

Б.А. Снопок

Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, Київ

ІНТЕЛЕКТУАЛЬНІ СЕНСОРНІ СИСТЕМИ НА ОСНОВІ КРОС-РЕАКТИВНИХ МАСИВІВ ХІМІЧНИХ СЕНСОРІВ



Для експресного визначення проб в газовому, рідкому чи твердому станах розроблено прототипи інтелектуальних мультисенсорних систем газового аналізу, які є новим поколінням чутливих та селективних засобів контролю за забрудненням навколишнього середовища та моніторингу промислових процесів. Ці розробки дали початок новому напрямку інтелектуального приладобудування на основі мультисенсорних масивів газового аналізу для вирішення різноманітних задач у промисловому господарстві України.

Ключові слова: хімічні сенсори, електронний ніс, п'єзоелектричні перетворювачі, розпізнавання образів, мультисенсорні масиви, ідентифікація.

ОСОБЛИВОСТІ ІННОВАЦІЙНОЇ ДІЯЛЬНОСТІ В УКРАЇНІ

Поступальний розвиток науки і техніки — необхідна умова підвищення рівня життя людей і основний чинник національної безпеки держави. Наріжним каменем даного процесу є інноваційна діяльність, що сприймається як реалізація результатів наукових досліджень або науково-технічних розробок у вигляді нового або вдосконаленого продукту, технології і т. ін. Кінцевим результатом цього процесу є використання продукту в промисловому господарстві і його комерційна присутність на ринку. Ціль інноваційної діяльності звичайно пов'язана або з розширенням асортименту, оптимізацією технології, зменшенням собівартості продукції і (або) видів послуг, або з поліпшення їхньої якості.

Незважаючи на те, що вплив науково-технічного прогресу на розвиток суспільства принципово не відрізняється в різних країнах, конкретні кроки по реалізації результатів науково-технічної діяльності залежать від кон-

кретних економічних, технологічних і соціальних умов відповідної області, регіону, держави. Україна — не виняток з цього правила. Особливості інноваційної діяльності в Україні зумовлені, насамперед, технологічними і соціальними причинами, що свідчить про невідповідність суспільства до впровадження інноваційних технологій. Наприклад, до найбільш успішних інноваційних проєктів у телекомунікаційній сфері за останні десятиліття, очевидно, можна віднести такі продукти, як мобільний зв'язок або кабельне телебачення. Однак цей успіх пов'язаний не стільки з успішною інноваційною діяльністю в Україні, скільки з відсутністю повного забезпечення населення телекомунікаційними послугами. Підтвердженням тому є подальший розвиток цих галузей (цифрове телебачення, мобільний Інтернет тощо), що вже не демонструє аналогічного росту. Наведений приклад свідчить про особливості інноваційної політики в Україні, обумовлені відсутністю тривалого послідовного технологічного розвитку суспільства, як це відбувалося, наприклад, у країнах ЄС. Особливо ці особливості виявляються в області науково-техніч-

ного прогресу, оскільки протягом останніх років Україна переважно виступає як споживач, а не як постачальник на ринок нової продукції та послуг. Це привело до падіння в суспільстві активного прагнення до створення нових продуктів. В Україні фактично відсутня організована система і професійні кадри, здатні формувати прогностичне і творче середовище для їхнього створення. За таких умов державна політика по стимулюванню інноваційної діяльності, безумовно, буде зустрічати опір, оскільки для створення продукту з поліпшеними якостями необхідно мати, щонайменше, його сучасний аналог. Водночас заклади системи освіти в Україні (і середньо-спеціального, і вищого ступенів), які в усьому світі саме і є центрами інноваційної діяльності, на сьогоднішній день не мають навіть базових засобів навчання і наукової діяльності. Таким чином, без створення в системі освіти відповідної інформаційно-технологічної бази для підготовки кадрів і проведення науково-технічних розробок інноваційна діяльність в Україні навряд чи зможе стати успішною і конкурентною на світовому рівні.

