹-300 千兆赫兹的范围中, 比如在 0.5-3 千兆赫兹范围内或在 50-100 千兆赫兹的范围内。
30 可取的是, 应用依据本发明的第一方面的装置执行依据第三、第四、第五和第六方面的反应。

在第七方面, 本发明还涉及一种执行化学反应的方法, 所说的方法包括如下的步骤:

- a) 在施放器中提供试样,
- b) 以具有预定的形状的第一脉冲的形式给该试样施加电磁辐射, 并通过进行数学运算从施放器中获得反射脉冲的特征, 由此获得第一反射频谱,
- c) 改变试样的物理和/化学特性,
- d) 以具有预定的形状的第二脉冲的形式给该试样施加电磁辐射, 并通过进行数学运算从施放器中获得反射脉冲的特征, 由此获得第二反射频谱,
- e) 重复步骤 c) 和 d) 直到按在第一和第二频谱之间的数学差(相减)计算的在第一和第二反射频谱之间的差值在预定的范围内。

如果在执行步骤 c) 和 d) 之后反射系数之差在预定的范围内, 则不再需要执行步骤 e)。此外, 如果该差接近于预定的范围, 如果执行步骤 e) 可能不经济则也可以省去它。可取的是, 获得第一和第二反射频谱的数学运算包括傅立叶变换, 但也可以使用其它的变型的运算。应用依据本发明的第一方面的装置可以执行依据本发明的第七方面的方法。

在第八方面中, 本发明涉及应用依据本发明的第一方面的装置来加热包括至少一种有机化合物的至少一种试样。每个试样可以进一步包括一种或多种试剂和可选的催化剂。可取的是, 依据本发明的第一方面的装置可以设计为能够同时或顺序地或间歇地加热两个或更多的反应混合物, 比如 PCR 混合物。

通过在所述的化学反应中确定的预设值(比如存储在与控制装置相关的存储装置中的预设值)可以确定所施加的电磁辐射的周期、所辐射的功率等级以及电磁辐射的频率。频率和反射系数的相关数据可以存储在存储器中以便进一步处理。进一步的处理可以在神经网络中进行。

在第九方面中, 本发明涉及使化学物种与试剂(可选择在催化剂的作用下)进行化学反应的一套设备, 其中在依据本发明的第一方面的装置中执行该化学反应, 所说的设备包括:

- a) 包括至少一种试剂和可选的催化剂的试样盒,

b) 电子存储装置, 该电子存储装置包括涉及在可选的催化剂的作用下在化学物种和试剂之间的化学反应的数据, 所说的电子存储装置和设备适合于从该存储装置中检索数据并处理所说的数据以控制将电磁辐射施加到所说的试样盒中。

5 本方面进一步包括关于给试样盒中增加化学物种的指令。

附图 1 所示为在依据本发明的装置中的三种主要的模块的可能的组合。

附图 2 所示为包括依据本发明的装置的实施例。

附图 3 所示为安装在微滴板中的施放器。

10 附图 4 所示为具有对称地安装在四个井孔的中心的微波导体中的微滴板。

附图 5 所示为具有输入和输出部件 12 和 13 的发射型施放器的微滴板。

附图 6 所示为对于每个试样井具有不同的天线的微滴板。

15 如上文所示, 本发明提供一种执行化学反应优选并行地执行化学反应的装置和方法。依据本发明的特别有益的特征是在信号发生器中和放大装置中使用半导体部件。从下文可清楚地看出, 半导体信号发生器在化学合成中具有迄今为止所不能实现的优点, 而这些优点能够在依据本发明的方法中实现。

20 在执行化学反应的装置和方法中应用微波或其它的电磁辐射的主要目的是加热和/或使暴露在微波辐射中的试样发生催化反应。可取的是, 将试样放在该装置的施放器中的试样盒中。

此外, 依据本发明的方法和装置, 根据输送到施放器中和/或在施放器中所吸收的实际信号能量级控制信号发生器。这种反馈使得它能够
25 在很高程度上灵活地控制试样的温度。

术语微波是指频率范围在 300 兆赫兹-300 千兆赫兹中的电磁辐射。依据本发明的装置和方法在频率范围 500 兆赫兹-300 千兆赫兹范围内实施, 可取的是在 500 兆赫兹-30 千兆赫兹内比如 500 兆赫兹-10 千兆赫兹比如 2-30 千兆赫兹比如 300 兆赫兹-4 千兆赫兹比如 2-20 千
30 兆赫兹比如 0.5-3 千兆赫兹或在 50-100 千兆赫兹的范围内实施。

附图 1 所示为依据本发明的装置的优选实施例。通过信号放大器 29 分别放大的 n 个信号发生器 28 通过在中心的方框表示的发送网络 23

连接到 m 个分离的施放器。可以看出所有的部件都连接到电源 44 和控制器 45。附图 1 所示为并行处理试样，并且优选根据在发送网络、施放器或试样中的微波能量的耦合来控制发生器和施放器。应该指出的是每个施放器 24 都包含一个或多个试样。

- 5 如果输送到每个施放器 24 中的平均能量小于放大器 29 的最大输出功率，施放器 24 的数量可以超过信号发生器 28 和放大器 29 的数量，因此 $n < m$ 。如果输送到每个施放器 24 中的平均能量大于放大器 29 的最大输出功率，则用于每个施放器的功率可以来自几个放大器。因此从一些放大器中输出的功率可以发送到几个不同的施放器中。在这种情况下施放器 24 的数量可以小于信号发生器 28 和放大器 29 的数量，因此 $n > m$ 。通过发送网络 23 可以实现在放大器和施放器之间的这种辐射导向和耦合。每个放大器和施放器还可以成对地耦合，即 $n = m$ 。

在下文中，包括在该装置中的每个部件都将更详细地进行描述，包括一些优选的特征。

- 15 发生器 28 和放大器 29 基本由半导体部件组成。为了能够产生在 300 兆赫兹和 300 千兆赫兹之间的信号，需要基于半导体的几个单个发生器。

- 所产生的信号的功率可以在 0 和 1 瓦之间连续地变化。该信号发生器能够驱动信号放大器和/或功率放大器。此外通过控制器 45 可以
20 对该信号放大器进行控制/编程。控制功能是指可以控制幅值、频率、频率带宽、信号形式、脉冲形式或信号/脉冲的持续时间以及能够同时控制两个或更多的功能的任何组合。

基于半导体的微波发生器和放大器相对于常规的 TWT、微波回旋管和磁控管具有许多优点。这些优点如下：

- 25
- 容易控制频率和输出功率
 - 较小的物理尺寸
 - 不需要较高的电压，改善了安全性和可靠性
 - 没有预热时间，因此能够立即使用
 - 没有磨损部件，这极大地降低了保养成本，延长了装置的使用
- 30 时间
- 与 TWT 相比远远高于 MTBF 和低于 MTTR
 - 与 TWT 相比具有较好的增益曲线的平滑性

