

Bahmatskaya Alexandra Igorevna – Southern Federal University; e-mail: a.bachmackaja@gmail.com; 17, Pertovskaya street, room 307, Taganrog, 347900, Russia; phone: +79281887518; the department of technospheresafety, ecology and chemistry; postgraduate student.

Plugotarenko Nina Konstantinovna – e-mail: plugotarenkonk@sfedu.ru; 52-B, Pertovskaya street, room 16, Taganrog, 347900, Russia; phone: +79054592199; the department of technospheresafety, ecology and chemistry; cand. of eng. sc.; associate professor.

УДК 539.231:547.838.53:004.942:001.53:544.23.022.246

В.В. Петров, Н.К. Плуготаренко, Т.В. Семенистая, М.М. Фалчари

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ МАТЕРИАЛОВ ПОЛИМЕРНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ ПЛЕНОК МЕДЬСОДЕРЖАЩИХ ПАН МЕТОДАМИ ТЕОРИИ САМООРГАНИЗАЦИИ

Исследована поверхность образцов пленок на основе медьсодержащего полиакрилонитрила (ПАН), который является проводящим полимером за счет образования системы сопряженных π -связей. Целью исследования является управление технологией получения материалов с точными значениями требуемых характеристик по данным расчетных моделей, как для сенсоров газа, так и для других устройств. Исследование органических полупроводников проводилось с позиции методов самоорганизации. В связи с этим, для возможности применения данных методов, в работе подтверждено наличие самоорганизующих систем в образцах пленок. Рассмотрены процессы образования фрактальных структур при формировании полимерных органических материалов на примере металлосодержащих полиакрилонитрилов (ПАН). Для установления влияния технологических параметров получения пленок металлосодержащего ПАН на газочувствительные свойства, проведены исследования методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) изображения поверхности полученных образцов. Проведен анализ морфологии поверхности методом вложения Такенса. Рассчитана величина корреляционной и фрактальной размерностей образцов пленок. Оценено влияние условий ИК-отжига образцов и концентрации модифицирующей добавки на образование фрактальных структур пленок Си-содержащего ПАН. Математические расчеты показали, что повышение концентрации модифицирующей добавки в пленках приводит к образованию выступов большего размера. Выявлено, что с ростом времени отжига при одинаковых значениях температуры, возрастает размер выступов поверхности пленок. По полученным данным в результате компьютерного эксперимента рассчитаны значения средней взаимной информации (СВИ), и найдена корреляция между значениями коэффициента газочувствительности и СВИ. На основе статистических методов была подтверждена значимость корреляции величины газочувствительности и величины СВИ, оценивающая полученную модель данных величин, как адекватную.

ПАН; АСМ; СВИ; теория самоорганизации.

V.V. Petrov, N.K. Plugotarenko, T.V. Semenistaya, M.M. Falchari

STUDY OF THE STRUCTURE OF POLYMERIC ORGANIC MATERIALS FILMS WITH A COPPER CONTENT OF PAN BY SELF-ORGANIZATION THEORY

In this work surface of Cu-containing films of polyacrylonitrile (PAN) specimen which is conductive polymer at the expense of conjugated π -bond were investigated. Research objective is control of getting technology of precision values required characteristics materials of calculated data models for gas sensor and other devices. Organic semiconductors research was taken by the methods of self-organization. In this case for the possibility of using this methods presence of self-organization systems in films samples was confirmed in this work. The processes of fractal structures formation in the getting of polymeric organic materials by the example of metal-containing polyacrylonitriles (PAN).

Investigations by the atomic-force microscopy method of surface images of getting samples were conducted for identify technology parameters of metal-containing PAN films influence on gas sensitive property. The analyze of surface morphology were taken by the Takens's method. The quantity of the correlation and fractal dimension of film samples was calculated. The effect of IR-annealing conditions samples and the concentration of modifying agent on the formation of fractal structures of Cu-containing films PAN estimated. Mathematical calculations show that increasing the concentration of modifying agent in films leads to the formation of larger protuberance. It was found that with increasing annealing time at identical temperatures, the size of the surface film projections is increasing. As a result of computer simulation the data obtained the values of the average mutual information (AMI) were calculated, and a correlation was found between the values of the coefficient of gas sensitivity and AMI. Based on statistical methods by the significance of the correlation values of gas sensitivity and magnitude of the AMI has been confirmed adequate evaluating the data model values.

