



Физический факультет
Московского
государственного университета
имени М.В.Ломоносова

Сверточные нейронные сети для разработки углеродных наносенсоров с управляемыми люминесцентными свойствами

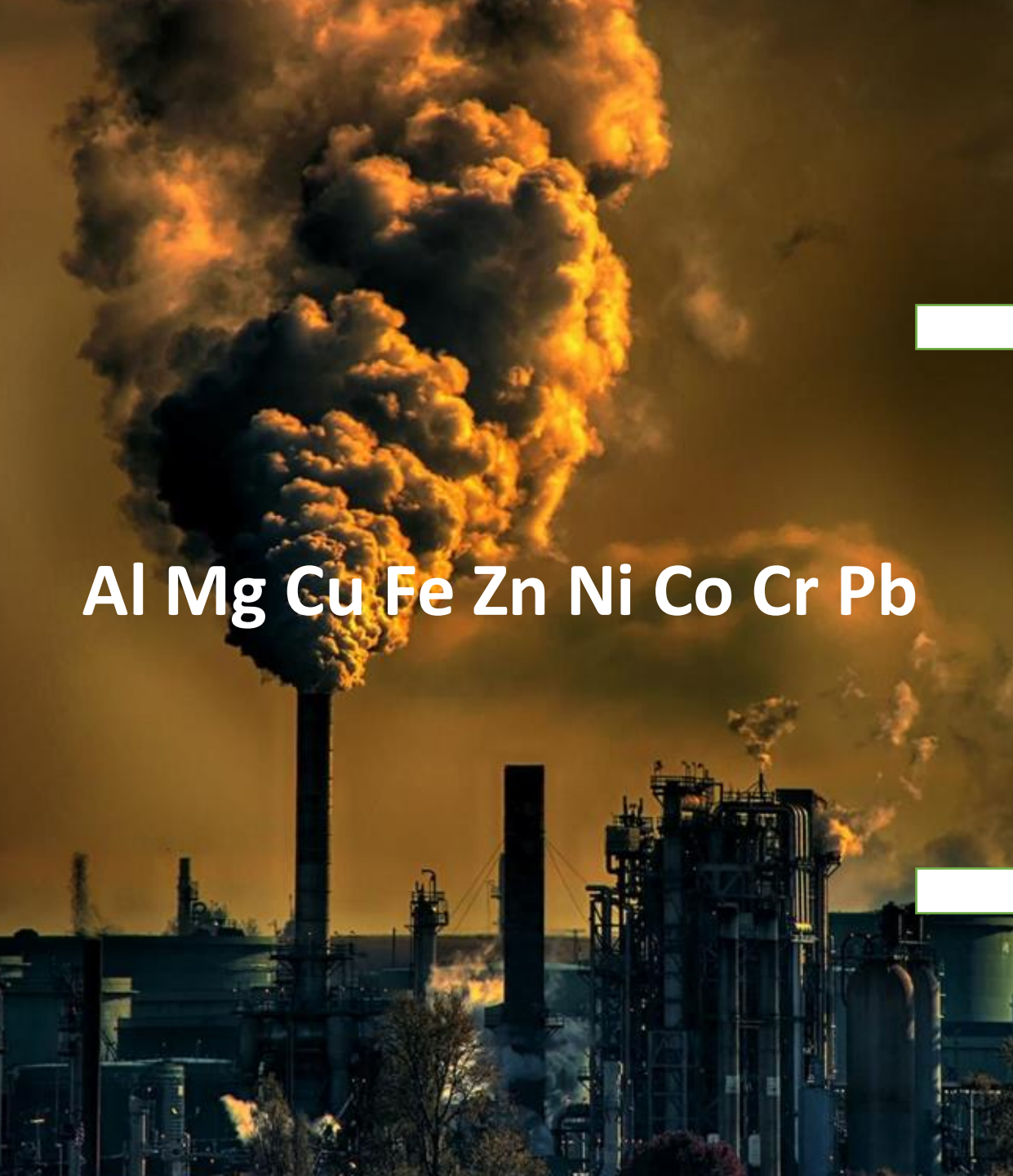
Чугреева Г. Н.

Лаптинский К. А.