· 与 TWT 相比具有更低的噪声

放大装置 29 可能包括信号放大器 29 和功率放大器 30, 如附图 2 所示。信号放大器 29 是一种基于半导体的器件, 它适合于将来自信号发生器的信号放大。放大装置的增益可以通过改变控制信号的电平来调整。因此操作员可以选择输出的幅值。

提供功率放大器 30 以进一步放大来自信号放大器的信号。功率放大器也是基于半导体的增益可调整的器件。通过改变控制信号的电平可以改变该增益。

施加到施放器的加热功率优选在取决于所述的试样尺寸和化学反应的 1-2000 瓦的范围内。通常的范围为 1-300 瓦比如 5-50 瓦、10-1000 瓦比如 30-100 瓦和 50-2000 瓦比如 100-1000 瓦。

用于监测或“扫描”的电磁辐射的所需的功率(见下文)通常仅需加热所需的功率的一部分。通常的范围为 0.05-100 瓦比如 0.1-10 瓦。根据试样、工艺和所述的化学反应的不同也可以改变应用的时间。通常的反应时间为 0.1 秒至 2 小时比如 0.2-500 秒或 0.5-100 秒。

应用发送网络将来自放大装置的被放大的信号输送到一个或多个施放器中。

发送网络可以包括许多特征。附图 2 所示为包括所选择的这些特征的装置的实施例。附图 2 仅是说明不同的特征如何实施的实例, 在附图 2 中的顺序并不是限制性的。下面的特征可以包括在发送网络中:

-循环器 31

-双向耦合器 32

-功率表 34-38

-模拟载荷 33

-分频器 51

-组合器 50

-频谱分析器

下文参考附图 2 描述这些特征中的一些特征。

循环器 31 防止微波施放器 24 反射功率和防止发送网络 23 输入功率放大器 30。而是将反射功率集中到可连接到第一功率表 34 的虚负载 33。一些基于半导体的发生器和放大器例如碳化硅发生器/放大器并不受背向散射的微波的影响, 并且当应用这种发生器/放大器时并不需要

循环器 31.

循环器 31 适合于可操作地连接到在放大装置和发送网络之间，并且具有至少一个输入端子、输出端子和至少一个组合的输入/输出端子。输入端子可操作地连接到放大装置的输出端子和组合的输入/输出端子可操作地连接到发送网络。此外，载荷 33 和第一功率表 34 都可以并入到与循环器连接的装置中。

该发送网络可以包括耦合器比如双向耦合器 32，所说的耦合器包括一输入端子、至少两个输出端子和一组合的输入/输出端子。输入端子可操作地连接到循环器或放大器的输出端子和输出端子可操作地连接到发送网络的其它的部件上。

双向耦合器将输入和/或反射的功率的一部分集中到两个功率表 35 和 36。第三功率表 36 测量朝施放器方向所输送的部分功率，而第二功率表 35 测量在相反的方向即背离施放器的方向输送的部分功率。功率确定装置可以给控制器 45 提供功率。

发送网络还可以包括组合器 50 和分频器 51 以有利于并行处理。这些器件可以包括开关以使网络的结构可以改变。

通常，提供发送网络以发送分别应用半导体信号发生器和半导体放大器所产生和放大的电磁辐射。所产生和所放大的信号可以发送到单个或许多施放器中。

这种网络的实例是具有分频器的同轴电缆以将功率/信号线分成反馈所有的不同施放器所需的功率/信号线。实现发送网络的变型方法是应用波导、带状线等。发送网络可以与施放器成一体，如附图 3、4、5 和 6 所示。

施放器比如 24 可以是各种类型。依据本发明一些特征优选包括在施放器中。下文参考附图 2 描述这些优选特征中的一些特征。后面给出许多实施施放器的更详细描述。

施放器的最低要求是：

- a) 一个输入端子 12
- b) 一个试样盒 1，和
- c) 将微波能量限制在输入端子 12 中的装置。

为了根据在试样中所吸收的（或通过施放器反射的）能量来控制信号发生器和放大器，必需采取一些措施测量在施放器中所吸收-和所

反射的总的能量。

为了确定在试样中的所吸收的功率（能量）的多少，施放器包括确定电磁场强度的装置。施放器包括可操作地连接到吸收从施放器所反射的能量的载荷 33 的输出端子。此外，第四功率测量装置 37 可操作地连接到载荷 33 和控制装置 45。还有，环形天线 13 起微波接收装置的功能。环形天线连接到第五功率测量装置 38 和控制装置 45。

上述的载荷 33 和环形天线 13 都用于监测和接收通过试样 1 将能量传输到功率测量装置 37 或 38 所发射的微波。在试样上所辐射的功率和通过试样所发射/反射的功率之间的差值（根据具体的结构应用相应的功率表测量）表示在系统中的能量损失和在试样中所吸收的能量的总和。在将试样放入施放器之前通过测量未加载负荷的施放器的系统损失来校准施放器。在试样中吸收的能量的特征在于在给定的温度和频率下试样的电介质特性。通过扫描在给定范围例如 1-4 千兆赫兹内的频率并监测来自载荷 33 或接收天线 13 的信号以及来自 35 的反射信号，因此可以跟踪化学反应的进展。

施放器还可以包括可操作地连接到控制器的传感器以监测和控制施加到试样的微波能量。还可以包括在加热的过程中（以及任何中间的非加热阶段）测量表示反应或过程程度特征的任何参数的传感器，这些参数比如压力、温度、pH 和导电率。在 W094/24532 中描述了一种可行的用于微波腔的温度传感器。这种传感器的输出还可以用于测量在试样中所吸收的功率的多少。

频谱分析仪可以连接到功率测量装置，而功率测量装置的频率可以是频率可选择的。如果集中到施放器的电磁信号是时间的函数，例如脉冲发送的，则对在试样上的脉冲辐射的时间和频率频谱和所反射/发射的信号的分析可能产生对试样的有用的信息。这种分析可能包括对所测量的信号进行傅立叶变换。这种特征并不特定连接到施放器，而是在系统中的不同位置上的功率表连同可能包括在控制器中的分析装置的测量值的组合。

可取的是，施放器是可调的，以便根据所使用的频率它可以调谐到支撑模式。应该指出的是施放器可以具有准静态的、近场、表面场、单模腔或多模腔以及开口腔。例如通过调整施放器的某些几何参数比如谐振器杆，可以将它的谐振频率调谐到对应于连接到输入端子 12 的

信号频率。

试样 1 可以直接放在施放器中，但是通常将该试样放在打开或密闭的试样盒 2 中。这种试样盒可以与施放器或由适合于在微波加热中使用的任何材料制成的分离的反应容器连成一体。正如本领域的熟练技术人员所熟知，形成试样盒的材料优选不吸收微波能量。可以使用各种类型的聚合物和玻璃。具体地说，当同时加热许多试样时优选使用各种类型的盘子、微滴板等。许多试样盒可以组成试样盒组，这种试样盒组能够对所有的试样同时进行很均匀的加热。

