



Физический факультет
Московского
государственного университета
имени М.В.Ломоносова

Сверточные нейронные сети для создания углеродного фотолюминесцентного наносенсора ионов металлов

Чугреева Г. Н.

Сарманова О. Э.

Лаптинский К. А.

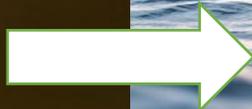
Доленко Т. А.

21 июня 2024
Москва





Al Mg Cu Fe Zn Ni Co Cr Pb



Углеродные точки (УТ) как наносенсоры

Свойства:

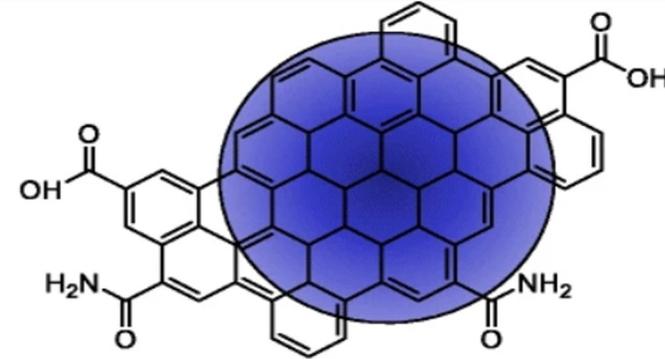
- Интенсивная, стабильная фотолюминесценция (ФЛ)
- Чувствительность ФЛ к изменениям параметров окружения (температура, рН, ионы и молекулы, и др.)
- Биосовместимость
- Диспергируемость в воде

Структурные особенности:

- Шарообразная/дискообразная форма
- Разнообразные функциональные группы на поверхности
- Размер до 100 нм

Области применения:

- Наносенсорика
- Тераностика
- Бיוвизуализация
- Энергетика



Схематическое представление УТ [1]



Цель и задачи работы

Цель: разработка фотолюминесцентного наносенсора на основе УТ для одновременного определения концентрации ионов в воде с применением искусственных нейронных сетей.

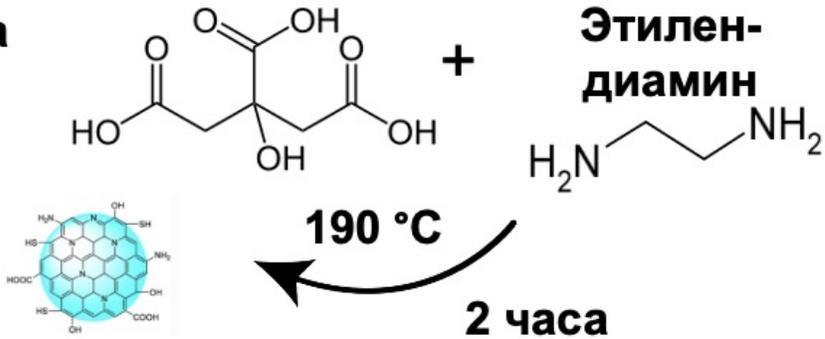
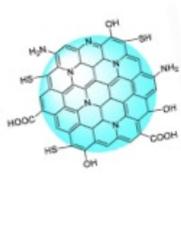
Задачи:

1. Синтез и характеристика водных растворов наночастиц.
2. Исследование влияния взаимодействий поверхности УТ с ионами в воде на фотолюминесценцию наночастиц.
3. Получение базы данных спектров фотолюминесценции УТ.
4. Применение ИНС для разработки фотолюминесцентного мультимодального углеродного наносенсора ионов в воде.

