СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ РАБОТЫ ТЕРМОСТАТА ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ТЕПЛОВОГО ДВИЖЕНИЯ СВОБОДНЫХ ФУЛЛЕРЕНОВ

Д.В. Алябьев, И.Д. Ядгаров

Институт ионно-плазменных и лазерных технологий

Ташкент, Узбекистан

e-mail: wside2008@mail.ru

К настоящему времени интерес к эндоэдральным фуллеренам сохраняет высокий уровень. Это, прежде всего, связано с развитием методов синтеза и выделения эндоэдральных фуллеренов [1]. Для моделирования идеализированных процессов, рассмотренных в [1], необходимо корректно оценивать время динамической стабилизации модельного процесса, микро- и макроскопических параметров. Получены результаты оценки времени термолизации для процесса теплового движения свободных фуллеренов в широком диапазоне температур (1000 фуллеренов, 610-900К, термостат Нозе-Хувера, пакет LAMMPS,[2]). Статистический анализ показал, что для рассматриваемого модельного эксперимента, минимально требуемое время для корректного описания термодинамики процесса составляет не менее 10пс.

Общее время процесса модельного эксперимента составило 100пс, для этого времени, отклонение температуры от заданного ее значения на уровне составляет не более 6К (для температуры системы 900К), и не более 4К (для температуры системы 610К). Статистический анализ выполнен с применением стандартного функционала языка R.

ЛИТЕРАТУРА

1. AIP Advances 9, 075324 (2019); <https://doi.org/10.1063/1.5100980>

2. LAMMPS.org

3. R Core Team (2021). R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria, <https://www.R-project.org/>