

Колесникова М.Б., Дьяков А.Г., Андреева С.С.

Харьковский государственный университет питания и торговли

ЯМР ИССЛЕДОВАНИЯ ВЛАГОУДЕРЖИВАЮЩИХ СВОЙСТВ КРАХМАЛОВ ФИЗИЧЕСКОЙ МОДИФИКАЦИИ

Аннотация

Актуальность темы состоит в исследовании свойств крахмалов физической модификации для обоснования их использования в технологии сладких соусов на основе плодово-ягодного сырья. Экспериментально получены научные данные относительно качественных показателей крахмалов физической модификации из восковой кукурузы и тапиоки. Одним из требований к качеству плодово-ягодных соусов является стабильная консистенция за счет реализации функционально-технологических свойств загустителя. Представлены результаты ЯМР исследования влагоудерживающих свойств оклейстеризованных крахмальных дисперсий на основе крахмалов физической модификации для обоснования использования в технологии соусов сладких на основе плодово-ягодного сырья.

Ключевые слова: крахмалы физической модификации, ЯМР, сигнал спиновой луны, влагоудерживающая способность.

Kolesnikova M.B., Dyakov O.G., Andreeva S.S.

Kharkiv State University of Food Technology and Trade

NMR STUDIES OF WATER-RETAINING PROPERTIES OF STARCHES PHYSICAL MODIFICATION

Summary

The relevance of the topic is to study the properties of starches physical modification to justify their use of technology for sweet sauces on the basis of fruit and berry raw materials. Experimentally obtained scientific data on qualitative indicators of starches physical modification of waxy maize and tapioca. One of the requirements for the quality of fruit and berry sauces is stable consistency through implementation of functional and technological properties of the thickener. Presents the results of the study water-holding properties of starch pastes based on starches, physical modification of the method of nuclear magnetic resonance (NMR) to study the use of technology for sweet sauces on the basis of fruit and berry raw materials.

Keywords: starches physical modification, NMR, signal of the spin of the moon, water-holding capacity.

УДК 519.6

ПОРІВНЯЛЬНИЙ АНАЛІЗ ПРОГРАМНИХ ПРОДУКТІВ ДЛЯ ОБЧИСЛЕННЯ ЕНЕРГЕТИЧНОГО СПЕКТРА ЕЛЕКТРОНА У СКЛАДНІЙ ЦИЛІНДРИЧНІЙ НАНОТРУБЦІ

Леонтьєва Н.Р.

Буковинський державний фінансово-економічний університет

У статті досліджується порівняльний аналіз програмних продуктів для визначення енергетичного спектру складної циліндричної нанотрубки. Програмні продукти для аналізу були створені за допомогою програм C++ та Wolfram Mathematica 7.0. Також в статті оцінюється складність розробки цих програмних продуктів. Побудовано графік залежності енергії від радіуса внутрішньої дротики, значення для якого розраховані за двома програмами. З отриманого графіка оцінюється похибка вимірювання енергетичного спектра електрона.

Ключові слова: програмний продукт, нанотрубка, енергетичний спектр, внутрішня дротики, похибка.

Постановка проблеми. Напівпровідникові квантові дротики вивчаються як теоретично, так і експериментально вже протягом 20 років. Удосконалення методів їх вирощування дало змогу вченим формувати ансамблі квантових нанодротів з радіальною гетероструктурою. У залежності від геометричних параметрів внутрішньої дротики перпендикулярна до осі квантового дроту гетероструктура, дозволяє цілеспрямовано змінювати спектральні параметри основних квазічастинок (електронів, екситонів, фононів) у наносистемі.

В залежності від властивостей квазічастинок, такі системи можуть використовуватися в якості базових елементів тунельних нанодіодів, нанотранзисторів з

високою рухливістю електронів, високоефективних світлодіодів, високоефективних приладів, фотоелектричних перетворювачів, наносенсорів для діагностики різних біологічних і хімічних з'єднань [1].