PAN; AFM; AMI; theory of self-organization.

Введение. В настоящее время ведутся интенсивные исследования в новом перспективном направлении научных разработок, предметом которых является органическая электроника. Среди множества типов сенсорных систем выделяются органические полимеры, которые имеют существенные преимущества перед неорганическими полупроводниковыми материалами, такие как простота получения, низкая стоимость, высокая чувствительность при низких температурах, характерных для приземного слоя атмосферы.

Одним из видов органических материалов, используемых для создания молекулярных проводников, являются проводящие полимеры [1–6].

Предметом наших исследований является термобработанный полиакрилонитрил (ПАН), являющийся проводящим полимером за счет образования системы сопряженных π -связей вследствие протекания термохимических реакций при ИК-отжиге в интервале температур 250–500 °С [7, 8].

Адсорбционные свойства пленок ПАН возможно оптимизировать несколькими способами: введением в пленкообразующий раствор солей переходных металлов в небольших концентрациях, либо изменением молекулярной структуры за счет различных температурно-временных режимов термообработки [7–13]. В работах [14–16] показано, что высокие значения коэффициента газочувствительности имеют те пленки Cu- и Ag-содержащего ПАН, процессы самоорганизации в которых наиболее явно выражены, о чём свидетельствуют переход структуры газочувствительного материала от одного вида к другому, присутствие структур нескольких корреляционных размерностей.

Проводя исследования состава различных сенсорных полимерных материалов и используя методы моделирования, можно создать унифицированную численную модель, которая сможет обеспечить значительную оптимизацию процесса получения пленок металлсодержащего ПАН путем управления технологии получения материалов с точными значениями требуемых характеристик по данным расчетных моделей, как для сенсоров газа, так и для других устройств.

Для реализации вышеуказанной цели необходимо провести исследования параметров структуры пленок с позиции теории самоорганизации.

Особое значение уделяется проверке значимости получаемой численной модели величины СВИ от газочувствительности [17].

Методика эксперимента. Для формирования пленок Cu-содержащего ПАН применен метод пиролиза под воздействием некогерентного ИК-излучения при невысоком вакууме $((5-10) \cdot 10^{-2}$ мм рт. ст.) и в атмосфере аргона. Образцы плёнок изготовили по методикам, описанным в [9, 15, 18–20]. Концентрацию модифицирующей добавки в плёнкообразующих растворах варьировали в диапазоне значений $\omega = 0,5 \div 10,0$ масс. %. Термообработку пленок Cu-содержащего ПАН проводили в вакуумной камере ИК-отжига. В качестве источника излучения использо-

вали галогенные лампы КГ-220, максимум излучения которых приходится на область 0,8–1,2 мкм. Интенсивность излучения на первом этапе ИК-отжига соответствовала температуре 150–350 °С в течение 5–20 минут, а интенсивность излучения на втором этапе ИК-отжига – температуре 250–800 °С в течение 2–10 минут.

Чувствительность пленок оценивали с помощью коэффициента газочувствительности S , который рассчитывали как [21]:

$$S = (R_0 - R_g) / R_0, \quad (1)$$

где R_0 – значение сопротивления плёнки на воздухе, R_g – значение сопротивления пленки в атмосфере детектируемого газа.

Применение теории самоорганизации к описанию закономерностей формирования органических тонкопленочных материалов позволяет моделировать и исследовать структуры полученных материалов, которые определяют его последующие свойства.

Корреляционный анализ данных, полученных при обработке поверхности образцов пленки дает возможность выявить наличие процессов самоорганизации в ней. Следует учитывать, что наличие самоорганизующихся структур в образцах пленок, обосновывает возможность исследования данного объекта с позиции теории самоорганизации.

Расчет корреляционной размерности (D) производили методом вложения Такенса. Метод Такенса позволяет произвести реконструкцию динамических процессов, происходящих в системе [22, 23]. С использованием программы Image Analysis были обработаны 65536 точек изображения поверхности каждого образца для построения данной функции.

Рассматривая поверхность образца пленки как фрактальный объект, необходимо использовать при исследовании данного объекта общие представления о фракталах и рассматривать как совокупность фракталов.

Для подсчёта фрактальной размерности (D_f) использовали программу Gwyddion [24]. В ходе анализа установлено, что результаты расчётов фрактальной размерности, полученные методом триангуляции, являются наиболее близкими к среднему арифметическому значению фрактальной размерности по четырём методам.