试样盒还具有试样入口和出口以在处理步骤或整个过程中或之间将试样放入施放器和试样盒或从其中取出。

在施放器中自由空间可以以惰性气体填充以免在气体和试样之间产生反应。然而可取的是试样盒包括盖子。可取的是施放器包括至少一个入口/出口以将惰性气体输入到在试样上的空间中。一种可变型的方案是，以活性气体比如 H_2 填充在试样上的空间， H_2 在氢化反应中很有用。

可取的是施放器能够保持由化学反应形成的或有意形成的较高的内压以产生作为反应参数的高压大气。较高的内压通常用作增加在液相的沸点之上的试样温度。将这种压力保持在不高于或不低于预定的水平或预设值。压力系统具有安全阀功能以保护压力部件和人身安全。

快速冷却试样是很实用的特征，它可以包括在施放器中。通常当冷却试样而不使用任何冷却装置时，试样的温度达到周围环境温度的时间很长，这就导致了不希望的副反应和其它的不希望的现象。因此可以应用强制冷却来使试样冷却到预定的温度所需的时间最小。冷却装置可以是任何类型的冷却装置，比如循环空气、循环水或其它液体冷却介质、珀耳帖 (peltier) 元件等。冷却装置还可以用于控制在循环过程中的温度。冷却装置的一种重要应用是应用在试样的温度循环是理想的情况。应用预编程的温度周期来控制以微波加热试样和应用冷却装置来冷却试样。这种应用的实例是执行 PCR 反应 (聚合酶链式反应 (Polymerase Chain Reaction)) 的温度循环。

控制器 45 具有如附图 2 所示的中心功能块。控制装置是基于计算机的系统以对该装置和其所有的模块/部件进行控制 (运行时间控制) 和编程。

控制器 45 可以连接到在网络中作为用户接口的一个或几个 PC 和/或用于几个微波装置的计算装置。这样就可以使用存储数据和/或处理数据和/或涉及预定的过程参数的数据的存储装置。

5 通过控制器 45 提供给发生器 28 的控制信号可以根据来自施放器 24 的背反射或发射信号的第一函数进行改变, 所说的背反射或发射信号可以通过一个功率测量装置 34-38 来检测。通过控制器提供给放大装置 29 和 30 的控制信号可以根据来自施放器的背反射或发射信号的第二函数进行改变, 所说的背反射或发射信号可以通过一个功率测量装置 34-38 来检测。

10 提供给发生器 28 的控制信号确定了输出频率, 提供给放大装置 29 和 30 的控制信号确定了被放大的信号的幅值。被放大的信号的幅值按时间函数变化。

控制系统具有三个不同的运行模式:

- 1) 加热模式
- 15 2) 监测模式
- 3) 编程模式

在加热模式下运行控制器 45 将特定的要求输入到控制的配置中。控制器能够设置并控制来自信号放大器 29 和功率放大器 30 的功率。此外控制器还能够调制信号发生器 28 所产生的信号以产生输出信号, 20 这种输出信号是一种时间函数比如矩形或三角形波形。在相同的情况下, 信号的占空比必需可调以降低所发送的信号功率。

通过将第一控制信号输送到信号放大器 29 和将第二控制信号输送到功率放大器 30 来实现上述的特征。

25 并入在控制器中的另一个特征是能够控制信号发生器的输出频率。此外, 关于频率扫描的设置即起始频率、终止频率、频率分辨率以及扫描时间都必需可以从控制器控制。起始频率是在 0.5-300 千兆赫兹的范围内, 优选在 1-30 千兆赫兹的范围内。在其间改变电磁辐射的频率之间的预定值是在 0.5-300 千兆赫兹, 优选在 1-30 千兆赫兹。

30 此外, 整个过程或部分过程(如果它涉及不止一个步骤)的过程时间应该可控制。

通过功率表 36 实现测量到施放器的输入功率, 然而, 功率表 36 的最佳位置取决于发送网络的精确配置。同样, 以功率表 34 或 35 测量

来自施放器的反射功率，而 37 或 38 测量从施放器耦合出的功率。通过由于空腔来校准该装置以测量在施放器中的损失可以测量在施放器中吸收的功率。可以在处理试样的频率范围内完成这种校准。通过减去和空施放器的反射功率损失功率可以计算吸收的功率。

- 5 通过功率表 34 至 38 所测量的功率信号发送到控制器以用于控制该信号发生器 28 的频率和/或在信号放大器 29 和/或功率放大器 30 中的增益。

10 控制器 45 还可以提供系统部件-比如定向耦合器 32、循环器 31 等的控制信号。控制器可以提供其它类型的信号处理。通过应用前文所述的传感器，控制器还能够控制和监测试样参数比如温度、压力、pH、导电率等。通过这种参数的电流测量，如果参数达到预定值则该控制器能够响应。可以设置在该过程中不会被超过的最大值和在该过程中不会比其更低的最小值。

15 确定在电磁辐射和试样之间的耦合并改变辐射的功率和频率是关键。此外，可以根据反馈信号电平的变化超过预定的阈值来改变电磁辐射的频率。在电磁辐射和试样 1 之间的耦合效率（作为反射系数测量）和涉及频率的数据可以存储在存储器中以便进一步处理。

20 在监测模式中，可使用扫描函数，该函数从第一扫描（给定通道基线）对该信号进行归一化，并监测在随后的许多扫描周期中与归一化基线的差值。另一个可用的特征是可以跟踪和锁定到给定在试样 1 中所吸收的最大的功率的频率（移动最大值）。微波发生器 28 的频率可在中心频率周围至少 30%的范围上调整。

25 当该装置在编程模式中运行时，操作员必需能够使用内置的高级方法编程语言产生、存储、检索以及编辑。一种方法是在其中每个事件都具有至少一个过程作为输入的事件的预编程序列。过程参数例如有功率、时间压力等。

该装置还可以包括采集和处理所有数据并存储和/或从内部和/或外部数据库检索所说的数据的装置。

30 通过应用具有与至少一个如下可变的参数相结合的所说的监测和控制装置的装置：频率、波形、功率、时间、温度、压力、人造大气，能够使所说的化学反应的这些条件最佳并保持这些最佳的条件。

再次参考附图 2，所示为产生有助于化学和生物反应的微波的装

置。这些装置的一个主要特征的目的是使所说的化学反应的反应条件最佳化。该装置的另一组特征的目的是监测并控制所说的化学反应的最佳条件。再一组特征的目的在于过程数据采集、数据处理、存储和从内部和/或外部数据库中检索数据。

- 5 当两个或更多的起始物质进行化学反应时，在它们的物理和化学特性方面产生了变化。这些特性的变化通常取决于温度。经常以升高了的温度进行化学反应以增加反应速度或输送足够的能量来使反应初始化并保持反应。所输送的能量的形式可以是热辐射、超声、微波等。在微波作为能量的输送形式的情况下，输送到反应物质的能量取决于
- 10 在化学反应的过程中起始物质和所形成的物质的电介质特性。电介质特性取决于温度并因此在化学过程中变化。在化学反应中由于形成了新的化学物质也会使电介质特性发生变化。物质的电介质的特性随频率的变化也是已知的。

