

## **ВЕРОЯТНОСТНЫЙ АНАЛИЗ МОДЕЛИРОВАНИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК КОМПОЗИЦИОННЫХ НАНОЧАСТИЦ, СФОРМИРОВАННЫХ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ**

А.В. Вахрушев, А.Ю. Федотов

*Институт прикладной механики УрО РАН, Ижевск, 426067, Россия*

Представлена математическая модель процессов конденсации композиционных наночастиц из газовой фазы. Приведены результаты расчетов формирования композиционных наночастиц из серебра и меди при конденсации в вакууме. Вычислены основные свойства наночастиц. Численное моделирование процессов формирования выполнено многократно, получена серия выборочных параметров наночастиц: числа наночастиц в единице объема, их среднего диаметра, средней плотности и массовой доли серебра в наночастицах. По критерию Пирсона и при помощи статистической функции проверен закон распределения характеристик наночастиц. Выполнен анализ оценочных параметров предполагаемых теоретических законов.

## **PROBABILISTIC ANALYSIS OF STRUCTURAL PROPERTIES DISTRIBUTION SIMULATION FOR COMPOSITE NANOPARTICLES FORMED IN GAS PHASE**

A.V. Vakhrouchev and A.Y. Fedotov

*Institute of Applied Mechanics UB RAS, Izhevsk, 426067, Russia*

The mathematical model of condensation processes of composite nanoparticles from a gas phase is submitted. Calculation results of formation composite nanoparticles from silver and copper at vacuum evaporation and condensation are obtained. The basic nanoparticles properties are calculated. Numerical simulation of nanoparticles forming process is executed many times. The series of selective nanoparticles parameters such as number of nanoparticles in volume, its average diameter, average density and silver mass portion in nanoparticles are obtained. Laws of nanoparticles properties distribution are checked by means of Pirson criterion and statistic function. The analysis of evaluative parameters is executed for suggesting theoretical laws.

### **1. Введение**

Расчет макроскопических параметров нанокompозитов является актуальной задачей, которая требует определения энергетических, структурно-масштабных параметров, механических свойств наноэлементов, изучения процессов формирования и взаимодействия структурных наноэлементов, образующих композит. Применительно к порошковым нанокompозитам данная задача рассмотрена в работах [1–9]. Как показали исследования, главная особенность наноэлементов состоит в том, что при изменении характерного размера наноэлементов их физико-механические характеристики (модуль упругости, прочность, деформационные и другие параметры) могут изменяться на порядок, что обусловлено перестройкой (причем не обязательно монотонной) атомной структуры и формы наноэлемента. Поэтому характерный размер наноэлемента является одним из главных параметров, определяющих свойства нанокompозита. Следует отметить, что процессы формирования наноэлементов, определяющие их структуру и свойства, осуществляемые на атомарном и молекулярном уровне, являются

вероятностными или стохастическими. Поэтому указанные параметры наноэлементов всегда имеют определенный разброс. В этой связи вероятностный анализ распределения параметров наноэлементов является весьма актуальной задачей.

Цель настоящей работы — вероятностный анализ с помощью метода молекулярной динамики законов распределения параметров наночастиц, формируемых при конденсации из газовой среды.

## 2. Постановка задачи и теоретические основы

Схема расчетной области для решения поставленной выше задачи представлена на рисунке 1.

Моделирование процессов формирования наночастиц осуществляется методом молекулярной динамики [10–12]. Основу метода составляет численное решение дифференциального уравнения движения Ньютона для каждого атома с начальным заданием скоростей и координат:

$$m_i \frac{d^2 \bar{\mathbf{r}}_i(t)}{dt^2} = - \frac{\partial U(\bar{\mathbf{r}}(t))}{\partial \bar{\mathbf{r}}_i(t)} \quad (i = 1, 2, \dots, K), \quad (1)$$

$$t = 0, \quad \bar{\mathbf{r}}_i(t_0) = \bar{\mathbf{r}}_{i0}, \quad \frac{d\bar{\mathbf{r}}_i(t_0)}{dt} = \bar{\mathbf{V}}_i(t_0) = \bar{\mathbf{V}}_{i0} \quad (i = 1, 2, \dots, K), \quad (2)$$

где  $K$  — число атомов, составлявших наносистему;  $m_i$  — масса  $i$ -го атома;  $\bar{\mathbf{r}}_{i0}, \bar{\mathbf{r}}_i(t)$  — начальные и текущие радиус-векторы  $i$ -го атома соответственно;  $U(\bar{\mathbf{r}}(t))$  — потенциальная энергии системы;  $\bar{\mathbf{V}}_{i0}, \bar{\mathbf{V}}_i(t)$  — начальная и текущая скорости  $i$ -го атома соответственно;  $\bar{\mathbf{r}}(t) = \{\bar{\mathbf{r}}_1(t), \bar{\mathbf{r}}_2(t), \dots, \bar{\mathbf{r}}_K(t)\}$ .

