

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ  
ДАГЕСТАНСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР РАН  
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ИМ. Х.И. АМИРХАНОВА ДФИЦ РАН  
ДАГЕСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ЧЕЛЯБИНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

# ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ, КРИТИЧЕСКИЕ И НЕЛИНЕЙНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

## СБОРНИК ТРУДОВ

международной конференции,  
посвященной 300-летию Российской академии наук



*Российская Академия Наук*

10-15 сентября 2023 г.



Махачкала 2023

УДК 537.61

ББК 22.334

Ф-16

**Ф-16** Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах. Сборник трудов международной конференции (10-15 сентября 2023 г., Махачкала). – Махачкала: Издательство АЛЕФ, 2023. – 302 с.

ISBN 978-5-00212-314-8

DOI: 10.33580/9785002123148

В настоящий сборник включены материалы, представленные на международную конференцию "Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах".

Конференция проводится Институтом физики Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук, Дагестанским государственным университетом, Челябинским государственным университетом.

Материалы воспроизведены с авторских оригиналов, в связи с чем Оргкомитет конференции не несет ответственности за допущенные опечатки и стилистические погрешности.

ISBN 978-5-00212-314-8

© Институт физики Дагестанского ФИЦ РАН, 2023

© Издательство АЛЕФ, 2023

## Искусственные нейронные сети как инструмент для прогнозирования температуры аррениусовского перехода аморфообразующих жидкостей

Галимзянов Б.Н., Доронина М.А., Мокшин А.В.  
Казанский федеральный университет, Казань, Россия  
e-mail: bulatgnmail@gmail.com

Температура аррениусовского перехода  $T_A$  соответствует термодинамическому состоянию, в котором атомистическая динамика жидкости становится гетерогенной и кооперативной, в то время как активационный барьер диффузионной динамики становится зависимым от температуры  $T$  при  $T < T_A$  [1]. Теоретическая оценка этой температуры затруднительна для некоторых типов материалов, особенно для силикатов и боратов. В этих материалах температурная зависимость самодиффузии воспроизводится законом Аррениуса, где активационный барьер практически не зависит от  $T$ .

Цель исследования настоящей работы заключается в установлении соответствия между температурой  $T_A$  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 [2]. 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 следующего вида

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

связывающее температуры  $T_g$ ,  $T_m$  и  $T_A$ , которое с алгебраической точки зрения является уравнением для искривленной поверхности второго порядка (значения коэффициентов  $a_1$ ,  $a_2$ ,  $b_1$  и  $c_1$  определяются через нелинейный регрессионный анализ). Показано, что это уравнение позволяет корректно оценивать температуру  $T_A$  для большого класса материалов, независимо от их состава и стеклообразующей способности.

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

[1] P.G. Debenedetti, F.H. Stillinger, Nature **410**, 259 (2001).

[2] B.N. Galimzyanov, M.A. Doronina, A.V. Mokshin, Materials **16**, 1127 (2023).