- 15 在具有频率调谐的装置中，在特定的频率下能够最佳地将能量耦合到反应中。根据试样取决于温度的介电常数 ϵ' ，这种频率依据在反应中的温度变化。

- 术语“化学反应”是指涉及在两个原子之间形成或分解（共价）键的任何有机和无机反应以及群和大分子的构象体反应。应该理解的是该术语也包括在其中酶作为催化剂的反应例如聚合酶链反应（PCR）
- 20 以及类似的类型的反应。化学反应优选是包含有机化合物例如低分子有机化合物和生物有机化合物（例如酶）的反应。此外可取的是发生一种或更多种的有机化合物的化学组成的变换。

- 化学反应通常是有机化学反应，所有的公知的有机化学反应实际上都可以使用。典型的反应类型有聚合/寡聚化、酯化、脱羧基、酯化、
- 25 氢化、去氢、添加比如 1, 3-双极添加、氧化、异构化作用、酰化、烷化、酰胺化、芳基化、狄尔斯阿德耳反应（Diels-Alder reaction）比如 maleinisation 和 fumarisation、环氧化、甲酰化、羧氢化、硼氢化、卤化、羟基化、金属氢化、还原、磺化、甲基胺化、臭氧分解等。可以相信的是依据本发明的装置和方法特别适合于包含一种或多
- 30 种的催化剂的反应和不对称的有机反应。

化学反应在适合的溶剂中进行或以无杂质的形式进行。当使用溶剂时，可取的是在室温下耗散因子（损耗角正切）大于 0.04。适合的

溶剂的实例有乙腈、DMF、DMSO、NMP、水、第三丁醇、EtOH、苯基氯、乙二醇、丙酮、THF。所产生的辐射的信号频率可以调谐到所使用的溶剂的吸收带/峰值。

5 化学反应通常包含起始物质（基质或“化学物种”）、试剂和可选的催化剂（例如酶比如 athermostable DNA 聚合酶）。起始物质可以是处于任何状态的任何化学基质、固相、液相或气相。所包括的起始物质都是用于在化学反应中的反应的固体载体的所有的物质。起始物质还包括在化学反应中所形成的所有的物质（化学物质）并可以作为在相同的过程中或在相同的装置中所进行的新的过程中的随后的化学反
10 应的新的起始物质。起始物质或试剂也可以包括在人造大气的气态中。在该装置中所执行的前面的化学反应所产生的化学产物还应该作为在该装置中随后所执行的化学反应的起始物质。

施放器 24 包括将微波能量施加到一个或更多个试样 1 中的腔体。应该理解的是在依据本发明的装置中各种类型的腔体和腔体的结构代
15 表施放器的不同的实施例。由于在原理上该装置可以包含任何公知类型的施放器（虽然具有不同的成功的可能性），但是本发明并不限于所述的特定的变型。在下文中，描述了说明不同的施放器设计和并行处理程度的不同的实施例。这些实施例可以作为在附图 1 和 2 中的施放器 24。

20 附图 3 所示为阵列地安装的许多腔体。这种阵列可以是（但并不限于）微滴板 4。每种腔体都通过盖子 6、底板 8 和外部金属管 17 确定。每个腔体包括试样盒 2、用于调整腔体的谐振频率的谐振器杆 16、输入和输出信号环形天线 18 以及可选择的气体入口/出口 15。如附图 3 所示经过环形天线 18 通过电感引入微波，可替换的是也可以通过反
25 馈整个阵列的发送网络电容地引入微波。将试样放在腔体的外部管 17 中的谐振器杆 16 上。谐振器杆的长度可以调整以改变腔体的谐振频率。所有的部件都彼此电连接以形成封闭的电路。可以对腔体增压并放在人造大气中。

在附图 4A 和 B 中示出了另一种应用，在这里四个试样并孔 9 对称
30 地安装在试样盒组中。屏蔽金属罩 3 作为在腔体中包围在四个试样盒周围的壁。微波发射装置 5 放置在四个单个的试样盒之间所确定的空间的中心并由此同时辐射四个试样 1。因此在附图 4 中所示的实施例中，

并行地处理许多试样（在本实例中为 4 个）。如附图 4B 中所示，如相对于附图 3 所描述的阵列类似地设置了许多腔体。

附图 5 所示为发射或接收装置（分别为 12 或 13）安装在底板 8 上并且这些装置形成阵列的结构。盖子 6 安装在该板的顶面上，接收或发射装置 13 或 12 可以安装在该盖子上。底板或盖子可以是（但并不限于）微滴板。底板 8 和盖子与金属管 3 一起确定了腔体。可以在金属管中插入由适合的材料（例如玻璃或聚合物例如聚苯乙烯）制成的管瓶以作为试样盒 2。冷却装置可以连接在底板上。为了耗散没有被吸收的微波，盖子可以包括吸收微波的材料。冷却装置也可以连接到盖子以处理所耗散的能量。用于人造大气的入口/出口 15 可以连接到盖子和/或底板上。可以通过应用人造大气或从化学反应中内部产生的压力来对反应容器增加压力。通过在 12 或 13 处应用较高的介电常数壳体实现场密封。因此可以取去该盖子，施放器变成开口式施放器。

附图 6 所示为每个试样井具有单个的天线 5 的微滴板，其中将天线插入在试样井中。试样井呈阵列设置并且金属管 3 包围在每个井的周围作为屏蔽。玻璃或塑料的试样盒 2 通常插入在金属管 3 中作为试样盒。在如附图 3 和 5 所示的实施例的情况下，单个处理每个试样。

应用微波和微波腔的结构工作的基本规则和指令例如描述在 Gabriel 等人的文章中（Chem. Soc. Rev. 1988 Vol.27, pp 213-223 和 Microwave Engineering, Harvey (ed.), Academic Press, London 1963（尤其是第 4-6 章））。

依据本发明的装置适合于加热包括至少一种有机化合物的至少一种反应混合物（试样）。反应混合物或每种反应混合物（试样）可以进一步包括一种或更多的试剂和可选的一种催化剂（例如酶）。

在尤其有利的实施例中，该装置适合于同时或顺序地或间歇地加热至少两种或更多的混合物。

在本发明的一种重要的实施例中，并行地执行许多化学反应。由于依据本发明的装置的成本效率结构这是现实的。附图 1 所示为在后面对许多试样进行并行处理的原理。

如前文所述依据本发明的第三方面本发明还提供一种同时或顺序地执行许多化学反应的方法。

本方法和下文所述的方法都适合于应用在此所定义的装置执行。

例如在最佳的过程中和在化合物的库结构中, 一个重要的事实是
可以使电磁辐射适应于每个试样(例如在频率、加热时间、功率、信
号脉冲、信号周期等方面)。在后一种情况中, 在各种试剂和各种基质
(和酶)中的任何反应性的差别都可以通过该装置进行补偿。因此,
5 在本发明的进一步的实施例中, 该装置用于制备化合物的组合库(至
少4种化合物)。此外, 依据本发明的装置和方法都可以用于在并行处
理中制备大量的化合物, 其中这些化合物并不是组合库的一部分, 即,
其中的化合物并不具有共同的结构特征。由于该装置能够将电磁辐射
的应用耦合到每个独立的试样中, 因此这就能够进行并行处理。进一
10 步有益的变型方案是通过应用具有试样入口和试样出口的试样盒来连
续地制备化合物。在后一种情况中, 可以将试样放置在环行或螺旋形
管的试样盒中, 随后通过试样入口引入漂洗液, 由此使试样通过试样
出口从试样盒中出来, 随后引入新的试样。在微波加热的情况下由于
相对较短的反应时间, 大量的试样可以并行地(几个试样盒)或顺序
15 地(一个试样盒)进行处理。

