

Раздел IV. Электроника и нанотехнологии

УДК 621.317.799:539.216.2:539.217.5:541.67

Т.А. Бедная, С.П. Коноваленко

ИССЛЕДОВАНИЕ СТАБИЛЬНОСТИ СЕНСОРОВ ГАЗА НА ОСНОВЕ КОБАЛЬТСОДЕРЖАЩЕГО ПОЛИАКРИЛОНИТРИЛА

В связи с загрязнением атмосферы токсичными газами важной является проблема измерения их концентрации в воздухе. Для обнаружения токсичных веществ в воздухе необходимы сенсоры газов, которые будут являться не только надежными, высоко чувствительными, селективными и обратимыми в благоприятных температурных условиях, но и оставаться стабильными в течение достаточно долгого времени. В настоящее время одной из наиболее распространенных и перспективных систем мониторинга газового состава атмосферы являются полупроводниковые резистивные сенсоры. Для их создания большой интерес вызывает возможность регулирования различных механических и электрофизических свойств полимеров путем добавления в исходную полимерную матрицу дисперсных наполнителей. Одним из перспективных с практической точки зрения направлений в этой области является создание композитных полимеров с улучшенными газочувствительными свойствами. В данной работе исследовались сенсоры на основе полиакрилонитрила (ПАН) с различным процентным содержанием кобальта. Изменяя технологические параметры процесса формирования структуры металлоорганических полимерных нанокомпозитов, появляется возможность изменения электрофизических свойств материала. Обнаружено, что внесение наполнителя (в данном случае кобальта) в исходный полимер приводит к улучшению стабильности сенсора. Целью данной работы является построение модели, которая позволяет связать стабильность значений коэффициента газочувствительности пленок кобальтсодержащего ПАН с параметрами технологического процесса формирования газочувствительного материала. Данная модель предлагается для целенаправленного синтеза материалов и значительного сокращения времени и ресурсов.

Нанокомпозитные материалы; полиакрилонитрил; нейросетевое моделирование; газочувствительные материалы; металлсодержащие органические полимеры; ИК-отжиг.

Т.А. Bednaya, S.P. Konovalenko

STUDY OF STABILITY OF GAS SENSORS BASED COBALT POLYACRYLONITRILE

Due to the pollution of the atmosphere with toxic gases is an important problem of measuring their concentration in the air. For the detection of toxic substances in the air required gas sensors, which will be not only reliable, highly sensitive, selective and reversible favorable temperature conditions, but remain stable for a sufficiently long time. Currently, one of the most popular and promising monitoring atmospheric composition are semiconductor resistive sensors. For their creation of great interest is the possibility of regulation of various mechanical and electrical properties of polymers by adding to the original polymer matrix dispersed fillers. One of the most promising from a practical point of view direction in this area is the creation of composite polymers with improved gas sensing properties. In this study we investigated sensors based on polyacrylonitrile (PAN) with different percentages of cobalt. By varying the process parameters of the process of formation of structure metal-polymer nanocomposites, it is possible to change the electrical properties of the material. It has been found that making the filler (in this case, cobalt) in the base polymer leads to improved stability of the sensor. The purpose of this paper is to construct a model that allows you to associate the stability of

gas sensitivity coefficient values PAN cobalt films with the parameters of the technological process of formation of gas sensitive material. This model is proposed for the targeted synthesis of materials and a significant reduction in time and resources.

Nanocomposite materials; polyacrylonitrile; neural network modeling gas-sensing materials; metal-containing organic polymers; IR- pyrolyze.

Введение. Создание химических сенсоров – устройств, способных селективно реагировать с газами, изменяя при этом один из своих физических параметров (электрическая проводимость, сопротивление, емкость, термо-ЭДС) – является актуальной задачей современной науки [1–3]. Основой химических сенсоров нового типа являются нанокompозитные материалы, обладающие селективностью и высокой чувствительностью, быстрым откликом и работающие при комнатной температуре [4].