Потенциальная энергия взаимодействия атомов определялась силами взаимодействия Ван-дер-Ваальса в виде потенциала Ленарда–Джонса:

$$U = \sum_{ij \in vdw} \left[ \frac{A_{ij}}{R_{ij}^{12}} - \frac{B_{ij}}{R_{ij}^6} \right], \quad A_{ij} = \left( \frac{e_i^*}{2} + \frac{e_j^*}{2} \right)^{12} \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_j}, \quad B_{ij} = 2 \left( \frac{e_i^*}{2} + \frac{e_j^*}{2} \right)^6 \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_j}, \quad (3)$$

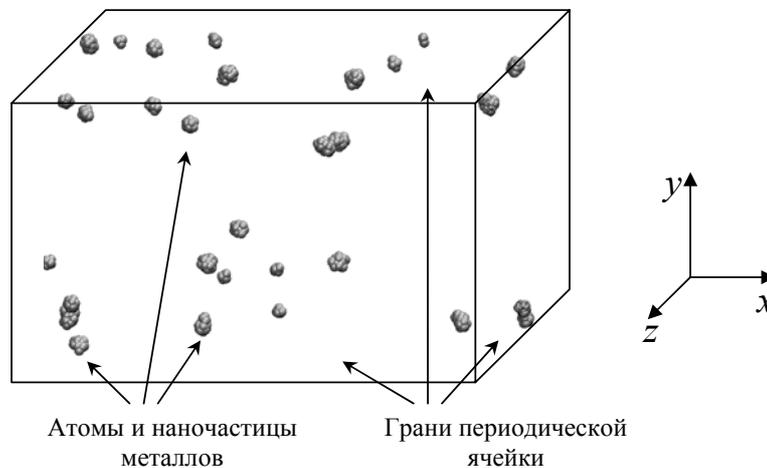


Рис. 1. Схема расчетной области

где  $e_i^*$  — расстояние, на котором энергия разделения двух атомов типа  $i$  минимальна;  $\varepsilon_i$  — глубина потенциальной ямы энергии взаимодействия Ван-дер-Ваальса для  $i$ -го атома;  $R_{ij}$  — расстояние, на котором происходит взаимодействие.

Задача формирования наночастиц в газовой среде решается многократно с однотипными термодинамическими начальными условиями. При этом начальные условия (2) отличаются в каждой численной реализации случайно заданным образом. В начальный момент времени атомы распределяются случайным образом по расчетной ячейке с периодическими граничными условиями. Они находятся в свободном состоянии и не сгруппированы в наночастицы. Распределение начальных скоростей атомов задается согласно распределению Максвелла, соответствующего начальной температуре наносистемы. Последующее охлаждение обуславливает конденсацию свободных атомов в наночастицы.

Выборочные данные некоторого параметра формируемых наночастиц получаются из серии вычислительных экспериментов. Далее проверяется гипотеза о виде закона распределения данного параметра.

Затем по результатам серии вычислительных экспериментов находятся распределения параметров наносистемы в каждый момент времени. Параметрами могут выступать такие свойства как число наночастиц в единице объема, их средний диаметр, общие объем и площадь поверхности. Для фиксированного момента времени распределение отдельного параметра  $X$  представляется выборочными случайными значениями  $x_1, x_2, \dots, x_N$ . В общем случае закон распределения параметров не известен и возникает вопрос его определения. Оценка закона распределения выборочных параметров осуществляется по критерию Пирсона [13].

Критерий Пирсона основывается на проверке непараметрической гипотезы о соответствии эмпирической функции распределения некоторому теоретическому закону. Выборочные данные оцениваемого параметра упорядочиваются по неубыванию и группируются в вариационный ряд  $x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_N$ , где  $N$  — общее число выборочных данных. Область изменения случайного параметра  $X$  разбивается на  $m$  интервалов  $\Delta_1, \Delta_2, \dots, \Delta_m$ . Количество интервалов разбиения определяется по эвристической формуле Стерджесса  $m = 1 + 3,322 \lg N$  [14].

Вероятности  $p_j$  ( $j = 1, 2, \dots, m$ ) попадания случайной величины в каждый интервал  $\Delta_j$  вычисляются в соответствии с предполагаемым теоретическим законом распределения

$$p_j = P\{X \in \Delta_j\} = \int_{\Delta_j} f(x) dx, \quad (4)$$

где  $f(x)$  — плотность распределения вероятности. Теоретическое число значений  $\tilde{n}_j$  случайной величины  $X$ , попавшее в интервал  $\Delta_j$ , определяется как  $\tilde{n}_j = Np_j$ . Эмпирические частоты  $n_j$  вычисляются подсчетом выборочных значений  $x_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ), которые попадают в интервал  $\Delta_j$ .

Если теоретические частоты  $\tilde{n}_j$  слабо отличаются от эмпирических  $n_j$ , принимается гипотеза о соответствии эмпирического закона распределения теоретическому; в противном случае гипотеза отклоняется. В качестве теоретических

законов распределения могут поочередно выступать известные распределения:  $\chi$ -квадрат, Стьюдента, нормальное и другие.

Степень расхождения между эмпирическими и теоретическими частотами, характеризуется критерием Пирсона [13]

$$Kr = \sum_{j=1}^m \frac{(n_j - \tilde{n}_j)^2}{\tilde{n}_j} = \sum_{j=1}^m \frac{(n_j - Np_j)^2}{Np_j} = \sum_{j=1}^m \frac{n_j^2}{Np_j} - N. \quad (5)$$

В соответствии с теоремой Пирсона критерий  $Kr$  имеет распределение  $\chi$ -квадрат при  $N \rightarrow \infty$  с числом степеней свободы  $k = m - r - 1$ . Здесь  $m$  — количество интервалов выборки,  $r$  — число параметров предполагаемого закона распределения. Например, нормальный закон имеет два параметра — математическое ожидание и среднеквадратическое отклонение. Следовательно, число степеней свободы при проверке гипотезы о нормальности закона распределения выборки равняется  $k = m - 3$ .