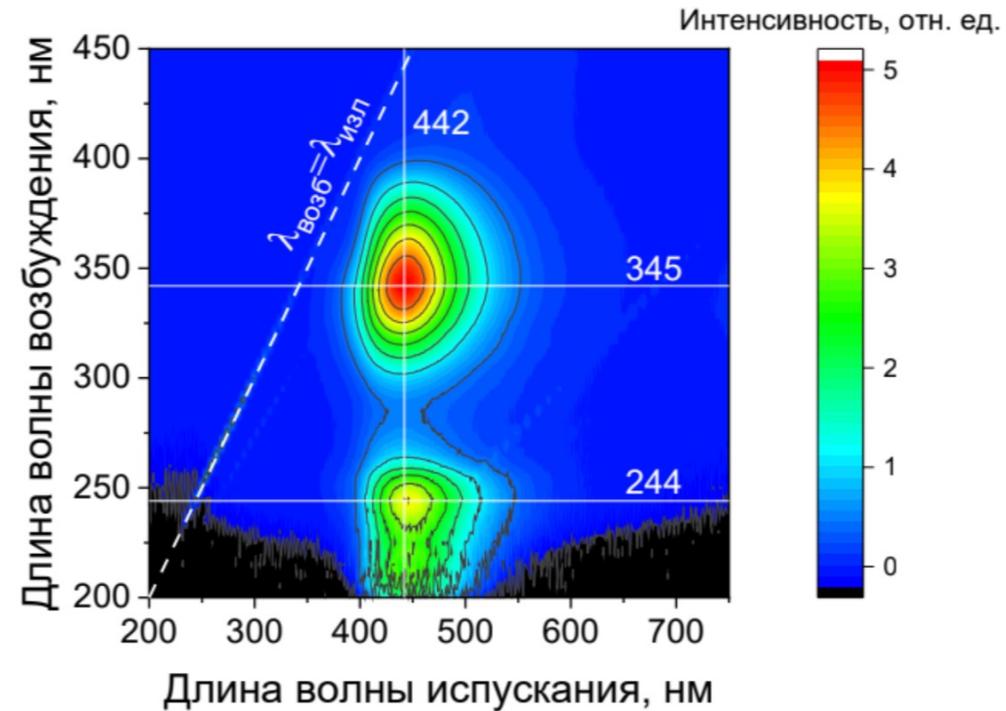


Характеризация УТ

Лимонная кислота



Гидротермальный метод синтеза УТ

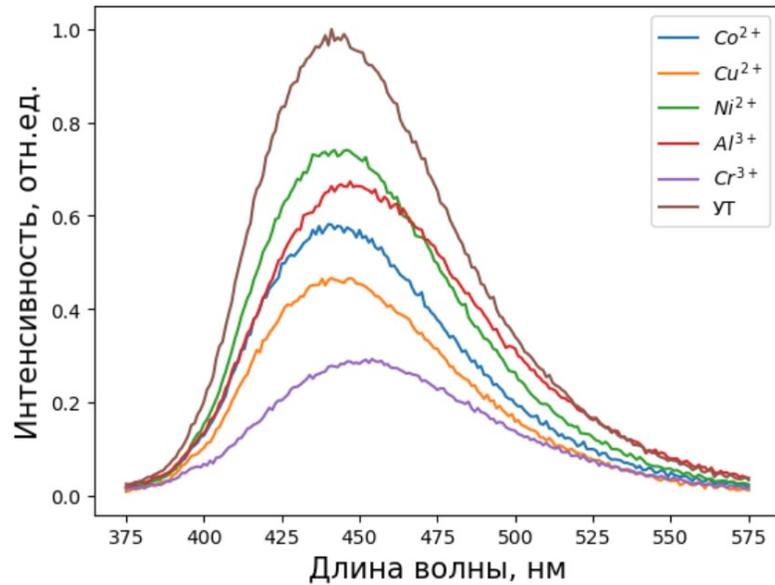


Размер, нм (ПЭМ)	Размер, нм (ДСР)	ζ -потенциал, мВ	Квантовый выход люминесценции, % $\lambda_{\text{возб}} = 345\text{ нм}$
5-11 \pm 0.3	17.3 \pm 0.4	-13.3 \pm 0.7	99.1 \pm 0.5

