

## МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ СЕНСОРОВ ГАЗОВ НА ОСНОВЕ ОРГАНИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

**Светлана Петровна Коноваленко**

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

*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.*

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

### MODELING THE PROPERTIES OF GAS SENSOR MATERIALS BASED ON ORGANIC SEMICONDUCTORS

Svetlana P. Konovalenko

Taganrog Institute named after A.P. Chekhov (branch) RSEU (RINH), Associate Professor,  
Candidate of Technical Sciences, Docent, Russia, Taganrog, svetlana\_s12@mail.ru

*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.*

*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 ( $\omega$ ), температура и время первого ( $T_1, t_1$ ) и второго этапов ( $T_2, t_2$ ) 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 принят к публикации 05.10.21.*