Таким образом, задавшись уровнем значимости  $\alpha$ , характеризующим достоверность принимаемой гипотезы, и определив число степеней свободы  $k$ , можно вычислить квантиль распределения  $\chi$ -квадрат ( $\chi_{\alpha,k}^2$ ), которая впоследствии сравнивается с величиной критерия  $Kr$ . Если  $Kr \leq \chi_{\alpha,k}^2$ , то гипотеза о совпадении теоретического и эмпирического закона распределения принимается. В противном случае гипотеза отклоняется. Полученная эмпирическая функция распределения случайной величины  $F^*(x)$  сравнивается по критерию Пирсона с различными теоретическими законами распределений  $F(x)$ , представленными в таблице 1.

Использование критерия Пирсона требует вычисления основных параметров теоретического закона распределения, определяемых по их точечным оценкам. Например, для нормального закона распределения требуется найти оценки двух параметров: математического ожидания и среднеквадратического отклонения.

Точечные оценки теоретических законов распределения определяются методом моментов. Сущность метода состоит в том, что выбирается столько эмпирических моментов, сколько требуется оценить неизвестных параметров распределения. Обычно достаточно вычислить моменты 1-го и 2-го порядков, то есть выборочные математическое ожидание и исправленную дисперсию:

$$M_x = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i, \quad (6)$$

$$D_x = \sigma_x^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - M_x)^2. \quad (7)$$

Вычисленные выборочные оценки моментов приравниваются к теоретическим моментам, составляются уравнения, выражающие зависимость параметров распределения от выборочных моментов. В результате решения данных уравнений находятся оценки параметров распределения генеральной совокупности.

Дополнительно для оценки нормальности закона распределения выборочных данных вычисляется статистическая функция распределения результатов [15]. Выборочные данные оцениваемого параметра упорядочиваются по возрастанию и группируются в вариационный ряд  $x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_N$ , где  $N$  — общее число

Таблица 1. Законы распределения и их параметры

Закон распределения	Параметры распределения	Плотность распределения вероятности	Математическое ожидание	Дисперсия
Нормальный	$\mu$ — математическое ожидание, $\sigma$ — среднеквадратическое отклонение	$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$	$\mu$	$\sigma^2$
$\gamma$ -распределение	$k > 0, \theta > 0$ — коэффициенты масштаба	$f(x) = x^{k-1} \frac{\exp(-x/\theta)}{\Gamma(k)\theta^k},$ $\Gamma(k) = \int_0^{\infty} x^{k-1} e^{-x} dx$	$k\theta$	$k\theta^2$
Стьюдента	$n > 0$ — число степеней свободы	$f(x) = \frac{\Gamma((n+1)/2)}{\sqrt{n\pi}\Gamma(n/2)(1+x^2/n)^{(n+1)/2}}$	0	$\frac{n}{n-2}$
$\chi$ -квадрат	$n > 0$ — число степеней свободы	$f(x) = \frac{(1/2)^{n/2}}{\Gamma(n/2)} x^{n/2-1} \exp(-x/2)$	$n$	$2n$
Экспоненциальный	$\lambda > 0$ — интенсивность	$f(x) = \lambda \exp(-\lambda x)$	$\frac{1}{\lambda}$	$\frac{1}{\lambda^2}$
Распределение Лапласа	$\alpha > 0$ — коэффициент масштаба, $\beta$ — коэффициент сдвига	$f(x) = \frac{\alpha}{2} \exp(-\alpha x-\beta )$	$\beta$	$\frac{2}{\alpha^2}$
$\beta$ -распределение	$\alpha > 0, \beta > 0$	$f(x) = \frac{x^{\alpha-1}(1-x)^{\beta-1}}{B(\alpha,\beta)},$ $B(\alpha,\beta) = \int_0^1 x^{\alpha-1}(1-x)^{\beta-1} dx$	$\frac{\alpha}{\alpha+\beta}$	$\frac{\alpha\beta(\alpha+\beta)^{-2}}{(\alpha+\beta+1)}$

выборочных данных. Статистическая функция распределения определяется по формуле:

$$\phi(x_1) = \frac{n(x_1)}{N+1}, \quad \phi(x_i) = \phi(x_{i-1}) + \frac{n(x_i)}{N+1} \quad (i = 2, 3, \dots, L), \quad (8)$$

где  $n(x_i)$  — количество совпадающих элементов со значением  $x_i$ ;  $L$  — число элементов вариационного ряда без учета повторяющихся значений. Данная функция представляет собой ступенчатую линию: ширина ступеней определяется величиной  $x_{i+1} - x_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N-1$ ); высота каждой последующей ступени по сравнению с предыдущей увеличивается на  $1/(N+1)$  (Рис. 2). Для повторяющихся значений вариационного ряда  $x_i = x_{i+1} = \dots = x_{i+k}$  величина статистической функции распределения возрастает на  $k/(N+1)$ , где  $k$  — число совпадающих элементов. При большом значении количества наблюдений  $N$  статистическая функция сходится по вероятности к истинной выборочной функции распределения.