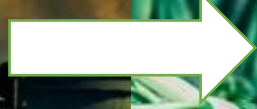
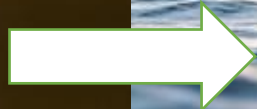
Доленко Т. А.

**3 июля 2026
Москва**





Al Mg Cu Fe Zn Ni Co Cr Pb



Углеродные точки (УТ) как наносенсоры

Свойства:

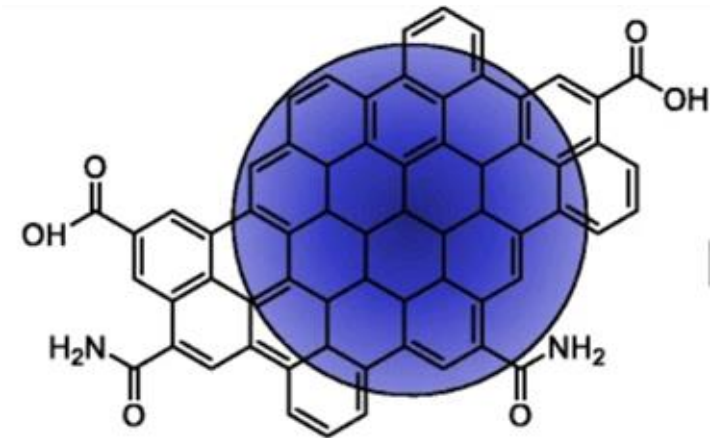
- Интенсивная, стабильная фотолюминесценция (ФЛ)
- Чувствительность ФЛ к изменениям параметров окружения (температура, pH, ионы и молекулы, и др.)
- Биосовместимость
- Диспергируемость в воде

Структурные особенности:

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

Области применения:

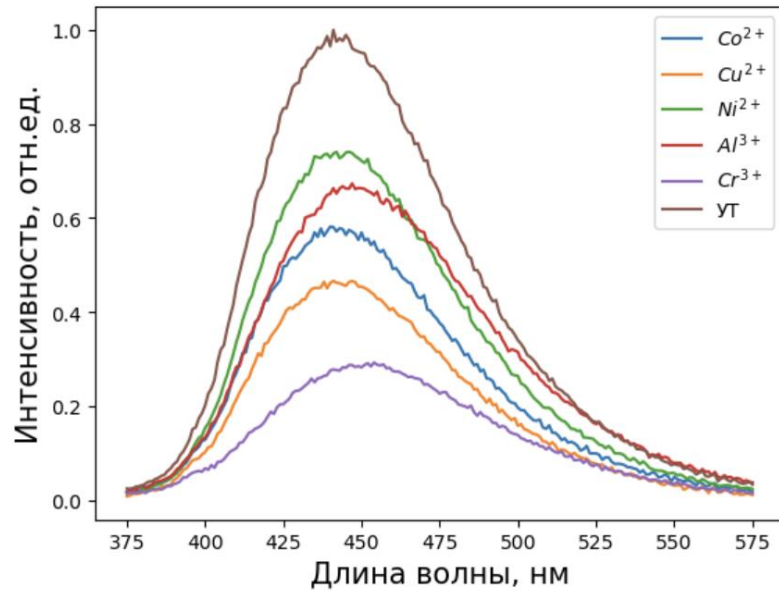
- Наносенсорика
- Тераностика
- Биовизуализация
- Энергетика



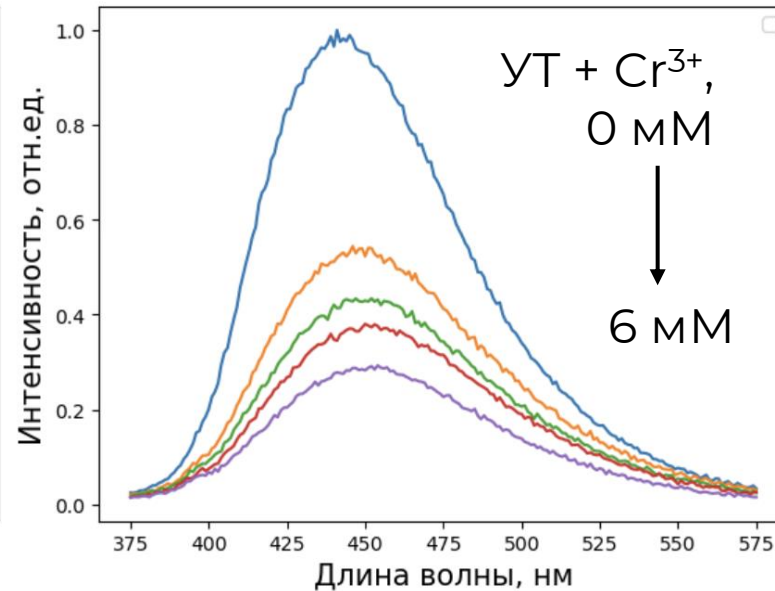
Схематическое представление УТ [1]



