УДК 544.163.2:004.94

Коноваленко Светлана Петровна
(Таганрогский институт им. А.П. Чехова (филиал) РГЭУ (РИНХ), доцент, к.т.н., доцент, Россия, г. Таганрог, svetlana\_s12@mail.ru)

S.P. Konovalenko
(Taganrog Institute named after A.P. Chekhov (branch) RSEU (RINH), Associate Professor, Ph.D., Associate Professor, Russia, Taganrog, svetlana\_s12@mail.ru)

МОДЕЛИРОВАНИE СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ СЕНСОРОВ ГАЗОВ НА ОСНОВЕ ОРГАНИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

MODELING THE PROPERTIES OF GAS SENSOR MATERIALS BASED ON ORGANIC SEMICONDUCTORS

Аннотация. Разработан подход для моделирования газочувствительных и физико-химических свойств материалов на основе органических полупроводников. В основе подхода лежит использование различных методов моделирования: линейный, нелинейный регрессионный анализ и нейронные сети. В качестве внешних сигналов для моделирования выбраны параметры технологического процесса формирования материалов: массовая доля металла в пленкообразующем растворе, температура и время первого и второго этапа отжига.

Abstract. An approach has been developed for modeling the gas-sensitive and physicochemical properties of materials based on organic semiconductors. The approach is based on the use of various modeling methods: linear, nonlinear regression analysis and neural networks. The parameters of the technological process of the formation of materials were selected as external signals for modeling: the mass fraction of metal in the film-forming solution, the temperature and time of the first and second stages of annealing.

Ключевые слова: моделирование, газочувствительность, регрессионный анализ, полиакрилонитрил.

Keywords: modeling, gas sensitivity, regression analysis, polyacrylonitrile.

Для детектирования токсичных газов в воздухе необходимым является поиск новых материалов и создание на их основе эффективных газоанализаторов. Одним из перспективных направлений в этой области является создание сенсоров на основе органических полупроводников. Такие сенсоры обладают высокой чувствительностью и достаточно просты в проектировании. Одним из таких материалов является полиакрилонитрил (ПАН).

С целью сокращения эксперимента для уменьшения материальных и временных издержек необходима разработка математических моделей для определения физико-химических свойств газочувствительного материала и функциональных характеристик сенсоров газов на их основе.

При моделировании зависимости свойств объектов от технологических параметров необходимо определить область определения функция, в пределах которой наблюдается свойство объекта (например, полупроводниковые свойства материалов). Функциональную зависимость можно определить, используя метод наименьших квадратов или нейросетевой подход.

Для моделирования физико-химических свойств материалов и функциональных характеристик сенсоров газов на основе кобальтсодержащего ПАН в качестве входных параметров (дескрипторов) являются параметры технологического процесса формирования органического полупроводника. Для моделирования необходимо выделить входные и выходные сигналы. Для разных подходов моделирования (методов) в качестве выходных являются технологические параметры создания газочувствительных пленок: массовая доля кобальта (ω), температура и время первого (T1, t1) и второго этапов (T2, t2) ИК-отжига.

Полученные модели в пределах экспериментальной ошибки удовлетворительно описывает собранные данные, что позволяет с ее помощью оптимизировать химический состав и условия термообработки для получения эффективных низкотемпературных сенсоров газа на основе полиакрилонитрила.

С целью моделирования рассматривались нейронные сети в виде многослойного персептрона. Установлено, что лучшая работоспособность для прогнозирования газочувствительности наблюдается в сетях с двумя скрытыми слоями: в первом слое 8 нейронов, во втором – 5. Для обучения сети использовался один из методов, показавший наибольшую эффективность: быстрого распространения, дельта-дельта-с-чертой, Квази-Ньютон, обратного распространения, сопряженных градиентов, Левенберга-Маркар. В результате теоретического исследования выбран метод обратного распределения ошибки.

Материал поступил в редколлегию 05.10.21.