

ОПРЕДЕЛЕНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК ПО РАЗМЕРАМ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Барковский В. В. (Университет ИТМО), **Тепляков Н. В.** (Университет ИТМО)
Научный руководитель – доктор ф.-м. наук, Рухленко И. Д.
(Университет ИТМО)

Целью работы является разработка эффективного способа определения функции распределения квантовых точек по размерам из знания их оптических свойств. Для определения параметров размерного распределения наночастиц использовались методы машинного обучения, обученные на синтетическом наборе сгенерированных спектров оптического поглощения ансамблей квантовых точек. Полученные результаты будут использованы для разработки решения задачи мгновенного определения функции распределения квантовых точек по размерам на основе знания их спектров поглощения.

Введение. Для понимания многих функциональных особенностей квантовых точек особенно важно знание их функции распределения по размерам, поскольку от размера наночастиц зависит их энергетический зазор. Имеющиеся численные методы определения функции распределения частиц по размерам, которые представляют собой решение оптимизационной задачи обратного поиска решения, достаточно медлительны и неточны, особенно если распределение по размерам описывается сложной функцией. В данной работе мы предлагаем новый подход к прогнозированию функции распределения квантовых точек по размерам и показываем, что наш подход обеспечивает гораздо большую точность и эффективность по сравнению с известными методами.

Основная часть. Основная идея представленного метода заключается в предварительной генерации множественных спектров поглощения ансамблей квантовых точек, где каждый ансамбль характеризуется некоторой функцией распределения по размерам. После чего эти данные используются для обучения моделей машинного обучения, которые осуществляют разложение целевых функций распределения по размерам на несколько элементарных пиков и предсказывает центры, ширины и амплитуды данных пиков. Конкретные модели машинного обучения включают в себя линейную регрессию, деревья решений и нейронные сети.

Выводы. В результате работы был разработан новый подход к восстановлению функции распределения квантовых точек по размерам из знания их усредненных спектров поглощения. Данный метод характеризуется высокой эффективностью и большой точностью предсказаний, даже в случае многомодальных функций распределения. В последствии планируется усовершенствование подхода путем включения в эту систему данных, полученных в результате проведения экспериментов над реальными квантовыми точками.

Барковский В. В. (автор)

Подпись

Тепляков Н. В. (автор)

Подпись

Рухленко И. Д. (научный руководитель)

Подпись