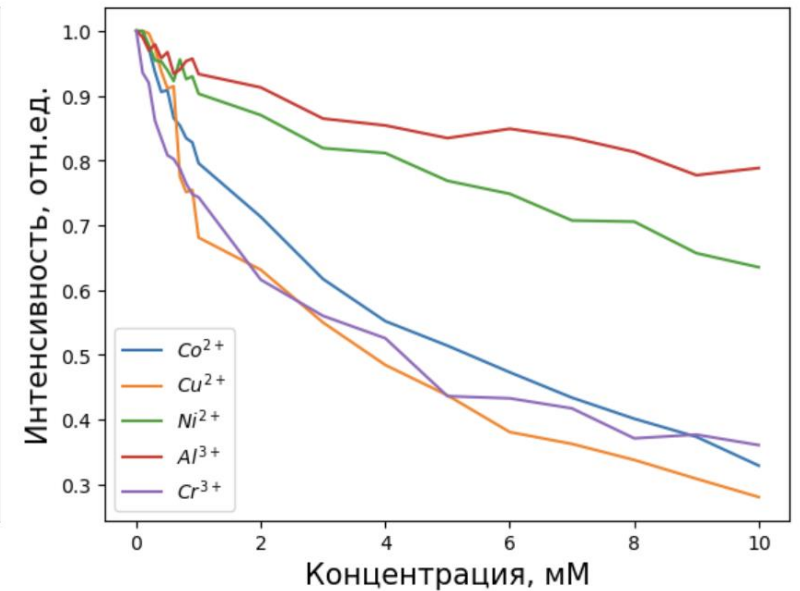
Фотолюминесцентные свойства УТ



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



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



Интенсивность ФЛ УТ в
зависимости от концентрации
ионов.

Концентрация УТ 5 мг/л

[2] A. Vervald et al. Phys.CemC, 2023.

[3] G.N. Chugreeva et al. (2024). Mosc. Univ. Phys, 79,2.



Цель и задачи работы

Цель: разработать подход для установления оптимальных условий синтеза углеродных наночастиц, обеспечивающих требуемую точность определения концентрации катионов в водных растворах с помощью методов машинного обучения

Задачи:

1. Получение базы спектральных данных водных растворов различных углеродных точек (УТ)
2. Применение нейронных сетей для получения точности определения концентрации катионов Co^{2+} и Cu^{2+} каждым типом УТ
3. Обучение нейронной сети-аппроксиматора для получения функционально зависимости точности определения концентрации ионов УТ от параметров их синтеза



Набор спектральных данных

Синтез 74 видов УТ

- Соотношение концентраций этилендиамина и лимонной кислоты (прекурсоров) от 1:1 до 1:20
- Температура – диапазон от 100 до 200°C с шагом 20°C
- Время синтеза – от 30 до 360 мин с различным шагом