Металлсодержащие полимерные органические материалы являются предметом интенсивных исследований в связи с перспективами их использования при создании сенсоров. В качестве таких материалов находят применение нанокompозитные материалы, представляющие собой органическое вещество, в котором диспергированы наночастицы неорганических веществ (металлов, оксидов металлов) в органической матрице. Совмещение свойств неорганических и органических веществ открывает широкие возможности для формирования материалов с принципиально новыми свойствами.

С целью повышения избирательности и адсорбционной активности сенсоров газов проводят модифицирование состава полупроводниковых органических материалов переходными металлами. Традиционно используют легирование наночастицами металлов, такими, как палладия [5], платины [6], золота [7–8], серебра [9–11]. Достаточно перспективным является создание металлполимерных нанокompозитов на основе полиакрилонитрила (ПАН) и частиц Co, Gd и Fe. При исследовании химических превращений в присутствии хлоридов переходных металлов установлено, что эти соединения образуют с нитрильными группами полимера донорно-акцепторные комплексы [12]. Природа металла оказывает существенное влияние на удельное сопротивление нанокompозитов, оно зависит от электропроводности металла и химического родства к электрону ионов металла.

Постановка задачи. Недостатком органических материалов в качестве газочувствительного слоя сенсоров газа является дрейф его параметров. Стабильность газочувствительного материала в результате поисков оптимального состава и технологических режимов формирования пленок увеличивается. С другой стороны, необходимо уменьшить материальные и временные затраты на поиск сенсора газа, обладающего необходимыми стабильными свойствами. Поэтому разработка статистической модели, позволяющей предсказать стабильность сенсора, весьма важна. Недостаточная разработанность общей теории физико-химических и газочувствительных свойств полимерных газочувствительных материалов не позволяет установить зависимость между свойствами пленок и режимами технологического процесса. Решением этой проблемы является использование статистических методов нахождения зависимостей между величинами. Таким образом, целью работы является построение модели, которая позволяет связать стабильность значений коэффициента газочувствительности пленок кобальтсодержащего ПАН с параметрами технологического процесса формирования газочувствительного материала.

Для достижения поставленной цели необходимо провести экспериментальные исследования и сформировать базу данных газочувствительных свойств пленок кобальтсодержащего полиакрилонитрила; разработать модель зависимости стабильности сенсоров от технологических режимов формирования пленок; используя результаты моделирования, определить параметры технологического процесса и изготовить сенсоры, стабильные во времени.

Методика исследования. В данной работе в качестве компонентов композиционного материала выбраны ПАН, которому можно придать полупроводниковые свойства посредством соответствующей термообработки и который способен изменять сопротивление при селективном поглощении молекул газа [13–14.]. В качестве модифицирующей добавки выбран хлорид кобальта (II), в результате чего достигается оптимизация адсорбционно-резистивных свойств ПАН [15].

Газочувствительный элемент сенсора представляет собой пленку нанокompозитного материала, для формирования которого использовали плёнообразующие растворы состава: ПАН в качестве электропроводящего компонента, хлорид кобальта в качестве модифицирующих добавок для повышения избирательности и адсорбционной активности ПАН [16], диметилформамид (ДМФА) в качестве растворителя обоих компонентов. Пленкообразующие растворы готовили совместным растворением соответствующей навески CoCl_2 (0,25 ÷ 1 масс.%) и ПАН в ДМФА.

Схема технологического процесса изготовления газочувствительного элемента сенсора на основе пленок Co/ПАН представлена на рис. 1.



Рис. 1. Схема технологического процесса изготовления сенсора на основе кобальтсодержащего ПАН

Чувствительность сенсора оценивали с помощью коэффициента газочувствительности S , который рассчитывается как:

$$S = (R_0 - R_g)/R_0, \text{ при } R_0 > R_g \quad (1)$$

и

$$S = |(R_0 - R_g)/R_0|, \text{ при } R_0 < R_g \quad (2)$$

где R_0 – значение сопротивления плёнки на воздухе, R_g – значение сопротивления плёнки в атмосфере детектируемого газа [17].

Изготовленные сенсоры на основе кобальтсодержащего ПАН должны быть не только высокочувствительны к детектируемому газу, но и обладать стабильностью коэффициента газочувствительности на протяжении достаточно долгого времени. В связи с этим были проведены исследования сенсоров газов на стабильность коэффициента газочувствительности к NO_2 .