处理参数即关于电磁辐射的频率和功率都通过控制器(45)进行
控制。从上文中应该理解的是电磁辐射优选通过基于半导体的信号发
生器产生, 尤其是通过在本发明的第一方面中所描述的装置产生的。
在某些应用中, 例如在要求加热/冷却循环的场合, 优选间歇地施加电
20 磁辐射。可替换的是任何冷却装置都可以间歇地启动。

如上文所述, 特别使电磁辐射适合于每种试样即每种试样/试样
盒, 并且独立地选择处理参数。这就意味着可以在不同的条件下处理
每个试样, 或者在基本相同的条件下处理试样组但对于每个试样组的
条件不同, 或者所有的试样都在基本相同的条件下处理。在一组试样
25 都在基本相同的条件下进行处理的情况下, 有利的是仍然能够应用基
本如在附图4中所示的施放器, 其中试样盒集中在由两个或更多的试
样盒组成的组中(在附图4中四个试样盒为一组)。这种试样盒组通常
由2-1000个试样盒组成, 典型的是3-96个试样盒。

该装置能够产生表示化学反应完成和进展的数据。这种数据可以
30 存储在可选地与控制连接的数据库中。此外, 该数据库可以具有
关于从化学反应中所出现的产物的信息, 例如纯度、对映体的纯度、
产量等。在不同的条件下(例如, 关于如下的条件: 频率、加热时间、

5 加热周期、加热功率、试剂浓度、基质和任何催化剂、信号波形、反射功率、发射功率、温度、压力、人造大气、试样管瓶的类型等)在不同的腔中同时地或在不同的条件下在相同或不同的腔中顺序地对许多反应化合物进行加热,都将适当地分析(例如自动地统计分析)这些数据并为随后类似的化学反应提供惟一可能的最佳反应条件。可以应用适合的方法分析并评价所处理的数据以得到最佳的参数设置和条件。通过多变量数据分析对该过程的结果进行处理以使其最优化。

10 此外,可以为随后的相同类型的反应提供一组适合的反应条件,例如应用特定种类的催化剂的取代反应,应用特定基质的狄尔斯阿尔德耳反应等。

在本发明的进一步方面中,可以设想通过该装置的输送器识别用于许多标准类型的反应的最佳(或适合的)过程参数的这种数据并依据本发明一同提供。因此,在优选的实施例中,与控制器相连接的存储包括用于预定的过程参数而设计的一部分。这种部分可以制成可更换的存储器卡(或“智能卡”),通过该装置的供应器可以定期地更新这种卡,并将它提供给该装置的用户。

20 因此,本发明还涉及一种方法和使用,其中通过在所述的化学反应中的预设值确定电磁辐射的使用周期、所发射功率的等级以及输送到在施放器中的试样的电磁辐射的频率。这种预设值存储在与该装置的控制器相连接的存储装置中。

因此,如前文第九方面所描述本发明的进一步有利的方面是本发明涉及一种在可选的催化剂的作用下使化学物种与试剂进行化学反应的一套设备,其中在如本发明的第一方面中所描述的装置中执行化学反应。

25 在第九方面中,应该理解的是该成套设备所提供的试样盒包括一种或多种所需的试剂和/或任何适合的催化剂以使用户仅需要给该试样盒提供化学物质。该设备还优选提供溶剂(如果需要溶剂的话)以确保试剂和催化剂能够完全溶解/分散。可替换的是,试样盒可以包含固定形式的试剂和/或催化剂以有利于隔离化学反应的产物。

30 该装置能够执行许多其它重要的方法以执行化学反应。在一个实施例中,在施加电磁辐射之前(反射系数的基准组)和之后通过扫描试样来同时监测反应的进展。通过在加热之后和之前(基准组)比较

一组反射系数，确定该进展。在基准条件（空的施放器）和在施放器中放入试样的条件之间的微波信号的比较描述在 US5, 521, 360 中。就本发明而言，通过控制器（45）根据所测量组的反射系数可以改变过程参数。可取的是，在进行比较之前对耦合效率组进行归一化和/或变换。

因此，如上文所述依据本发明的第三方面本发明提供一种执行化学反应的方法。

在上文所述的方法中的一种有用的变型方案（“生物传感器”变型）中，在将化学物质放入试样之前首先（参考）改变频率（步骤（b））（一次“扫描”）。该试样包括酶或无机分子或细胞，对于这些化学物质是一种基质或一种配合基。然后执行随后的“扫描”并且希望反射系数之差体现在化学物质和试样成分之间的相互作用。对于研究在配合基/基质和酶之间的相互作用本实施例是一种特别有用的变型。在这种变型方案中经常省去加热（步骤（c））。此外，仅需要重复该步骤以研究所述的随着时间的相互作用，同样仅需要比较两组反射系数。

此外，本发明还涉及一种识别应用电磁辐射（特别是在其中预定的范围包括在电磁辐射和试样之间提供最佳的耦合的频率）的最小反射（或两个或更多个最小值）的方法。即，如前文所述依据本发明的第五方面本发明提供一种执行化学反应的方法。

此外，如前文所述依据本发明的第六方面，本发明还提供一种寻找表示局部（或全程）的反射系数的频率的同时执行化学反应的方法，即一种执行化学反应的方法。

此外，如前文所述依据本发明的第七方面，本发明还提供一种寻找在其中反射系数具有预定水平的频率的同时执行化学反应的方法，即一种执行化学反应的方法。

在此所描述的方法的一种特别有益的变型方案中，每个试样包括至少一种酶，此外每个试样都是 PCR 混合物。

PCR 反应是依据本发明的第六方面的装置的特别有益的应用，因为该装置提供了一种能够精确地改变并脉冲发送所施加的能量（由此改变 PCR 管瓶的温度）的装置。此外，该装置包括控制和监测 PCR 反应的进展的装置。