У даній роботі пропонується аналітичний підхід, практична реалізація якого в різних галузях сучасної економіки України могла б дати значний економічний та соціальний ефект. Однак через технологічну невідповідність служб контролю та системи сертифікації, відсутність кваліфікованого персоналу і інші причини впровадження такої системи необхідно проводити спочатку в організаціях вищої і середньо-спеціальної школи. Це дасть можливість не лише ознайомити і підготувати фахівців у розглянутій галузі, але й істотно розширити технічний арсенал закладів системи освіти новими інформаційно-технічними комплексами нового покоління.

ІДЕОЛОГІЯ ПОБУДОВИ І ФУНКЦІОНУВАННЯ КРОС-РЕАКТИВНИХ СЕНСОРНИХ МАСИВІВ

Необхідність оперативного контролю не тільки за окремими хімічними сполуками, а й

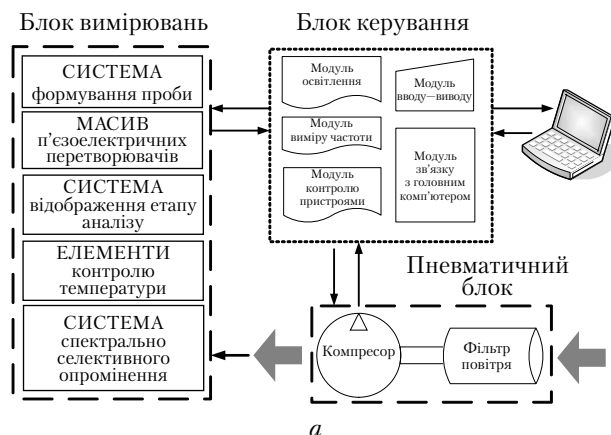
за складними сумішами різної природи для забезпечення ефективності й екологічної безпеки промислового виробництва, підвищення якості життя і т. ін. обумовлює зростаючий інтерес до інтелектуальних сенсорних систем на основі крос-реактивних сенсорних масивів різного призначення. Це пов'язано, насамперед, з тим фактом, що аналіз якісного і кількісного складу таких багатокомпонентних хімічних середовищ (БХС) з використанням класичних методів аналітичної хімії в багатьох випадках стикається з обмеженнями, обумовленими наявністю в пробі великої кількості фракцій різної природи.

Оскільки матеріальні витрати і затрати часу на етапах підготовки, власне вимірювання аналітичного сигналу, виділення хімічної інформації про БХС на основі каліброваних залежностей у сукупності і визначають ефективність тієї або іншої аналітичної методики, то використання селективних сенсорних масивів є економічно недоцільним для вирішення подібних задач. Найбільш ефективні традиційні методики для експресного хімічного аналізу БХС використовують для одержання інформації про сполуку або сукупність сполук, наявність яких встановлюється (аналіз) за допомогою аналізу деяких властивостей йому специфічних особливостей або характерного його поведіння під час протікання різних процесів. Завданням дослідника є створення таких процедур аналізу, за яких забезпечується найбільша специфічність стосовно конкретного аналізу при реєстрації інформативного сигналу на тлі, створюваному супутніми домішками і матрицею. Незважаючи на широке поширення саме такого підходу для аналізу БХС, можливості формування сенсорних наборів, оптимізованих для виявлення строго визначених сумішей, мають принципові обмеження, обумовлені лише частковою специфічністю рецепторних центрів унаслідок наявності в рамках одного хімічного класу однакових функціональних угруповань, аналогічної просторової будови і близьких фізико-хімічних властивостей.

З формальної точки зору БХС можуть бути описані не сумою складових їхніх індивідуальних компонентів (або відповідних їм відгуків специфічних сенсорів), а деякою моделлю з характерним для кожної сполуки набором параметрів — хімічним образом (ХО). Інструментальні системи на основі масивів слабоселективних сенсорів для формування ХО газоподібних БХС із їхньою наступною ідентифікацією за допомогою методик розпізнавання образів одержали назву «електронний ніс» (ЕН). У випадку газового аналізу реалізація даного підходу допускає використання масивів датчиків для відображення розмаїття БХС на m -мірний простір відгуків, де m — число каналів. Сигнали датчиків, таким чином, повинні відбивати деяку властивість елементів БХС або відображати особливості взаємодії їх компонентів із чутливим хімічним шаром. Величини відгуків сенсорного масиву при взаємодії з БХС приводять до формування багатомірної поверхні відгуку в m -мірному просторі, що і є характеристикою проби.