В результате проведенного эксперимента были определены технологические параметры, которые позволяют получить сенсоры газа на основе кобальтсодержащего ПАН с наиболее высоким показателем газочувствительности к NO_2 (табл. 1) [18–19].

Таблица 1

Технологические режимы формирования пленок кобальтсодержащего ПАН для сенсоров NO_2

№	$\omega(\text{Co})$, масс. %	$T_1, ^\circ\text{C} - t_1$, мин.	$T_2, ^\circ\text{C} - t_2$, мин.	R , Ом
1	1	300-20	350-5	$11,5 \cdot 10^9$
2	1	300-20	350-10	$2,1 \cdot 10^9$
3	0,75	300-20	350-5	$6 \cdot 10^9$

С целью сокращения времени исследования сенсоров газа на временную стабильность были разработаны математические модели, позволяющие определить технологические параметры изготовления сенсоров стабильно функционирующих в течение длительного времени.

Для задач моделирования в течение одного месяца проводилось не менее 10-ти измерений коэффициента газочувствительности (S). Далее сенсоры разбивались на классы: в первый класс (присваивалось значение I) входили сенсоры, если S изменялся не более чем на 10 % от первоначального значения. Принималось, что такие сенсоры обладают временной стабильностью. Во второй класс (присваивалось значение II) включались сенсоры, если S после очередного измерения изменялся более, чем на 10%. Принималось, что такие сенсоры являются нестабильными. При этом также проводилось сопоставление результатов исследования временной стабильности коэффициента газочувствительности сенсоров газов в течение 200 дней и в течение 30 дней.

Для моделирования газочувствительных свойств металлсодержащего полиакрилонитрила использовались искусственные нейронные сети [20], позволяющие получать довольно сложные законы управления [21]. Основным недостатком нейронной сети является свойство «черного» ящика: нейросетевая модель не выявляет никакого физического смысла по сравнению с физико-математическими моделями.

Для создания нейронной сети использовалась искусственная нейронная сеть прямого распространения сигнала, содержащая 5 входных нейронов и один выходной. Каждый входной нейрон соответствует одному из технологических параметров, выходной – прогнозируемому свойству.

Рассматривались две сети для сенсоров на основе пленок кобальтсодержащего полиакрилонитрила, изготовленных без предварительной сушки и с сушкой в термощкафу. Для предсказания стабильности сенсоров используются сети в виде многослойного персептрона [22]. Разбиение набора экспериментальных данных представлено в табл. 2.

Таблица 2

Разбиение набора данных на обучающую, тестовую и контрольную выборки

	Всего	N^* обучения	N^* теста	N^* контроля
Нейронная сеть 1	173	87	43	43
Нейронная сеть 2	167	84	42	41

* N – количество образцов сенсоров газа.

Обучение производили с помощью метода обратного распространения ошибки [19]. Архитектура нейронной сети представлена на рис. 2.

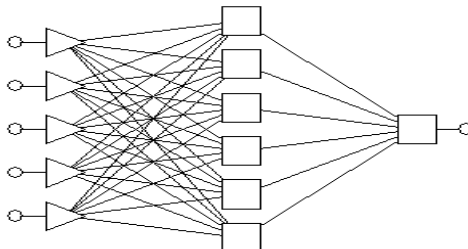


Рис. 2 Архитектура нейронной сети для прогнозирования стабильности сенсоров на основе Со-содержащих пленок ПАИ

Тестирование нейронных сетей представляет сравнение расчетных и экспериментальных данных. В таблице приведены данные статистической обработки данных нейронных сетей.

Таблица 3

Статистическая обработка данных НС моделей НС6.1

	Модель 1 (без сушки)	Модель 2 (с сушкой)
Среднеквадратическое отклонение	0,05	0,06
Ошибка обучения	0,11	0,12
Контрольная ошибка	0,15	0,16
Тестовая ошибка	0,15	0,17
Подтверждение, %	89	91

На рис. 3 представлена гистограмма распределения П подтверждения модели стабильности сенсоров газа на основе пленок кобальтсодержащего полиакрилонитрила:

П подтверждения селективности сенсоров газа рассчитывали по формуле:

$$П = \frac{m}{n} \cdot 100 \%, \quad (3)$$

где m – количество подтвержденных данных из общей выборки, n – общее число испытаний.

