

Studentesimposium in die Natuurwetenskappe, 31 Oktober 2008, Universiteit van Johannesburg: 'n Seleksie van referaatopsommings

Steriese en elektroniese effek van metaalbevattende substituente op Fischer-karbeenmetaalbondelverbindings

D.I. BEZUIDENHOUT

Departement Chemie, Universiteit van Pretoria, Lynnwood, Pretoria 0002
 daniela.bezuidenhout@up.ac.za

Die insluiting van verskillende oorgangsmetaalfragmente by komplekse word reeds die afgelope aantal jare wyd bestudeer om die effek van die verskillende metaalfragmente op die reaktiwiteit van die ligande en die chemie van die komplekse te ondersoek.¹ Indien hierdie benadering volgens die algemene formule $[M(CO)_5\{C(OR')R\}]$ in die veld van Fischer-karbeenkomplekse toegepas word, kan die karbeeneienskappe verander word deur die invoering van metaalbevattende substituente om die karbeenkoolstof verder te aktiveer,² of deur die karbeenligand as 'n brug tot ander oorgangsmetale te gebruik.³

Die eerste voorbeeld van Fischer-karbeenmetaalbondelverbindings van die Groep VI-pentakarbonieloorgangsmetaalkomplekse wat twee of meer oorgangsmetaalsubstituente bevat, is gesintetiseer en gekarakteriseer. Hierdie metaalbondelverbindings kan dus tot selfs drie verskillende oorgangsmetale bevat, waarvan elkeen in elektroniese kontak met die karbeenkoolstof is.⁴

Die steriese en elektroniese effekte van die verskillende metaalbevattende substituente, in die besonder dié van $[Cr(\eta^6\text{-benzo}[b]\text{tiofeniel})(CO)_3]^-$, titanoksie- en ferrosiel-substituente, is ondersoek deur middel van spektroskopiese metodes soos enkelkristal-X-straalriffraksie, infrarooi, Raman- en KMR-spektroskopie, sowel as digtheidsfunksionele teorie. Die eksperimentele molekulêre eienskappe wat waargeneem is, is aan die hand van die gemodelleerde data verklaar, en daar is bevind, sowel eksperimenteel as teoreties, dat die invoering van die verskillende metaalfragmente as karbeen-substituente die moontlikheid bied om die reaktiwiteit van die karbeenligand te modelleer.

Verwysings

1. (a) Lotz, S., van Rooyen, P.H. en Meyer, R. (1995). *Adv. Organomet. Chem.* 37:219. (b) Bunz, U.H.F. (1996). *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 35:969. (c) Lang, H. (1994). *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* 33:547. (d) Paul, F. en Lapinte, C. (1998). *Coord. Chem. Rev.* 431:178-180.
2. Sierra, M.A. (2000). *Chem. Rev.* 100:3591.
3. (a) Bartik, T., Weng, W., Ramsden, J.A., Szafert, S., Fallon, S.B., Arif, A.M. en Gladysz, J.A. (1998). *J. Am. Chem. Soc.* 120:11071. (b) Hartbaum, C., Mauz, E., Roth, G., Weissenbach, K. en Fischer, H. (1999). *Organometallics.* 18:2619. (c) Landman, M., Görts, H. en Lotz, S. (2001). *J. Organomet. Chem.* 280:617-618.
4. Bezuidenhout, D.I., van der Watt, E., Liles, D.C., Landman, M. en Lotz, S. (2008). *Organometallics.* 27:2447.

The steric and electronic effects of metal-containing substituents on Fischer carbene metal clusters

Novel Group VI transition metal Fischer carbene complexes containing three different transition metal substituents, all in electronic contact with the carbene carbon atom, were synthesised. The electronic and steric effects of the different metal-containing substituents, specifically $[\text{Cr}(\eta^6\text{-benzo}[b]\text{thienyl})(\text{CO})_3]$, titanoxo and ferrocenyl substituents, were studied using both spectroscopic and theoretical methods.

Luminessensie van gesintetiseerde nanodeeltjies en kommersiële ZnS:Mn²⁺-fosfors

M.M. BIGGS*, O.M. NTWAEABORWA, J.J. TERBLANS EN H.C. SWART

Departement Fisika, Universiteit van die Vrystaat, Posbus 339, Bloemfontein 9300

*biggsm.sci@ufs.ac.za

Die luminessensie van gesintetiseerde nanodeeltjies en/of kommersiële ZnS:Mn²⁺ word in detail bespreek. Nanodeeltjies word gesintetiseer deur 'n proses wat as die oplossingsgelatien- (sol-gel-) tegniek bekend staan. In hierdie proses word die chemies voorbereide ZnS:Mn²⁺ in 'n SiO₂-matriks geplaas. Dit word gedoen om die luminessensie-eienskappe van die deeltjies te versterk en ook om dit teen degradering te beskerm. Tydens die sintese word Zn²⁺-ione deur Mn²⁺-ione vervang.

Opwekking van die ZnS:Mn²⁺ by 310 nm het geel-oranje uitstraling veroorsaak wat met die $^4\text{T}_1 \rightarrow ^6\text{A}_1$ -oorgang van Mn²⁺-ione in 'n ZnS-matriks geassosieer word. Hierdie oorgange kan aan die hand van die Tanabe Sugano-energielakdiagramme vir 'n d⁵-ioon verduidelik word. Die verskillende opgewekte toestande van Mn²⁺ kan van die kwantumgetalle van 'n d⁵-ioon afgelei word. Die verwantskap tussen die Russell Saunders-koppelingskema en die kwantumgetalle word getoon. Daar word ook getoon hoe die Russell Saunders-koppelingskema die betrokke terme in die Tanabe Sugano-diagramme kan verduidelik.

Die opbrek in energie van die verskillende d-orbitale wat in die Tanabe Sugano-diagramme waargeneem word, word aan die hand van die ligand-veldteorie verduidelik. Die verwantskap tussen die ligand-veldteorie en die sinkblende-kristalstruktur van ZnS:Mn²⁺ word getoon. Die tetraëdriese oorvleueling van die verskillende d-orbitale en die ligande word bespreek, en die opbrek van energie van die d-orbitale word getoon.

Die struktuur en morfologie van die monsters is deur middel van onderskeidelik x-sdraaldiffraksie (XRD) en 'n skandeerelektronmikroskoop (SEM) bepaal. Op grond van die XRD-data is die deeltjies se grootte aan die hand van Scherrer se vergelyking bepaal. 'n Energiedispersiespektroskoop (EDS) is gebruik om die chemiese samestelling van die monsters te bepaal.

Fotonluminessensie- (PL-) data is deur middel van 'n 325 nm-HeCd-laser ingesamel. Katodoluminessensie- (CL-) data en Auger-piek-tot-piek-hoogte- (APPH-) profiele is onder ultrahoë vakuum verkry, en die effek van die elektrongestimuleerde oppervlak-chemiese reaksie- (ESSCR-) meganisme op die degradering van ZnS:Mn²⁺-fosfors is bespreek.

The mechanism of luminescence of nanoparticulate and commercial ZnS:Mn²⁺ phosphors

The mechanism of luminescence of a sol-gel nanoparticulate and/or commercial ZnS:Mn²⁺ is discussed in detail. The role that the Tanabe Sugano diagrams and the Russell Saunders coupling scheme plays in the ${}^4T_1 \rightarrow {}^6A_1$ transition of Mn²⁺ ions is explained. Different structure and morphology techniques are also discussed.

Lumineserende meganisme van yttriumsilikaat, gedoteer met serium ($Y_2SiO_5:Ce$) en fosforpoeier

E. COETSEE*, J.J. TERBLANS EN H.C. SWART

Departement Fisika, Universiteit van die Vrystaat, Bloemfontein 9301

*coetseee.sci@ufs.ac.za

'n Lumineserende meganisme is vir die breëbandemissiespektra van $X_1 - Y_2SiO_5:Ce$ -fosforpoeier saamgestel. Luminessensie in $Y_2SiO_5:Ce$ vind deur middel van inter- atomiese energie-oorgange (in die Ce³⁺-ioon self) plaas. Die breëbandemissiespektrum, bestaande uit twee hoofpieke, strek in die sigbare ligspektrum vanaf 400 tot 500 nm (blou lig). Vier Gausiese pieke is egter op hierdie twee hoofpieke van die katode- (CL-) en fotonluminessensie- (PL-) spektra gepas.

Die vier pieke van die passingsmodel kan toegeskryf word aan die twee verskillende posisies (A_1 en A_2) wat die Ce³⁺-ioon in die moedermatriks kan beset, en die oriëntasieverskil van die nabyleegeleë ione in die komplekse kristalstruktuur van Y_2SiO_5 . Elke posisie van die Ce³⁺-ioon gee aanleiding tot energie-oorgange vanaf die 5d-energievlek tot die twee (vandaar die twee breë hoofpieke) 4f-vlakke in die Ce³⁺-ioon self. Die 4f-energievlek deel op in twee vlakke, ${}^2F_{5/2}$ en ${}^2F_{7/2}$, as gevolg van die effek wat die kristalveld in die kristalstruktuur veroorsaak en die moontlikheid dat die 4f-elektron 'n spin van +1/2 en -1/2 kan hê. Die kristalveld ontstaan vanuit die interaksie tussen die ione en atome in die kristalstruktuur.

Daar is ook 'n moontlikheid van energie-oorgange vanaf defekvlakke in die bandgaping van die moedermatriks na die Ce³⁺-ioon. Hierdie oorgange vind van die 2p-orbitaal van O²⁻ na die 4f-orbitaal in Ce³⁺ plaas.

Luminescent mechanism of cerium doped yttrium silicate ($Y_2SiO_5:Ce$) phosphor powder

A luminescent mechanism was constructed for broad emission spectra of $X_1 - Y_2SiO_5:Ce$ phosphor. Four Gaussian peaks fitted to the cathode- and photoluminescence spectra may be attributed to two different sites of the Ce³⁺ ion in the host and the difference in orientation of the neighbour ions in the crystal structure.

