**Исследование влияния параметров синтеза на оптические свойства углеродных наночастиц в красной и ближней инфракрасной спектральных областях с помощью различных моделей машинного обучения**

***Тучин В.С., Ушакова E.В.***

*Студент, 1 курс магистратуры*

*Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия*

*E-mail: vlad.fioitu56@gmail.com*

Разработка новых наноструктурированных материалов ограничивается трудоемким процессом синтез, а также стоимостью материалов и человеческих ресурсов. В связи с этим возникает интерес к предсказанию методик получения новых материалов, обладающих необходимыми свойствами, с помощью методов машинного обучения [1]. В данной работе был собран, обработан и проанализирован набор данных по синтетическим параметрам и оптическим свойствам набора светоизлучающих наноматериалов - углеродных точек с оптическими переходами в красном и ближнем инфракрасном спектральных диапазонах. Была разработана модель для предсказания спектральных характеристик этих углеродных точек (УТ) на основе множественной линейной регрессии, которая была проверена путем сравнения предсказанных (Pred.) и экспериментально наблюдаемых оптических свойств углеродных точек (длины волн фотолюминесценции и поглощения, квантовый выход), что отображено в таблице 1. Для получения экспериментальных данных были проведены два типичных синтеза УТ с люминесценцией в красной области спектра, а именно УТ, синтезированные из лимонной кислоты в формамиде (обозначенные как УТ-1), и УТ, синтезированные из лимонной кислоты и мочевины в диметилформамиде (обозначенные как УТ-2). Синтез этих УТ был выполнен в трех различных химических лабораториях (в России, Гонконге и Китае – образец 1, 2, 3 соответственно) с целью оценки влияния оборудования лаборатории, использованных материалов и различий в условиях хранения.

Таблица 1. Сравнение экспериментальных и полученных с помощью множественной линейной регрессии оптических свойства УТ-1 и УТ-2

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Опт.св-ва | УТ-1 | УТ-2 |
| Pred. | Обр. 1 | Обр. 2 | Обр. 3 | Pred. | Обр. 1 | Обр. 2 | Обр. 3 |
| Abs, nm | 549 | 573±31 | 576 | 580 | 591 | 568 ± 10 | 558 | 590 |
| PL, nm | 645 | 640 ± 5 (ex.590) | 617(ex.590) | 615(ex.590) | 641 | 627 ± 6 (ex.550) | 626(ex.550) | 654(ex.512) |
| PLQY, % | 25 | 29(ex.550)10 (ex.590) | 22 (ex.415)10 (ex.590) | 20 (ex.530)15 (ex.560) | 29 | 18 (ex.430) | 13 (ex.550) | 18 (ex.560) |

Для анализа кластеров, полученных с помощью метода k-Means из собранных данных, были использованы модели k-ближайших соседей, линейной регрессии, дерево решений и случайного леса. Как показали результаты, одним из недостатков регрессионных моделей, дерева решений и случайного леса является переобучение на маленьких наборах данных, и поэтому для данного исследования модели линейной регрессии и метода ближайших соседей более подходят в качестве моделей машинного обучения. Для всех задач предлагается открытый исходный код на GitHub для использования в предсказании оптических свойств углеродных точек и их процедур синтеза [2].

*Грантовая поддержка работы осуществляется Российским научным фондом (22-13-00294).*

**Литература**

1. Chibani S., Coudert F.-X. Machine learning approaches for the prediction of materials properties // APL Materials. 2020. Т. 8. № 8. С. 080701.

2. Tuchin V.S. et al. Optical Properties Prediction for Red and Near‐Infrared Emitting Carbon Dots Using Machine Learning // Small. 2024. С. 2310402.