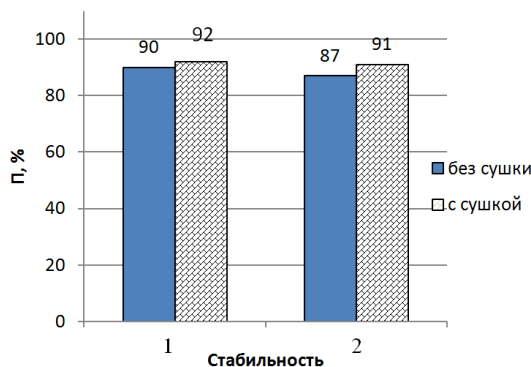


Рис. 3. Результаты расчета параметра П при моделировании стабильности отклика сенсоров на основе Со-содержащих пленок (1 – сенсоры стабильны, 2 – нестабильны)

Для проверки работоспособности моделей сформировали последовательность входных величин (не входящие в обучающий массив), получили выходные последовательности системы и сравнили их с результатами, полученными в ходе эксперимента. В результате проверки совпадение модели и эксперимента выявлено в 89 % случаях.

Полученная нейросетевая модель позволяет прогнозировать стабильность сенсоров диоксида азота.

Результаты и обсуждение. По данным модели выбраны образцы сенсора на основе кобальтсодержащего ПАН, обладающие стабильностью показаний во времени. Для проверки стабильности коэффициента газочувствительности сенсоров от времени к NO_2 в течение 200 дней измеряли сопротивление сенсоров на основе газочувствительных пленок кобальтсодержащего ПАН. Сенсор помещали в камеру для испытаний калибровочного стенда. Показания сопротивлений снимали в чистом воздухе. Дрейф коэффициента газочувствительности за 200 дней для образцов оказался равен: для 1–6,6 %; 2–4,9 %, 3–8,7 %; 4–23 % (рис. 4).

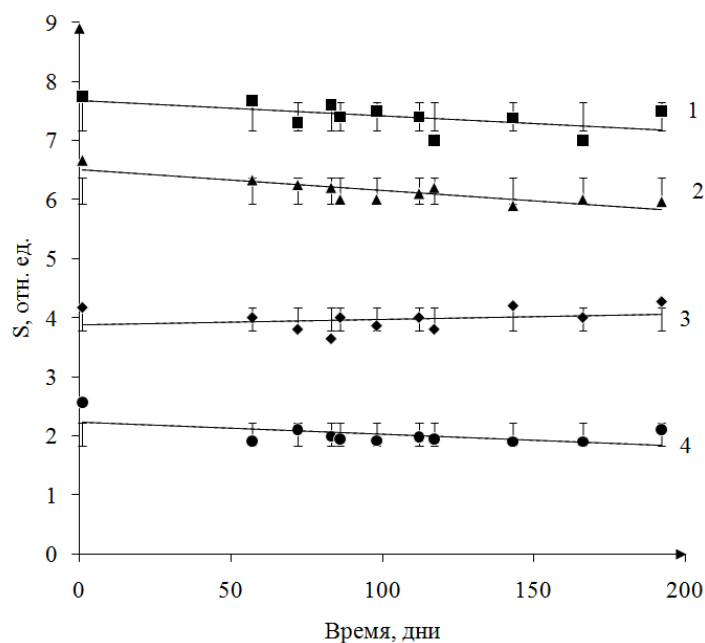


Рис. 4. Зависимость коэффициента газочувствительности к NO_2 от времени:

- 1 – $\omega(\text{Co})=0,25$ мас. %, $T_1=350$ °C, $t_1=15$ мин., $T_2=350$ °C, $t_2=5$ мин;
- 2 – $\omega(\text{Co})=1$ мас. %, $T_1=300$ °C, $t_1=20$ мин., $T_2=350$ °C, $t_2=5$ мин;
- 3 – $\omega(\text{Co})=0,75$ мас. %, $T_1=300$ °C, $t_1=15$ мин., $T_2=350$ °C, $t_2=10$ мин;
- 4 – $\omega(\text{Co})=0,25$ мас. %, $T_1=300$ °C, $t_1=5$ мин., $T_2=450$ °C, $t_2=10$ мин