在 US4, 683, 202 和 US4, 683, 196 中一般性地描述了 PCR 技术。使

用微波辐射加热 PCR 混合物是公知的，即从 W091/12888、W095/15671 和 W098/06876 中可知，然而，通过应用依据本发明的装置进行处理相对于公知的系统具有前所未有的优点。在 W098/06876 中可以看到处理 PCR 混合物的一般规则（例如温度范围和周期数和时间）。PCR 温度循环的典型实例是高达大约 80-100℃ 的变性加热步骤（例如 0.5-3 分钟）、在其中使混合物达到大约 20-40℃ 的冷却步骤（例如 0.1 至 1 分钟）以及在大约 55-75℃ 的聚合步骤（例如 1-5 分钟）。完整的放大反应通常包含 15-100 个周期，例如大约 25-35 个周期。

应用本发明能够很精确地控制所施加的能量并以可控制的剂量施加能量和非常快速地冷却试样以减少冷却步骤。此外，它还能够通过例如在每个冷却步骤中将较低强度的微波信号施加到反应混合物来监测反应的进展，以确定反应是否完成（相对于一定的标准）。因此，优选在至少两个等级的周期中施加电磁辐射，其中至少在每个周期的一部分中冷却试样。至少两个等级可以表示 80-100℃ 和 55-75℃ 的温度水平。通常，使冷却开始以使温度达到 20-40℃ 的水平。还可以恒定地进行冷却（例如以冷块（底板）的形式）以实现更陡峭的冷却梯度。