На даний час інтенсивно досліджуються напівпровідникові нанотрубки, що є різновидом квантових дротів з радіальною гетероструктурою. Так, у залежності від напівпровідникових матеріалів, що входять до складу гетероструктури, експериментаторами вже створені прості (з однією квантовою ямою для електрона) [2] та складні (багатоямні) кільцяшарові [3] шестигранні нанотрубки. Поведінка основних квазічастинок у квантових дротах і простих нанотрубках уже досить детально вивчена,

а теоретичні дослідження спектрів електронів, фонових та екситонів у складних кількешарових напівпровідникових нанотрубках лише починаються.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Можливість вирощування ниткоподібних кристалів (квантових дротин, нановіскерів) вперше була показана в роботі Вагнера та Елліса. Автори здійснивали газофазове осадження кремнію з парів $SiCl_4$ і водню на підложку кремнію. Даний метод, який дістав відповідну назву «пара-рідина-кристал» (ПРК), широко використовувався у 2000-х роках для створення цілих ансамблів квантових дротин з контрольованою морфологією та характерним поперечним розміром ~ 10 нм.

У циклі робіт [4-6] авторам вдалося виростити шестигранні квантові дротини та складні нанотрубки на основі напівпровідників $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ не використовуючи металевий каталізатор. Зокрема у праці [6] автори методом молекулярно-променевої епітаксії при температурі отримали складні шестигранні нанотрубки, що склалися з внутрішньої дротини (середовище $GaAs$), тонкого напівпровідникового шару-бар'єра (середовище $Al_{0,4}Ga_{0,6}As$) і нанотрубки ($GaAs$) у зовнішньому середовищі ($Al_{0,4}Ga_{0,6}As$).

Розвиток технології створення квазіодновимірних ниткоподібних нанокристалів, а також простих і складних нанотрубок привів до створення світло-випромінюючих приладів на їх основі. Зокрема у роботі [7] на основі квантової дротини було реалізовано світлодіод $n-InP/InAsP/p-InP$, що містив одну квантову точку. Уже реалізовані фотоприймачі і світлодіоди на основі квантових дротин InP та ZnO .

У багатьох роботах повідомляється про лазерну генерацію за оптичного накачування у ниткоподібних нанокристалах на основі напівпровідників CdS і ZnO . Виявляється, що випромінювання при цьому концентрується на кінцях ниткоподібного кристалу. Це означає, що така наносистема є природним резонатором Фабрі-Перо. На даний час ведуться роботи по дослідженню можливостей реалізації лазерів на квантових дротинах зі струмовим накачуванням.

Методи аналізу, що використовуються сьогодні не забезпечують детектування вірусів малих концентрацій і часто вимагають складних маніпуляцій зі зразками, що часто буває незручно для інфікованих проб. Одним із перспективних нових підходів є прямий аналіз електричних сигналів від квантових нанодротин, які змінюють опір при адсорбції заряджених макромолекул на рецепторах, що приєднані до поверхні.

У своїй праці Боун і Гаролд досліджували енергетичний спектр екситона у циліндричній напівпровідниковій ($GaAs$) квантовій дротині радіуса ρ_0 у середовищі $Al_xGa_{1-x}As$ з безмежним та скінченним стрибком потенціальної енергії квазічастинок на межі.

Оскільки у квантових нанодротинах чи нанотрубках носії заряду обмежені у двох вимірах, а вільно можуть рухатись лише у третьому, то відповідні характеристики наноприладів на їх основі переважають ті, які демонструють прилади на квантових ямах (планарні конструкції). Тому не дивно, що останніми роками саме квантові дротини та нанотрубки пропонують використовувати в якості активних робочих елементів квантових каскадних лазерів та детекторів. Такі прилади, що побудовані на основі плоских наногетеросистем уже створені і успішно функціонують в актуальному терагерцовому діапазоні електромагнітних хвиль.

Мета статті. Головною метою цієї роботи є розробка програмних продуктів за допомогою C++ та

Wolfram Mathematica 7.0 та оцінка похибки вимірювання енергетичного спектра електрона за допомогою цих програм.

Викладення основного матеріалу. Теорія енергетичного спектра та хвильових функцій електрона, що використовується для створення програмних продуктів, розроблена для складної циліндричної нанотрубки на основі напівпровідників $GaAs$ та $Al_xGa_{1-x}As$, що подана на рис. 1.