Для исследования поверхностных свойств пространственно распределенных систем, полученных в результате процессов самоорганизации, была использована методика расчёта СВИ, которая описывает динамические особенности процесса получения материалах [25]. Взаимная информация определяется через энтропию и условную энтропию двух случайных величин [26, 27].

В результате проведены расчеты СВИ для поверхностей плёнок Si-содержащего ПАН с различным содержанием модифицирующей добавки.

Алгоритм исследования взаимосвязи между значениями СВИ и значениями газочувствительности включает:

- ◆ вычисления коэффициента корреляции (r);
- ◆ нахождение коэффициентов уравнения регрессии методом наименьших квадратов [18];
- ◆ отражение значимости уравнения регрессии методом критерия Фишера.

После реализации вышеуказанного алгоритма, производится анализ полученных значений, вычисленных статистическими методами, величин СВИ поверхностей плёнок Si-содержащего ПАН, в результате которого возможно выявление линейной зависимости между значениями коэффициента газочувствительности и СВИ.

Результаты и их обсуждение. Проведен анализ АСМ-изображений морфологии поверхности плёнок Si-содержащего ПАН. Выявлено, что повышение концентрации модифицирующей добавки в образцах приводит к увеличению разме-

ров выступов на образованных поверхностных структурах. Повышение концентрации модифицирующей добавки от 0 % до 10 % приводит к образованию выступов большего размера 11 нм до 260 нм.

Также на увеличение размера выступов влияет продолжительность ИК-отжига. Так, выявлено, что с увеличением времени ИК-отжига размер выступов увеличивается. К примеру, при времени ИК-отжига 20 минут образуются выступы, соответствующие максимальному значению – 260 нм.

Обнаружено, что повышение температуры ИК-отжига приводит к образованию поверхностей с размером выступов от 33 нм до 260 нм. Вероятно, что поверхностные явления, происходящие в тонкопленочном материале, при повышении температуры приводят к разрушению образованных ранее в результате процессов самоорганизации структур полимерного материала.

Следовательно, возможно, предположить об отрицательном воздействии более высоких температур на процессы самоорганизации, протекающие в плёнках Si-содержащего ПАН.

Понижение температуры ИК-отжига с 800 °С до 600 °С приводит к формированию поверхностных структур с меньшим среднеквадратичным значением шероховатости поверхности (рис. 1).

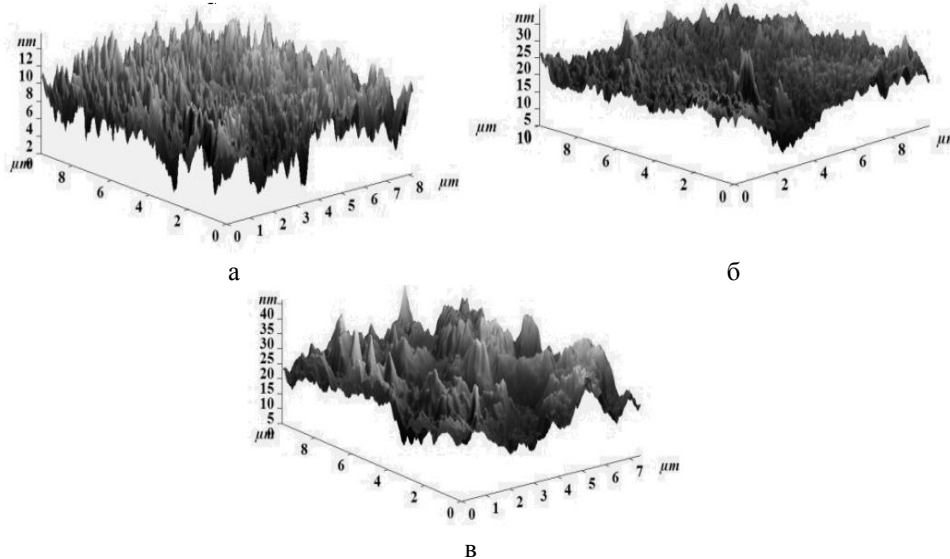


Рис. 1. АСМ-изображение поверхности плёнок Si-содержащего ПАН с концентрацией модифицирующей добавки в плёнкообразующем растворе $\omega = 0,2\%$, отожжённых при температурах: а – $T_{\text{ИК-отжига}} = 600\text{ °С}$; б – $T_{\text{ИК-отжига}} = 700\text{ °С}$; в – $T_{\text{ИК-отжига}} = 800\text{ °С}$

Значения среднеквадратичной шероховатости для поверхностей плёнок, полученных при трех различных температурах ИК-отжига 600 °С, 700 °С и 800 °С равны 1,4 нм, 2,39 нм и 4,26 нм соответственно.