ПРАКТИЧНА РЕАЛІЗАЦІЯ СИСТЕМ ГАЗОВОГО АНАЛІЗУ НА ОСНОВІ КРОС-РЕАКТИВНИХ СЕНСОРНИХ МАСИВІВ

Протягом останніх років було розроблено низку систем моніторингу стану складних хімічних сумішей, серед яких слід виділити базовий прототип приладу «UltraNose», який заснований на формуванні унікального образу суміші в координатах відгуків слабоселективних сенсорних елементів (хімічний образ) з наступною їхньою класифікацією/ідентифікацією в системах розпізнавання образів [1–3]. Для реалізації цього підходу використано функціоналізований мультисенсорний масив п'єзокварцевих резонаторів, що дало можливість розділити процеси молекулярного розпізнавання (які обумовлюють профіль селективності масиву щодо можливих аналітів) та фізичного перетворення результатів цього процесу в інформаційний сигнал, придатний для подальшої обробки. Подальшим розви-



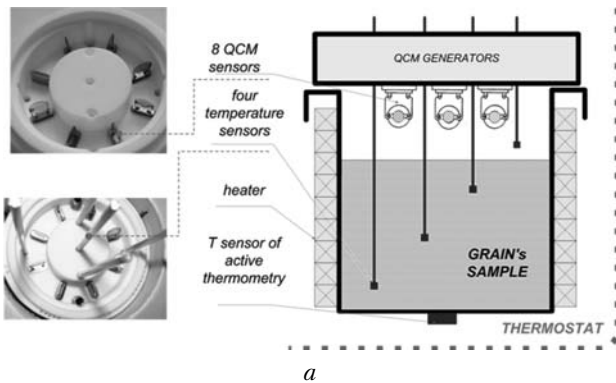
а



б

Рис. 1. а — блок-схема мультисенсорного масиву газового аналізу; б — загальний вигляд приладу «tu-NOSE»

тком цієї розробки стала система з керованим профілем селективності на основі сенсорного масиву п'єзокварцевих резонаторів з фоточутливими сенсорними шарами «tu-NOSE» (tunable nose) [4]. Така система газового аналізу є новим поколінням чутливих та селективних засобів контролю за технологічними процесами, якістю продуктів харчування, забрудненням сільськогосподарської продукції домішками органічних речовин тощо, яка може бути використана для проведення наукових



a



б

Рис. 2. *a* – блок-схема системи реєстрації прототипу приладу «GrainNOSE»; *б* – загальний вигляд приладу «GrainNOSE»

досліджень та для навчальних потреб [5]. Система включає програмні засоби контролю за параметрами системи, проведенням аналізу та формуванням баз даних хімічних образів.

Прототипи приладів «UltraNose» та «tu-NOSE» дають можливість формувати більш унікальні образи суміші в координатах відгуків слабоселективних сенсорних елементів за рахунок можливого розділення компонент з використанням елементів хроматографічної техніки (додаткова можливість системи «Ultra Nose») або селективного освітлення фоточутливих шарів сенсорних елементів і відповідної зміни профілю селективності сенсорного масиву («tu-NOSE»), оптимальної для вирішення відповідної прикладної проблеми. Це дає

можливість суттєво розширити спектр компонент, до яких даний масив чутливий (внаслідок того, що профіль селективності сенсорів може бути змінено за рахунок освітлення), і, відповідно, не тільки підвищити кількість аналітів, які можуть бути ідентифіковані з використанням такого масиву, але і підвищити ідентифікаційну здатність самого процесу розпізнавання [6–8]. Отже, прилади, які використовують даний підхід, здатні забезпечувати основні показники не гірше, ніж класичні мультисенсорні системи, а за вартістю та можливістю одночасного проведення аналізу багатоконпонентних зразків за кількома показниками вони кращі, ніж масиви специфічних сенсорних елементів. На рис. 1, *a* наведено функціональну схему прототипу мультисенсорного п'єзокристалічного аналізатора багатоконпонентних газових сумішей, а на рис. 1, *б* – його загальний вигляд.