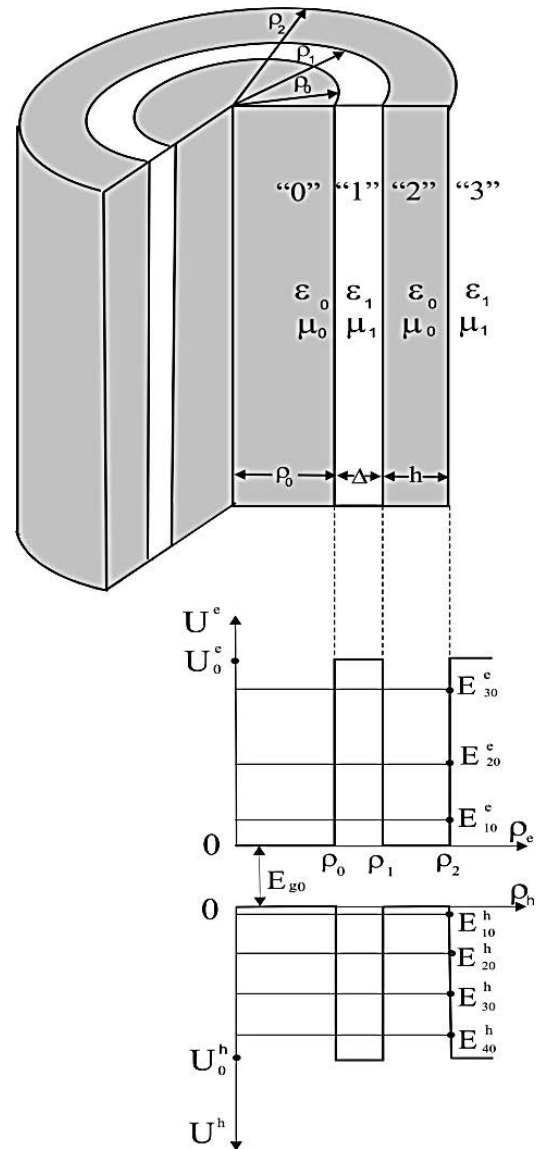


Рис. 1. Геометрична та енергетична схеми складної нанотрубки

Складна циліндрична напівпровідникова нанотрубка складається із квантового дроту радіуса ρ_0 (середовище «0»), тонкого напівпровідникового шару-бар'єра товщиною Δ («1»), та нанотрубки товщиною h («2»), вміщених у зовнішнє середовище («3»).

Матеріальні параметри, для розрахунку енергетичного спектра електрона ($E_{n,m}^e$), подані в таблиці 1.

Сталі ґраток (a_0, a_1) та діелектричні проникності (ϵ_0, ϵ_1) таких напівпровідникових складових наносистеми слабо відрізняються між собою (табл. 1), а розміри наносистеми такі, що $\rho_0, \rho_1, \rho_2 > a_0$ (a_1)

Програмні продукти створювалися для наносистеми (рис. 1) з такими початковими параметрами: товщини шару-бар'єра $\Delta = 4a_{GaAs}$ та нанотрубки $h = 4$ нм і концентрації 0,4. Радіус внутрішньої дротини (ρ_0) вибирався в інтервалі $[0; 50a_{GaAs}]$.

Таблиця 1
Матеріальні параметри напівпровідників

| GaAs | Al _x Ga _{1-x} As |
|--|---|
| $\mu_0^{(e)} = 0.063m_0$ | $\mu_1^{(e)} = (0.063 + 0.083x)m_0$ |
| $\mu_0^{(h)} = 0.51m_0$ | $\mu_1^{(h)} = (0.51 + 0.25x)m_0$ |
| $U_0^{(e)} = 0.57(1.155x + 0.37x^2)eV$ | |
| $U_0^{(h)} = 0.43(1.155x + 0.37x^2)eV$ | |
| $\epsilon_{\infty 0} = 10.89$ | $\epsilon_{01} = 10.89 - 2.73x$ |
| $\epsilon_{\infty 0} = 12.9$ | $\epsilon_{01} = 12.9 - 2.84x$ |
| $\Omega_{L0} = 35meV$ | $\Omega_{L1} = 35 + 1.83x + 17.12x^2 - 5.11x^3$ |
| $\Omega_{T0} = 32.2meV$ | $\Omega_{T1} = \Omega_{L1} / \sqrt{\epsilon_{01} / \epsilon_{0\infty}}$ |

Для знаходження енергетичного спектра електрона потрібно розв'язати рівняння Шредінгера з хвильовою функцією, записаною з врахуванням циліндричної симетрії системи.

