

Моделирование рамановских спектров наноалмазов и решение обратной задачи на поиск распределения по размерам методами машинного обучения

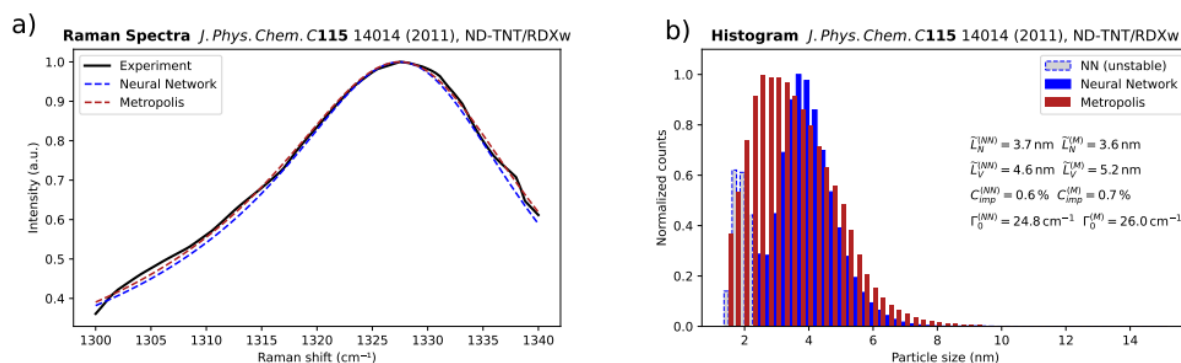
Коняхин С.В.¹

s.koniakhin@rqc.ru

¹ Российский Квантовый Центр, Москва, Россия

Предложена вычислительная платформа для моделирования и фитирования рамановских спектров наноалмазов, основанная на микроскопическом подходе, свободном от феноменологических неопределённостей модели фононного конфинмента. Теоретическая модель включает дискретный спектр в нанокристаллах на основе эффективной скалярной теории упругости для оптических фононов [1,2]. Частоты мод рассчитываются из параболической дисперсии с параметрами, верифицированными по модели Китинга, а интенсивности рассеяния — через непрерывную версию модели поляризации связей (bond polarization model) [1]. Влияние точечных дефектов (вакансий и лёгких примесей) учитывается аналитически через сдвиг пика и уширение, пропорциональное концентрации дефектов и обратному размеру частицы [3,4].

Прямая задача решается с использованием упругоподобной теории для оптических фононов (elasticity-theory-like approach for optical phonons), которая воспроизводит результаты атомистических расчётов. Для решения обратной задачи — восстановления распределения наноалмазов по размерам и параметров дефектности из экспериментального спектра — реализованы два независимых подхода. Первый подход использует обученную на синтетических данных нейронную сеть, второй — стохастическую оптимизацию по методу Метрополиса. Оба метода показали идентичную способность восстанавливать гистограммы размеров, концентрацию дефектов и инструментальное уширение без систематического смещения оценок. Разработанный инструмент валидирован на 14 экспериментальных образцах наноалмазов, полученных детонационным синтезом, НРНТ, синтезом на основе адамантана и лазерным синтезом. Для образцов с типичным размером от 2 до 8 нм достигнуто согласие с данными просвечивающей электронной микроскопии, рентгеновской дифракции и динамического рассеяния света.



Пример восстановления распределения наноалмазова по размерам по рамановскому спектру

Ссылки

- [1] Koniakhin et al., J. Phys. Chem. C **122**, 21711 (2018)
- [2] Utesov et al., J. Phys. Chem. C **122**, 22738 (2018)
- [3] Utesov et al., Phys. Rev. B **102**, 205421 (2020)
- [4] Koniakhin et al., Diam. Relat. Mater. **140**, 111182 (2024)