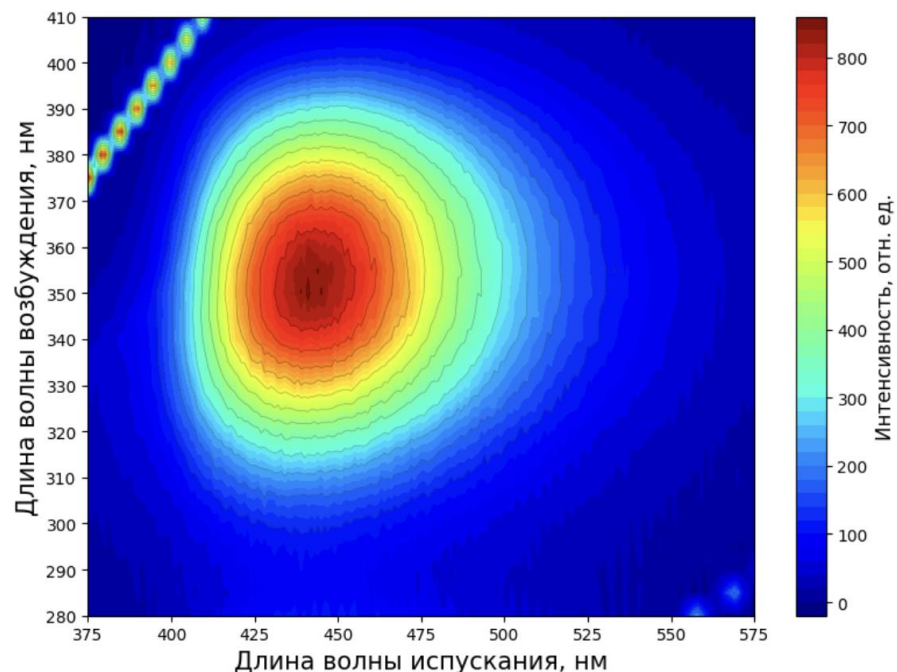
Приготовление растворов с ионами

- Концентрация УТ: 5 мг/л
- Диапазон изменения концентрации Cu^{2+} , Co^{2+} 0 – 6 мМ, шаг 0.67 мМ

Каждому типу УТ соответствует набор из 100 спектров-примеров

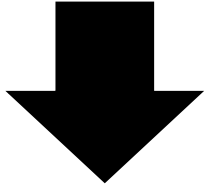
Итого 7400 спектров-примеров ФЛ растворов УТ

- Разбиение на тренировочный набор (90%) и валидационный (10%) наборы
Данные в наборах не пересекались
Предобработка – нормализация данных по статистике тренировочного набора



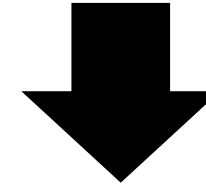
Спектры ФЛ растворов УТ, полученные на спектрофлуориметре Shimadzu RF-6000

Применение нейронных сетей для получения MAE определения концентрации ионов



**74 нейронные сети (НС)
(1 тип УТ – 1 сеть)**

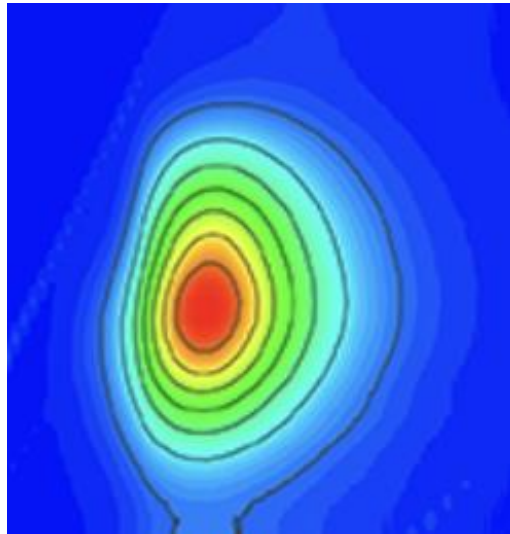
- + каждая НС фокусируется на изменении спектра только одного типа УТ**
- экстремально малое число примеров**