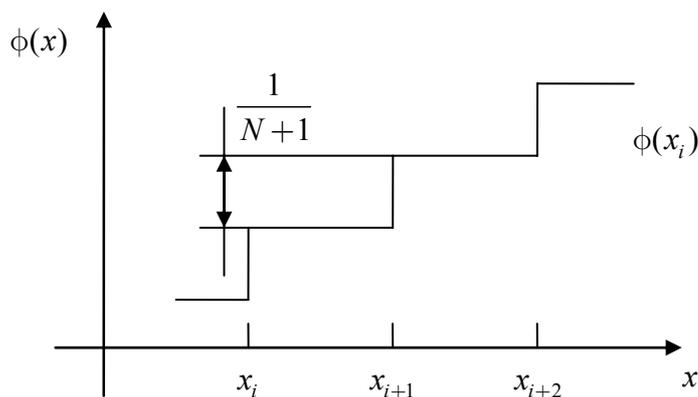


Рис. 2. Статистическая функция распределения

Через значения статистической функции распределения и соотношение  $\phi(x_i) = \Phi(z_i)$  находятся значения нормально распределенной величины  $z_i$ . Функция  $\Phi(z_i)$  представляет собой закон распределения нормальной случайной величины с нулевым математическим ожиданием и единичным среднеквадратическим отклонением. Случайная величина  $z$  связана с выборочными данными соотношением  $z_i = (x_i - M_x) / \sigma_x$ .

Для проверки нормальности закона распределения в координатной плоскости  $(x, z)$  наносятся точки  $(x_i, z_i)$ , соответствующие выборочным данным. Если точки располагаются вдоль одной прямой линии, то гипотеза о нормальности закона распределения принимается. В противном случае закон распределения выборочных данных не является нормальным.

### 3. Результаты и обсуждение

Ниже приводится вероятностный анализ расчета параметров наночастиц, формируемых из атомов серебра и меди. Подробно режимы формирования наночастиц описаны в [16–17]. Параметры потенциалов для исследуемых металлов представлены в таблице 2 [18].

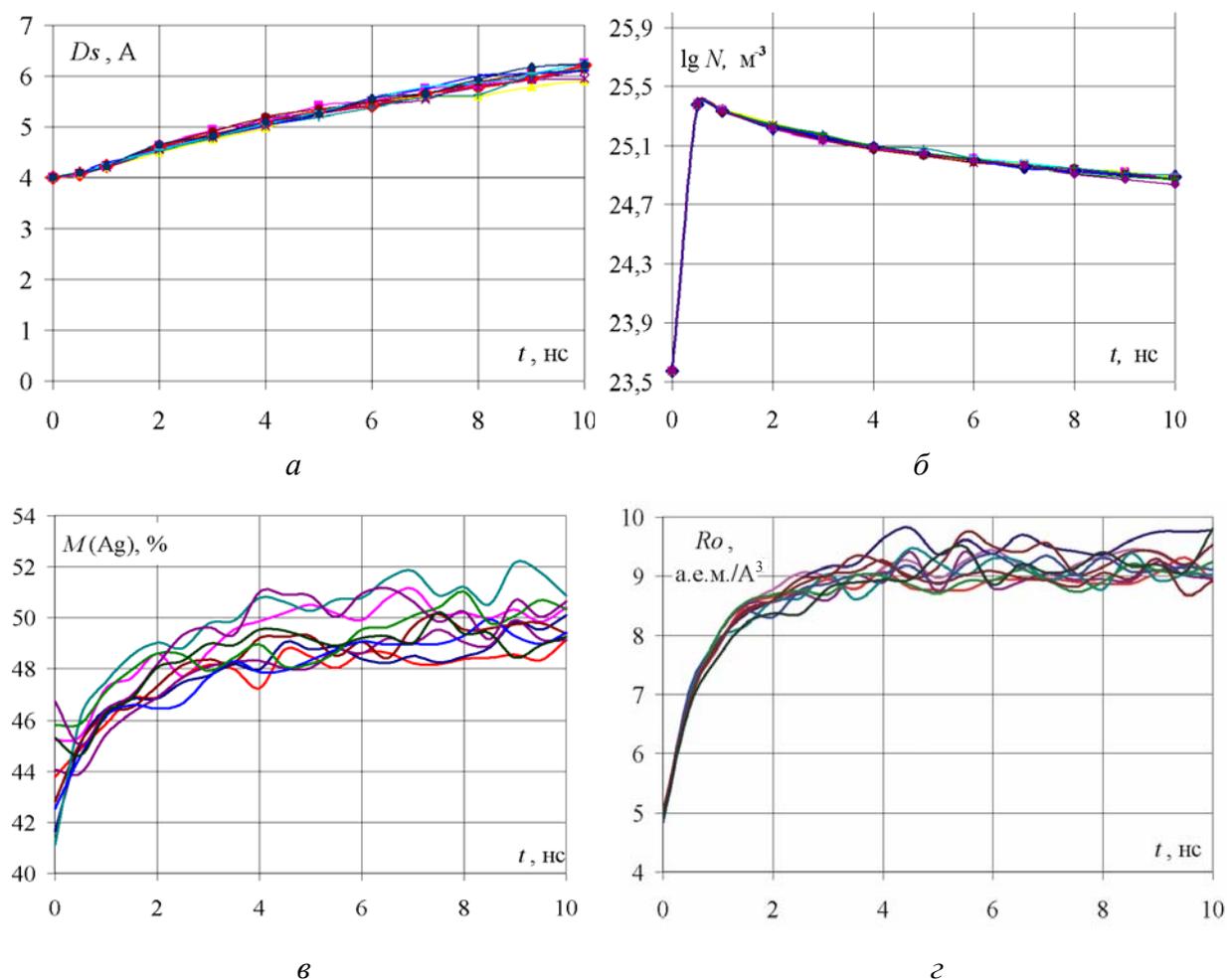
Рассматриваются результаты серии вычислительных экспериментов (объем выборки  $N = 30$ ) по расчету распределения среднего диаметра наночастиц  $D_s$ . Семейство кривых изменения среднего диаметра наночастиц  $D_s$  во времени представлено на рисунке 3, а. В соответствии с результатами расчета, начало этапа конденсации атомов металлов сопровождается появлением небольших композиционных наночастиц. С течением времени наблюдается объединение небольших наночастиц и, как