Statistiese beginsels as basis vir die identifisering van gedifferensieerd uitgedrukte gene deur gebruik te maak van twee-kleur gespikkeld cDNA mikroskyfies

N COETZER¹ EN MT LOOTS²

¹ACGT Bioinformatika en Berekeningsbiologie Eenheid, Departement Biochemie, Universiteit van Pretoria, Lynnwood, Pretoria 0002; ²Departement Statistiek, Universiteit van Pretoria, Lynnwoord, Pretoria 0002

¹nanette.coetzer@gmail.com; ²theo.loots@gmail.com

Mikroskyfietegnologie bewerkstellig die waarneming van uitdrukkingsvlakke van duisende gene gelyktydig. In effek vergelyk twee-kleur gespikkeld mikroskyfies die hoeveelheid transkripsies van spesifieke gene binne twee steekproewe. Byvoorbeeld selle van 'n plant behandel met patogene, teenoor selle van 'n onbehandelde plant. mRNA word geïsoleer van die selle, omgekeer getranskribeer na cDNA en gespikkeld met twee verskillende fluorisente kleurstowwe, gewoonlik Cy5 wat rooi is en Cy3 wat groen is. Die twee gespikkeld cDNA steekproewe word dan gemeng en gehibridiseer op 'n enkele mikroskyfplaatjie. Beeldanalise kwantificeer die intensiteitdata en relatiewe intensiteit word gebruik in verhouding-gebaseerde analise om opgereguleerde en afgereguleerde gene in reaksie op die oorspronklike behandeling te identifiseer.

Om biologiese inligting van mikroskyfdata te onttrek, vereis gesikte statistiese metodes. Die nulhipotese wat getoets word vir elke geen wanneer die twee gevalle vergelyk word, is dat daar geen verskil tussen die uitdrukking van die twee gevalle is nie. Ideaal gesien moet elke geval voorgestel word deur meervoudig onafhanklike biologiese steekproewe ten einde statistiese toets te kan doen. Deur twee-kleur cDNA mikroskyfies te gebruik, kan steekproewe direk vergelyk word op dieselfde mikroskyfplaatjie, of indirek deur elke steekproef met 'n gemeenskaplike verwysings-steekproef te hibridiseer. Logaritmes van die uitdrukkings-verhouding eerder as die verhoudings self word meestal in berekening gebruik. Dit is omdat die intensiteit-effek van mikroskyfiese neig om vermenigvuldigend te wees en die log-transformasie skakel hierdie vermenigvuldigende effekte in additiewe effekte om, wat makliker is om te modelleer.

Nadat die data elektronies ingelees is, word die rou data verkieslik op verskeie maniere voorgestel vir kwaliteitskontrole en om ongewenste effekte te elimineer.

Die aanwesigheid van volgehoue agtergrondseine is 'n algemene probleem. Daar is verskeie agtergrondse-inaanpassingsmetodes beskikbaar, byvoorbeeld die "agtergrond-mediaan"-afstruktingsmetode en die "norm-eksp" metode. Laasgenoemde maak gebruik van 'n winding van die normaal- en eksponensiaalverdeling om hierdie scenario te modelleer.

Die doel van normalisering is om enige sistemiese neigings te verweder uit die uitdrukkings-verhouding data wat ontstaan uit die mikroskyfietegnologie, eerder as vanuit biologiese verskille tussen die analisators of tussen die teiken-RNA steekproewe wat op die skyfie gehibridiseer is. Die gebruik van kontrole-spikkels wat nie-gedifferensieerd uitgedruk is op die mikroskyfies kan waardevolle inligting in die normaliseringsproses verskaf.

Die ontwerp van enige mikroskyfie eksperiment kan in terme van 'n lineêre model uitgedruk word. 'n Lineêre model word gepas op die uitdrukkings-verhouding data vir elke geen (oor die versameling mikroskyfieplaatjies), sodat die totale variasie van die betrokke geen se uitdrukkings-verhouding data beskryf kan word deur te onderskei tussen sistemiese variasie en ewekansige variasie. Nadat die lineêre model gepas is, word empiriese Bayes metodes gebruik om verskeie statistiese vir elke geen te bereken, wat lei tot die identifisering van die statisties betekenisvolle gedifferensieerde uitgedrukte gene.

Verdere uitbreiding op hierdie navorsing sou kon insluit die ondersoek van alternatiewe agtergrondsein-verdelings of die bestaan van priori-verdelings anders as die normaalverdeling in die Bayes analise. Wiskundige statistiek in die biologiese toepassingsveld is tans 'n aktiewe en belowende navorsingsveld.

Statistical principles underlying the identification of differentially expressed genes using two-colour spotted cDNA microarrays

Microarray technology allows the monitoring of expression levels for thousands of genes simultaneously, making possible the identification of statistically significant differentially expressed genes. Two-colour spotted micro arrays in effect compare the number of transcripts from specific genes within two samples. The application of statistical principles in biology signifies an active and promising future.

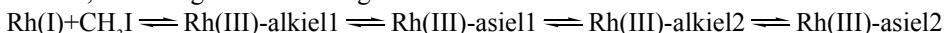
'n Eksperimentele en kwantumberekeningschemie-studie van die reaksie tussen die karbonileringskatalisator $[\text{Rh}((\text{C}_5\text{H}_4\text{S})\text{COCHCOR})(\text{CO})(\text{PPh}_3)]$ en metieljodied ($\text{R} = \text{CF}_3, \text{C}_6\text{H}_5, \text{C}_4\text{H}_3\text{S}$)

M.M. CONRADIE EN J. CONRADIE¹

Departement Chemie, Universiteit van die Vrystaat, Nelson Mandelarylaan,
Bloemfontein 9300

¹conradj.sci@ufs.ac.za

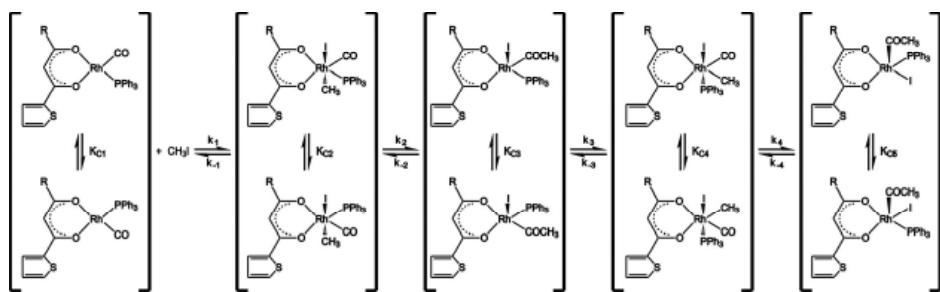
Die reaksiepad van die oksidatiewe addisie van metieljodied by die karbonileringskatalisator $[\text{Rh}((\text{C}_5\text{H}_4\text{S})\text{COCHCOR})(\text{CO})(\text{PPh}_3)]$, met $\text{R} = \text{CF}_3, \text{C}_6\text{H}_5$ of $\text{C}_4\text{H}_3\text{S}$, is eksperimenteel met behulp van UV-sigbare, IR-, ^1H KMR- en ^{31}P KMR- spektroskopiese tegnieke ondersoek. Die oksidatiewe addisie van metieljodied by vierkantig planêre Rh(I)-komplekse en die daaropvolgende metielmigrasie-reaksie is van belang vir industriële prosesse soos die Monsanto-proses, waarby metanol in asynsuur omgeskakel word.¹ Op grond van 'n IR-studie is daar bevind dat die hoofreaksieprodukte uit twee verskillende Rh(III)-alkiel- en twee verskillende Rh(III)-asiel-spesies bestaan, soos aangedui in die volgende skema:



'n Verdere ^1H - en ^{31}P KMR-studie het aangedui dat elkeen van hierdie reaksieprodukte bestaan uit twee isomere wat in 'n vinnige ewewig verkeer. 'n ^1H NOESY-studie het meer insig in die stereochemie van hierdie reaksieprodukte verskaf.

Deur middel van 'n kwantumberekeningschemie-studie is die relatiewe energiewaardes vir al die moontlike Rh(III)-alkiele en Rh(III)-asielle bereken. Met behulp van hierdie energiewaardes is 'n energieprofiel van die reaksieprodukte saamgestel. Die berekende oorgangstoestand van die addisiestap het aangedui dat die eerste Rh(III)-alkiel wat vorm, 'n produk van die transaddisie van metieljodied by die Rh(I)-metaalsentrum is. Die berekende oorgangstoestand van die daaropvolgende metielmigrasiestap het insig gegee in die stereochemie van die eerste Rh(III)-asielreaksieproduk wat vorm. Daar is voorts aan die hand van die energieprofiel bevind dat die stereochemie van die termodinamies stabiele tweede Rh(III)-alkiel en die tweede Rh(III)-asiel

daar uitsien soos in die onderstaande skema voorgestel word (enantiomere nie aangedui nie). Die resultate aangaande die mees waarskynlike reaksiepad wat uit die teoretiese studie verkry is, stem met die bevindinge van die eksperimentele studie ooreen.



Verwysing

- Maitlis, P.N., Haynes, A., Sunley, G.J. en Howard, M.J. (1996). *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* 2187-2196.

An experimental and DFT study of the reaction between the carbonylation catalyst $[\text{Rh}((\text{C}_5\text{H}_4\text{S})\text{COCHCOR})(\text{CO})(\text{PPh}_3)]$ and methyl iodide ($\text{R} = \text{CF}_3, \text{C}_6\text{H}_5, \text{C}_4\text{H}_3\text{S}$)

The reaction between CH_3I and $[\text{Rh}((\text{C}_5\text{H}_4\text{S})\text{COCHCOR})(\text{CO})(\text{PPh}_3)]$ ($\text{R} = \text{CF}_3, \text{C}_6\text{H}_5, \text{C}_4\text{H}_3\text{S}$) was studied. The experimental study revealed the existence of the main reaction products of two Rh(III)-alkyl and two Rh(III)-acyl species consisting of two isomers each. The theoretical study provides insight into the stereochemistry of the reaction products.

Chemiese karakterisering en vergelyking van die vlugtige verbindings in vier *Cyclopia*- (heuningbos-) spesies deur middel van SEP-GC-MS

J.C. CRONJE

Chemie en Polymeerwetenskap, Universiteit van Stellenbosch, Privaatsak X1, Matieland, Stellenbosch 7602
jccronje@sun.ac.za

Heuningbostee is 'n trots Suid-Afrikaanse inheemse kruietee wat ook groot belangstelling oorsee geniet. Daar kom 23 *Cyclopia*- (heuningbos-) spesies in die fynbosbioom van die Wes- en Oos-Kaap van Suid-Afrika voor, waarvan hoofsaaklik drie spesies, naamlik *Cyclopia intermedia*, *C. subternata* en *C. genistoides*, kommersieel vir die maak van heuningbostee gebruik word. Die tee se kenmerkende soet smaak en aroma word deur die hoëtemperatuurfermentasie van die takkies en blare bewerkstellig. Hierdie smaak en aroma, die lae tannieninhoud en ander gesondheids-eienskappe asook die afwesigheid van kaffeïen dra tot die gewildheid van die tee by.