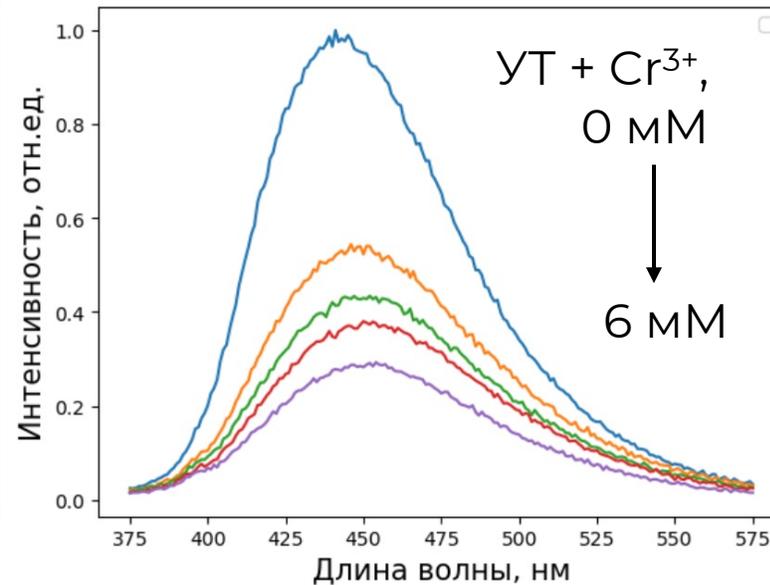
Результаты характеристики УТ



Фотолюминесцентные свойства УТ

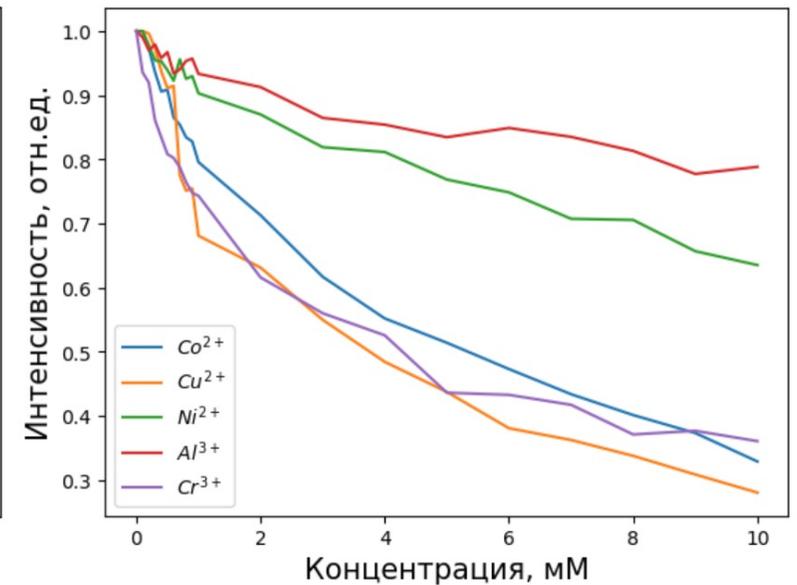


Интенсивность ФЛ УТ в присутствии различных катионов с концентрацией 6 мМ.



Интенсивность ФЛ УТ в присутствии ионов Cr^{3+} с различной концентрацией

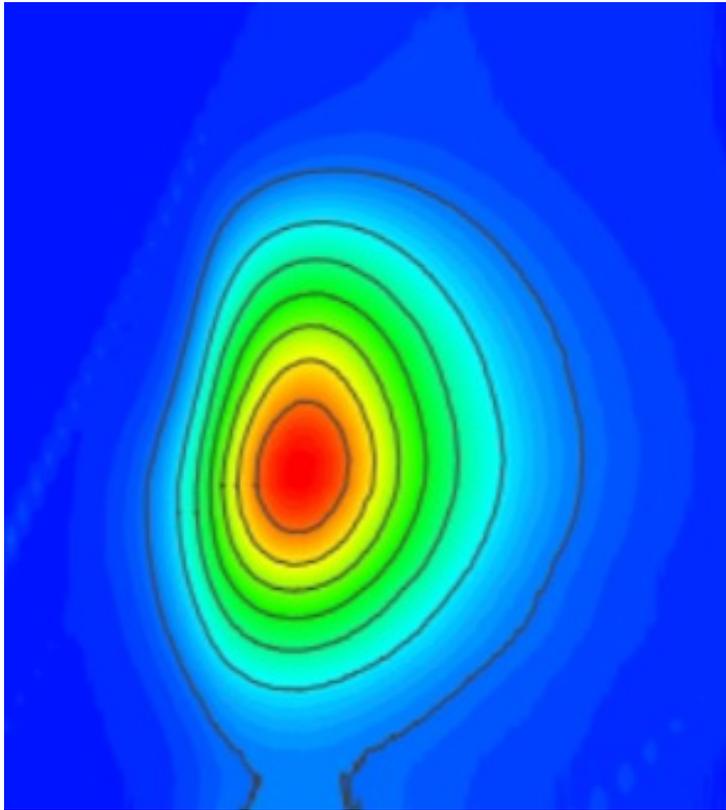
Концентрация УТ 5 мг/л



Интенсивность ФЛ УТ в зависимости от концентрации ионов.