Заключение. В результате разработана математическая модель, которая имеет высокие статистические показатели (с погрешностью не более 10 %) и позволяет с достаточно высокой надежностью в рассматриваемом интервале технических режимов прогнозировать стабильность значений коэффициента газочувствительности полученного материала. Основным научным результатом является то, что стабильность показаний коэффициента газочувствительности пленок кобальтсодержащего ПАН определяется температурой первого этапа отжига (более 300 °C). На основе проведенных исследований удалось получить сенсор, обладающий ко-

эффицентом газочувствительности $S = 8$ отн.ед. с дрейфом коэффициента газочувствительности не более 8,8 %. В сравнении с сенсорами на основе серебросодержащего полиакрилонитрила [23], получены сенсоры стабильные во времени, но обладающие более высоким коэффициентом газочувствительности ($S(\text{Co}/\text{ПАН}) < 8$, $S(\text{Ag}/\text{ПАН}) < 5$). Нейросетевое моделирование позволяет получить модель с высокими предсказательными возможностями и с ограниченным числом дескрипторов, описывающих главные свойства.

Полученная модель имеет практическое значение для технологии формирования пленок кобальтсодержащего ПАН, так как позволяет прогнозировать их свойства.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Harrison R., Webb J.* A review of the effect of N fertiliser type on gaseous emissions // *Adv. Agron.* – 2001. – Vol. 73. – P. 65-108.
2. *Abdul-Wahab S. A., Al-Alawi S. M., El-Zawahry A.* Patterns of SO₂ emissions: a refinery case study // *Environmental Modelling and Software.* – 2002. – Vol. 17 (6). – P. 563-570.
3. *Lemieux P.M., Lutes C.C., Santoianni D.A.* Emissions of organic air toxics from open burning: a comprehensive review // *Progress in Energy and Combustion Sci.* – 2004. – Vol. 30. – P. 1-32.
4. *Васильев Р.Б., Рябова Л.И., Румянцова М.Н., Гаськов А.М.* Газовая чувствительность границ раздела в полупроводниковых материалах // *Сенсор.* – 2005. – No. 1. – С. 21-47.
5. *Шахотин А.Н., Кудряшов С.И., Сафонова О.В., Гаськов А.М., Демидов А.В., Путилин Ф.Н.* Легирование палладием поликристаллических пленок SnO₂ методом лазерной абляции // *Химия высоких энергий.* – 2000. – Т. 34, № 3. – С. 219-235.
6. *Madler L., Roessler A., Pratsinis S.E., Sahn T., Gurlo A., Barsan N., Weimar U.* Direct formation of highly porous gas-sensing films by in situ thermophoretic deposition of flame-made Pt/SnO₂ nanoparticles // *Sensors and Actuators B: Chemical.* – 2006. – Vol. 114 (1). – P. 283-295.
7. *Choi U.-S., Sakai G., Shimano K., Yamazoe N.* Sensing properties of Au-loaded SnO₂-Co₃O₄ composites to CO and H₂ // *Sensors and Actuators B: Chemical.* – 2006. – Vol. 107. – P. 397-401.
8. *Wurzinger O., Reinhardt G.* CO-sensing properties of doped SnO₂ sensors in H₂-rich gases // *Sensors and Actuators B: Chemical.* – 2004. – Vol. 103. – P. 104-110.
9. *Kennedy M.M., Krus F.E., Fissan H., Mentha B.R., Stappert S., Dumpich G.* Tailored nanoparticle films from monosized tin oxide nanocrystals: Particle synthesis, film formation, and size-dependent gas-sensing properties // *J. Appl. Phys.* – 2003. – Vol. 93. – P.551-560.
10. *Joshi R.K., Krus F.E., Dmitrieva O.* Gas sensing behavior of SnO_{1.8}: Ag films composed of size-selected nanoparticles // *J. Nanopart. Res.* – 2006. – Vol. 8. – P. 797-808.
11. *Semenistaya T., Petrov V., Ping Lu.* Nanocomposite of Ag-Polyacrylonitrile as a Selective Chlorine Sensor // *Advanced Materials Research.* – 2013. – Vol. 804. – P. 135-140.
12. *Кожитов Л.В., Крапухин В.В., Козлов В.В., Карпачева Г.П.* Способ получения термостабильного нанокompозита Cu/Полиакрилонитрил. Патент №2330864. 2008 г.
13. *Аль-Хадрами И.С., Королев А.Н., Семенистая Т.В., Назарова Т.Н., Петров В.В.* Исследование газочувствительных свойств медьсодержащего полиакрилонитрила // *Известия вузов. Электроника.* – 2008. – № 1. – С. 20-25.
14. *Макеева Н.А., Пин Лу, Иванец В.А., Семенистая Т.В., Плуготаренко Н.К., Королев А.Н.* Прогнозирование величины отклика на диоксид азота газочувствительного материала на основе полиакрилонитрила с помощью методов теории самоорганизации // *Известия ЮФУ. Технические науки.* – 2011. – № 4 (117). – С. 149-156.
15. *Земцов Л.М., Карпачева Г.П.* Химические превращения полиакрилонитрила под действием некогерентного инфракрасного излучения // *Высокомолекулярные соединения.* – 1994. – Т. 36, № 6. – С. 919-924.
16. *Bradley J. Holliday, Thomas B. Stanford, and Timothy M. Swager.* Chemoresistive gas-phase nitric oxide sensing with cobalt-containing metallopolymers // *Chem. Mater.* – 2006. – Vol. 18. – P. 5649-5651.