Sedert die aanvang van die kommersiële kultivering en prosessering van heuningbostee in die middel van die 1990's, was die kwaliteit van die tee dikwels nie op standaard nie. Hierdie

probleem het gedreig om die ontwikkeling en uitbreiding van 'n suksesvolle heuningbossteebedryf te kniehalter;¹ daarom is begin met intensiewe navorsing om die fermentasie- en droogprosesse te kontroleer en optimeer.^{2,3} Die plantmateriaal en gevolglike kwaliteit van die tee word ook verder verbeter deur voortplanting en seleksie asook deur die toepassing van sekere hortikulturele praktyke.⁴ Om 'n tee van konsekwent goeie kwaliteit te kan lewer, moet die tee geëvalueer word aan die hand van bepaalde kriteria soos groei- en produksieparameters, samestellings⁵ en bioaktiwiteitsmaatstawwe⁶ en sensoriese eienskappe. Om laasgenoemde vir 'n baie groot aantal monsters deur middel van sensoriese analise (opgeleide sensoriese paneel) te bepaal, kan egter baie tydwend en moeilik wees. My navorsing is onder andere gemik op die ontwikkeling van 'n vinnige instrumentele siftingstegniek waardeur die sensoriese paneel uiteindelik vervang sal kan word. Terselfdertyd word inligting in verband met die vorming van die aktiewe geurkomponente tydens fermentasie verkry, wat aangewend kan word om beter beheer oor die proses te verkry en sodoende ook groter kostedoeltreffendheid ten opsigte van tyd- en energieverbruik te verseker.

Die chemiese verbindings wat in die aroma van die gefermenteerde en ongefermenteerde plantmateriaal van vier verskillende heuningbosspesies voorkom, is met behulp van 'n monsterverrykingstafie (*sample enrichment probe*, SEP)⁷ en gaschromatografie-massa-spektrometrie (SEP-GC-MS) geanaliseer en geïdentifiseer. Die chemiese profiele is kwantitatief en kwalitatief vergelyk om verskille en ooreenkoms tussen die onderskeie spesies en ook tussen die gefermenteerde en ongefermenteerde heuningbosstee uit te lig. Daar is bevind dat versadigde en onversadigde alkohole, aldehyde en metielketone meer prominent in die ongefermenteerde heuningbosstee voorkom, terwyl terpenoiëde oorheersend in die gefermenteerde heuningbosstee aanwesig is.

'n Artikel is gepubliseer waarin die chemiese samestelling van een van die spesies, *C. genistoides*, gerapporteer word.⁸ Hierdie navorsing maak deel uit van 'n uitgebreide navorsingsprogram onder leiding van die Landbounavorsingsraad (LNR) se Infruitec-Nietvoorbij, in samewerking met verskeie ander instansies, wat fokus op die optimering van alle aspekte van die heuningbossteebedryf.

Verwysings

1. Du Toit, J., Joubert, E. en Britz, T.J. (1998). Honeybush tea – a rediscovered South African herbal tea. *Journal of Sustainable Agriculture* 12:67-84.
2. Du Toit, J. en Joubert, E. (1998). Effect of drying conditions on the quality of honeybush tea (*Cyclopia*). *Journal of Food Processing and Preservation* 22: 493-507.
3. Du Toit, J. en Joubert, E. (1999). Optimization of the fermentation parameters of honeybush tea (*Cyclopia*). *Journal of Food Quality* 22:241-256.
4. ARC, (2007). Website of Honeybush Research Programme, Agricultural Research Council, South Africa. <http://www.arc.agric.za/home.asp?pid=4045>.
5. Joubert, E., Manley, M. en Botha, M. (2006). Use of NIRS for quantification of mangiferin and hesperidin contents of dried green honeybush (*Cyclopia genistoides*) plant material. *Journal of Agriculture and Food Chemistry* 54: 5279-5283.
6. Verhoog, N.J.D., Joubert, en Louw, A. (2007). Screening of four *Cyclopia* (honeybush) species for putative phytoestrogenic activity through estrogen receptor binding assays. *South African Journal of Science* 103:13-21.
7. Burger, B.V., Marx, B., Le Roux, M. en Burger, W.J.G. (2006). Simplified analysis of volatile organic compounds in headspace and aqueous samples by high-capacity sample enrichment probe. *Journal of Chromatography A* 1121:, 259-267.
8. Le Roux, M., Cronje, J.C., Joubert, E. en Burger, B.V. (2008). Chemical characterization of the constituents of the aroma of honeybush, *Cyclopia genistoides*. *South African Journal of Botany* 74:139-143.

Chemical characterisation and comparison of the volatile constituents of four honeybush species (*Cyclopia*) using sample enrichment probe (SEP) and GC-MS

A high-capacity sample enrichment probe (SEP), developed for research on the aroma constituents of herbal teas derived from different South African plant species, was used in conjunction with GC-MS to analyse the volatile constituents of four *Cyclopia* species. The resulting chemical profiles were compared qualitatively and quantitatively.

Karakterisering van Cr-Al dun lagies vervaardig deur middel van RF-diodeverstuiwing

H.A. DERRETT¹, A.R.E. PRINSLOO^{1*}, D. SPENATO², H.L. ALBERTS¹ EN C.J. SHEPPARD¹

¹ Departement Fisika, Universiteit van Johannesburg, Posbus 524, Aucklandpark 2006

² Laboratoire de Magnétisme de Bretagne, Department Fiska, Universiteit van Brest, Le Gorgeu 6, CS93837, 29238, Brest, Cedex, Frankryk

^{1*}alettap@uj.ac.za; ²david.dekadjevi@unive-brest.fr

Cr en Cr-allooie is unieke antiferromagnetiese materiale met 'n groot verskeidenheid fisiese eienskappe wat die belangstelling van sowel eksperimentaliste as teoretici prikkel.¹ Dun lagies en heterostrukture van Cr en Cr-allooie toon interessante eienskappe wat nie in groot monsters van die materiale waargeneem word nie,^{2,3} byvoorbeeld die bemiddelingsrol van dun lagies Cr in uitruilingsgekoppelde superroosters en reuse magnetowerstand.²

Die antiferromagnetiese ordening in Cr en Cr-allooie word toegeskryf aan 'n spindigtheidsgolf-toestand, waarin die rondloper-elektronspindigheid sinusvormig varieer na aanleiding van posisie in die materiaal. Die vorming van 'n spindigtheidsgolf (SDG) word geassosieer met die elektron- en holte-Fermi-oppervlaktes wat nestel, en gaan met anomalieë in die elektriese en magnetiese eienskappe gepaard.¹ Die byvoeging van 'n onsuiwerheid by suiwer Cr, kan 'n merkwaardige uitwerking op die fisiese eienskappe van die materiaal hê. Groot monsters van $\text{Cr}_{100-x}\text{Al}_x$ -allooie met $15 < x < 25$ toon halfgeleier-eienskappe van die smal bandgaping. Dit is sover bekend die enigste Cr-allooii wat hierdie eienskap openbaar. Ten einde insig in die rol van dimensionele effekte op die fisiese eienskappe van die Cr-Al-allooii-sisteem te verkry, is studies op dun lagies $\text{Cr}_{100-x}\text{Al}_x$ met $10 \leq x \leq 13$ onderneem. Die resultate word hier gerapporteer.

Cr-Al-allooii dun lagies met 'n dikte van 210 nm is deur middel van radiofrekwensie- (RF-) diodeverstuiwing onder 'n statiese veld van 2 kA/m op Corning-glassubstrate vervaardig. Die konsentrasie van die elemente wat in elk van die dun lagies $\text{Cr}_{1-x}\text{Al}_x$ teenwoordig was, is met behulp van elektronmikrosonde-analise bepaal. Die analise toon die sammestelling van die dun lagies $\text{Cr}_{1-x}\text{Al}_x$ in die konsentrasiebereik $10 \leq x \leq 13$. Die kristallografiese oriëntasie en kwaliteit van die materiaal op die substrate is met behulp van X-straaldiffraksie bepaal. Die resultate toon 'n voorkeuroriëntasie vir Cr-Al (110) in die gespesifieerde groeitoestande. By verdere ondersoek is bevind dat daar 'n verskuiwing in die posisie van die Cr-Al (110) piek plaasvind as funksie van Al-konsentrasie. Die verskuiwing is direk eweredig aan die afname in die roosterparameters geassosieer met 'n homogene inkorporering van Al in die kubiese kristalstruktur van Cr. Die onderskeie lagies se oppervlakstrukture is met behulp van aftaselektronmikroskooptegnieke (SEM) ondersoek. Die lagies vertoon kolvormige gedeeltes op 'n uniforme agtergrond. 'n Analise van die elektrondispersiespektrum wat op die posisies van die kolvormige strukture verkry is, dui

egter daarop dat dit Cr-Al in dieselfde verhouding as in die res van die monster bevat. Standaard-elektriese weerstandsmetinge is volgens die vierkontakmetode as funksie van temperatuur in die gebied 77 K tot 450 K gedoen ten einde die dun lagies elektries te karakteriseer. Die resultate toon 'n negatiewe temperatuurkoëfisiënt vir die resistiwiteit en die karakteristieke optrede van 'n halfgeleier. In groot monsters Cr-Al-allooie word halfgeleiergeledrag slegs vir konsentrasies bo 15 at.% Al gevind. Die waarneming van halfgeleiergeledrag in dun lagies $\text{Cr}_{1-x}\text{Al}_x$ -alooi met $x \leq 13$ wat aansienlik laer as vir grootmonstermateriale is, word gedeeltelik aan interne spanningseffekte toegeskryf.

Verwysings

1. Fawcett, E., Alberts, H.L., Galkin, V. Yu, Noakes, D.R. en Yakhmi, J.V. (1994). *Rev. Mod. Phys.* 66: 25.
2. Zabel, H.J. (1999). *J. Phys.: Condens. Matter* 11: 9303.
3. Fullerton, E.E., Robertson, J.L., Prinsloo, A.E.R., Alberts, H.L. en Bader, S.D. (2003). *Phys. Rev. Lett.* 91: 237201.

Characterisation of Cr-Al thin films prepared using RF diode sputtering

This study focuses on $\text{Cr}_{1-x}\text{Al}_x$ thin films, with $10\text{d} \times d \times 13$, and provides insight into the dimensionality effects on the physical properties of the alloy system. Semiconductor behaviour is found in bulk Cr-Al alloys only for $x > 15$. The observation of semiconductor behaviour in these thin films, with $d \times 13$, is partly attributed to internal strain effects.