Таблица 2. Параметры взаимодействия Ван-дер-Ваальса

Константы потенциала Ленарда–Джонса	Ag	Cu
$\varepsilon_i, 10^{-21}$ Дж	55,242	65,583
$e_i^*, 10^{-10}$ м	2,968	2,624

следствие, рост их среднего размера. Но, несмотря на случайные распределения начальных координат и скоростей атомов металлов, средний диаметр наночастиц колеблется в небольшом диапазоне изменения данных. Следует отметить, что на заключительных этапах конденсации атомов и наночастиц, соответствующих отрезку времени моделирования  $t = 6 \dots 10$  нс, наблюдается более значительное расслоение среднего размера наночастиц.

Кроме размерного распределения наночастиц в работе исследуются такие параметры, как число наночастиц в единице объема (Рис. 3, б), средняя массовая доля серебра в наночастицах (Рис. 3, в), средняя плотность нанокластеров (Рис. 3, г). Вследствие значительного количества наночастиц в единице объема (порядка  $10^{25} \text{ м}^{-3}$ ) рассматривается десятичный логарифм данного параметра. Изменение числа наночастиц по времени соответствует увеличению их количества в начальные моменты и уменьшению в последующем за счет объединения уже сформированных наночастиц. Графики изменения средних величин доли массы серебра и плотности наночастиц характеризуют внутреннюю структуру и состав наночастиц. Поведение данных величин взаимно коррелируется, параметры имеют большую дисперсию по сравнению с количеством наночастиц и их размером.



**Рис. 3.** Семейство кривых изменения среднего диаметра наночастиц (а), логарифма числа наночастиц в единице объема (б), средней доли массы серебра в наночастицах (в), средней плотности наночастиц (г)

Для момента времени  $t = 10$  нс выполняется проверка гипотезы о законе распределения среднего диаметра наночастиц. Количество интервалов разбиения выборочных данных для определения эмпирических частот равняется  $m = 5$ . В таблице 3 содержатся величины параметров распределений, оцененные методом моментов, а также статистика Пирсона совместно с квантилью распределения  $\chi$ -квадрат. Уровень значимости при оценке гипотез соответствовал значению  $\alpha = 0,2$ .

Величина статистики Пирсона для распределения Стьюдента,  $\gamma$ - и  $\beta$ -распределений не может быть вычислена, так как теоретические функции вероятности не определены при полученных параметрах распределения. Следовательно, гипотезы о соответствии выборочных данных упомянутым вероятностным законам отвергаются как несостоятельные. Анализ статистики Пирсона для остальных законов распределения показывает, что ни одна гипотеза о законе распределения среднего диаметра наночастиц не выполняется. Возникшее расхождение выборочных данных с теоретическими законами объясняется недостаточностью объема выборки (рекомендуемый объем при использовании критерия Пирсона  $N \geq 50$ ). Тем не менее, наименьшее значение статистика Пирсона принимает для нормального закона распределения, что свидетельствует о наиболее вероятном распределении выборки по нормальному закону.

Гипотеза о нормальности распределения среднего размера наночастиц подтверждается построением статистической функции. На рисунке 4, а выборочные данные, показанные квадратными маркерами, сравниваются с нормально распределенной случайной величиной  $z$ . Математическое ожидание и дисперсия случайной величины  $z$ , согласно формулам (6), (7), составляют  $\mu = 6,131$  и  $\sigma^2 = 0,020$  соответственно. Как следует из рисунка 4, а, вариационный ряд среднего диаметра наночастиц в осях  $(Ds, z)$  располагается вдоль прямой линии, что свидетельствует о нормальном законе распределения.

Описанный выше подход используется также для оценки вида функции распределения количества наночастиц в единице объема. Величина статистики, вычисленной по критерию Пирсона, как и при анализе распределения среднего размера наночастиц, не подтверждает принадлежность выборочных данных ни к одному рассмотренному закону. Наименьшее значение статистики соответствует нормальному распределению  $Kr = 5,406$ , а наибольшее — экспоненциальному  $Kr = 45471$ , тогда как квантиль распределения  $\chi$  – квадрат на уровне значимости  $\alpha = 0,8$  не превышает

