УДК: 519.25: 539.23

С.П. Коноваленко1), Т.А. Бедная2)

1 Таганрог, Таганрогский институт

им. А.П. Чехова (филиал) ФГБОУ ВО

«РГЭУ (РИНХ)»

2 Таганрог, Политехнический институт

(филиал) ДГТУ в г. Таганроге

РЕГРЕССИОННАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ СОПРОТИВЛЕНИЯ ГАЗОЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ ПЛЕНОК КОБАЛЬТСОДЕРЖАЩЕГО ПАН

Аннотация: Предложен новый подход к прогнозированию физико-химических свойств материалов по технологическим режимам их формирования. Разработанная методика применена для прогнозирования отклика чувствительного слоя сенсора газа на основе пленок кобальтсодержащего полиакрилонитрила. Построена регрессионная модель для прогнозирования сопротивления на основе данных технологических процессов получения материала (массовая доля добавки (масс. %), температура и время 2-го этапа ИК-отжига). Доказана адекватность синтезированной модели (коэффициент корреляции R=0.95, объясненная дисперсия *υ=0.90*)

Abstract: A new approach to the forecasting of physical and chemical properties of materials on technological modes of their formation is proposed. The developed method was applied to predict the response of the sensitive layer the chlorine sensor based on cobalt-containing polyacrylonitrile films. The regression model is constructed for predicting gas sensitivity coefficient on the basis of these technological processes of material (mass fraction of additives (wt.%), The temperature and time of the 2nd IR annealing step). The adequacy of the synthesized models is proved (correlation coefficient is 0.95, explained variance is *0.90*)

Ключевые слова: моделирование, физико-химические свойства, полиакрилонитрил, газочувствительность, сенсор газа.

Keywords: modeling, physical and chemical properties, polyacrylonitrile, gas sensitivity, gas sensor.

Перспективным направлением развития микроэлектроники является разработка и изготовление элементов мультисенсорных систем на основе электропроводящих полисопряженных металлорганических полимерных материалов. Варьирование параметров технологического процесса формирования структуры металлорганического полимерного материала приводит к получению сенсоров с различными электрофизическими свойствами. Целью данной работы является разработка и исследование регрессионной модели [1, 2], описывающая влияние параметров технологического процесса формирования кобальтсодержащего полиакрилонитрила (Со/ПАН) на электросопротивление газочувствительного материала. Данная модель предлагается для целенаправленного синтеза материалов и значительного сокращения времени и ресурсов.

Газочувствительный материал представляет собой пленку нанокомпозитного материала [3], которая состоит из ПАН и модифицирующей добавки в виде Сo в количестве 0,25 ÷ 1 масс.%. В качестве подложек были использованы пластины поликора.

Образцы пленок получены пиролизом под действием некогерентного ИК-излучения: проводили ИК-отжиг образцов в два этапа с применением неглубокого вакуума. Интенсивность первого этапа ИК-отжига соответствовала температуре 250˚С, а интенсивность второго этапа ИК-отжига – 350 ÷ 500˚С. На первом этапе ИК-отжига время воздействия составило 15 минут, на втором этапе – при каждой температуре было различным (2 ÷ 10 минут). Измерения сопротивления полученных образцов проводили на тераомметре Е6-13А. Сопротивление плёнок ПАН, в которых присутствует Со, на несколько порядков меньше в сравнении с пленками ПАН, полученных в аналогичных технологических режимах.

База данных моделирования состоит из более 100 строк (массовая добавка и технологические режимы получения образцов). В результате обработки экспериментальных данных, используя метод наименьших квадратов (МНК), который был реализован при помощи пакета программ Maple 12, построена регрессионная модель для прогнозирования сопротивления полученных образцов пленок кобальтсодержащего ПАН.

Полученная модель имеет достаточно высокие статистические показатели. Результирующее уравнение модели имеет следующий вид:

, (1)

где *T2* – температура второго ИК-отжига; *t2* – время второго ИК-отжига; *m* – масса легирующей добавки. Объем выборки *n=80*; коэффициент корреляции *r=0,95*: коэффициент детерминации *r2=0,90*; критерий Фишера *F=231,02*; объясненная дисперсия *υ=0,90*. Все коэффициенты уравнения (1) статистически значимы и находятся соответственно в пределах *[-27,98;-23,93], [-1,09;-0,19], [-3,23;-1,65], [162,04;186,88].* Построенная модель адекватно описывает зависимость значения сопротивления пленок Co-содержащего ПАН с параметрами технологического процесса их формирования.

Включение в модель дескрипторов – температура и время первого этапа ИК-отжига – не приводит к существенному улучшению ни статистических показателей модели, ни ее прогнозирующей способности. Наибольшую значимость для данной модели имеют температура и время второго этапа ИК-отжига, концентрация модифицирующей добавки.

Способность прогнозировать значение сопротивления получаемых нанокомпозитных материалов, позволяет существенно сократить количество проводимого эксперимента. Задавая определённые технологические параметры, можно получать материалы с желаемой степенью сопротивления.

Литература:

1. *Дрейпер Н., Смит Г.* Прикладной регрессионный анализ. Множественная регрессия. – М.: Диалектика, 2007. – 912 c.
2. *Морозова Т.Ф., Демин М.С., Морозов А.С.* Регрессионный анализ экспериментальных данных электрофизических свойств тонких слоев магнитной жидкости // Наука в современном информационном обществе: матер. IX Междунар. науч.-практич. конф. США, Северный Чарльстон. Изд-во CreateSpace, 2016. С. 136–139.
3. *Коноваленко С. П., Бедная Т. А.* Исследование влияния модифицирующих добавок на газочувствительные свойства пленок на основе полиакрилонитрила к хлору // Перспективные материалы. 2017. №3. С. 33–40