

УДК 681.2.08**НЕЙРОСЕТЕВАЯ МОДЕЛЬ ГКР-ПОДЛОЖКИ**

Алеся Николаевна Бураковская

Студент 6 курса,

кафедра «Электронные технологии в машиностроении»

Московский государственный технический университет имени Н.Э.Баумана

Научный руководитель: Е.В. Панфилова,

Кандидат технических наук, доцент кафедры «Электронные технологии в машиностроении»

Для измерения Рамановского излучения используют Раман-спектрометр. Рамановская спектроскопия – метод, основанный на рассеянии света, поэтому все, что нужно для получения спектра – это направить падающий луч точно на образец и затем собрать рассеянный свет. А для молекул, адсорбированных на шероховатых металлических поверхностях (в особенности на частичках благородного металла) доля рамановских фотонов достигает $10^6 \dots 10^7$ единиц. Это явление известно как гигантское комбинационное рассеяние света (ГКРС). Этот эффект открывает широкие возможности для идентификации веществ и исследования изменений, происходящих в них под действием окружающей среды.

Ученые ищут способы получения такой поверхности, на которой ГКР-эффект был бы максимальным. Одни варьируют размер частиц золота, другие – их форму, третьи – внедряют частицы благородных металлов в опаловую матрицу, при этом получая различную величину усиления. Создание нейросетевой модели ГКР-подложки облегчит поиски «идеальной» структуры, которая будет показывать максимальные коэффициенты усиления.

Предлагаемая к использованию искусственная нейронная сеть будет предсказывать порядок коэффициента усиления ГКР по параметрам, влияющим на него (материал частицы, форма частицы, структура, размеры частицы, подложка, исследуемое вещество).

Для обучения и эксплуатации сети использовались следующие параметры:

Входные:

- Материал частицы ГКР-активного слоя: Au, Ag, Cu, Al;
- Форма частицы: Наностержень, Нанопризма, Треугольная призма, Гексагональная призма, Призма на призме, Пленка, Нанозвезда, Наносфера, Столбик, Конус с острием.
- Структура: Монослой, Двумерная, Хаотическая упаковка, Наносферы с частицами в межсферическом пространстве, Кристаллы, осажденные в водном р-ре очищенные; Кристаллы, осажденные в водном р-ре; Сплошная пленка; Пленка на опале; Смесь в-ва и частиц, осажденных в водном р-ре; Острийная;
- Характерный размер частицы в плоскости, параллельной подложке;
- Характерный размер частицы или пленки в плоскости, перпендикулярной подложке;
- Материал подложки: Кремний, Стекло, Полимерная пленка, Керамика;
- Исследуемое вещество: Родамин бж, Аналин, Тиофенольный раствор, 4-метилбензениол, Бактериородопсин, Вторая гармоника оптического излучения, Атмосфера;

В качестве выходного фактора использовалась основная характеристика эффекта:

- Коэффициент усиления комбинационного рассеяния света.

Задача сети – установить зависимость между входными и выходными параметрами, то есть задача регрессии. Для решения такой задачи были обучены 2 типа сети: многослойный перцептрон MLP с двумя скрытыми слоями и обобщенно-регрессионная сеть GRNN.

Наилучшие результаты при работе с обучающим набором данных и неизвестными данными показала сеть типа GRNN – определение значения коэффициента усиления осуществляется с точностью до порядка.

Точность работы созданной сети можно и нужно повысить увеличением набора статистических данных и дальнейшим варьированием коэффициентов сглаживания и функций активаций нейронов.

В настоящее время осуществляется расширение обучающей статистики.

Литература

1. *М.Ю.Цветков*, «SERS подложки на основе самоасSEMBЛИРОВАННЫХ и гибридных плазмонных наноструктур», - XIX Международная научно-техническая конференция «ВЫСОКИЕ ТЕХНОЛОГИИ В ПРОМЫШЛЕННОСТИ РОССИИ».
2. *Rachel A. Davies*, «Chemical Enhancement of the Surface Enhanced Raman Scattering Signals of Anilines via Their Ortho-Substituents», - Optics and Photonics Journal, 2013, 3, 13-23.
3. *Jing Yang*, «Laser Hybrid Micro/nano-structuring of Si Surfaces in Air and its Applications for SERS Detection», - Scientific Reports 4, Article number: 6657.