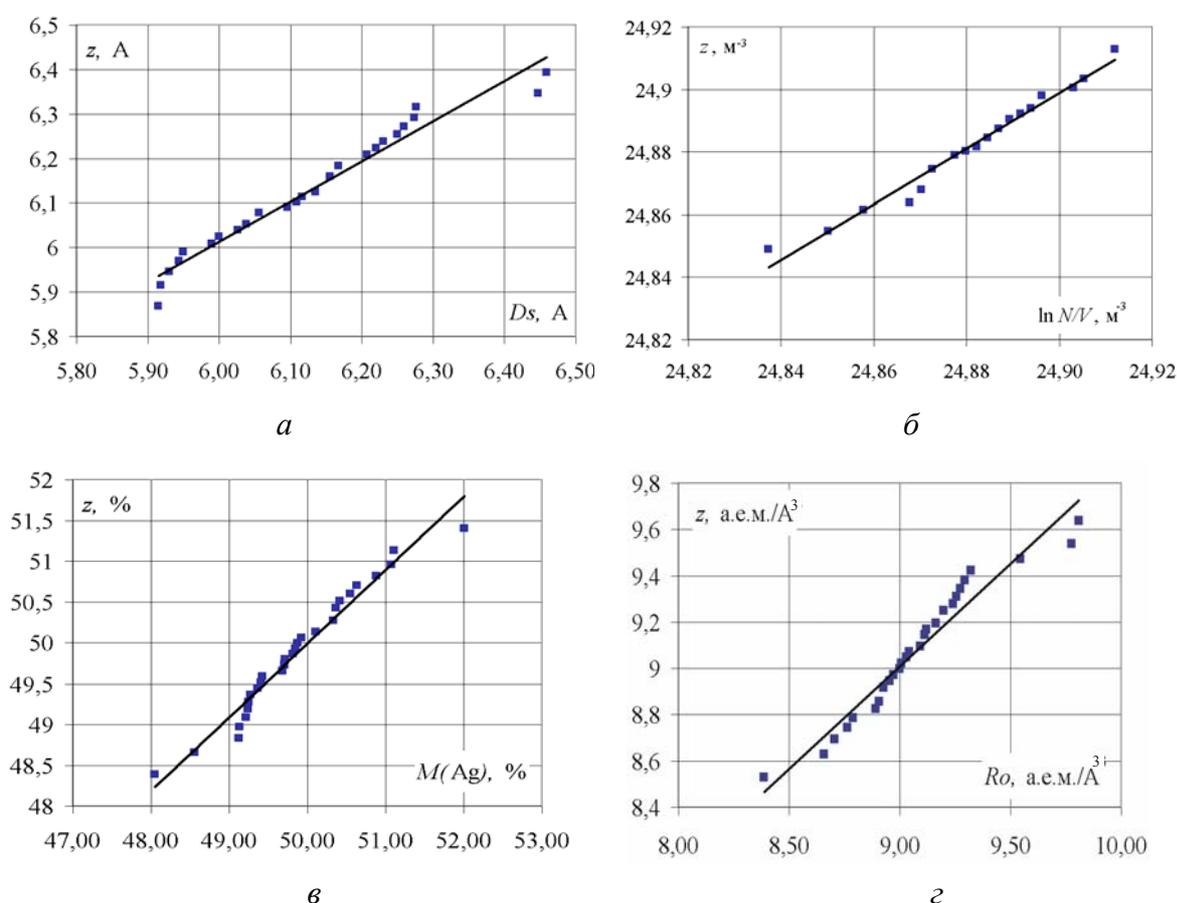
Таблица 3. Величины оцениваемых параметров и статистики Пирсона

Теоретическое распределение	Параметры распределения	Статистика Пирсона	Квантиль критерия
Нормальный закон	$\mu = 6,131, \sigma = 0,142$	$Kr = 1,804$	$\chi_{0,8,2}^2 = 0,446$
Гамма-распределение	$k = 1863,070; \theta = 0,003$	–	–
Распределение Стьюдента	$n = 0$	–	–
Распределение хи-квадрат	$n = 6$	$Kr = 550,688$	$\chi_{0,8,3}^2 = 1,005$
Экспоненциальный закон	$\lambda = 0,163$	$Kr = 1052,379$	$\chi_{0,8,3}^2 = 1,005$
Распределение Лапласа	$\alpha = 6,131, \beta = 3,752$	$Kr = 9,829$	$\chi_{0,8,2}^2 = 0,446$
Бета-распределение	$\alpha = -1363,868 < 0, \beta = 1141,407$	–	–

значения  $\chi_{0,8,3}^2 = 1,005$ . Для распределения Стьюдента,  $\gamma$ - и  $\beta$ -распределений величина статистики Пирсона не может быть вычислена, так как теоретические функции распределения вероятности не определены при полученных параметрах распределения.

Построение статистической функции числа наночастиц в единице объема приводится на рисунке 4, б, где квадратными маркерами отмечены значения статистической функции, а сплошной линией — линейная аппроксимация нанесенных данных. Значения статистической функции распределения количества наночастиц с достаточно малым разбросом располагаются вдоль аппроксимационной прямой. Таким образом, исследование статистической функции числа наночастиц в единице объема свидетельствует о нормальном законе распределения выборочных данных. Параметры закона распределения, вычисленные методом моментов, который в случае нормального закона совпадает с методом максимального правдоподобия, составляют  $\mu = 24,881$  и  $\sigma^2 = 2,98 \cdot 10^{-4}$ .