Для розрахунку енергетичного спектра електрона за допомогою C++ та Wolfram Mathematica 7.0, спочатку потрібно ввести початкові параметри: потенціальну енергію, ефективні маси, квазіімпульси та похідні від функцій Бесселя цілого порядку і модифікованих функцій Бесселя. Дані параметри в Wolfram Mathematica 7.0 подані на рис. 2, в C++ – рис. 3. Під час роботи в C++ було додатково створено програмний продукт для представлення функцій Бесселя (Wolfram Mathematica 7.0. ці функції розуміє).

Під час складних математичних перетворень [8], було отримано систему лінійних однорідних алгебраїчних рівнянь (2).

```

Сектр електрона.nb *
U0e := 297
U0h := 224
Ry := 13 605
mu0e := 0.063
mu1e := 0.0962
aGaAs := 5.65
ab := 0.529
me := 0
ROGaAs := 50      (*Внутрішня яма*)
R0 := ROGaAs * aGaAs / ab
R1AlGaAs := 4      (*Бар'єр*)
R1 := R0 + R1AlGaAs * aGaAs / ab
R2AlGaAs := 40      (*Зовнішня яма*)
R2 := R1 + R2AlGaAs / ab

x0e[Ene_] := Sqrt[mu0e * Ene / Ry]
x1e[Ene_] := Sqrt[mu1e * (U0e - Ene) / Ry]

JShe[me_, z_] := 1/2 (BesselJ[-1 + me, z] - BesselJ[1 + me, z]);
YShe[me_, z_] := 1/2 (BesselY[-1 + me, z] - BesselY[1 + me, z]);
IShe[me_, z_] := 1/2 (BesselI[-1 + me, z] + BesselI[1 + me, z]);
KShe[me_, z_] := 1/2 (-BesselK[-1 + me, z] - BesselK[1 + me, z]);
    
```

Рис. 2. Початкові параметри для розрахунку енергетичного спектра електрона в Wolfram Mathematica 7.0

$$\begin{cases}
 A_m^{(0)} J_m(\chi_0 \rho_0) - A_m^{(1)} I_m(\chi_1 \rho_0) - B_m^{(1)} K_m(\chi_1 \rho_0) = 0 \\
 A_m^{(0)} \frac{\chi_0}{\mu_0} J_m'(\chi_0 \rho_0) - \frac{\chi_1}{\mu_1} (A_m^{(1)} I_m'(\chi_1 \rho_0) + B_m^{(1)} K_m'(\chi_1 \rho_0)) = 0 \\
 A_m^{(1)} I_m(\chi_1 \rho_1) + B_m^{(1)} K_m(\chi_1 \rho_1) - A_m^{(2)} J_m(\chi_0 \rho_1) - B_m^{(2)} N_m(\chi_0 \rho_1) = 0 \\
 \frac{\chi_1}{\mu_1} (A_m^{(1)} I_m'(\chi_1 \rho_1) + B_m^{(1)} K_m'(\chi_1 \rho_1)) - \frac{\chi_0}{\mu_0} (A_m^{(2)} J_m'(\chi_0 \rho_1) + B_m^{(2)} N_m'(\chi_0 \rho_1)) = 0 \\
 A_m^{(2)} J_m(\chi_0 \rho_2) + B_m^{(2)} N_m(\chi_0 \rho_2) - B_m^{(3)} K_m(\chi_1 \rho_2) = 0 \\
 \frac{\chi_0}{\mu_0} (A_m^{(2)} J_m'(\chi_0 \rho_2) + B_m^{(2)} N_m'(\chi_0 \rho_2)) - \frac{\chi_1}{\mu_1} B_m^{(3)} K_m'(\chi_1 \rho_2) = 0
 \end{cases} \quad (1)$$

Ця система алгебраїчних рівнянь має відмінні від нуля розв'язки, коли визначник, складений із коефіцієнтів при невідомих $A_m^{(p)}$ та $B_m^{(p)}$ дорівнює нулю. (1) дає зв'язок усіх коефіцієнтів з коефіцієнтом $A_m^{(0)}$, який знаходиться з нормування радіальної хвильової функції.