Die gebruik van afstandswaarneming om ondergrondse watervloei aan te dui

L. DU PLESSIS

Departement Geografie, Universiteit van die Vrystaat, Posbus 339, Bloemfontein 9300
Duplessis.Leroy@gmail.com

Die benede-Modderrivier in die sentrale deel van die Vrystaat-provinsie van Suid-Afrika toon 'n onnatuurlike dreineringspatroon, terwyl die boonste gedeelte van die rivier oor 'n normale dendritiese dreineringspatroon beskik. Laasgenoemde bestaan uit 'n groot aantal vertakkings wat die hoofstroom voed. Die benede-Modderrivier beskik nie oor sulke vertakkings of waarneembare oppervlakvloei nie, maar word deur die teenwoordigheid van 'n groot aantal panne gekenmerk.

Die studie beoog om moontlike ondergrondse dreining in die benede-Modderrivier te karteer deur van digitale terreinmodellering en hoëresolusie-afstandswaarneming gebruik te maak. Die hipotese vir die studie lui dat, waar baie plantegroei in die afwesigheid van oppervlakwater voorkom, vlak ondergrondse water moontlik aanwesig kan wees.

Met behulp van 'n digitale terreinmodel (DTM) van die studiegebied is 'n vloeinetwerk sonder die inagneming van plaaslike dreining na die panne gemodelleer. 'n Plantegroei-indeks (NDVI) is gebruik om aktief groeiende plantegroei te identifiseer. 'n Vergelyking van gebiede met 'n hoë NDVI, die gemodelleerde stroomnetwerk en die afwesigheid van gekarteerde oppervlakdreining toon opvallende liggingsooreenkoms. 'n Moontlike ondergrondse dreineringsnetwerk vir die benede-Modderrivier is daarvolgens gekarteer.

Die resultate van bogenoemde ondersoek word gesteun deur die korrelasie wat gevind is tussen gebiede met 'n hoë NDVI en gekarteerde strome in die bo-Modderrivier. Die studie kan

lei tot die identifisering van moontlike paleoriviere en waterbronne, en is moontlik ook 'n goeie beginpunt vir die prospektering na mineraalafsettings.

The use of remote sensing to determine subsurface flow lines

The lower Modder River has no evidence of a surface drainage system. A drainage model is generated from a digital elevation model. A vegetation index (NDVI) is also generated from SPOT 5 satellite images. The possible subsurface drainage for the lower Modder River is mapped where the above-mentioned data sets intersect.

Beslissingsbome as woordafbrekingstegniek

M. FICK

Departement Besluitkunde, Universiteit van Suid-Afrika, Posbus 392, Unisa 0003
fickm@unisa.ac.za

In tydskrifte en koerante waar teks in smal kolomme gedruk word, word woorde dikwels aan die einde van reëls afgebreek om aanvaarbare woordspasiëring en bladuitleg te bewerkstellig. In tale soos Afrikaans, Nederlands en Duits word lang woorde gevorm deur saamgestelde woorde aanmekaar te skryf, dus moet woorde dikwels afgebreek word.

Aangesien alle drukwerk deesdae elektronies gedoen word, moet prosesse soos woordafbreking outomaties geskied. Vir Engels is dit reeds moontlik om die afbreking feitlik foutloos uit te voer. Outomatiese afbreking in tale soos Afrikaans is egter nog nie op 'n aanvaarbare vlak nie, en afbreking word gewoonlik per hand voor publikasie nagegaan. In 'n poging om 'n betroubare woordafbreker vir Afrikaans te ontwikkel, word verskeie tegnieke ondersoek, waaronder beslissingsbome.

Beslissingsbome is 'n masjienleertegniek waar voorbeeld van korrekte optrede gebruik word om 'n boomstruktuur te ontwikkel wat die uitkomste van items in 'n datastel deur middel van 'n reeks verdelings voorspel. Daar word tussen twee soorte beslissingsbome onderskei, naamlik klassifikasiebome, waarby die voorspelde uitkoms die klas is waaraan 'n data-item behoort, en regressiebome, waarby die voorspelde uitkoms 'n reële getal is, byvoorbeeld die prys van 'n huis.

Woordafbreking is 'n klassifikasieprobleem, aangesien daar telkens besluit moet word of 'n woorde op 'n sekere plek afgebreek moet word of nie. Daar is dus twee moontlike uitkomste of klasse, naamlik *breek die woorde op hierdie plek af*, of *moenie hier afbreek nie*. 'n Klassifikasieboom word dus vir die woordafbrekingsprobleem ontwikkel.

'n Beslissingsboom word vir 'n datastel ontwikkel deur die data rekursief te verdeel sodat die onsekerheid oor die klas waaraan 'n data-item behoort, afneem namate daar in die boom afbeweeg word. By elke vertakking word besluit watter eienskap volgende getoets moet word en wat die toets moet wees. Die volgende verdelingskriteria word dikwels gebruik:

- *Inligtingswins* kies by elke verdelingspunt daardie eienskap wat die afname in onsekerheid maksimeer.
- Die *Gini-index* bepaal by elke verdelingspunt die prestasie van alle moontlike verdelings oor die eienskappe wat nog nie getoets is nie, en kies daardie een wat die diversiteit, of wanorde, minimeer.

- “*Twoing*” lever meer gebalanseerde verdelings. Dit gebruik ’n boeteparameter om ongelyke verdelings te vermy en streef daarna om 50-50-verdelings gee.

Decision trees as a hyphenation technique

Hyphenation in agglutinative languages such as Afrikaans, Dutch and German poses a problem because long words are frequently created by joining words. Hyphenation is often necessary in papers and magazines where text is printed in narrow columns. The machine learning technique referred to as decision trees is considered for hyphenation.

Verandering van bodembedekking in die stedelike soomgebied van westelike Johannesburg

J. IMMELMAN

Departement Geografie, Omgewingsbestuur en Energiestudies, Universiteit van Johannesburg,
Posbus 284, Aucklandpark 2006

j.immelman@yahoo.com

Stedelike gebiede aan die Witwatersrand ervaar tans snelle verstedeliking weens verskeie oorsaaklike faktore soos die afskaffing van apartheid, natuurlike bevolkingsaanwas en die invloei van immigrante in die gebied. Hierdie snelle groei lei tot tekorte in die voorsiening van behuising, wat op sy beurt weer aanleiding gee tot die vorming van informele behuisingsprojekte asook onwettige plakkerskampe.

Die vinnige uitbreiding van formele en informele behuising inveral myngebiede wes van Johannesburg noodsak die monitering van sodanige uitbreidings. Die gereelde monitering van die groei en infiltrasie van woongebiede in myn- en landbou-areas is normaalweg tydrowend en duur. Moderne satellietwaarnemingstelsels kan egter ook vir sodanige monitering benut word (afhangende van die stelsels se resolusievermoëns – ruimtelik, spektraal en temporeel).

In hierdie navorsing word die mate ondersoek waarin bestaande geoutomatiseerde klassifikasies van satellietdata tussen stedelike bodembedekkings kan onderskei, ten einde veranderings in bodembedekking op bepaalde punte en oor ’n bepaalde tyd tussen 1991 en 2004 te kan bepaal. Die satellietdata wat vir die studie geselekteer is, is Landsat-beelde van 1991 en 2002 en Quickbird-beelde van 2002 en 2004. Met inagneming van die stelsels se data-eienskappe en standaardverwerkingsstegnieke om bodembedekking te bepaal, is die onderskeie beelde geklassifiseer met die doel om bodembedekking in elke tydperk te identifiseer en aan grondgebruik te koppel. Die einddoel van die navorsing was om te evalueer of die metodiek akkuraat genoeg tussen bodembedekkings kan onderskei ten einde grondgebruiksverandering tussen die tydperke te identifiseer. ’n Tweede subdoelwit was om die groei in woongebiede te probeer kwantifiseer na aanleiding van die oppervlak wat beslaan word.

Die suksesvolle aanwending van die tegnieke kan waardevolle intydse groeineigings uitwys, wat noodsaklik is vir die behoorlike beplanning van verskeie stedelike infrastrukture soos watertoevoer, elektrisiteitstoevoer, rioolafvoer, vervoersisteme en so meer. Dit kan ook waardevol wees in die monitering van die indringing van woongebiede wat normaalweg as onherbergsaam beskou word, soos langs riviere, in mynsones, en veral in onveilige mynsones (langs slydamme of op uitgemynde areas).

Met behulp van goeie klassifikasiestelsels en GIS-stelsels kan infiltrasie in sulke onveilige areas maklik deur die afbakening van buffersones gemoniteer word. Tegnieke wat benut is om die bestaande te ondersoek, het die versameling van steekproefinligting ingesluit ten einde die beeldverwerkingsstelsel op te lei om bodembedekking met behulp van 'n begeleide klassifikasieprocedure (*maximum likelihood*) te herken. Die sukses van die eindresultaat is deur visuele analise van die beeldmateriaal wat verkry is asook enkele veldbesoeke beoordeel.

Resultate van die ontlulings het getoon dat die woongebiedoppervlakte in die studiegebied tydens die ondersoekperiode meer as verdubbel het. Dit het ook duidelik getoon dat 'n gedeelte van die woongebiedoppervlakte in onveilige areas plaasgevind het. So byvoorbeeld het die woongebiedoppervlakte van 11% in 1991 tot 29% in 2004 toegeneem. Alhoewel die verskillende datastelle effens verskil ten opsigte van die persentasie groei wat plaasgevind het, is die verskil minimaal van aard (minder as 1%). Die navorsing het dus getoon dat daar in die studiegebied goed deur middel van 'n standaardklassifikasietegniek tussen bodembedekkingsklasse en geredelik beskikbare satellietdata onderskei kon word, en dat groei sowel as die spesifieke ligging van sodanige groei akkuraat aangetoon kon word. Satellietinligting en standaardverwerkingsprosedures kan dus suksesvol benut word om snelle woongebieduitbreiding te moniteer en veilig te bestuur.

Land-cover change in the urban periphery of Johannesburg

The study investigates the feasibility of automated image processing classification techniques to determine land cover from digital satellite data. The aim of the study is to determine and quantify the change in land cover of a sample area, using satellite images from 1991, 2002 and 2004. Another aim of the research is to determine growth patterns and quantify the amount and rate of growth of the city.