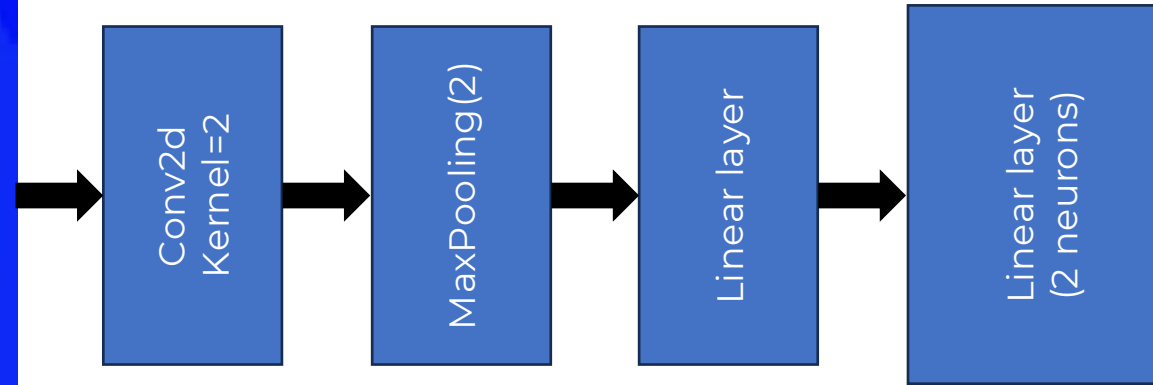
- 1 НС для всего набора данных**
- + способна анализировать изменение спектральных характеристик сразу многих типов УТ**
- + большая тренировочная выборка**
- меньшая чувствительность к изменению спектральных характеристик конкретного типа УТ**



Параметры обучения



Тензор [1x27x201]

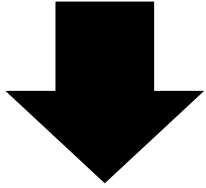


- MSE loss-function
- Adam optimizer
- Метрика качества решения -- MAE
- Параметр регуляризации 10^{-3}

- Начальная скорость обучения 0.001 (при неуменьшении MAE на валидационном наборе в течение 25 эпох уменьшалась в 5 раз, минимум 10^{-6})
- Критерий остановки обучения – неуменьшение ошибки на валидационном наборе в течение 50 эпох



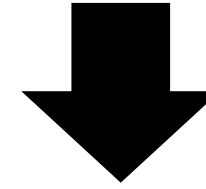
Применение нейронных сетей для получения MAE определения концентрации ионов



**74 нейронные сети (НС)
(1 тип УТ – 1 сеть)**

- + каждая НС фокусируется на изменении спектра только одного типа УТ**
- экстремально малое число примеров**

	Cu^{2+}	Co^{2+}
мин MAE, мМ	0.34	0.46
ЭД:ЛК	2	2
Температура, °C	180	160
Время синтеза, мин	240	240



**1 НС для всего набора данных
+ способна анализировать изменение спектральных характеристик сразу многих типов УТ**

- + большая тренировочная выборка**
- меньшая чувствительность к изменению спектральных характеристик конкретного типа УТ**

	Cu^{2+}	Co^{2+}
мин MAE, мМ	0.63	0.68
ЭД:ЛК	1	2
Температура, °C	140	120
Время синтеза, мин	220	200



