Brezmrežna metoda osnovana na računalniškem modelu proizvodnje fulerenov v plazemski celici

Katarina Mramor¹, Božidar Šarler^{2,1}

- Laboratorij za sisteme z naprednimi materiali, Center odličnosti za biosenzoriko instrumentacijo in procesno kontrolo COBIK, Velika pot 22, SI-5250 Solkan, Slovenia
- 2 Laboratorij za večfazne procese, Univerza v Novi Gorici, Vipavska 13, SI-5000 Nova Gorica, Slovenia

Povzetek

Molekule iz družine fulerenov zaradi svojih edinstvenih lastnosti in širokega spektra možnih uporab žanjejo veliko pozornosti tako v znanstvenih kot tudi v inžinirskih krogih. Ker ima proces tvorbe fulerenov velik vpliv na lastnosti materiala, je bilo izdelanih več proizvodnih metod. Med vsemi metodami, ki so trenutno dostopne je najprimernejša za uporabo v industriji metoda proizvodnje fulerenov v plazemski celici. Visoko povpraševanje po teh materialih je razkrilo potrebo po razumevanju procesa tvorbe fulerenov, zato so bili narejeni številni poskusi optimizacije plazemske celice (s katero lahko proizvajamo fulerene na industrijskem merilu) z namenom, da bi izboljšali donos.

Članek opisuje postopek sinteze fulerenov v plazemski celici, kjer fulereni nastajajo z izparevanjem grafitne elektrode v nizko tlačnem ozračju žlahtnega plina, skupaj s fizikalnim modelom, ki opisuje fizikalne lastnosti obnašanja plazme sklopljene z nelinernimi kemijskimi reakcijami. Enačbe predlaganega modela se rešujejo z Lokalno kolokacijsko metodo z radialnimi baznimi funkcijami (LKMRBF); metodo, ki je osnovana na multikvadričnih radialnih baznih funkcijah s pet-točkovnim vplivnim območjem in eksplicitnim časovnim korakom. Za reševanje enačb je uporabljena lokalna sklopitev med tlakom in hitrostjo.

KLJUČNE BESEDE: plazemska celica, sinteza fulerenov, računalniški model, brezmrežna metoda