

Учёные ускорят поиск новых люминофоров с высоким квантовым выходом

Учёные Сибирского федерального университета совместно с коллегами из Южно-китайского технологического университета (Гуанчжоу, Китай) с помощью метода машинного обучения «Случайный лес» проанализировали зависимость квантового выхода фотолюминесценции (PLQY) от кристаллической структуры существующих галогенидов металлов.



Галогенидами называют соединения галогенов с другими химическими элементами или радикалами. Изучив подобные соединения, исследователи выявили первостепенную роль расстояния между ионами металлов в них и количественно определили влияние других структурных особенностей, таких, как расстояние между металлом и галогеном и искажение полиэдров металл-галоген.

Проверив полученную модель на двух впервые синтезированных галогенидах металлов на основе сурьмы, учёные доказали высокую степень совпадения предсказанных и реальных характеристик – отличие составило порядка 15%. Ожидается, что разработанная программа ускорит открытие новых галогенидов металлов с люминесценцией и произведёт переворот на рынке осветительных люминесцентных приборов.

✖ «Несколько лет мы вынашивали идею о возможности использовать методы машинного обучения (МО) для определения взаимосвязи структура-свойства в кристаллах. Задача поиска взаимосвязей структура-свойства является важнейшей в физике твёрдого тела, поскольку структура кристалла напрямую управляет его свойствами. Нужно лишь понять эти законы, чтобы в будущем получать любые материалы с желаемыми свойствами. Эта задача очень сложна, взаимосвязи обнаруживаются нелегко, однако МО с этой проблемой успешно справляется», — заявил российский соавтор работы, доцент базовой кафедры физики твёрдого тела и нанотехнологий Института инженерной физики и радиоэлектроники СФУ **Максим Молокеев**.

Учёный подчеркнул: «соединений изучено более 30, и ещё больше – структурных характеристик. Человеку не под силу выполнить такую задачу самостоятельно. Вот тут на помощь приходит машинное обучение. Из всех существующих методов интернациональная команда выбрала классический метод «Случайного леса» (Random Forest), поскольку помимо обучения и дальнейшего прогнозирования квантового выхода, он позволяет также найти главные компоненты (в данном случае – главные структурные характеристики кристалла), которые максимально влияют на квантовый выход.»

Исследователям удалось узнать эти компоненты и обнаружить один из важных законов, как улучшать квантовый выход в кристаллах, содержащих Pb^{2+} , Sn^{2+} , Bi^{3+} , Sb^{3+} ионы. После чего были синтезированы два абсолютно новых соединения, чьи структуры учёные проанализировали. Анализ структур с помощью разработанной программы выявил, что прогнозируемый квантовый выход

равняется 6.5 и 75.9%.

Реальный эксперимент, проведённый после расчётов, показал значения, близкие к предсказанным: 18.8 и 96.5% соответственно. Наряду со стандартной процедурой проверки модели методом кросс-валидации, этот эксперимент подтвердил, что российско-китайская программа действительно может делать адекватные прогнозы, и что обнаруженные законы верны, и ими можно пользоваться.

«Самое ценное в этой работе то, что созданная нами программа прошла проверку и теперь ей можно пользоваться во многих сферах, где необходимо построить взаимосвязь между какими-то характеристиками объекта и его свойствами. Это могут быть не только материалы (например, сверхпрочный бетон, высокопрочные сплавы и т.д.), но и любые области прикладной науки, где нужен сбор данных, будь то медицина или фотобиология растений, где перебираемых параметров много, и они могут нелинейно связываться со свойствами. Мы разрабатываем это новое направление с разными коллективами ученых, накапливаем базы данных для проведения аналогичных исследований в самых неожиданных областях», — резюмировал учёный.

13 января 2022 г.

© Сибирский федеральный университет. Редакция сайта: +7 (391) 246-98-60, info@sfu-kras.ru.

Адрес страницы: <https://news.sfu-kras.ru/node/25753>