Аналіз запатентованих рішень та сучасного стану мультисенсорних систем хімічного аналізу дав можливість сформулювати та вдосконалити основні принципи розробки, а також обґрунтувати вибір конструкції та процедури аналізу даних від масиву хімічних сенсорів. Внаслідок цього *a*) було створено низку інтелектуальних сенсорних систем, які дають можливість проводити реєстрацію динамічного відгуку сенсорного масиву; *б*) розроблено спеціальне програмне забезпечення, яке керує процесом та дає можливість робити комплексний аналіз багатомірної поверхні відгуків у динамічному режимі; *в*) оптимізовано процедури відбору проб, підготовки й аналізу з використанням фоточутливих шарів з метою керування ефективною поверхневою концентрацією окремих компонент суміші на відповідних сенсорних елементах.

Розроблена інтелектуальна система класифікації та ідентифікації складних середовищ має всі необхідні компоненти та модулі: систему підготовки проб, об'єднану з модулем проведення аналізу; програмне забезпечення для дистанційного керування приладом по інтер-

фейсу USB та проведення автоматичних вимірювань складних багатокомпонентних сумішей. Було враховано необхідність адресного користування системою та розроблено простий інтерфейс користувача, запроваджено стандартизовані режими вимірювань, реалізовано процедури розрахунків дискримінаційної здатності з використання прямого доступу до пакетів статистичної обробки, враховано необхідність аналізу ХО в режимі реального часу. Все це дало можливість розробити програмне середовище для формування бібліотек хімічних речовин.

На основі проведених досліджень з використанням розробленого лабораторного прототипу стало можливим встановлення програми освітлення чутливих шарів у видимій області спектру з метою збільшення дискримінаційної здатності масиву щодо середовищ з домінуючими компонентами [6–8]. Система дозволяє оптимізувати програму освітлення у відповідності до поставлених задач. Безумовними перевагами даного приладу є можливість ідентифікувати саме складні суміші з переважаючими компонентами: зміни ХО таких сумішей при зміні концентрації деяких з їхніх компонент можуть бути описані як окремі класи.

Розглянуті системи були використані при розробці прототипу інтелектуальної системи «GrainNOSE» активного моніторингу стану зерна та зернопродуктів, що поєднує модуль активної термометрії (масив розподільних датчиків температури з системою формування температурного профілю) з блоком хімічного аналізу на основі сенсорного масиву п'єзокварцевих резонаторів [9], який є новим поколінням чутливих та селективних засобів контролю за забрудненням сільськогосподарської продукції домішками органічних речовин, в т.ч. продуктами метаболізму патогенних мікроорганізмів. Система містить в собі програмні засоби контролю за параметрами системи, проведенням аналізу та формуванням баз даних хімічних образів гетерогенних середовищ різноманітного походження. На рис. 2, а

наведено функціональну схему прототипу мультисенсорного аналізатора, а на рис. 2, б — його загальний вигляд.

Базові елементи розглянутих прототипів увійшли також в систему «NOSE-Chrom», яка поєднує хроматографічний модуль газового аналізу класичного типу з мультисенсорним масивом [10–12].

ВИСНОВКИ

Розроблено низку приладів нового покоління для контролю за станом гетерогенних середовищ різноманітного походження, що є прикладом новітніх технологічних рішень у галузі сучасного сенсорного приладобудування. Це дало можливість створити на сучасній базі новий аналітичний підхід з розширеними можливостями щодо встановлення та моніторингу якісного стану багатокомпонентних сумішей, що є обов'язковою передумовою адекватного функціонування як високотехнологічних підприємств, так і моніторингу навколишнього середовища. Широке використання мультисенсорних масивів у народному господарстві та для потреб екологічної безпеки зумовлює їх використання у навчальних закладах з природних дисциплін.