Расчитанные значения фрактальной D_f и корреляционной D размерностей для исследуемых образцов находятся в пределах $1,35 \div 2,31$ и $1,1 \div 2,4$ соответственно. Интерпретация дробной размерности заключается в том, что исследуемые поверхности плёнок хотя и близки к двумерной ($D_f = 2$), но обладают также и некоторыми свойствами трехмерности [16].

Анализ значений коэффициента газочувствительности исследуемых плёнок показал, что повышение температуры ИК-отжига также отрицательно отражается на газочувствительности тонкопленочного материала, при низких температурах ИК-отжига (250 °С) достигается максимальное значение $S = 0,78$ отн. ед.

Для исследования изучения процессов самоорганизации при формировании плёнок Си-содержащего ПАН в заданных условиях были проведены расчёты СВИ. Величина СВИ неизменна относительно различных технологий и позволяет оценивать влияние различных технологических факторов на структуру материала [26].

Как видно на рис. 2 линейная корреляция между значениями коэффициента газочувствительности и значениями СВИ [18, 28] описывается регрессионным уравнением:

$$y = 1,00207 - 59535,2 \cdot x. \quad (2)$$

Коэффициент корреляции между значениями коэффициента газочувствительности и СВИ равен $-0,82$, что говорит о хорошей линейной зависимости. Отрицательное значение коэффициента корреляции означает, что линейная зависимость обратная.

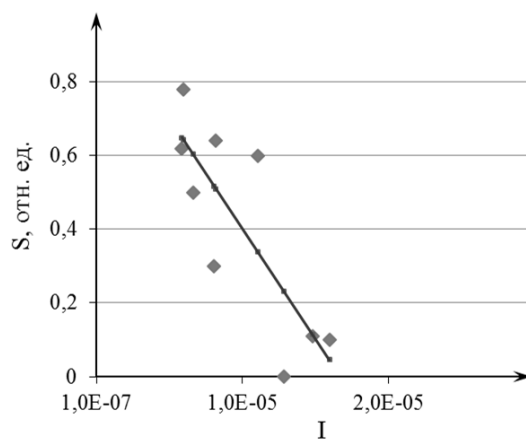


Рис. 2. Корреляционная зависимость величины СВИ и значения коэффициента газочувствительности плёнок Си-содержащего ПАН

К уравнению (2) был применен критерий Фишера (F-тест). Данный метод показал, что вероятность ошибки первого рода в уравнении (2) составляет $0,00005$, коэффициент детерминации равен $R^2=0,75$, что свидетельствует о значимости данной модели и адекватности полученных результатов.

Данная корреляция связана с тем, что газочувствительность пленок исследуемого типа определяет межмолекулярное взаимодействие детектируемого газа с поверхностью пленки [29]. Это межмолекулярное взаимодействие становится причиной перехода системы в новое состояние в результате перераспределения энергии и как следствие изменения энтропии данной системы. Исходя из того, что СВИ является выпуклой функцией распределения вероятностей и определяется энтропией системы, следовательно, использование СВИ является приемлемым методом для объяснения закономерностей формирования газочувствительного материала.

Таким образом, воздействие газов на поверхность пленки, связанное с перераспределением энергии в результате межмолекулярного взаимодействия, отражает взаимосвязь процессов формирования структуры и морфологии поверхности материала.

Заключение. В данной работе обоснована возможность применения идей и методов теории самоорганизации при рассмотрении процессов формирования органических полимерных материалов – плёнок Cu-содержащего ПАН.

Проведен анализ морфологии поверхности АСМ изображений образцов исследуемых плёнок методом вложения Такенса. Рассчитана величина корреляционной и фрактальной размерностей плёнок Cu-содержащего ПАН, которые подтвердили наличие процесса самоорганизации при структуризации полимерного материала.

Математические расчеты показали, что повышение концентрации модифицирующей добавки в плёнках приводит к образованию выступов большего размера. Выявлено, что с ростом времени отжига при одинаковых значениях температуры, возрастает размер выступов поверхности плёнок.

