

# **Тезисы конференции Физика.СПб/2023**

## **23-27 октября 2023 года**

---

Здесь представлены принятые на конференцию тезисы.

В сборнике трудов будут опубликованы только представленные на конференции работы.

---

# Использование методов машинного обучения для прогнозирования процессов затвердевания жидкостей

Галимзянов Б. Н.<sup>1</sup>, Доронина М.А.<sup>1</sup>, Мокшин А.В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>КФУ

**e-mail:** bulatgnmail@gmail.com

В последнее десятилетие значительно возрос интерес к изучению фазовых переходов в аморфообразующих жидкостях. Результаты последних исследований показывают, что аморфообразующая способность жидкости зависит от специфики изменения ее атомистической структуры и коллективной динамики вблизи температуры плавления  $T_m$  [1]. Начало таких изменений в динамике жидкости соответствует температуре аррениусовского перехода  $T_A$ . Принято считать, что выше  $T_A$  атомы жидкости не образуют никаких связанных структур. В этом случае зависимость логарифма вязкости от обратной температуры подчиняется линейному закону. Ниже  $T_A$  отдельные группы атомов становятся менее подвижными, что проявляется в отклонении вязкости от аррениусовского поведения, характерного для равновесных жидкостей [2].

Температура Аррениуса  $T_A$  соответствует термодинамическому состоянию, в котором атомистическая динамика жидкости становится гетерогенной и кооперативной [3]. Теоретическая оценка этой температуры затруднительна для некоторых типов материалов, особенно силикатов и боратов. В этих материалах температурная зависимость самодиффузии воспроизводится законом Аррениуса, где активационный барьер практически не зависит от температуры. Целью настоящей работы было установление взаимосвязи между температурой аррениусовского перехода  $T_A$  и физическими свойствами жидкостей, непосредственно связанными с их аморфообразующей способностью. С помощью модели машинного обучения была рассчитана температура  $T_A$  для силикатов, боратов, органических соединений и расплавов металлов различного состава. В качестве входных параметров использовались эмпирические значения температуры стеклования  $T_g$ , температуры плавления  $T_m$ , отношения этих температур  $T_g/T_m$  и индекса хрупкости  $m$ . Установлено, что температуры  $T_g$  и  $T_m$  являются значимыми параметрами, тогда как их отношение  $T_g/T_m$  и индекс хрупкости  $m$  мало коррелируют с температурой  $T_A$ . Важным результатом настоящей работы является аналитическое уравнение, связывающее температуры  $T_g$ ,  $T_m$  и  $T_A$ , которое с алгебраической точки зрения является уравнением для искривленной поверхности второго порядка [4]:

$$T_A(T_g, T_m) = a_1 T_g + a_2 T_g^2 + b_1 T_m + c_1 T_g T_m.$$

Значения коэффициентов  $a_1 = b_1 = 0.7016$ ,  $a_2 = -7.52 \times 10^{-4} K^{-1}$  и  $c_1 = 4.42 \times 10^{-4} K^{-1}$  были подобраны через регрессионный анализ. Показано, что это уравнение позволяет корректно оценить температуру  $T_A$  для большого класса материалов независимо от их состава и аморфобразующей способности.

Работа выполнена при поддержке РНФ (проект №19-12-00022).

## Список литературы

1. Jaiswal A., Egami T., Kelton K. F., Schweizer K. S., Zhang Y., Correlation between Fragility and the Arrhenius Crossover Phenomenon in Metallic, Molecular, and Network Liquids, Phys. Rev. Lett., 117, 205701, 2016.

2. Dai R., Ashcraft R., Kelton K. F., A possible structural signature of the onset of cooperativity in metallic liquids, J. Chem. Phys., 148, 204502, 2018.
3. Novikov V. N., Connection between the glass transition temperature  $T_g$  and the Arrhenius temperature  $T_A$  in supercooled liquids, Chem. Phys. Lett., 659, 133-136, 2016.
4. Galimzyanov B. N., Doronina M. A., Mokshin A. V., Arrhenius Crossover Temperature of Glass-Forming Liquids Predicted by an Artificial Neural Network, Materials, 16, 1127, 2023.