17. Бедная Т.А., Коноваленко С.П., Семенистая Т.В. Сравнительный анализ газочувствительности материалов на основе полиакрилонитрила с различными модифицирующими добавками // Тез. докл. 14-й науч. молодеж. школы «Физика и технология микро- и наносистем». – Санкт-Петербург, 2011. – С. 42.
18. Коноваленко С.П., Бедная Т.А., Семенистая Т.В., Королев А.Н. Прогнозирование влияния технологических параметров формирования газочувствительных материалов на основе полиакрилонитрила на электросопротивление // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. – 2013. – № 1. – С. 48-52.
19. Семенистая Т.В., Петров В.В., Бедная Т.А. Энергоэффективные сенсоры газов на основе нанокompозитных органических полупроводников. – Таганрог: Изд-во ЮФУ, 2013. – 120 с
20. Головкин В.А. Нейронные сети: обучение, организация и применение. Кн. 4: Учеб. пособие для вузов / Под общ. ред. А.И. Галушкина. – М.: ИПРЖР.2001. – 256 с
21. Anil K. Jain, Jianchang Mao, K.M. Mohiuddino Artificial Neural Networks: A Tutorial // Computer. – 1996. – Vol. 29, No. 3. – P. 31-44.
22. Баскин И.И. Моделирование свойств химических соединений с использованием искусственных нейронных сетей и фрагментных дескрипторов: дис. ... д-ра физ.-мат. наук. – М., 2009.
23. Лу Пун. Разработка технологии изготовления и исследование характеристик сенсоров диоксида азота и хлора на основе пленок полиакрилонитрила: дис. ... канд. техн. наук. – Таганрог, 2012.