Рівняння (2) є дисперсійним і служить для визначення спектра енергій електрона, як функцій аксіального квазіімпульсу. Запис даного дисперсійного рівняння для двох програмних продуктів поданий на рис. 4 та рис. 5.

$$\begin{vmatrix}
 J_m(\chi_0 \rho_0) & -I_m(\chi_1 \rho_0) & -K_m(\chi_1 \rho_0) & 0 & 0 & 0 \\
 \frac{\chi_0}{\mu_0} J_m'(\chi_0 \rho_0) & -\frac{\chi_1}{\mu_1} I_m'(\chi_1 \rho_0) & -\frac{\chi_1}{\mu_1} K_m'(\chi_1 \rho_0) & 0 & 0 & 0 \\
 0 & I_m(\chi_1 \rho_1) & K_m(\chi_1 \rho_1) & -J_m(\chi_0 \rho_1) & -N_m(\chi_0 \rho_1) & 0 \\
 0 & \frac{\chi_1}{\mu_1} I_m'(\chi_1 \rho_1) & \frac{\chi_1}{\mu_1} K_m'(\chi_1 \rho_1) & -\frac{\chi_0}{\mu_0} J_m'(\chi_0 \rho_1) & -\frac{\chi_0}{\mu_0} N_m'(\chi_0 \rho_1) & 0 \\
 0 & 0 & 0 & J_m(\chi_0 \rho_2) & N_m(\chi_0 \rho_2) & -K_m(\chi_1 \rho_2) \\
 0 & 0 & 0 & \frac{\chi_0}{\mu_0} J_m'(\chi_0 \rho_2) & \frac{\chi_0}{\mu_0} N_m'(\chi_0 \rho_2) & -\frac{\chi_1}{\mu_1} K_m'(\chi_1 \rho_2)
 \end{vmatrix} = 0 \quad (2)$$

На рис. 6 та рис. 7 подано розрахунок першого значення енергетичного спектра обраховане за допомогою двох програм. У Wolfram Mathematica 7.0 енергетичний спектр електрона отримується як перетин з віссю X (корінь), а в C++ – як значення величини в певному інтервалі від a до b з певною похибкою вимірювання $n=0,01$.

З рис. 7 та рис. 8 видно, що значення енергетичного спектра дещо відрізняються. В першому випадку отримали енергію 98,4166, а в другому – 100. Оскільки отримані різні значення, то доцільно визначити похибку вимірювання за двома програмами.

З рис. 8. видно, що залежність енергії від радіуса внутрішньої дротини в C++ розраховані не точно. Розрахунки в C++ займають досить багато часу. Похибка у вимірюваннях складає приблизно 3%.

```

long double X1(long double E, double m1){
    long double U0=297; //задаєм потенціальну енергію електрона
    return sqrt((m1*(U0-E))/13605);
}

long double energy(long double E){
    //оголошуємо змінні
    long double me=0; //потенціальна енергія електрона 0 та 2 середовища
    long double m0=0.063, p0=(50*5.65)/0.529;
    long double p1=p0+(4*5.65)/0.529;
    long double p2=p1+40/0.529;
    long double m1=0.0962;
    long double **a = new long double*[6];

    for(int i=0; i<6; i++){
        a[i]=new long double[6];
        for(int i=0; i<6; i++){
            for(int j=0; j<6; j++){
                a[i][j]=0;
                a[0][0]=_jn(me, X0(E, m0)*p0);
                a[1][0]=(X0(E, m0)/m0)*bessJ_(me, X0(E, m0)*p0);

                a[2][3]=_jn(me, X0(E, m0)*p1);
                a[3][3]=-(X0(E, m0)/m0)*bessJ_(me, X0(E, m0)*p1);
                a[4][3]=_jn(me, X0(E, m0)*p2);
                a[5][3]=(X0(E, m0)/m0)*bessJ_(me, X0(E, m0)*p2);
            }
        }
    }
}
    
```

Рис. 3. Початкові параметри для розрахунку енергетичного спектра електрона в C++

Леонтьева Н.Р.