Проведены расчеты СВИ плёнок Cu-содержащего ПАН с различными концентрациями модифицирующей добавки. Получена математическая модель взаимосвязи коэффициента газочувствительности и величины СВИ методом обработки экспериментальных данных и методом регрессионного анализа.

На основе статистических методов была подтверждена значимость корреляции величины газочувствительности и величины СВИ, оценивающая полученную модель данных величин, как адекватную.

При проведении экспериментальных исследований использовано оборудование центра коллективного пользования ЮФУ «Микросистемная техника и интегральная сенсорика». Исследования методом АСМ проводили в центре коллективного пользования ЮФУ «Нанотехнологии».

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Inzelt György.* Conducting Polymers – A New Era in Electrochemistry. – Berlin: Springer, 2010. – 282 p.
2. *Balint R., Cassidy N.J., Cartmell S.H.* Conductive polymers: Towards a smart biomaterial for tissue engineering // *Acta Biomaterialia.* – 2014. – Vol. 10, No. 6. – P. 2341-2353.
3. *Ates Murat, Karazehir Tolga and Sezai Sarac A.* Conducting Polymers and their Applications // *Current Physical Chemistry.* – 2015. – Vol. 2, No. 3. – P. 224-240.
4. *Li X., Wang Y., Yang X., Chen J., Fu H., Cheng T.* Conducting polymers in environmental analysis // *Trends in Analytical Chemistry.* – 2012. – Vol. 39. – P. 163-179.
5. *Lange U., Roznyatovskaya N.V., Mirsky V.M.* Conducting polymers in chemical sensors and arrays // *Analytica Chimica Acta.* – 2008. – Vol. 614. – P. 1-26.
6. *Bakshi A.K., Bhalla G.* Electrically conducting polymers: Materials of the twenty-first century // *J. of Scientific & industrial Research.* – 2004. – Vol. 63. – P. 715-728.
7. *Земцов Л.М., Карпачева Г.П.* Химические превращения полиакрилонитрила под действием некогерентного инфракрасного излучения // *Высокомолекул. соед.* – 1994. – Т. 36, №. 6. – С. 919-924.
8. *Jing M., Wang C., Wang Q., Bai Y., Zhu B.* Chemical structure evolution and mechanism during pre-carbonization of PAN-based stabilized fiber in the temperature range of 350–600 °C // *Polymer Degradation and Stability.* – 2007. – Vol. 92. – P. 1737-1742.
9. *Семенистая Т.В., Петров В.В., Бедная Т.А.* Энергоэффективные сенсоры газов на основе нанокompозитных органических полупроводников. – Таганрог: Изд-во ЮФУ, 2013. – 120 с.
10. *Semenistaya T.V., Petrov V.V., Lu.P.* Nanocomposite of Ag-polyacrylonitrile as a selective chlorine sensor // *Advanced Materials Research.* – 2013. – Vol. 804. – P. 135-140.
11. *Semenistaya T.V., Petrov V.V., Kalazhokov Kh.Kh., Kalazhokov Z.Kh., Karamurzov B.S., Kushkhov Kh.V., Konovalenko S.P.* Study of the properties of nanocomposite cobalt-containing IR-pyrolyzed polyacrylonitrile films // *Surface Engineering and Applied Electrochemistry.* – 2015. – Vol. 51, No. 1. – P. 9-17.
12. *Semenistaya T.V., Petrov V.V., Bednaya T.A., Zaruba O.A.* Gasoline vapor sensor based on Cr-containing polyacrylonitrile nanocomposite films through artificial neural networks application // *Materials Today: Proceedings.* – 2015. Vol. 2, No. 1. – P. 77-84.