REFERENCES

1. Harrison R., Webb J. A review of the effect of N fertiliser type on gaseous emissions, *Adv. Agron.*, 2001, Vol. 73, pp. 65-108.
2. Abdul-Wahab S.A., Al-Alawi S.M., El-Zawahry A. Patterns of SO₂ emissions: a refinery case study, *Environmental Modelling and Software*, 2002, Vol. 17 (6), pp. 563-570.
3. Lemieux P.M., Lutes C.C., Santoianni D.A. Emissions of organic air toxics from open burning: a comprehensive review, *Progress in Energy and Combustion Sci.*, 2004, Vol. 30, pp. 1-32.
4. Vasil'ev R.B., Ryabova L.I., Rummyantseva M.N., Gas'kov A.M. Gazovaya chuvstvitel'nost' granic razdela v poluprovodnikovykh materialakh [Gas sensitivity of discontinuities in semiconductor materials], *Sensor [Sensor]*, 2005, Vol. 1, pp. 21-47.
5. Shakhotin A.N., Kudryashov S.I., Safonova O.V., Gas'kov A.M., Demidov A.V., Putilin F.N. Legirovanie palladiem policristalicheskikh plenok SnO₂ metodom lazernoy ablyatsii [Alloying palladium polycrystalline SnO₂ films by laser ablation], *Himiya vysokikh energy [High Energy Chemistry]*, 2000, Vol. 34, No. 3, pp. 219-235.
6. Madler L., Roessler A., Pratsinis S.E., Sahm T., Gurlo A., Barsan N., Weimar U. Direct formation of highly porous gas-sensing films by in situ thermophoretic deposition of flame-made Pt/SnO₂ nanoparticles, *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2006 Vol. 114 (1), pp. 283-295.
7. Choi U.-S., Sakai G., Shimano K., Yamazoe N. Sensing properties of Au-loaded SnO₂-Co₃O₄ composites to CO and H₂, *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2006, Vol. 107, pp. 397-401.
8. Wurzing O., Reinhardt G. CO-sensing properties of doped SnO₂ sensors in H₂-rich gases, *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2004, Vol. 103, pp. 104-110.
9. Kennedy M.M., Kruis F.E., Fissan H., Mentha B.R., Stappert S., Dumpich G. Tailored nanoparticle films from monosized tin oxide nanocrystals: Particle synthesis, film formation, and size-dependent gas-sensing properties, *J. Appl. Phys.*, 2003, Vol. 93, pp. 551-560.
10. Joshi R.K., Kruis F.E., Dmitrieva O. Gas sensing behavior of SnO_{1.8}: Ag films composed of size-selected nanoparticles, *J. Nanopart. Res.*, 2006, Vol. 8, pp. 797-808.
11. Semenistaya T., Petrov V., Ping Lu. Nanocomposite of Ag-Polyacrylonitrile as a Selective Chlorine Sensor, *Advanced Materials Research*, 2013, Vol. 804, pp. 135-140.
12. Kozhitov L.V., Crapuhin V.V., Kozlov V.V., Carpacheva G.P. Sposob polucheniya termostabil'nogo nanokompозита Cu/Poliakrilonitril [A method of producing thermostable nanocomposite Cu/Polyacrylonitrile]. Patent No. 2330864. 2008.
13. Al'-Khadrami I.S., Korolev A.N., Semenistaya T.V., Nazarova T.N., Petrov V.V. Issledovaniye gazochuvstvitel'nykh svoystv med'soderzhashchego poliakrilonitрила [Investigation of gas sensing properties of copper-containing polyacrylonitrile], *Izvestiya vuzov. Elektronika [News of Higher Educational Institutions. Electronics]*, 2008, No. 1, pp. 20-25.