Статистические функции распределения средней доли массы серебра в наночастицах и средней плотности иллюстрируют рисунки 4, в и г соответственно. Вид данных графиков свидетельствует о близости законов распределения исследуемых величин к нормальному. Статистический анализ при помощи критерия Пирсона дает результаты, подобные полученным для количества наночастиц и их среднего размера:

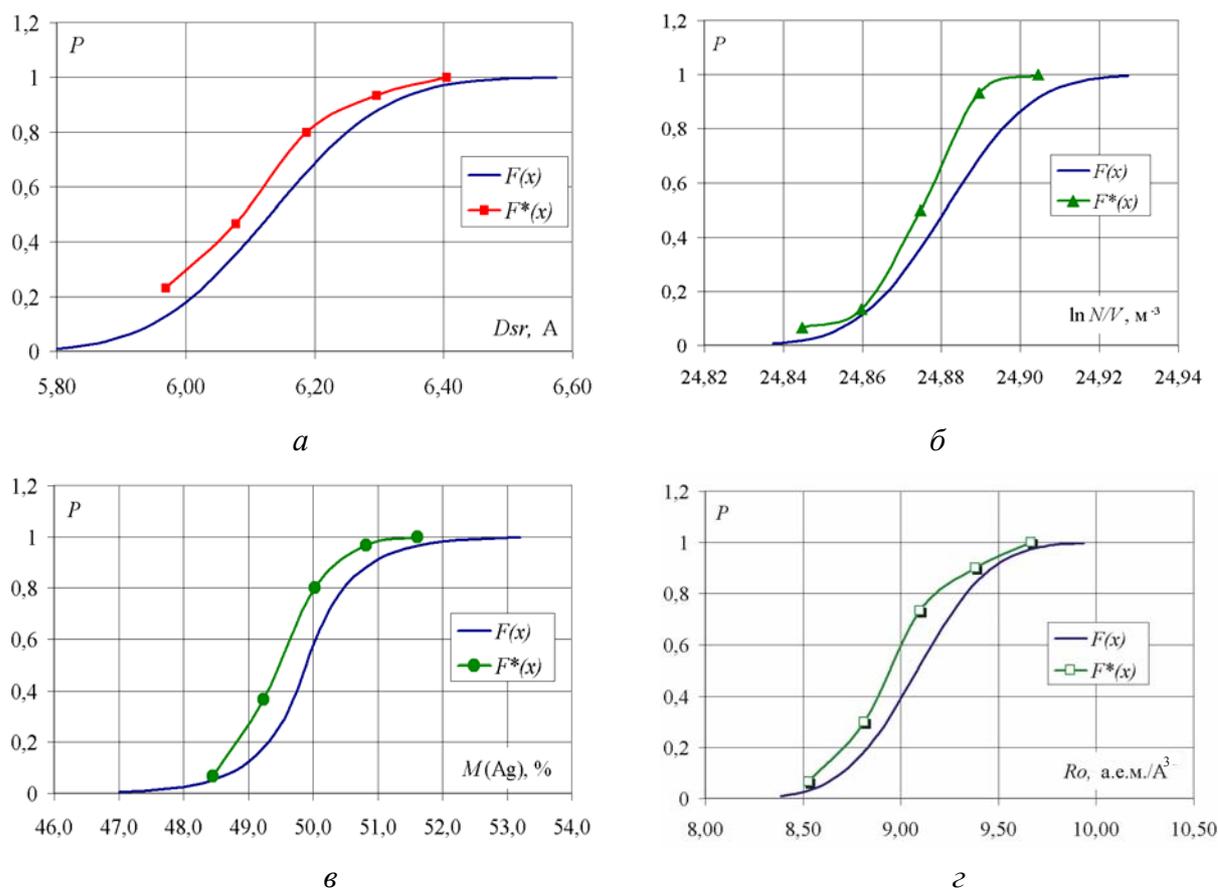


**Рис. 4.** Построение статистической функции распределения для выборочных данных, соответствующих среднему диаметру наночастиц (а), логарифму числа наночастиц в единице объема (б), средней доле массы серебра в наночастицах (в), средней плотности наночастиц (г)

ни одна гипотеза о виде закона распределения на уровне значимости  $\alpha = 0,8$  не принимается. Наименьшее значение статистики Пирсона для распределения средней плотности наночастиц соответствует нормальному закону ( $Kr = 1,635$ ), для распределения средней массовой доли серебра в наночастицах — закону Лапласа ( $Kr = 0,648$ ). При полученных выборочных значениях математического ожидания и дисперсии средней массовой доли серебра в наночастицах теоретические функции распределения вероятности для нормального закона и закона Лапласа оказываются достаточно близкими. Вследствие этого статистическая функция распределения массовой доли серебра лежит вдоль одной прямой линии и характеризует выборку как близкую к нормально распределенной.

В продолжение анализа рассматриваются приведенные на рисунке 5 теоретическая функция нормального распределения  $F(x)$  и функция  $F^*(x)$ , характеризующая выборочные данные.

Функции имеют одинаковые математические ожидания и среднеквадратические отклонения, найденные по выборочным оценкам. Кривые изменения вероятности находятся достаточно близко друг к другу, имеют близкие точки экстремумов и выпуклостей функций. Эмпирическая функция  $F^*(x)$  лежит выше теоретического закона, что объясняется небольшим объемом выборочных данных и, как следствие, малым количеством интервалов разбивки вариационного ряда.