13. Семенистая Т.В., Петров В.В., Ладыгина А.А. Энергоэффективные датчики газа на основе нанокompозитных материалов металлосодержащего полиакрилонитрила // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2014. – № 4 (153). – С. 219-229.
14. Petrov V.V., Plugotarenko N.K., Semenistaya T.V. Self-organization in the thin gas-sensitive Ag-containing polyacrylonitrile films // Chaotic Modeling and Simulation. – 2013. – No. 4. – P. 609-614.
15. 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.
16. Лу П., Иванец В.А., Семенистая Т.В., Плуготаренко Н.К. Исследование влияния структуры пленок серебросодержащего ПАН на их газочувствительность с применением теории самоорганизации, теории информации и атомно-силовой микроскопии // Нано- и микросистемная техника. – 2012. – № 5. – С. 21-28.
17. Мазуркин П.М. Статистическое моделирование. Эвристико-математический подход: Научное издание. – Йошкар-Ола: МарГТУ, 2001. – 100 с.
18. Радченко С.Г. Методология регрессионного анализа: Монография. – К.: Корнийчук, 2011. – 376 с.
19. http://sci.alnam.ru/book_tinf.php?id=22, режим посещения: 17.00 19.02.2015г.
20. Аль-Хадрамы И.С., Королев А.Н., Земцов Л.М., Карпачева Г.П., Семенистая Т.В. Исследование электропроводности ИК-пиролизованного медьсодержащего полиакрилонитрила // Материалы электронной техники. – 2008. – № 1. – С. 14-17.
21. Moshnikov V.A., Gracheva I.E., Kuznezov V.V. Hierarchical nanostructured semiconductor porous materials for gas sensors // Journal of Non-Crystalline Solids. – 2010. – Vol. 356, No. 37-40. – P. 2020-2025.
22. Бодягин Н.В., Вихров С.П. Пространственно-временной хаос в процессе образования твердотельного состояния // ПЖТФ. – 1997. – Т. 23. – С. 15.
23. Бодягин Н.В., Вихров С.П., Ларина Т.Г., Мурсалов С.М. Природа невоспроизводимости структуры и свойств материалов для микро- и наноэлектроники. – Рязань, РГРТА, 2004. – 256 с.
24. Бодягин Н.В., Вихров С.П., Ларина Т.Г., Мурсалов С.М. Процессы роста неупорядоченных полупроводников с позиций теории самоорганизации // Физика и техника полупроводников. – 2005. – Т. 39, № 8. – С. 953-959.
25. Гмурман В.Е. Теория вероятностей и математическая статистика: Учеб. пособие. – 12-е изд., перераб. – М.: Высшее образование, 2006. – 479 с.
26. Мурсалов С.М., Бодягин Н.В., Вихров С.П. О расчете корреляций в структуре в поверхностных материалах // Письма в ЖТФ. – 2000. – Т. 26. – С. 15.
27. Короленко П.В., Маганова М.С., Меснянкин А.В. Новационные методы анализа стохастических процессов и структур в оптике. Фрактальные и мультифрактальные методы, вейвлет-преобразования: Учебное пособие. – М.: МГУ им. М.В. Ломоносова. Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д.В. Скобельцына, 2004. – 82 с.
28. Льюис К.Д. Методы прогнозирования статистических данных. – М., 2009. – 342 с.
29. Бедная Т.А., Коноваленко С.П., Семенистая Т.В., Петров В.В., Королев А.Н. Газочувствительные элементы сенсора диоксида азота и хлора на основе кобальтсодержащего полиакрилонитрила // Известия высших учебных заведений. Электроника. – 2012. – № 4 (96). – С. 66-71.

REFERENCES

1. Inzelt, György. Conducting Polymers – A New Era in Electrochemistry. Berlin: Springer, 2010, 282 p.
2. Balint R., Cassidy N.J., Cartmell S.H. Conductive polymers: Towards a smart biomaterial for tissue engineering, *Acta Biomaterialia*, 2014, Vol. 10, No. 6, pp. 2341-2353.
3. Ates Murat, Karazehir Tolga and Sezai Sarac A. Conducting Polymers and their Applications, *Current Physical Chemistry*, 2015, Vol. 2, No. 3, pp. 224-240.
4. Li X., Wang Y., Yang X., Chen J., Fu H., Cheng T. Conducting polymers in environmental analysis, *Trends in Analytical Chemistry*, 2012, Vol. 39, pp. 163-179.
5. Lange U., Roznyatovskaya N.V., Mirsky V.M. Conducting polymers in chemical sensors and arrays, *Analytica Chimica Acta.*, 2008, Vol. 614, pp. 1-26.