Основні фактори, які перешкоджають здійсненню інноваційної діяльності в галузі практичного застосування таких систем, носять в основному організаційний характер (недолік кваліфікованого персоналу, відсутність інформації про нові технології тощо) і стримуються відсутністю законодавчих і нормативно-правових документів щодо їх сертифікації, уніфікації та стандартизації. Тому основні економічні та фінансові заходи з боку держави по впровадженню в практику пропонованої нами розробки повинні бути спрямовані в першу чергу на забезпечення закладів системи освіти такими сучасними інформаційно-технологічними сенсорними комплексами з метою їх всебічної апробації та на розробку проблемно-орієнтованих аналітичних методів аналізу складних (біо)хімічних сумішей різноманіт-

ного походження в базових секторах економіки України.

Робота виконана при фінансовій підтримці Національної академії наук України проектів «Створення хроматографічного сенсорного комплексу для виявлення та ідентифікації органічних забруднювачів навколишнього середовища», «Розробка інтелектуальної системи ідентифікації багатокомпонентних газових сумішей на основі мультисенсорних масивів з адаптивним профілем селективності», «Розробка біосенсорної системи сертифікації зерна та зернопродуктів щодо вмісту забруднювачів мікробіологічного та хімічного походження» та «Адаптивні системи ідентифікації продукції фармацевтичної та харчової промисловості».

ЛІТЕРАТУРА

1. *Снопко Б.А., Кушнеров І.Д., Савченко А.А., Снопко О.Б.* Пристрій мультисенсорного аналізу багатокомпонентних хімічних середовищ // Патент України на корисну модель №47035, 2010.
2. *Снопко Б.А., Кушнеров І.Д., Савченко А.А., Снопко О.Б.* Пристрій мультисенсорного аналізу багатокомпонентних хімічних середовищ // Патент України на корисну модель №44946, 2009.
3. *Снопко Б.А., Кушнеров І.Д., Савченко А.А., Снопко О.Б.* Пристрій мультисенсорного аналізу багатокомпонентних хімічних середовищ // Патент України на корисну модель №47034, 2010.
4. *Снопко Б.А., Кушнеров І.Д., Бурлаченко Ю.В.* Пристрій мультисенсорного аналізу багатокомпонентних хімічних середовищ // Патент України на корисну модель №49763, 2010.
5. *Січкарь Т.Г., Снопко Б.А., Стрижак О.Є. та ін.* Комплекс для проведення фізико-хімічних досліджень (лекційний демонстраційний експеримент) // Методики використання сучасних інформаційних технологій при підтримці процесу навчання обдарованої молоді, під редакцією С.О. Довгого та О.Є. Стрижак / Інститут обдарованої дитини. — К.: Інформаційні системи, 2009. — 200 с.
6. *Бурлаченко Ю.В., Снопко Б.А.* Управление адсорбционно-десорбционными процессами на поверхности химических сенсоров на основе фоточувствительных пленок фталоцианинов // Оптоэлектроника и полупроводниковая техника. — 2005. — С. 136–142.
7. *Бурлаченко Ю.В., Снопко Б.А.* Мультисенсорные массивы газового анализа на основе фоточувствительных органических материалов: повышение дискриминирующей способности в условиях селективного освещения // Журнал аналитической химии. — 2008. — Т. 63, № 6. — С. 557–565.
8. *Burlachenko J., Capone S., Siciliano P., Snopok B.* (2009): reproducibility and uniqueness of information coding as key factors for array optimization // AIP (American Institute of Physics) Conference Proceedings. — V.1137. — P. 574–575.
9. *Болтовець П., Шварц Ю., Снопко Б. А.* Інтелектуальна система контролю якості зерна: перспективи і шляхи застосування // Вісник Львів. ун-ту, Серія фіз. — 2009. — Т. 44. — С. 172–177.
10. *Філіппов А.П., Стрижак П.Є., Серебряй Т.Г. и др.* Мультисенсорная система в комплексе с газовым хроматографом для идентификации паров летучих органических соединений // УХЖ. — 2007. — Т. 73, № 1–2. — С. 97–101.
11. *Filippov, A.P., Strizhak, P.E., Serebry, T.G. et al.* New Materials of Coatings for Discrimination of Hydrocarbons by Multisensor System Combined with Gas Chromatograph // Theoretical and Experimental Chemistry. — 2005. — 41 (6). — P. 371–376.
12. *Філіппов А.П., Стрижак П.Є., Серебряй Т.Г., Снопко Б.А.* Спосіб аналізу газів та парів летких речовин та їх сумішей за допомогою пристрою для здійснення цього аналізу // Патент України на корисну модель № 47450, 2010.