Набор данных



Тензор [1x27x201]

- Концентрация УТ: 5 мг/л
- Диапазон изменения концентрации
 Cu^{2+} , Co^{2+} , Al^{3+} , Cr^{3+} , Ni^{2+} : 0 – 6 мМ, шаг 1.5 мМ
 NO_3^- : 0 – 72 мМ, шаг 3-4.5 мМ
 - 3125 растворов:
 - 20 однокомпонентных
 - 160 двухкомпонентных
 - 640 трехкомпонентных
 - 1280 четырехкомпонентных
 - 1024 пятикомпонентных
 - 1 раствор без ионов
- Разбиение на тренировочный набор (70%)
валидационный (20%)
тестовый (10%)
Данные в наборах не пересекались
 - 5-кратная кросс-валидация
- 3-кратная инициализация весов сети
 - Результаты усреднялись

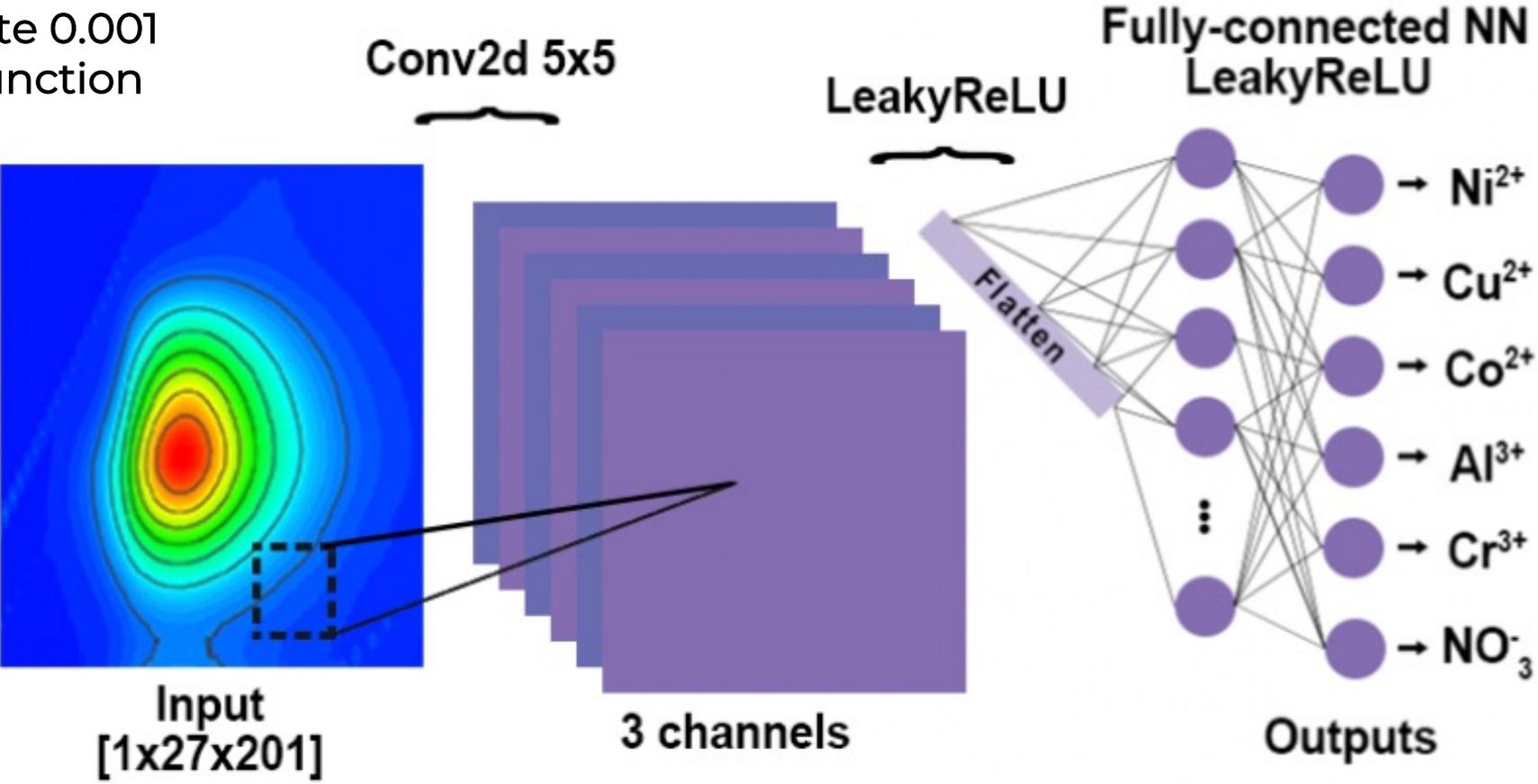
[1] Akbal, F., & Camci, S. (2011). Treatment of metal plating wastewater by electrocoagulation. *Environmental Progress & Sustainable Energy*, 31(3), 340–350.