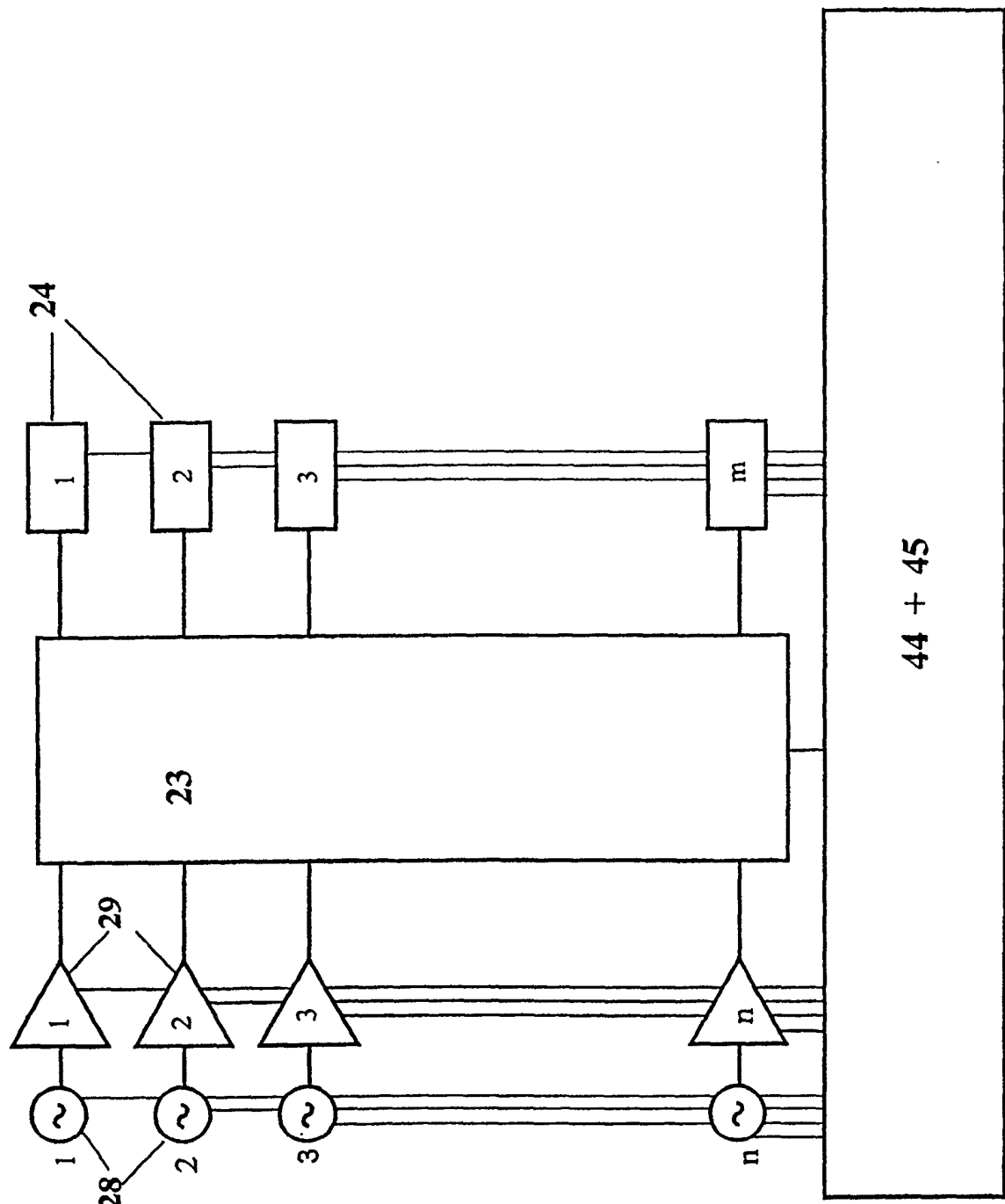


图 1

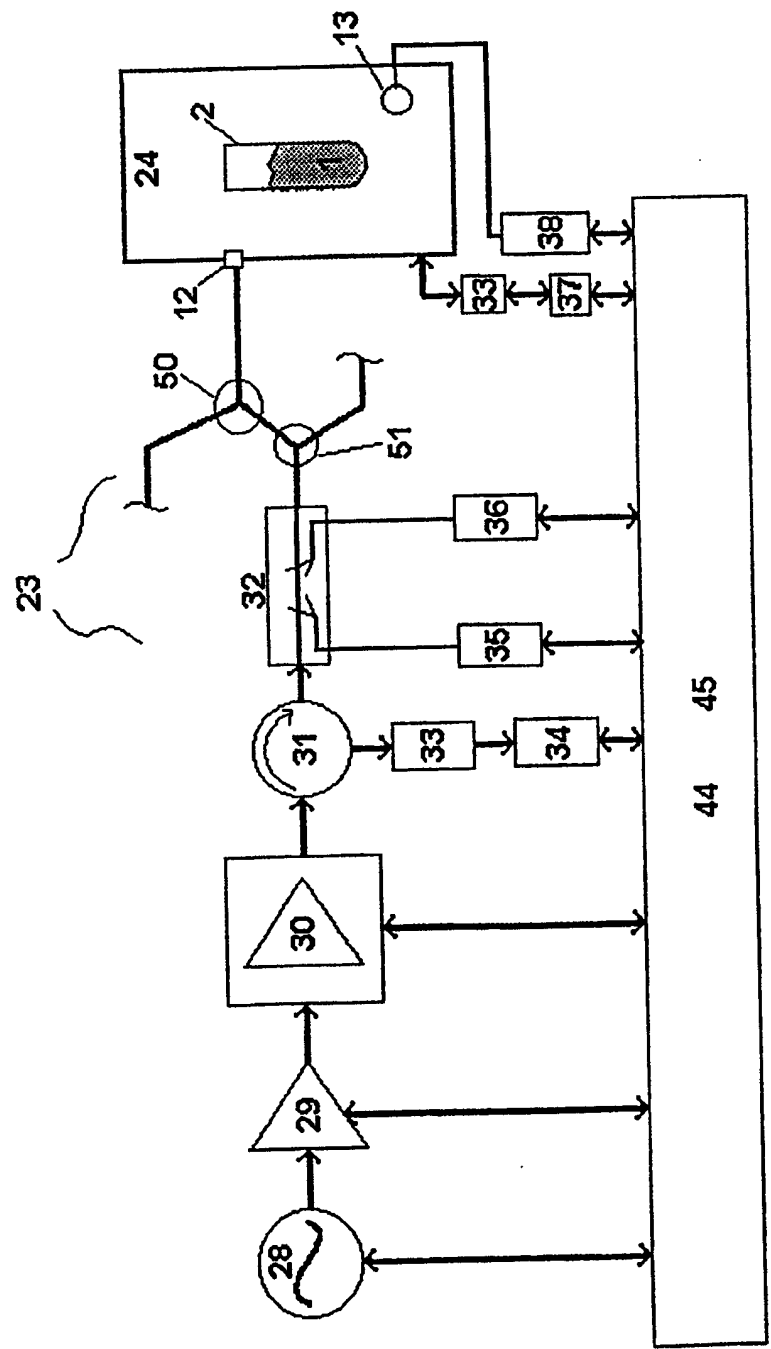


图 2

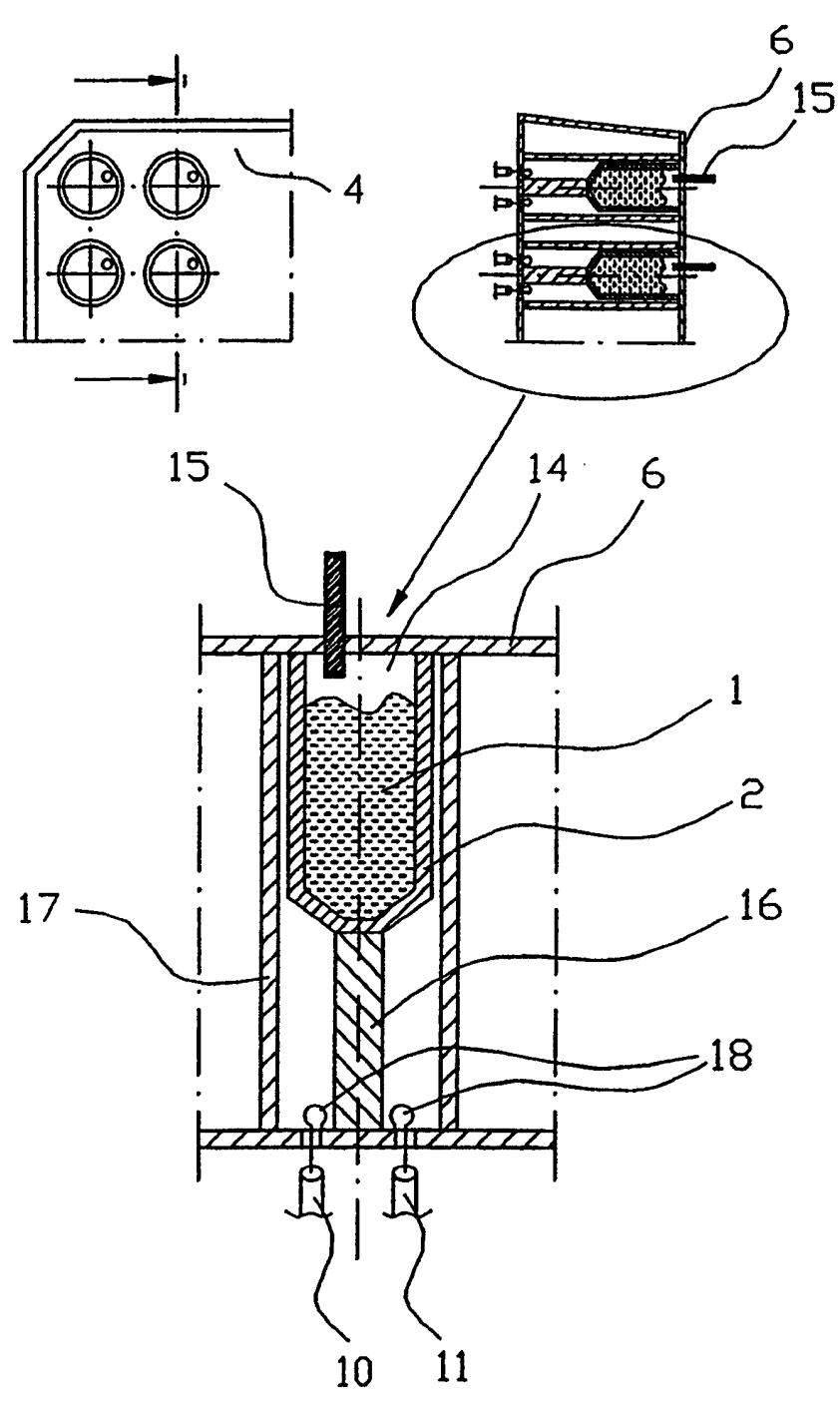


图 3

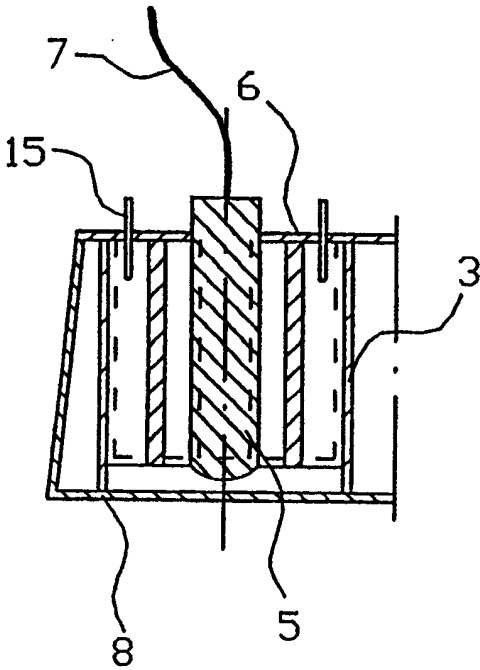


