

ПРОГРАММИРУЕМОЕ СООСАЖДЕНИЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО AZO ДЛЯ СОЗДАНИЯ МУЛЬТИСЕНСОРНЫХ ГАЗОАНАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ

^aГойхман Б.В., ^aФедоров Ф.С., ^bСимоненко Н.П., ^bСимоненко Т.Л., ^{b,c}Фисенко Н.А.,
^aДубинина Т.С., ^aОвчинников Г., ^dЛанцберг А.В., ^eЛипатов А., ^bСимоненко Е.П.,
^{a,f}Насибулин А.Г.

^aСколковский институт науки и технологий, Москва, Россия

^b Институт общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова РАН, Москва, Россия

^cРоссийский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева, Москва, Россия

^dМосковский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана,
Москва, Россия

^eГорно-технологический колледж Южной Дакоты, Рэпид-Сити, США

^fУниверситет Аальто, Аальто, Финляндия

Считается, что мультисенсорные системы, типа «электронный нос», главным образом решают проблему селективного определения запаха или аналита. Несмотря на то, что такие системы обеспечивают различение близких гомологов и изомеров, они требуют предварительного «обучения», в рамках которого получаемый векторный сигнал, связанный с анализируемым веществом, проецируется в искусственное пространство образов.

В данном исследовании мы впервые протестировали метод программируемого совместного осаждения для синтеза оксида цинка, легированного алюминием (AZO). Способ позволяет осаждать AZO с высокой точностью целевого химического состава, $ZnO - 1,5\% Al_2O_3$. Материал кристаллизуется в виде тонких пористых хлопьев, состоящих из нанокристаллов со слегка искаженной структурой вюрцита [1].

Синтезированный материал показывает высокий, до 0,87, хеморезистивный сенсорный отклик на пары спиртов, 0,9 ppm, в воздухе при 300 °C с пределом обнаружения на уровне нескольких ppm и даже ppm. Полученные сенсоры показывают хорошую стабильность хеморезистивного отклика, а также низкое время отклика. В работе мы подтвердили прямую зависимость величины чувствительности AZO от молекулярной массы анализируемого вещества для *n*-спиртов. Используя метод главных компонент и алгоритм машинного обучения *Random Forest*, было продемонстрировано не только селективное распознавание близких гомологов и изомеров спиртов, но и возможность их обнаружения без предварительного «обучения» мультисенсорной системы - сопоставляя молекулярные «отпечатки пальцев» данных аналитов из баз данных Mol2vec и PubChem с получаемым векторным сигналом.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-73-10288, <https://rscf.ru/project/21-73-10288/>.

References

1. Goikhman B.V. et. al. / J. Mater. Chem. A. 2022. Vol. 10. P. 8413-8423.