14. *Makeyeva N.A., Pin Lu, Ivanets V.A., Semenistaya T.V., Plugotarenko N.K., Korolev A.N.* Prognozirovaniye velichiny otklika na dioksid azota gazochuvstvitel'nogo materiala na osnove poliakrilonitrila s pomoshch'yu metodov teorii samoorganizatsii [Forecasting the response to nitrogen dioxide of gas-sensing material based on polyacrylonitrile with the methods of the theory of self-organization], *Izvestiya YUFU . Tekhnicheskiye nauki* [Izvestiya SFedU. Engineering Sciences], 2011, Vol. 117, No. 4, pp. 149-156.
15. *Zemtsov L.M., Karpacheva G.P.* Khimicheskiye prevrashcheniya poliakrilonitrila pod deystviyem nekogerentnogo infrakrasnogo izlucheniya [Chemical transformation of the polyacrylonitrile under the influence of incoherent infrared radiation], *Vysokomolekulyarnyye soyedineniya* [Polymer Science], 1994, Vol. 36, No. 6, pp. 919-924 .
16. *Bradley J. Holliday, Thomas B. Standford, and Timothy M. Swager.* Chemoresistive gas-phase nitric oxide sensing with cobalt-containing metallopolymers, *Chem. Mater.*, 2006, Vol. 18, pp. 5649-5651.
17. *Bednaya T.A., Konovalenko S.P., Semenistaya T.V.* Sravnitel'nyy analiz gazochuvstvitel'nosti materialov na osnove poliakrilonitrila s razlichnymi modifitsiruyushchimi dobavkami [Comparative analysis of gazochuvstvitel materials on the basis of polyacrylonitrile with various modifying additives], *Tez. dokl. 14-y nauch. molodezh. shkoly «Fizika i tekhnologiya mikro- i nanosistem»* [Abstracts of 14-th scientific youth school "Physics and technology of micro and nanosystems"]. St. Petersburg, 2011, pp. 42.
18. *Konovalenko S.P., Bednaya T.A., Semenistaya T.V., Korolev A.N.* Prognozirovaniye vliyaniya tekhnologicheskikh parametrov formirovaniya gazochuvstvitel'nykh materialov na osnove poliakrilonitrila na elektrosoprotivleniye [Forecasting the impact of technological parameters of formation of gas-sensitive materials based on polyacrylonitrile resistivity], *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Materialy elektronnoy tekhniki* [News of Higher Educational Institutions. Materials of electronic engineering], 2013, No. 1, pp. 48-52.
19. *Semenistaya T.V., Petrov V.V., Bednaya T.A.* Energoeffektivnyye sensory gazov na osnove nanokompozitnykh organicheskikh poluprovodnikov [Energy efficient gas sensors based on nano-composite organic semiconductors]. Taganrog: Izd-vo YuFU, 2013, 120 p
20. *Golovko V.A.* Neyronnyye seti: obucheniye , organizatsiya i primeneniye [Neural networks: training, organization and application]. Book 4: *Ucheb. posobiye dlya vuzov* [Textbook for high schools], Under the general ed. A.I. Galushkina. Moscow: IPRZHR.2001, 256 p.
21. *Anil K. Jain, Jianchang Mao, K.M. Mohiuddino* Artificial Neural Networks: A Tutorial, *Computer*, 1996, Vol. 29. No. 3, pp. 31-44.
22. *Baskin I.I.* Modelirovaniye svoystv khimicheskikh soyedineniy s ispol'zovaniyem iskusstvennykh neyronnykh setey i fragmentnykh deskriptorov. Diss. dokt. fiz.-mat. nauk [Modelling of the properties of chemical compounds using artificial neural networks and fragment descriptor. Dr. phys. and math.sc. diss.]. Moscow, 2009.
23. *Lu Pin.* Razrabotka tekhnologii izgotovleniya i issledovaniye kharakteristik sensorov dioksida azota i khloro na osnove plenok poliakrilonitrila. Dis. kand. tekhn. nauk [The development of technology and the study of the characteristics of sensors for nitrogen dioxide and chlorine-based films of polyacrylonitrile. Cand. of eng. sc. diss.]. Taganrog, 2012.

Статью рекомендовал к опубликованию к.т.н. И.С. Коберси.

Бедная Татьяна Алексеевна – Южный федеральный университет; e-mail: bednayat@mail.ru; 347928, г. Таганрог, пер. Некрасовский, 44; тел.: 89289561532; кафедра техносферной безопасности, экологии и химии; ассистент.

Коноваленко Светлана Петровна – Таганрогский институт им. А.П. Чехова (филиал) РГЭУ (РИНХ) –e-mail: svetlana_s12@mail.ru; 347936, г. Таганрог, ул. Инициативная, 48; тел.: 89298200769; кафедра теоретической, общей физики и технологии; старший преподаватель.

Bednaya Tatiana Alekseevna – Southern Federal University; e-mail: bednayat@mail.ru; 44, Nekrasovskiy, Taganrog, 347928, Russia; phone: +79289561532; the department of technospheresafety, ecology and chemistry; assistant.

Konovalenko Svetlana Petrovna – Taganrog Institute of A.P Chekhov (Branch) RGEU (RINH); e-mail: svetlana_s12@mail.ru; 48, Inicativnaya street, Taganrog, 347936, Russia; phone: +79298200769; the department of theoretical physics and general technology; senior lecturer.