图 4A

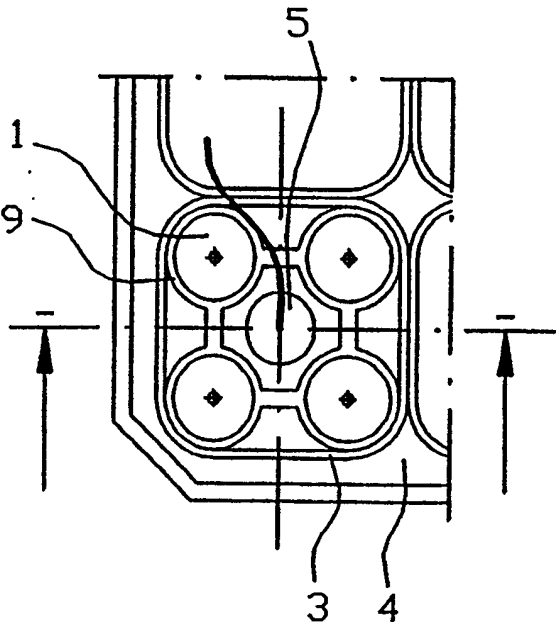


图 4B

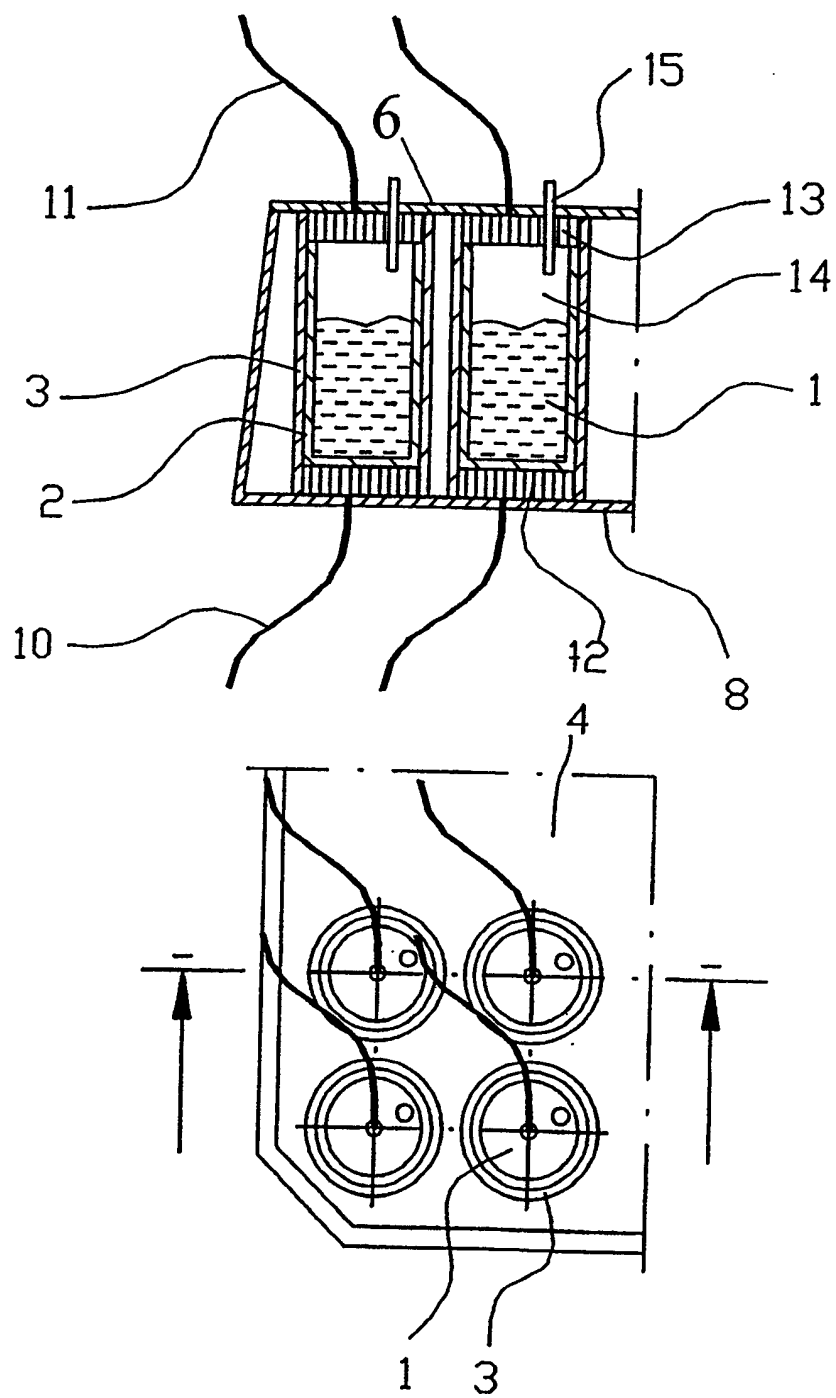


图 5

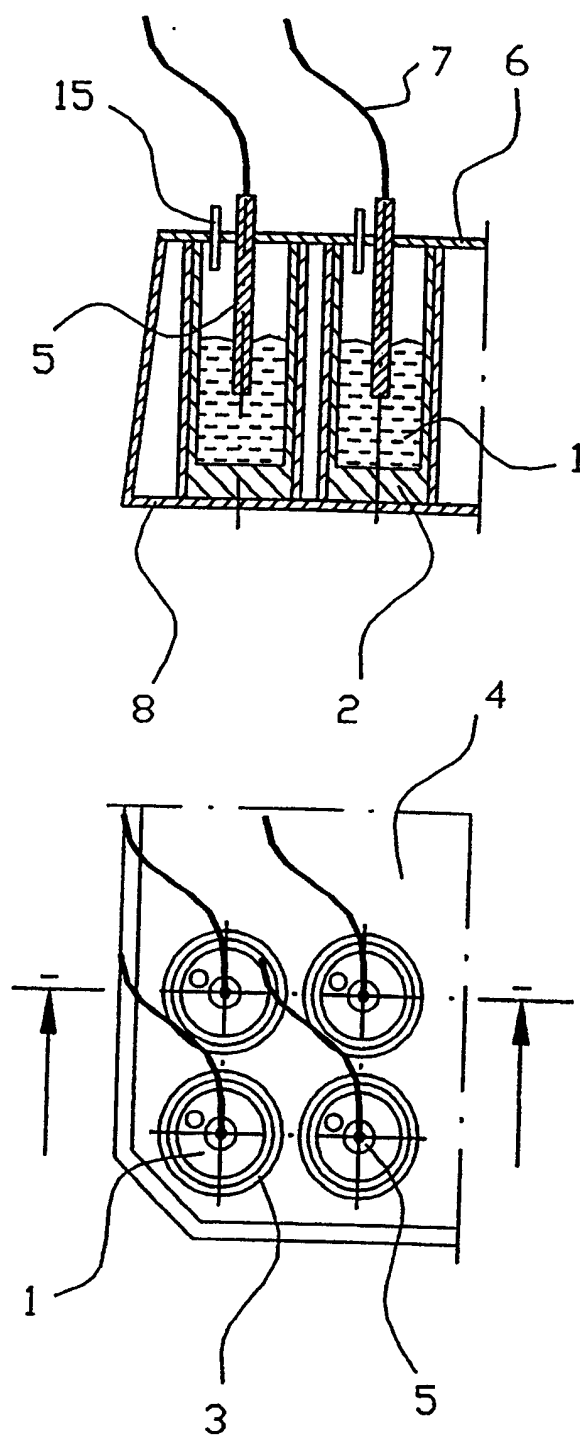


图 6