Обучение модели-аппроксиматора

Аппроксиматор – полносвязная нейронная сеть с 3 слоями

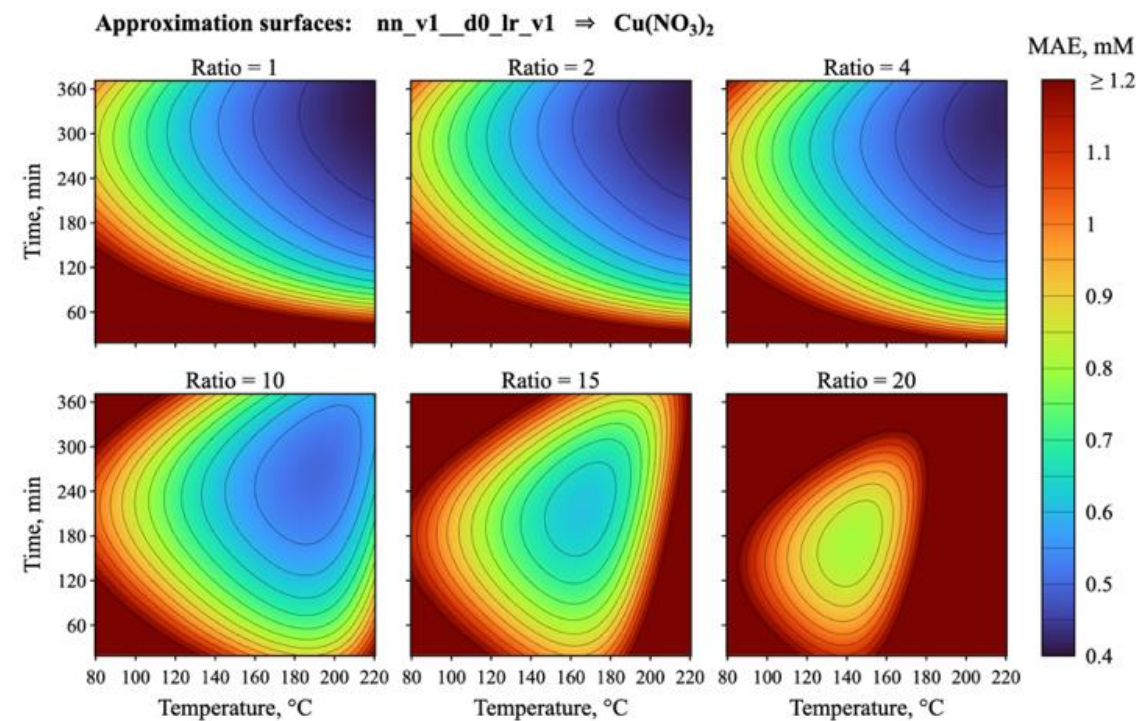
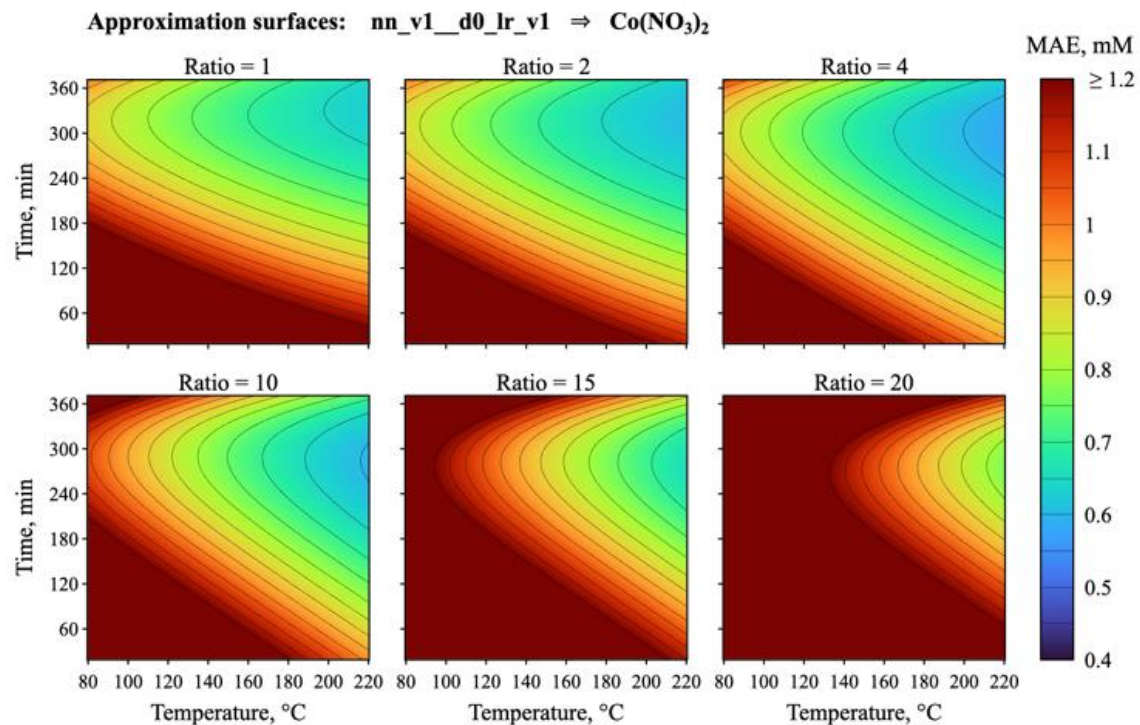
	САО, мм		Параметры синтеза		
	$\text{Co(NO}_3)_2$	$\text{Cu(NO}_3)_2$	ЭД:ЛК	Температура, °C	Время синтеза, мин
0	0.94	0.83	1	100	240
1	0.43	0.48	1	100	300
...	...	...	...	...	...
70	1.31	1.31	20	180	180
71	1.15	1.31	20	180	240
72	0.78	1.00	20	180	300
73	1.33	1.58	20	180	360