Буковинский государственный финансово-экономический университет

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПРОГРАММНЫХ ПРОДУКТОВ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА ЭЛЕКТРОННАЯ В СЛОЖНОЙ ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ НАНОТРУБКЕ

Аннотация

В статье исследуется сравнительный анализ программных продуктов для определения энергетического спектра сложной цилиндрической нанотрубки. Программы для анализа были созданы с помощью программ C++ и Wolfram Mathematica 7.0. Также в статье оценивается сложность разработки этих программных продуктов. Построен график зависимости энергии от радиуса внутренней проволоки, значение для которого рассчитаны по двум программам. Из полученного графика оценивается погрешность измерения энергетического спектра электрона.

Ключевые слова: программный продукт, нанотрубка, энергетический спектр, квантовая проволока, погрешность.

Leontyeva N.R.

Bukovinian State Finance and Economics University

COMPARATIVE ANALYSIS OF SOFTWARE PRODUCTS TO DETERMINE THE ENERGY SPECTRUM OF ELECTRON IN COMPLEX CYLINDRICAL NANOTUBE

Summary

This article investigates the comparative analysis software products to determine the energy spectrum of complex cylindrical nanotube. Software products for analysis were created using C++ and Wolfram Mathematica 7.0 programs. Also the complexity of these software products development is estimated in this article. We constructed a graph of the energy as a function of radius of the inner wire, the value of which were calculated by the two programs. The of an electron energy spectrum is estimated from the received graph.

Keywords: software products, nanotube, energy spectrum, quantum wire, measurement error.

УДК 332.12.331

ІНФОРМАЦІЙНІ СИСТЕМИ УПРАВЛІННЯ І РОЗПОДІЛУ ЕЛЕКТРОЕНЕРГІЇ НА СУДНОРЕМОНТНОМУ ЗАВОДІ

Помаз Т.С.

Одеський національний морський університет

У даній статті розглянуто теоретичні питання побудови інформаційних систем управління (ІСУ) та роль її в діяльності сучасних підприємств. Розкрито зміст втілення процесів системи на практичному прикладі розподілення електроенергетики на судноремонтному підприємстві. Продемонстрований порядок використання сучасних інформаційних технологій при вирішенні завдань управління ресурсами виробничого підприємства.

Ключові слова: ІСУ, електроенергетика, вітрогенератори, реорганізація.

Постановка проблеми. Розвиток інформаційних систем в організаціях усіх галузей і сфер діяльності за останні 30 років зазнало значних змін. Від централізованої моделі обробки інформації на базі мейнфреймів до технології клієнт / сервер, який ефективно об'єднує гідності своїх попередників. Сучасний етап економічного розвитку організацій у всьому світі характеризується розширенням і вдосконаленням форм і методів їх управління з використанням корпоративних інформаційних систем. Інформаційна система – це набір механізмів, методів і алгоритмів, спрямованих на підтримку життєвого циклу інформації, які включають три основних процеси: обробку даних, управління інформацією та управління знаннями.

Багато холдингових компаній широко використовують сучасну потужну інформаційну базу. В Україні проблема проектування автоматизованих інформаційних систем управління стоїть особливо гостро,

оскільки до недавнього часу економічна теорія обслуговувала, як правило, державні органи влади різного рівня, а сама економіка була замкнута, з мінімальною участю в міжнародному поділі праці.

Метою статті є підкреслення універсальності ІСУ на приведеному прикладі використання електроенергії при роботі на судноремонтному підприємстві.

Виклад основного матеріалу. Єдина інформаційна система управління підприємством орієнтується на досягненні мети: задоволення потреб в інформації керівників усіх рівнів і ланок системи управління підприємством у встановлені терміни для підготовки, прийняття та реалізації рішень.

Сучасна інформаційна система підприємства є автоматизованою, людино-машинною системою, в якій творчі здібності менеджера доповнюються можливостями електронно-обчислювальної техніки, математичного моделювання та прогнозування.