**Рис. 5.** Сравнение выборочной функции вероятности распределения среднего диаметра наночастиц (а), логарифма числа наночастиц в единице объема (б), средней доле массы серебра в наночастицах (в), средней плотности наночастиц (г)

Сравнение вероятностной функции нормального распределения  $F(x)$  и эмпирических функций  $F^*(x)$  для среднего диаметра наночастиц, количества и их средней плотности (Рис. 5, а, б и г соответственно), показывает хорошее соответствие выборочных и теоретических данных. Для средней массовой доли серебра в нанообъектах приводится сравнение с теоретическим законом распределения Лапласа (Рис. 5, в). Для небольших значений выборочных величин наблюдается лучшее совпадение теоретической и эмпирической функций. С увеличением значений расхождение между зависимостями становится более заметным из-за малого количества интервалов для нахождения выборочных частот ( $m = 5$ ).

#### 4. Заключение

1. Для среднего диаметра наночастиц, их количества в единице объема, средней массовой доли серебра в наночастицах и средней плотности наноэлементов на основе критерия Пирсона не принимается ни одна гипотеза о законе распределения на уровне значимости  $\alpha = 0,8$ .

2. Наиболее вероятными законами распределения выборочных рядов по размеру, числу и плотности наночастиц в соответствии со статистикой Пирсона являются нормальные законы распределения. Для массовой доли серебра в наночастицах наименьшее значение статистика Пирсона имеет для распределения Лапласа. Построение статистических функций исследуемых величин подтверждает близость выборочных данных к нормальному закону распределения. Величина оцененных параметров математического ожидания и дисперсии вариационного ряда, соответствующих размеру наночастиц, определяется соотношениями  $\mu = 6,131$  и  $\sigma^2 = 0,020$ , для выборочных данных по количеству наночастиц в единице объема —  $\mu = 24,881$  и  $\sigma^2 = 2,98 \cdot 10^{-4}$  соответственно.

3. Расчеты показывают, что проверка гипотезы о соответствии структурных свойств наночастиц какому-либо теоретическому закону распределения на основе критерия Пирсона требует значительного объема выборочных данных.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 08-08-12082-офи) и Программы Президиума РАН «Разработка методов получения химических веществ и создание новых материалов» (проект «Наносистемы: фундаментальные соотношения нано- и макропараметров»).

#### Литература

1. *Kompis V., Kompis M., Kaukic M., Hui D.* Singular Trefftz Functions for Modelling Material Reinforced by Hard Particles. // Topping BHV, Montero G, Montenegro (eds) Proceedings of the Fifth International Conference on Engineering Computational Technology, CD-ROM Paper 184, Civil-Comp Press, Stirlingshire. – 2006.
2. *Суздаев И.П.* Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. – М.: Изд-во КомКнига, 2006. – 592с.
3. *Vakhrouchev A.V.* Simulation of Nano-Elements Interactions and Self-Assembling // Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2006. – N. 14. – P. 975-991.
4. *Vakhrouchev A.V.* Computer Simulation of Nanoparticles Formation, Moving, Interaction and Self-Organization // Journal of Physics: Conference Series. – 2007. – V. 61. – P. 26-30.
5. *Vakhrouchev A.V.* Modelling of the Process of Formation and Use of Powder Nanocomposites // Composites with Micro and Nano-Structures. Computational Modeling and Experiments. Computational Methods in Applied Sciences Series. – Barcelona, Spain: Springer Science. – V. 9. – 2008. – P. 107-136.

6. *Вахрушев А.В., Липанов А.М.* Численный Анализ атомной структуры и формы металлических наночастиц // Вычислительная математика и техническая физика. – 2007. – Т. 47, № 10. – С. 1774-1783.
7. *Алфимов М.В., Кадушиников Р.М., Штуркин Н.А. и др.* Имитационное моделирование процессов самоорганизации наночастиц // Российские нанотехнологии. – 2006. – Т. 1, № 1–2. – С. 127–133.
8. *Вахрушев А.В., Липанов А.М.* Расчет потенциала парного взаимодействия наночастиц // Химическая физика и мезоскопия. – 2005. – Т. 7, № 1. – С. 53-62.
9. *Krivtsov A.M., Wiercigroch M.* Molecular Dynamic Simulation of Mechanical Properties for Polycrystal Materials // Materials Physics and Mechanics. – 2001. – V. 3(1). – PP. 45-51.
10. *Rim M.* Наноконструирование в науке и технике. Введение в мир нанорасчета. – Москва-Ижевск: Изд-во НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2005. – 160с.
11. *Хеерман Д.В.* Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. – М.: Наука, 1990. – 176с.
12. *Verlet L.* Computer «experiments» on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // Phys. Rev. – 1967. – V. 159, N. 1. – PP. 98-103.
13. *Кендалл М., Стьюарт А.* Статистические выводы и связи. – М.: Наука, 1973. – 899с.
14. *Sturges H.A.* The choice of classic intervals // J. American Statist. Ass. – 1926. – March. – P. 47.
15. *Тутубалин В.Н.* Теория вероятностей и случайных процессов. Основы математического аппарата и прикладные аспекты. – М.: Изд-во МГУ, 1992. – 400с.
16. *Вахрушев А.В., Федотов А.Ю.* Исследование процессов формирования композиционных наночастиц из газовой фазы методом математического моделирования // Химическая физика и мезоскопия. – 2007. – Т. 9, № 4. – С. 333-347.
17. *Вахрушев А.В., Федотов А.Ю.* Моделирование формирования композиционных наночастиц из газовой фазы // Альтернативная энергетика и экология. – 2007. – № 10. – С. 22-26.
18. *Stauffer D.* Annual Reviews of Computational Physics. – World Scientific, 2001. – 332p.