'n Gebruikersvriendelike uitgloësisteem

C.J. JAFTA*, W.D. ROOS EN J.J. TERBLANS

Departement Fisika, Universiteit van die Vrystaat, Posbus 339, Bloemfontein 9300

*jaftacj.sci@ufs.ac.za

Die konsentrasie van elemente op die oppervlak van 'n materiaal bepaal sy interaksie met sy onmiddellike omgewing. Kennis aangaande hoe om hierdie konsentrasies te manipuleer, is dus van die uiterste belang. Dit is wel bekend dat die vloeい van atome na die oppervlak van 'n materiaal deur verskeie faktore bepaal word. Een van die minder bekende faktore, naamlik die oriëntasie van die oppervlak, word tans ondersoek. Enkelkristalle wat met onsuwerhede gedoteer is, word gebruik om oppervlaksamestelling as 'n funksie van temperatuur te meet. Hierdie enkele eksperimentele lopie stel die eksperimenteerder in staat om al die segregasieparameters te bepaal.

Die kristalle word gedoteer deur dun lagies op die kristalle te deponeer, hulle in kwartsbuise onder argonatmosfeer te seël en dan uit te gloei. In die proses word daar van gespesialiseerde glasblasers gebruik gemaak. Aangesien hierdie glasblasers baie skaars is, is die behoefte geïdentifiseer aan die ontwerp van 'n oondsistēem waarin bogenoemde enkelkristalle vir lang tye (800 ure) by hoë temperature (1 000 °C) en in 'n bepaalde niereaktiewe atmosfeer uit gegloei sal kan word.

Die uitgloei-sisteem bestaan uit 'n kwartsbuis (4 cm x 1 m) met vakuumkleppe aan beide kante. Die buis is met twee vitonseëls aan elke kant met die vlekvryestaalkoppelings geseël om 'n hoë vakuum en druk te verseker. Tydens die opstelling word die uitlaatklep gesluit en word Ar-gas tot op 'n druk van 1,5 atmosfere in die buis ingelaat, waarna die inlaatklep gesluit word. Die sisteem word dan met behulp van 'n turbomolekulêre pomp tot by 'n druk van $< 10^{-6}$ Torr afgepomp. Hierdie procedures, wat verseker dat geadsorbeerde gasse uit die sisteem gespoel word, word herhaal, en by elke herhaling word die temperatuur van die sisteem met 100 °C verhoog. Indien 'n temperatuur van 500 °C bereik word, word beide kleppe gesluit om 'n druk van 1,5 atmosfere in die buis te bewerkstellig. Die temperatuur word dan verder verhoog tot die verlangde waarde en daar gelaat vir die bepaalde tyd. 'n Elektroniese beheereenhed moniteer die druk in die kwartsbuis, registreer die uitgloeyd en beheer die stroom na die oond.

Die integriteit van die sisteem is getoets deur 'n polikristallyne kopermonster 64 uur lank by 900 °C uit te gloei. Deur middel van die oppervlaktegniek X-straalfoto-elektronspetroскопie, wat hoofsaaklik vir chemiese analyse gebruik word, is die oksidasietoestand van die monster met dié van 'n ongeoksideerde kopermonster vergelyk. Die ongeoksideerde toestand van die uitgeloede monster bevestig die sukses van die sisteem.

A user-friendly annealing system

Research on single crystals is an expensive exercise. Currently, the crystals are doped by annealing the prepared crystals, sealed in quartz tubes under argon atmosphere. In the process, specialist glass blowers are used. Because these glass blowers are scarce, a need was identified to design an oven system in which these crystals can be annealed for long periods (800 h) and at high temperatures (1000 °C) under specific nonreactive atmospheres. The set-up is such that adsorbed gasses can be flushed from the system, before the system is backfilled to above atmosphere with a noble gas. An electronic control unit monitors the pressure inside the tube, registers the annealing time and controls the current to the oven. The poster discusses the operation, mentions the advantages and disadvantages of the system and shows the X-ray photoelectron spectroscopy results of copper polycrystalline materials, which confirm the success of the system.

Aktiewe interne bedreigingsopsporing in finansiële stelsels met SIDA

W.S. LEUNG EN E.M. EHLERS

Akademie vir Inligtingstegnologie, Universiteit van Johannesburg, Posbus 524,
Auckland Park 2006
wsleung@uj.ac.za; emehlers@uj.ac.za

Opnames toon dat, hoewel die bestuur van ondernemings besorg is oor bedreigings van buite hul ondernemings, hul grootste bron van kommer bedreigings van binne die onderneming self is.¹ Die gebrek aan vertroue is nie onredelik nie, aangesien werknemers betreklik maklik kennis aangaande die interne prosesse van die onderneming kan bekom. Sodanige inligting stel oneerlike werknemers in staat om bedrog te pleeg sonder dat enige onraad bemerk word.²

Namate meer insidente van grootskaalse bedrog onthul word, word die bestuur van ondernemings al meer aanspreeklik gehou.³ Daar bestaan dus 'n behoefté aan beter moniterings-

meganismes om toekomstige insidente van bedrog te verhoed. Hierdie meganismes moet beide op werknelmers en op bestuur van toepassing wees.

Die monitoring van al die aktiwiteite in finansiële stelsels is geen maklike taak nie, gegee die aantal aktiwiteite wat elke dag plaasvind. Die gebruik van intelligente agente wat in monitering, inligtingsversameling en ontleding spesialiseer, kan dus ideaal wees, aangesien die meeste auditprosesse om bedrog te verhoed, so geautomatiseer sou kon word.⁴

Die SIDA- (*scout, investigation, detection and analysis*) agentmodel is met bogenoemde doel voor oë ontwikkel. Die model bestaan uit vier verskillende groepe agente, naamlik verkennings-, ondersoek-, opsporings- en ontledingsagente. Elke groep agente fokus op die spesifieke rol deur die naam aangedui. Die SIDA-model poog om moontlike insidente van bedrog met groter noukeurigheid te identifiseer.

Verkenningsagente moniteer die aktiwiteite van al die gebruikers van 'n finansiële inligtingstelsel. So stel die verkenningsagente 'n aktiwiteitsprofiel vir elke gebruiker saam. Die SIDA-model kan dus aktiwiteitsprofiële vir werknelmers in elke afdeling vergelyk. So kan ongewone aktiwiteite opgespoor word.

Die ondersoekagente is vir die ouditering en toetsing van bestaande data verantwoordelik. Ondersoekagente verifieer of aktiwiteite steeds aan die kriteria van voldoenings- en reguleringsliggame voldoen. Die ondersoekagente leer dus uit vorige bedrogpogings en kan die SIDA-stelsel derhalwe aanpas om soortgelyke toekomstige bedrogpogings op te spoor.

Opsporingsagente is daarvoor verantwoordelik om finansiële stelsel aktiwiteite, soos bepaalde transaksies, te moniteer. Opsporingsagente is die agente wat verdagte gedrag na die ontledingsagente stuur vir verdere ontleding. Aangesien ongeldige alarms vir enige bedreigings-opsporingstelsel as nadelig beskou word, is dit belangrik dat die ontledingsagente optimaal moet funksioneer. Die SIDA-stelsel moet dus slegs geldige insidente van bedrog onder die aandag van die administrateurs van die finansiële stelsels bring.

Verwysings

1. Patcha, A. en Park, J. (2007). An overview of anomaly detection techniques: Existing solutions and latest technological trends. *Computer Networks*. 51(12): 3448-3470.
2. Nowell Group. (2007). *Nowell SpyForce-AI: Insider Threat | Identity Theft | Anomaly Detection* [Aanlyn]. Beskikbaar by: <http://www.nowellgroup.com/> index.php?page=papers [Toegangsdatum: 5 Mei 2008].
3. Sarbanes-Oxley. (2007). *Sarbanes-Oxley - Financial and Accounting Disclosure Information* [Aanlyn]. Beskikbaar by: <http://www.sarbanes-oxley.com/> [Toegangsdatum: 12 Augustus 2008].
4. Spafford, E.H. en Zamboni, D. (2000). Intrusion detection using autonomous agents. *Computer Networks*. 34(4):547-570.

Active internal threat detection in financial systems with the aid of SIDA

The Scout, Investigation, Detection and Analysis Model is a set of intelligent agent groups working together to enhance the information gathering, monitoring and events examination efforts in order to better secure a financial systems environment. The cooperation between the different roles allows for increased accuracy in determining fraudulent activities.

'n Detailvlakalgoritme vir die spoedoptimering van vloeistof-simulasie

J.K. LOOTS¹ EN A. HARDY²

Akademie vir Inligtingstegnologie, Universiteit van Johannesburg

¹jkloots@afrigraph.org; ²ahardy@uj.ac.za

Vloeistofsimulasies verloop baie stadig, buiten in die geval van uitsonderlike klein simulasie-areas. Simulasies van groot areas kan baat by die toepassing van parallelle programmering, maar simulasies waarvan die area klein is, baat hoegenaamd nie by parallelle programmering nie; intendeel, parallelle programmering vertraag die spoed van sulke simulasies wanneer meer prosesse bygevoeg word.

Die vloeistofsimulasies wat in hierdie referaat aangebied word, maak van die Navier-Stokes-vergelykings vir onsaamdrukbare vloeistowwe gebruik. Die simulasie kan in drie lae of velde opgebreek word: die snelheidsvektorveld, die digtheidskalaarveld en die vertoonveld (wat ook as 'n skalaarveld beskou word). Al die velde " beide vektor- en skalaarvelde" is ononderbroke en word vir die oplossing van die simulasie in diskrete velde opgebreek. Die algoritme om hierdie bewerking uit te voer, sien soos volg daaruit:

- 'n Nuwe snelheidsveld word bereken deur die ou snelheidsveld se waardes te verwerk.
- 'n Nuwe digtheidsveld word bereken deur die nuwe snelheidsveld se waardes te verwerk.
- Die vertoonveld word verander deur die digtheidsveld se waardes te verwerk.
- Die velde word aangepas, die snelheid kan as gevolg van digtheidswaardes verander word, en al die velde kan deur middel van eksterne insette verander word.
- Herhaal die algoritme.

Die tyd wat geveng word om vir al die velde op te los, styg namate die simulasie-area se diskrete waardes verdig.

Detailvlak is 'n grafikategniek wat voorskryf dat die belangrikheid van 'n objek in 'n animasie bepaal word deur hoeveel verwerking die objek ondergaan. Die detailvlaktegniek verander dus inderdaad die vlak van detail op 'n dinamiese wyse namate die animasie verander.