[2] Л.Ф. Долина Современная техника и технологии для очистки сточных вод от солей тяжелых металлов, 2008

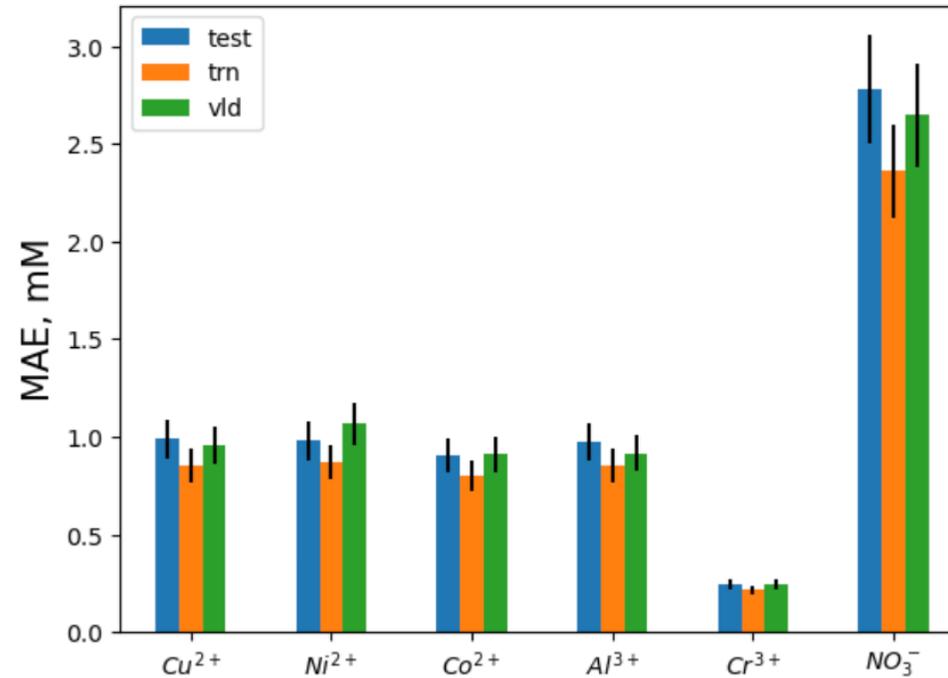


Применение ИНС. Архитектура нейросети

Adam optimizer
Learning rate 0.001
MSE loss function



Применение ИНС. Результаты



	Cu^{2+}	Ni^{2+}	Co^{2+}	Al^{3+}	Cr^{3+}	NO_3^-
MAE на тестовом наборе данных, мМ	0.99 ± 0.07	0.98 ± 0.07	0.90 ± 0.06	0.98 ± 0.07	0.24 ± 0.013	2.78 ± 0.29
Относительная ошибка, %	16.50%	16.30%	15.00%	16.50%	4.00%	3.86%



Выводы

1. Показана принципиальная возможность создания мультимодального фотолюминесцентного наносенсора на основе УТ для одновременного определения концентрации шести ионов Cu^{2+} , Ni^{2+} , Co^{2+} , Al^{3+} , Cr^{3+} и NO_3^- в воде.
2. Применение сверточных нейронных сетей для решения обратной пятипараметрической задачи обеспечило средние абсолютные ошибки определения концентрации ионов Cu^{2+} , Ni^{2+} , Co^{2+} , Al^{3+} , Cr^{3+} и NO_3^- со средними абсолютными ошибками 0.99 ± 0.07 мМ, 0.98 ± 0.07 мМ, 0.90 ± 0.06 мМ, 0.98 ± 0.07 мМ, 0.240 ± 0.013 мМ и 2.78 ± 0.29 мМ, соответственно. Точность разработанного наносенсора удовлетворяет требованиям контроля и мониторинга состава сточных и технологических вод.



Публикации по теме

1. O. E. Sarmanova, K. A. Laptinskiy, S. A. Burikov, G. N. Chugreeva, and T. A. Dolenko. Implementing neural network approach to create carbon-based optical nanosensor of heavy metal ions in liquid media. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 286:122003, 2023.
2. G. N. Chugreeva, O. E. Sarmanova, K. A. Laptinskiy, S. A. Burikov, T. A. Dolenko. Application of convolutional neural networks for creation of photoluminescent carbon nanosensor for heavy metals detection. *Optical Memory and Neural Networks (Information Optics)*. Принята к печати 25.07.2023.
3. O.E. Sarmanova, G. N. Chugreeva, K. A. Laptinskiy, S. A. Burikov, T. A. Dolenko. Decoding fluorescence excitation-emission matrices of carbon dots aqueous solutions with convolutional neural networks to create multimodal nanosensor of metal. *Moscow University Physics Bulletin*. Принята к печати 5.10.2023.



Спасибо за внимание!