6. Bakshi A.K., Bhalla G. Electrically conducting polymers: Materials of the twenty-first century, *J. of Scientific & industrial Research*, 2004, Vol. 63, pp. 715-728.
7. Zemtsov L.M., Karpachova G.P. Khimicheskie prevrashcheniya poliakrilonitrila pod deystviem nekogerentnogo infrakrasnogo izlucheniya [Chemical transformations of polyacrylonitrile under the influence of incoherent infrared radiation], *Vysokomolekul. soed.* [The high. comm.], 1994, Vol. 36, No. 6, pp. 919-924.
8. Jing M., Wang C., Wang Q., Bai Y., Zhu B. Chemical structure evolution and mechanism during pre-carbonization of PAN-based stabilized fiber in the temperature range of 350–600 °C, *Polymer Degradation and Stability*, 2007, Vol. 92, pp. 1737-1742.
9. Semenistaya T.V., Petrov V.V., Bednaya T.A. Energoeffektivnye sensory gazov na osnove nanokompozitnykh organicheskikh poluprovodnikov [Energy-efficient gas sensors based nanocomposite organic semiconductors]. Taganrog: Publishing house of the SFU, 2013, 120 p.
10. Semenistaya T.V., Petrov V.V., Lu P. Nanocomposite of Ag-polyacrylonitrile as a selective chlorine sensor, *Advanced Materials Research*, 2013, Vol. 804, pp. 135-140.
11. Semenistaya T.V., Petrov V.V., Kalazhokov Kh.Kh., Kalazhokov Z.Kh., Karamurзов B.S., Kushkhov Kh.V., Konovalenko S.P. Study of the properties of nanocomposite cobalt-containing IR-pyrolyzed polyacrylonitrile films, *Surface Engineering and Applied Electrochemistry*, 2015, Vol. 51, No. 1, pp. 9-17.
12. Semenistaya T.V., Petrov V.V., Bednaya T.A., Zaruba O.A. Gasoline vapor sensor based on Cr-containing polyacrylonitrile nanocomposite films through artificial neural networks application, *Materials Today: Proceedings*, 2015, Vol. 2, No. 1, pp. 77-84.
13. Semenistaya T.V., Petrov V.V., Ladygina A.A. Energoeffektivnye datchiki gaza na osnove nanokompozitnykh materialov metallsoderzhashchego poliakrilonitrila [Energy efficiency of gas sensors based on metal-polyacrylonitrile nanocomposites], *Izvestiya YuFU. Tekhnicheskie nauki* [Izvestiya SFedU. Engineering Sciences], 2014, No. 4 (153), pp. 219-229.
14. Petrov V.V., Plugotarenko N.K., Semenistaya T.V. Self-organization in the thin gas-sensitive Ag-containing polyacrylonitrile films, *Chaotic Modeling and Simulation*, 2013, No. 4, pp. 609-614.
15. Makeeva 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 [Predicting the magnitude of response to nitrogen dioxide gas sensing material based on polyacrylonitrile by the methods of the theory of self-organization], *Izvestiya YuFU. Tekhnicheskie nauki* [Izvestiya SFedU. Engineering Sciences], 2011, No. 4 (117), pp. 149-156.
16. Lu P., Ivanets V.A., Semenistaya T.V., Plugotarenko N.K. Issledovanie vliyaniya struktury plenok serebrosoderzhashchego PAN na ikh gazochuvstvitel'nost' s primeneniem teorii samoorganizatsii, teorii informatsii i atomno-silovoy mikroskopii [Investigation of the influence the film structure of the silver-PAN their gas sensing using self-organization theory, information theory and atomic force microscopy], *Nano- i mikrosistemnaya tekhnika* [Nano and Microsystem Technology], 2012, No. 5, pp. 21-28.
17. Mazurkin P.M. Statisticheskoe modelirovaniye. Evristiko-matematicheskii podkhod: Nauchnoe izdanie [Statistical modeling. Heuristic-mathematical approach: Scientific publication]. Yoshkar-Ola: Mari State Technical University, 2001, 100 p.
18. Radchenko S.G. Metodologiya regressionnogo analiza: Monografiya [Regression analysis Methodology: Monograph]. Kiev: Korniychuk, 2011, 376 p.
19. Available at: http://sci.alnam.ru/book_tinf.php?id=22, mode of visit (19 February 2015).
20. Al-Hadrami I.S., Korolev A.N., Zemtsov L.M., Karpachova G.P., Semenistaya T.V. Issledovanie elektroprovodnosti IK-pirolizovannogo med'soderzhashchego poliakrilonitrila [Research conductivity copper-containing IR pyrolyzed polyacrylonitrile], *Materialy elektronnoy tekhniki* [Proceedings of the electronic equipment], 2008, No. 1, pp. 14-17.
21. Moshnikov V.A., Gracheva I.E., Kuznezov V.V. Hierarchical nanostructured semiconductor porous materials for gas sensors, *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2010, Vol. 356, No. 37-40, pp. 2020-2025.
22. Bodyagin N.V., Vikhrov S.P. Prostranstvenno-vremennoy khaos v protsesse obrazovaniya tverdotel'nogo sostoyaniya [Spatio-temporal chaos in the process of formation of solid-state], *PZHTF* [Technical Physics Letters], 1997, Vol. 23, pp. 15.