Die belangrikste lae wat versnel moet word is die snelheidslaag, dan die digtheidslaag en laastens die vertoonlaag. Die maklikste manier om die simulasie te versnel, is deur eenvoudig die grofheid van die tyd- of diskrete verdeling te vergroot, maar dit sal die aantreklikheid van die simulasie verminder. In die geval van 'n growwer tydstap sal die simulasie rukkerig vertoon, en in die geval van 'n growwer diskrete verdeling sal die detail van elke raam aangetas word.

'n Detailvlakbenadering van die Navier-Stokes-vergelykings maak van twee ononderbroke waardes, tyd en simulasie-area, gebruik. Die volgende twee metodes verdien oorweging. In 'n tydverdeling loop die snelheidslaag met 'n growwer tydstap as die digtheid en vertoon lae. Die maklikste verdeling is dat daar vir elke snelheidstap in die algoritme X digtheids- en vertoonstappe is, waar X 'n heelgetal is. Die ander metode is om 'n growwe snelheidsveld te gebruik en daarmee saam 'n minder growwe digtheidsveld wat snelhede waar nodig interpoleer, en 'n nog minder growwe vertoonveld, wat digtheidswaardes kan interpoleer.

Die doel van hierdie referaat is om detailvlakmetodes te ondersoek (spesifiek in die tyddimensie), en om 'n detailvlakalgoritme aan te pas ten einde 'n metode vir aantreklike fisikabaseerde vloeistofsimulasies te ontwerp. Hierdie aangepaste metode se spesifieke doel is om kleiner simulasies vinniger te laat verloop.

A level of detail algorithm for the speed optimisation of fluid simulations

The aim of this presentation is to examine level of detail techniques and also to adapt a level of detail approach in order to develop visually pleasing physics-based simulations. The specific aim of the adapted methods is to speed up simulations on smaller simulation areas where parallel programming has no value.

Die vertering en kwantifisering van onsuiwerhede in sirkoon en plasmagedissosieerde sirkoon (pdz)

S. LOTTÉR¹, W. PURCELL¹ EN J.T. NEL²

¹Departement Chemie, Universiteit van die Vrystaat, Posbus 339, Bloemfontein 9300;

²NECSA, Pretoria

¹*LotterS.sci@mail.ufs.ac.za; ²jtn@peldev.necsa.co.za

INLEIDING

Sirkonium en hafnium behoort albei aan die titaangroep elemente op die periodieke tabel (groep 4). Sirkonium kom in die natuur hoofsaaklik as sirkoonerts voor, en is altyd met hafnium (1-5%) en ander elemente gekontamineer. Die grootste probleme in die suiwering van Zr is i) die vertering van die uiters moeilik oplosbare sirkoonerts, en ii) die kwantifisering en verwydering van Hf en ander onsuiwerhede uit die erts. Die fisiese en chemiese gedrag van Zr en Hf is feitlik identies, en is dus baie moeilik om van mekaar te onderskei. Die gebruik van sirkonium vind wye toepassing in die nywerheid, en dit is veral die metaal se vermoë om termiese neutrone deur te laat wat dit uiters geskik maak as hulsel vir die kernmateriaal in kernreaktors. In teenstelling met sirkonium is hafnium heelwat minder deurlaatbaar vir termiese neutrone ($\times 600$), en is in baie lae konsentrasievlake in reaktorgraad sirkoniummallooie toelaatbaar.

Die doel van hierdie projek is i) om nuwe verteringsprosedures vir sirkoon te ontwikkel, en ii) om effektiewe analitiese metodes daar te stel wat sirkonium (as hoofkomponent) asook die ander onsuiwerhede (as mikro-onsuiwerhede) in die sirkoniumverbindings uiters akkuraat te kan bepaal.

RESULTATE

Resultate in hierdie studie het getoon dat mikrogolfvertering asook die gebruik van 'n litiumtetraboraat-smeltmiddel as suksesvolle metodes vir die vertering van die natuurlike sirkoon (as alternatief vir HF-vertering) gebruik kan word.

Die kwantifisering van die verskillende elemente is grootliks met behulp van 'n Shimadzu ICPS-7510-spektrometer uitgevoer. Eerstens is die teenwoordigheid (kwalifisering) van al die elemente by drie verskillende golflengtes (die sterkste emissielyne vir elke element) bepaal, en daarna die sensitiwiteit en waarnemingsvlakte van al die teenwoordige elemente. Konsentrasievlake van selfs slegs 9 dele per biljoen vir yster en soortgelyke waardes vir ander elemente is bereik. Die verteerde monsters asook die suurekstraksies is vervolgens geanalyseer.

Matriksprobleme is beperk deur die kwantitatiewe analises op die verteerde monsters met behulp van die standaard-byvoegingsmetode uit te voer. Die verteringprosedure en die suksesvolle

kwantifisering van al die elemente is aanvanklik op die gesertifiseerde SARM62-verwysingstandaard uitgevoer. Daarna is die verteringsprosedures op PDZ asook op die sirkoon-mineraal met sukses herhaal, soos duidelik uit die elementanalises blyk.

GEVOLGTREKKING

Resultate wat uit hierdie studie verkry is, toon dat

- i) litiumtetraboraat-smeltmiddel as suksesvolle verteringmetode vir die sirkoon-mineraal aangewend kan word
- ii) mikrogolf-suurekstraksie 'n belowende metode vir analise asook vir industriële gebruik is
- iii) IGP-OES 'n uiters suksesvolle metode vir die kwantifisering van makro- en mikro-elemente in die sirkoonertsmatriks is

Quantification of impurities in zircon and plasma-dissociated zircon (pdz)

Zircon ore is the primary starting material used when making zirconium metal for nuclear applications. Small impurities of elements such as hafnium or cadmium will cause the zirconium metal to become unusable without further purification. ICP-OES was used in the identification and determination of these impurities.

Die gebruik van tasbare modelle om stoïgiometriese berekening vir studente te vergemaklik

A.F. MARAIS

Departement Chemie, Tshwane Universiteit van Tegnologie, Privaatsak X680, Pretoria 0001
maraisf@tut.ac.za

Die vak Chemie behels fundamentele wetenskaplike redeneringsvermoë, abstrakte konsepte en probleemberekeninge. Die verskillende gebeurtenisse wat onbeskryflike klein partikels ondergaan, word ondersoek. Sulke gebeurtenisse kan nie gesien of selfs gemeet word nie, buiten met behulp van gesofistikeerde instrumente.

Die vak word oor die algemeen as moeilik beskou, as gevolg van 'n gebrek aan voldoende fisies tasbare voorbeeld. Volgens Johnstone¹ is dit moeilik vir studente om te onderskei tussen denkvlekke soos die makro (tasbare), die submikro (atomiese en molekulêre) en simboliese taal, wat algemeen deur wetenskaplikes aanvaar en in redenasies en interpretasies gebruik word. Studente leer tydens ontoereikende opleiding op skool die verkeerde konsepte aan, en kan dit nie vereenselwig met dit wat op universiteit aangebied word nie. Die probleem word vererger deurdat daar te vinnig by die onderliggende konsepte verby beweeg word en op berekeninge gekonsentreer word. Die gevolg is dat studente formules en definisies memoriseer, maar in gebreke bly om onderliggende konsepte onder die knie te kry. Tipiese voorbeeld is die verwarring tussen 'n subskrif en 'n koëffisient soos dit in chemiese vergelykings gebruik word. Verdere verwarring onstaan aangaande begrippe soos beperkende reagens en teoretiese reaksie-opbrengs.

Die konseptuele chemiebegrippe van altesaam 496 eerstejaarstudente in Chemie is aan die begin van die eerste semester in 2008 getoets, en hulle is weer met dieselfde toets gemeet nadat formele lesings aan die einde van die semester voltooi is. Geen statistiese verbetering van

konseptuele kennis weens gewone lesings is aan die hand van t-toetse bemerk nie. Die spesifieke vraag aangaande wat stoïgiometrie behels, het slegs 5% van die totale aantal studente aan die begin van die semester reg beantwoord, en slegs 10% aan die einde. Die 496 studente het vyf verskillende groepe verteenwoordig, en slegs een van die groepe is gebruik om die tasbare modelle te toets.

Gekleurde Lego-blokkies is gebruik om reagense en die produkte van reaksievergelykings voor te stel. Met behulp van die blokkies kan diagrammatisse voorstelle op skrif gestel word. Deur middel van omvattende vrae word studente gehelp om die onderliggende konsepte te toets en daarna die probleme op te los. Daar is bewys³ dat, wanneer studente eers na die makro-, tasbare en sienbare vlak kan terugkeer, hulle die gebeurtenisse op mikrovlak makliker kan verstaan. Dié spesifieke benadering bevorder beter begrip vir die simboliese taal van chemie. Na die gebruik van die tasbare modelle is sowel die studente in die betrokke groep as studente in een van die ander groepe met behulp van 'n toets beoordeel. Die studente wat die tasbare blokkies gebruik het, het 'n gemiddelde punt van 55% behaal, vergeleke met die ander groep, wat slegs 29% behaal het. Daar word dus aanbeveel dat sulke tasbare hulpmiddels aanvanklik gebruik moet word, voordat daar van studente verwag word om moeilike konsepte te visualiseer.

Verwysings

1. Johnstone, A. (2000). *Chemistry Education: Research and practice in Europe*. 1:9-15.
2. Mulford, D., Robinson, W. (2002). *Journal of Chemical Education*. 79:739-744.
3. Sarquis, A. (2001). *Journal of Chemical Education*. 78:820.

Using tactile models as a means to alleviate the common problems students experience with stoichiometry.

Students often memorise formulas and definitions, without understanding the underlying concepts required, in order to work with abstract units of measure. A common example of this occurs when students tackle stoichiometric problems and are unable to either predict reaction yield, or identify limiting reagents. After the usual forms of lecture presentation had failed to make a significant impact, the researcher found that by moving back to the concrete level, and using "Lego" blocks, before incorporating more abstract reasoning, students were more likely to overcome their difficulties.

'n Ondersoek na dioksienagtige stowwe in grond en sediment van die sentrale gebiede van Suid-Afrika

C. NIEUWOUTD*, L.P. QUINN, R. PIETERS EN H. BOUWMAN

Skool vir Omgewingswetenskappe en Ontwikkeling (Dierkunde), Noordwes-Universiteit, Potchefstroomkampus, Privaatsak X6001, Potchefstroom 2520

*claudine.nieuwoudt@nwu.ac.za

Persisterende organiese besoedelstowwe (POB's) wek wêreldwyre kommer as gevolg van hulle alomteenwoordigheid en toksisiteit. Hierdie stowwe het die vermoë om in voedselkettings op te hoop en kan noemenswaardige gesondheidsrisiko's vir mens, dier en omgewing inhou. Sommige POB's is dodelik in hoë konsentrasies, maar hul skadelikste effekte lê eerder in hul kroniese toksisiteit, wat kanker en defekte van die immuun-, voortplanting-, senuwee- en endokriene stelsels kan veroorsaak.