MAE определения концентрации ионов 74 СНС, каждая из которых обучалась на наборе данных, соответствующих одному типу УТ



Обучение модели-аппроксиматора

Аппроксиматор – полносвязная нейронная сеть с 3 слоями

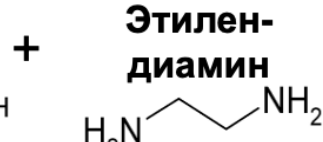
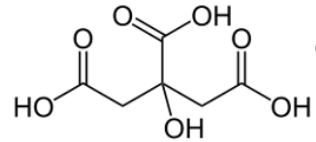
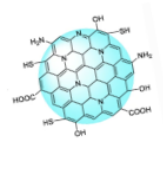


Спасибо за внимание!



Характеризация УТ

Лимонная кислота



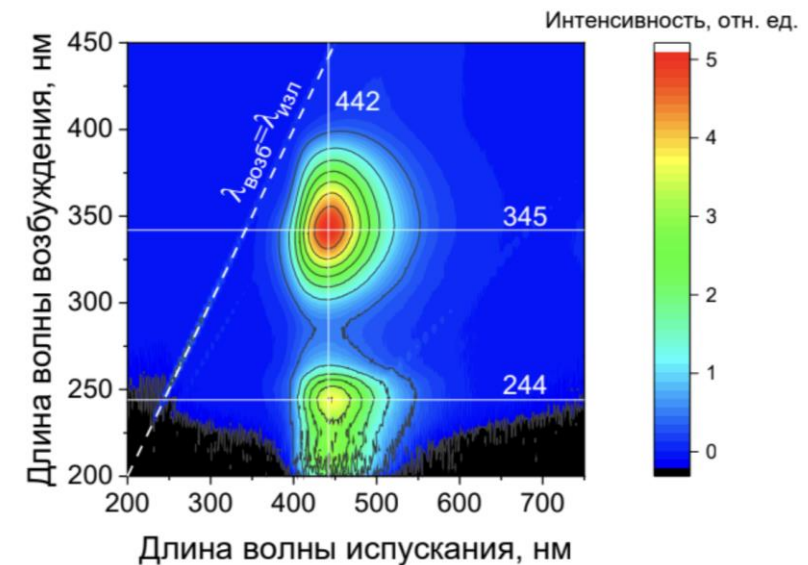
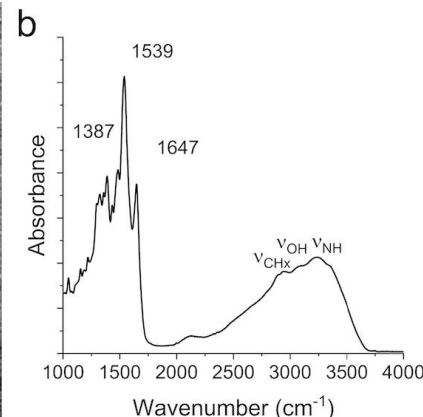
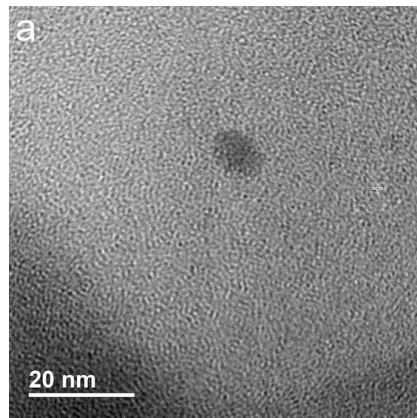
190 °C

2 часа

Гидротермальный метод синтеза УТ

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

Результаты характеристики УТ



Изображение УТ, полученное с помощью ПЭМ (а); спектры ИК-поглощения выпаренных из водного раствора УТ (б).

Матрицы возбуждения-испускания фотolumинесценции водного раствора УТ с концентрацией 5 мг/л



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.