Б.А. Снопко

ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЕ СЕНСОРНЫЕ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ КРОСС-РЕАКТИВНЫХ МАССИВОВ ХИМИЧЕСКИХ СЕНСОРОВ

Для экспрессного определения проб в газовом, жидком или твердом состояниях разработаны прототипы интеллектуальных мультисенсорных систем газового анализа, которые являются новым поколением чувствительных и селективных средств контроля загрязнения окружающей среды и мониторинга промышленных процессов. Эти разработки положили начало новому направлению интеллектуального приборостроения на основе мультисенсорных массивов газового анализа для решения разнообразных задач в промышленном хозяйстве Украины.

Ключевые слова: химические сенсоры, электронный нос, пьезоэлектрические преобразователи, распознавание образов, мультисенсорные массивы, идентификация.

B.A. Snopok

INTELLIGENT SENSOR SYSTEMS BASED
ON THE CROSS-REACTIVE ARRAYS
OF CHEMICAL SENSORS

Intellectual multichannel systems of a gas analysis, suitable assays prototypes are developed for a rapid analysis of specimens parameters in gaseous, liquid or solid states. These systems are a new generation of sensitive and selective devices for the environmental control and a monitoring of the industrial processes. It has allowed to create a new direction

in National Academy of sciences of Ukraine concerning the newest intellectual instrument making on a basis of the multichannel devices of a gas analysis for the solution of various problems in an industrial sector of Ukraine, for requirements of preservation of the environment, and, in the final analysis, to enrich a life standard of people.

Key words: chemical sensor arrays, electronic nose, piezoelectric transducers, pattern recognition, multichannel analysers, identification.

Надійшла до редакції 15.07.10

**ДЕРЖІНВЕСТИЦІЙ
СФОРМУВАЛО БАЗУ ДАНИХ
СТРАТЕГІЧНО ВАЖЛИВИХ
ІНВЕСТИЦІЙНИХ ПРОЕКТІВ**

На виконання доручення Президента України та відповідного доручення Прем'єр-міністра України Державне агентство України з інвестицій та розвитку сформувало базу даних стратегічно важливих для держави і привабливих для інвесторів інноваційних та інфраструктурних проектів, реалізація яких потребує залучення інвестицій, у тому числі іноземних.



Станом на 20.07.2010 року до Держінвестицій надійшла інформація про понад 1200 проектів, з яких до бази даних було відібрано 891 проект. Більше половини з них (495 проектів) були надані обласними державними адміністраціями. Майже кожна четверта проектна пропозиція надійшла від міністерств та відомств. З проектів міністерств та відомств, включених до бази даних, кожен третій проект (66 проектів) надано Мінпаливенерго, Мінвуглепром та Мінрегіонбуд подано по 46 проектів, Мінпромполітики — 24 проекти, Національним космічним агентством України — 10, Мінтрансзв'язку — 5, Мінагрополітики — 3. алому винаходів і нових технологій «Новий Час» в Севастополі.



З понад 220 заявок, що містить база даних інвестиційних програм і проектів Держінвестицій, до бази даних включено 33 проекти. До переліку стратегічно важливих увійшли також 162 інвестиційні проекти, надані регіональними центрами Держінвестицій.