Die Stockholmkonvensie vir POB's is in Mei 1995 geïnisieer, en stel dit ten doel om die vrystelling van hierdie stowwe te verminder en uiteindelik te elimineer. Die verdrag is deur Suid-Afrika onderteken en bekragtig, en die Konvensie het op 17 Mei 2004 internasionale wet geword.

Alhoewel daar al menige studies oor die gebruik van POB's in plaagbeheer, soos DDT, in Suid-Afrika gedoen is, is daar nog min bekend oor die dioksienagtige POB's wat as toevallige neweprodukte by verbrandingsprosesse gevorm word. Hierdie groep stowwe sluit poligehloreerde dibenso-para-dioksiene (PCDD), -dibenofurane (PCDF) en -bifeniele (PCB) in. PCDD/F's word as neweprodukte in industriële en termiese prosesse gevorm. Daarenteen is PCB's in die verlede vir industriële doeleinades vervaardig. Die gebruik en vervaardiging van PCB's is in die vroeë 1980's verban, maar koplanêre PCB's word steeds as neweprodukte gevorm. Potensiële bronne van dioksienagtige stowwe sluit chemiese en petrochemiese industrieë, yster- en staalwerke, papier- en pulpindustrieë, sementvervaardiging en verbrandingsprosesse in. Kleiner, niepuntbronne soos die verbranding van huishoudelike afval en veldbrande dra ook by. Al hierdie bronne kom in Suid-Afrika voor, sommiges gekonsentreer in industriële sektore, ander in residensiële en onontwikkelde gebiede. Die vernaamste reservoires waarin dioksienagtige stowwe uiteindelik ophoop, is grond en sediment, daarom het die studie op hierdie matrikse gefokus.

Die doel van hierdie studie was om die konsentrasies van dioksienagtige stowwe in die grond en sediment van sentraal-Suid-Afrika te bepaal, en om industriële areas met nie-industriële areas te vergelyk. Gaschromatografie is tesame met hoëresolusie-massaspektrometrie en die H4IIE-luc-biosiftingstoets gebruik om individuele PCDD/F-isomere te identifiseer en te kwantifiseer, en om die totale konsentrasie 2,3,7,8-tetrachlorodibenzo-paradioksiën-ekwivalente (TCDD-Ekw) te bepaal. Die resultate wat deur middel van chemiese en biologiese analises verkry is, het ooreengestem, en bewys dat die H4IIE-luc-biosiftingstoets as 'n vinnige, kostedoeltreffende siftingstoets gebruik kan word.

Die deteksielimiet (DL) van die biosiftingstoets was 8.2×10^{-1} en 2.8 ng TCDD-Ekw/kg (dm) vir onderskeidelik sediment en grond. Ekw20-waardes wat met die biosiftingstoets bepaal is, het gestrek van <DL tot 70 ng TCDD-Ekw/kg (dm) vir grond, en van <DL tot 45 ng TCDD-Ekw/kg (dm) vir sediment. Die dioksienkonsentrasie in grond was in die algemeen hoër as dié in sediment, en grond van Vanderbijlpark se industriële area en Klerksdorp se residensiële area het hoër konsentrasies bevat as die ander industriële areas. Wanneer die resultate van instrumentele analises en die biosiftingstoets in ag geneem word, het toksiese ekwivalentkonsentrasies (TEK) gewissel tussen 1.2×10^{-1} en 32 ng TEK/kg (dm) vir sediment, en tussen 3.4×10^{-1} en 20 ng TEK/kg (dm) vir grond. In die algemeen was die vlakke van dioksienagtige stowwe in die grond en sediment van sentraal-Suid-Afrika laer as dié wat in die sediment- en grondkwaliteitsriglyne van Kanada, Duitsland en die VSA voorgestel word.

An investigation into dioxin-like substances in the soil and sediment of central South Africa

This study investigated the levels of dioxin-like substances in the soil and sediment of central South Africa. Samples were analysed by means of gas chromatography/high resolution mass spectrometry (GC-HRMS) and the H4IIE-luc bio-assay. In general, the levels of dioxin-like substances in South African soils and sediments were lower than the quality guidelines proposed by Canada, Germany and the USA.

'n Ondersoek na die krokodilsterftes in die Nasionale Krugerwildtuin

L.P. QUINN^{1*}, C. NIEUWOUDT¹, R. PIETERS¹, D. PIENAAR² & H. BOUWMAN¹

¹ Skool vir Omgewingswetenskappe en Ontwikkeling (Dierkunde), Noordwes-Universiteit, Potchefstroomkampus, Privaatsak X6001, Potchefstroom 2520

² Nasionale Krugerwildtuin, Suid-Afrikaanse Nasionale Parke, Privaatsak X402, Skukuza 1350

*Laura.Quinn@nwu.ac.za

Die Nylkrokodil word volgens die rooidatalys as kwesbaar bestempel. Al word die krokodil nie as 'n besonder seldsame reptiel gereken nie, is broeibevolkings met genoegsame genetiese variasies beperk. Daarbenewens krimp hul natuurlike habitat, en lei menslike aktiwiteit tot die verswakking van waterkwaliteit in byna al die groot rivierstelsels van suidelike Afrika.

Een van die grootste natuurlike Nylkrokodilbevolkings in Suid-Afrika kom in die Olifantsrivier in die Nasionale Krugerwildtuin voor. Dié stelsel spog met sommige van die grootste krokodille in die suidelike halfond. In Mei vanjaar het groot getalle van die diere in hierdie stelsel egter begin sterf. Benewens die wildtuin se eie wetenskaplike en veeartseny-afdeling is 'n aantal ander navorsingsinstansies ook genader om die sterftes te ondersoek. Hierdie instansies het die Departement van Waterwese en Bosbou, die Universiteit van Pretoria, die Noordwes-Universiteit, asook die Universiteit van die Oranje-Vrystaat ingesluit. Navorsingsinstansies in Swede en Noorweë is ook betrek.

Die eerste nadoodse ondersoeke het aan die lig gebring dat die reptiele dood is aan pansteatitis. Steatitis is hoofsaaklik 'n dieet geassosieerde toestand. Die vergalste vet van verrotte vis of die inname van groot hoeveelhede poli-onversadigde vette in 'n dieet wat laag is aan vitamien E veroorsaak die uitputting van die organisme se anti-oksidantstelsel. Nadat die organisme se anti-oksidantstelsel uitgeput is, vind lipiedperoksidasie plaas en word seroïedpigment in die vetweefsel afgeset. Die peroksidasie veroorsaak dat die vet verhard en onbuigsaam word, en die seroïedpigment gee aan aangetaste vetweefsel die kenmerkende geel kleur.

Aangesien daar nie groot getalle dooie vis in die omgewing van die sterwende krokodille aangetref is nie, en die krokodille se dieet nie noemenswaardig verander het nie, is ander oorsake ondersoek. Daar is onder meer aandag gegee aan die moontlike rol van algobloeiings, swaarmetale, hidrologiese veranderinge weens die verhoging van die wal van die Massingirdam stroomafwaarts, net oor die grens in Mosambiek, en die moontlike teenwoordigheid van bakteriese of virale infeksies.

Verskeie besoedelstowwe affekteer die liggaam om oksidatiewe stres te veroorsaak. Die moontlike teenwoordigheid van 'n aantal stowwe, insluitend akrielamied en endosulfaan, word tans in sediment sowel as in krokodil- en visweefsel ondersoek. Akrielamied is 'n industriële chemikalie wat veral tydens metaalherwinning en bouprosesse gebruik word. Die stof is neurotoksies, maar min is bekend oor ander ekologiese effekte in akwatiese omgewings of op reptiele. Endosulfaan is 'n insekplaagdoder wat algemeen gebruik word. Daar is bewys dat endosulfaan oksidatiewe stres in akwatiese organismes veroorsaak deur die vorming van reaktiewe suurstofspesies.

Tot dusver is daar geen uitsluitsel oor die oorsaak van die pansteatitis nie. Die kompleksiteite van 'n stelsel wat oor internasionale grense heen strek, en die groot aantal faktore wat 'n rol in krokodilgesondheid speel, laat 'n legkaart van moontlikhede ontstaan. 'n Verklaring vir die moontlike oorsake lê waarskynlik opgesluit in die sameloop van omstandighede, menslik en natuurlik, wat tot die sterftes bygedra het.

An investigation into crocodile deaths occurring in the Kruger National Park

Since May 2008, a number of crocodile deaths have occurred in the Kruger National Park. These deaths are attributed to pansteatitis. However, the cause of this disease is unknown. Different research groups are currently involved in investigations focusing on various factors that could influence the health of crocodiles.

Sellulêre outomate met selgroepering

E. SMAL

Departement Rekenaarwetenskap, Universiteit van Stellenbosch, Privaatsak X1,
Matieland 7602
eugene.smal@gmail.com

Ons modelleer 'n spesifieke uitlegoptimeringsprobleem, naamlik die LEGO-konstruksieprobleem.

Die LEGO-konstruksieprobleem is in 1998 deur LEGO-maatskappy-ingenieurs aan die wetenskaplike gemeenskap voorgestel as: Gegee enige 3D-voorwerp, hoe sou dit uit LEGO-blokkies gekonstrueer word? Die maatskappy benodig 'n program met 'n *gelegoseerde* model as invoer wat dan die LEGO-bou-instruksies daarvoor genereer.

'n *Gelegoseerde* model is 'n 3D-matriks van een en nulle, waar 'n een 'n deel van die objek verteenwoordig en die grootte van 'n generiese blokkie is. 'n Nul verteenwoordig 'n oop spasie van dieselfde grootte. 'n Generiese blokkie is die kleinste LEGO-blokkie (1×1). Die probleem kan dus gedefinieer word as die vind van 'n optimale uitleg van LEGO-blokkies wat al die ene in die *gelegoseerde* model sal bedek.

'n Optimale uitleg van LEGO-blokkies is gedefinieer deur middel van verskeie heuristiese. Die aantal blokkies wat gebruik word, moet geminimeer word. Groter blokke moet waar moontlik gebruik word om die bou van die standbeeld te vergemaklik en om te help verseker dat die eindproduk aaneengeskakel is. Blokkies in opeenvolgende lae moet in afwisselende rigtings gebruik word om die stabiliteit van die standbeeld te verbeter. 'n Groot deel van al die blokkies moet deur ander blokkies in die daaropvolgende laag bedek word, en elke blokkie moet soveel moontlik blokkies in die vorige laag bedek.