23. *Bodyagin N.V., Vikhrov S.P., Larina T.G., Mursalov S.M.* Priroda nevosproizvodimosti struktury i svoystv materialov dlya mikro- i nanoelektroniki [The nature of non-reproducibility of the structure and properties of materials for micro- and nanoelectronics]. Ryazan, RGRTA, 2004, 256 p.
24. *Bodyagin N.V., Larina T.V., Mursalov S.M.* Protsessy rosta neuporyadochennykh poluprovodnikov s pozitsiy teorii samoorganizatsii [Processes of growth disordered semiconductors to the theory of self-organization], *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Semiconductors], 2005, Vol. 39, No. 8, pp. 953-959.
25. *Gmurman V.E.* Teoriya veroyatnostey i matematicheskaya statistika: Ucheb. posobie [Probability theory and mathematical statistics: Proc. Manual], 12nd ed., rev. Moscow: Higher Education, 2006, 479 p.
26. *Mursalov S.M., Bodyagin N.V., Vikhrov S.P.* O raschete korrelyatsiy v strukture v poverkhnostnykh materialov [On the calculation of correlation structure in the surface materials], *Pis'ma v ZhTF* [Technical Physics Letters], 2000, Vol. 26, pp. 15.
27. *Korolenko P.V., Maganova M.S., Mesnyankin A.V.* Novatsionnye metody analiza stokhasticheskikh protsessov i struktur v optike. Fraktal'nye i mul'tifraktal'nye metody, veyvlet-preobrazovaniya: Uchebnoe posobie [Novation methods of analysis of stochastic processes and structures in optics. Fractal and multifractal methods, wavelet transform. Tutorial]. Moscow: MGU im. M.V. Lomonosova. Nauchno-issledovatel'skiy institut yadernoy fiziki im. D.V. Skobel'tsyna, 2004. 82 p.
28. *L'yuis K.D.* Metody prognozirovaniya statisticheskikh dannykh [Forecasting methods of statistical data]. Moscow, 2009, 342 p.
29. *Bednaya T.A., Konovalenko S.P., Semenistaya T.V., Petrov V.V., Korolev A.N.* Gazochuvstvitel'nye elementy sensora dioksida azota i khlorina na osnove kobal'tsoderzhashchego poliakrilonitrila [Gas-sensitive sensor elements nitrogen dioxide and chlorine based cobalt polyacrylonitrile], *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Elektronika* [Proceedings of the higher educational institutions. Electronics], 2012, No. 4 (96), pp. 66-71.

Статью рекомендовал к опубликованию д.т.н., профессор А.Н. Белов.

Петров Виктор Владимирович – Южный федеральный университет; e-mail: vvp2005@inbox.ru; 347900, г. Таганрог, ул. Чехова, 2; тел.: 88634371910; директор Института управления в экологических, экономических и социальных системах.

Семенистая Татьяна Валерьевна – e-mail: semenistaya@yandex.ru; тел.: 88634371624; кафедра техносферной безопасности, химии и экологии; доцент.

Плуготаренко Нина Константиновна – e-mail: plugotarenko@mail.ru; кафедра техносферной безопасности, химии и экологии; зав. кафедрой; доцент.

Фалчари Марта Маисовна – e-mail: larina7566@yandex.ru; тел.: 89188561396; кафедра техносферной безопасности, химии и экологии; аспирант.

Petrov Viktor Vladimirovich – Southern Federal University; e-mail: vvp2005@inbox.ru; 2, Chekhov street, Taganrog, 347900, Russia; phone: +78634371910; director of the Institute of Management in the environmental, economic and social systems.

Semenistaya Tatiana Valerievna – e-mail: semenistaya@yandex.ru; phone: +78634371624; the department of technospheric safety, ecology and chemistry; associate professor.

Plugotarenko Nina Konstantinovna – e-mail: plugotarenko@mail.ru; the department of technospheric safety, ecology and chemistry; head the department; associate professor.

Falchari Martha Maisovna – e-mail: larina7566@yandex.ru; phone: +79188561396; the department of technospheric safety, ecology and chemistry; head the department; postgraduate student.