Die probleem is voorheen opgelos deur middel van optimeringsmetodes gebaseer op genetiese algoritmes en 'n beperkte boomsoektogmetode. Ons modelleer die probleem deur sellulêre outomate met selgroepering te gebruik. Ons metode verskil van vorige metodes deurdat dit van lokale optimering in plaas van globale optimering gebruik maak.

Volgens ons metode word die LEGO-standbeeld laag vir laag gebou. Aanvanklik word die laag as 'n matriks van selle beskou. Elke sel wat 'n een verteenwoordig, word as 'n genetiese blokkie geïnisialiseer. Blokkies word dan saamgegroepeer om groter blokke te vorm. Elke blokkie kan dus as 'n groep selle beskou word.

In elke iterasie "besluit" elke blokkie met watter van sy omliggende blokke hy kan saamgroepeer om groter blokke te vorm. Die blokkies maak van 'n lokale kostefunksie gebruik om te besluit met watter omliggende blokkies hulle saam wil groepeer. Die kostefunksie bevat al die heuristiese wat bepaal of 'n standbeeld optimaal gekonstrueer is. Blokke kan slegs saamgegroepeer word as hulle 'n geldige LEGO-blokkie sal vorm.

As 'n blok nie meer met enige van sy omliggende blokke kan saamgroepeer nie, kan die blokkie "besluit" om in generiese blokkies op te breek. Hierdie stap word benodig om die soek na 'n optimale oplossing te kan voortsit.

Ons eksperimente toon vergelykbare resultate met dié van vorige metodes. Hierdie metode gebruik aansienlik minder geheue en in die algemeen ook veel minder LEGO-blokkies. Die metode kan ook maklik aangepas word om LEGO-standbeelde in kleur te konstrueer deur die groepering van blokke tot blokke van dieselfde kleur te beperk, waar vorige metodes nie maklik kleur kon byvoeg nie.

Cellular automata with cell clustering

This study considers the modelling of a particular layout optimisation problem, the LEGO construction problem. This problem investigates how any real-world 3D object can be constructed from LEGO bricks. Cellular automata with cell clustering is used to create LEGO building instructions.

Gemodelleerde gedrag van 'n elektries gestimuleerde menslike ouditiewe senuweevesel

J.E. SMIT¹, T. HANEKOM EN J.J. HANEKOM

Departement Elektriese, Elektroniese en Rekenaar-Ingenieurswese, Universiteit van Pretoria, Lynnwood, Pretoria 0002

¹kobie.smit@up.ac.za

In hierdie studie is 'n moontlike uitbreiding van die Hodgkin-Huxley-model vir ongemiëliniseerde senuweevesels ondersoek. Die aanpassings is daarop gemik om die opwekkingsgedrag by Ranvier-nodes van 'n menslike sensoriese senuweevesel te kan voorspel, met spesifieke toepassing op die voorspelling van temporale eienskappe van die menslike ouditiewe stelsel. Die model is in drie fases ontwikkel. Gemete ioniese membraanstroomwaardes vir 'n enkele, menslike gemiëliniseerde perifere senuweevesel is gebruik om aksiepotensiaaldinamika by Ranvier-nodes te beskryf. Daarna is morfometriese inligting van menslike senuweevesels gebruik om 'n toepaslike kabelmodel, wat op twee bestaande modelle gebaseer is, te ontwikkel. Laastens is morfologiese veranderlikes van hierdie model vir 'n Tipe I- ouditiewe senuweevesel aangepas en aan 'n volume-geleidingsmodel van die koglea gekoppel.

Hierdie studie is die eerste wat bewys dat vergelykings van die Hodgkin-Huxley-model suksesvol aangepas kan word om die opwekkingsgedrag van 'n algemene, menslike perifere sensoriese senuweevesel te voorspel sonder om van die Goldman-Hodgkin-Katz-vergelykings gebruik te maak. In vergelyking met bestaande modelle bevat hierdie model 'n meer uitgebreide daarstelling van die temperatuurafhanklikheid van die fisiologiese en elektriese veranderlikes.

Twee weergawes van die menslike Tipe I- ouditiewe senuweevesel-model is ontwikkel, waarvan een 'n onbeskadigde (niegedegenereerde) vesel en die ander 'n beskadigde (gedegenereerde) vesel voorstel. 'n Vergelyking van voorspelde en eksperimenteel gemete resultate het aangedui dat kortstondige en meer blywende natrium- asook stadige kaliumioon-membraanstrome bestaan, soortgelyk aan dié wat in algemene sensoriese senuweevesels aangetref word. Die verband tussen kronaksie, reobasisstroom, gemiddelde vertraging, drempels en relatiewe

refraktêre periodes en die mate van degenerasie van vesels is aangedui. Die model kon ook drempelverskille tussen verskillende asimmetriese golfvorms voorspel. Die kombinasie van blywende natrium- en stadige kaliumioon-membraanstromes kon, gedeeltelik eksperimenteel waargeneem, niemonotone opwekkingsgedrag voorspel.

'n Vereenvoudigde metode is ontwikkel om die elektries ontlokte, saamgestelde aksiepotensiaalreaksies van neurale opwekking te bepaal. Die metode bied 'n berekenings-effektiewe manier om die profielwydtes van die uitsette van modelle wat neurale opwekkingsprofiële bereken, te voorspel. Dit verskaf ook 'n indirekte manier om stimulusverswakking te bereken deur die waarde wat gemete resultate die beste voorspel, te bereken. Resultate het ook bevestig dat elektrodeskikkings nader aan die modiolus meer gefokusde neurale opwekkingsverspreidings voorspel as elektrodeskikkings wat meer lateraal is.

Modelled response of the electrically stimulated human auditory nerve fibre

In this study, the Hodgkin-Huxley model for unmyelinated nerve fibres was modified to predict the excitability behaviour of myelinated human sensory nerve fibres, as applied to the electrically stimulated human auditory system. The model expands the toolbase available to improve the understanding of neural excitation behaviour in the cochlear implant research field.

'n Metode om die verbetering in werksverrigting van industriële radio-Ethernet te bepaal volgens die diensvlak-differensiële rand (DVDR)

P. VAN RHYN EN G. P. HANCKE

Departement Elektriese, Elektroniese en Rekenaar-Ingenieurswese, Universiteit van Pretoria,
Lynnwoodweg, Pretoria 0002
vanrhyn@mweb.co.za

Die studie ondersoek die kenmerkende eienskappe van radio-Ethernet met spesifieke fokus op die verbetering van werksverrigting wat diensvlakgehalte en betroubaarheid betref.

Radionetwerke gebaseer op veelvoudige inerset en veelvoudige-afvoer-ortagonale frekwensiedelingsmultipleksering (OFDM) word ondersoek, omdat dit waarskynlik aan die meerderheidvereistes van radio-Ethernetnetwerke voldoen. OFDM word as een van die interessantse ontwikkelings in die dissipline van breëband-radionetwerke beskou, weens 'n aantal kenmerkende eienskappe: 1) 'n toleransie teen veelvoudige transmissiebaan-vervorming en selektiewe frekwensiedeining, 2) impulsgeras-onderdrukking en 3) spektrale effektiwiteit.

Sekere eksterne verskynsels in die direkte omgewing kan egter verrekende effekte op die dataspoeed van 'n radio-Ethernetnetwerk hê, byvoorbeeld veelvoudige transmissiebaan-vervorming, selektiewe frekwensiedeining of impulsgeras. Ander faktore wat die werking van die radio-netwerke kan beïnvloed, sluit in die kenmerkende eienskappe van die modulasie- en kommunikasieprotokolle wat gebruik word, asook die stralingskomponente soos die antenna en verwante komponente.

Verbeterde werksverrigting kan van OFDM-stelsels verkry word deur die toepassing van veelvoudige antennas aan een of meer kante van die radioskakel. Veelvoudige antennas kan gebruik

word om sekere vervormingseffekte te kanselleer, en om diversiteit en stralingswins deur middel van koherente samevoeging te bewerkstellig. Die gebruik van veelvoudige antennas aan beide kante van die radioskakel bied 'n addisionele fundamentele stralingswins, wat verbeterde spektrale effektiwiteit meebring.

'n Probleem wat nog opgelos moet word, is hoe om die verbeteringsgraad van 'n radionetwerk ten opsigte van diensvlakverhoging te definieer wanneer daar na die optimisering van die netwerk gestreef word. Die resultate van dataspoedtoetse kan misleidend wees indien 'n verskynsel wat ons die "diensvlak-differensiële rand" (DVDR) van radiodatanetwerke noem, in aanmerking geneem word.

'n Onbekende verskynsel waarna ons voorlopig as die "diensvlak-differensiële rand" (DVDR) van radio-Ethernetnetwerke verwys, word in die studie beskryf. Ons het die DVDR vir die eerste keer in Oktober 2007 tydens voorlopige transmissietoetse van 'n OFDM-radio-Ethernetnetwerk aan die Tshwane South College waargeneem. Daar is waargeneem dat 'n OFDM-stelsel breëbandkommunikasie tussen die toegangspunt TP en 'n mobiele nodus handhaaf namate dit in 'n reguit lyn wegbeweeg. By 'n sekere afstand dno vanaf die TP staak breëbandkommunikasie volkome. Die nodus moet nou 'n aansienlike afstand in die rigting van die TP tot by dmaks terug beweeg, voordat stelseltransmissie herstel word. Dit is hierdie afstand tussen dno en dmaks waarna ons verwys as die DVDR, en tydens eksperimente word dit as 'n aansienlike persentasie van die afstand tussen die TP en dno waargeneem.

Dit blyk 'n komplekse taak te wees om die kommunikasie-diensvlakgehalte te bepaal van 'n nodus wat binne die DVDR ontplooи is. Die aanwesigheid van die DVDR plaas 'n vraagteken op die resultate wanneer die verbetering in die diensvlakgehalte van 'n radio-Ethernetnetwerk na optimisering bepaal word.

A method to estimate the performance optimisation of an industrial Ethernet network by observation of the service level differential zone

The study investigates the performance optimisation of wireless Ethernet with a specific focus on quality of service (QoS) and reliability. An unknown phenomenon affecting service level is described. We shall refer to this phenomenon as the "service level differential zone" (SLDZ) of a wireless Ethernet network.