

Было рассмотрено движение вещества, вытекающего из трубы, в основном поперечном течении канала. Физические параметры, такие как плотность, динамическая вязкость, гидравлический диаметр и скорость, были подобраны таким образом, чтобы получить малое число Рейнольдса для ламинарного течения. Вследствие того, что в сложных турбулентных моделях расчета распространения выбросов ТЭС и АЭС рассматривается концентрация и массовое соотношение различных химических веществ, в математической модели необходимо было учесть возможность расчета концентрации. Так как элементы выбросов под воздействием химических и физических параметров смешиваются, образуя новые компоненты, в модель и численный алгоритм была включена возможность расчета химической реакции. Полученные численные результаты показали, что изменение степени экспоненты в профиле скорости не имеет значительного влияния на течение, однако задание скорости в виде константы дает значительную ошибку в расчетах.

### Список литературы

1. Дукенбаев К. Энергетика Казахстана. Технический аспект / К. Дукенбаев. – Алматы.- 2001 . - 312 с.
2. Acharya, S., Tyagi, M., Hoda, A. Flow and heat transfer predictions for film-cooling. Ann. NY Acad. Sci. 934.- 2001. - 110-125 pp.
3. Andreopoulos, J., Rodi, W. Experimental investigation of jets in a crossflow // J. Fluid Mech. 138.- 1984. - 93-127 pp.
4. Broadwell, J. E., Breidenthal, R. E. Structure and mixing of a transverse jet in incompressible flow // J. Fluid Mech. 148.- 1984.- 405-412 pp.
5. Camussi R., Guj G., Stella A. Experimental study of a jet in a crossflow at very low Reynolds number // Journal of Fluid Mechanics. Volume 454. - 2002. - 113-144 pp.
6. Chai, X., Iyer, P. S., Mahesh, K. Numerical study of high speed jets in crossflow // Journal of Fluid Mechanics, Volume 785.- 2015. - 152-188 pp.
7. Chochua, G., Shyy, W., Thakur, S., Brankovic, A., Lienau, K., Porter, L., Lischinsky, D. A computational and experimental investigation of turbulent jet and crossflow interaction. Numer. Heat Transfer A 38.- 2000. - 557-572 pp.
8. Chung T. J. Computational Fluid Dynamics. Cambridge University Press, 2002 - p. 1012.
9. Falconi C. J., Denev J. A., Frohlich J. and Bockhorn H. A test case for microreactor flows - a two-dimensional jet in crossflow with chemical reaction, Internal Report, available at: <http://www.ict.uni-karlsruhe.de/index.pl/themen/dns/index.html>: "2d test case for microreactor flows. Internal report. 2007 July 20, 2007.
10. Livescu, D., Jaber, F. A., Madnia C. K. Passive-scalar wake behind a line source in grid turbulence // Journal of Fluid Mechanics. Volume 416.- 2000. - 117-149 pp.
11. Margason, R. J. Fifty years of jet in crossflow research. In AGARD Symp. on a Jet in Cross Flow, Winchester, UK.-AGARD CP . - 1993.- p. 534.
12. Shan, J. W., Dimotakis, P. E. Reynolds-number effects and anisotropy in transverse-jet mixing // J. Fluid. Mech. 566.-2006. - 47-96 pp.
13. U.S. Environmental Protection Agency, Clean Air Markets Division, available at: <https://ampd.epa.gov/ampd/>
14. Zavila O. Physical Modeling of Gas Pollutant Motion in the Atmosphere, Advances in Modeling of Fluid Dynamics, Dr. Chaoqun Liu (Ed.), InTech, 2012, DOI: 10.5772/48405.

УДК 621.038

### БИР ЭЛЕКТРОНДУУ ЭЛЕМЕНТТЕРДИ МОДЕЛДЕШТИРҮҮ

*Кожоева Сурабюбю Тургашевна, к.т.н, доцент, Ж.Баласагын ат. КУУ, Кыргызстан, 720011, г.Бишкек, ул. Осмонкула 40А, e-mail: [suura@mail.ru](mailto:suura@mail.ru)*

*Касымалиева Кыял - КУУ Ж.Баласагын ат.КУУ , Кыргызстан, 720011, г.Бишкек, ж.м.  
Учкун, ул Кенеш 66.e-mail: [suura@mail.ru](mailto:suura@mail.ru)*

**Макаланын максаты:** Электрониканын мындан ары өнүгүүсүнүн бир жолу, бул ар кандай электрониканын элементтерин, башкача айтканда техникалык түзүлүштөрдү түзүүдө текшерүүгө мүмкүн болгон белгилүү сандагы электрондордун жылышы же болбосо бир электрондун абалын аныктоо. Теориялык бат аракеттүүлүк чеги жүздөгөн терагерцке жана энергияны талап кылышы  $3 \cdot 10^{-8}$  Вт ээ болгон бир электрондуу түзүү болуп эсептелет.

**Негизги сөздөр:** бирэлектроника, моделдештирүү, металлдарын атомдорунун ортосунагы ширетүү кубулуштары, туннелдештирүү, нноэлектрониканын транзистору, молекула, кванттык системалар, башкаруучу электрод, когеренттүүлүк.

## SIMULATION JF SINGLE-ELECTRON ELEMENTS

*Kojoeva Surabyby Turgashevna, PhD (Engineering), docent, Kyrgyzstan, 720011, c.Bishkek, KNU named after J.Balasagun, e-mail: [suura@mail.ru](mailto:suura@mail.ru)*

*Kasymalievа Kyal –engineer, Kyrgyzstan, 720011, c.Bishkek, KNU named after J.Balasagun, e-mail: [suura@mail.ru](mailto:suura@mail.ru)*

The purpose article - determine the position and the number of mobile electrons in the electronic elements that is relevant for the creation of elements of nanoelectronics . Since the theoretical calculation of the performance of these devices reaches hundreds of terahertz and the energy consumption is  $3 \cdot 10^{-8}$  W , modeling and evaluation of single-electron transistors , consisting of two metal electrodes in contact transition of one electron is the content of this article.

**Keywords:** one - electronics, modeling, contact phenomena between the metal atoms , tunneling transistors, nanoelectronics , molecule , quantum systems , the control electrode , coherence.

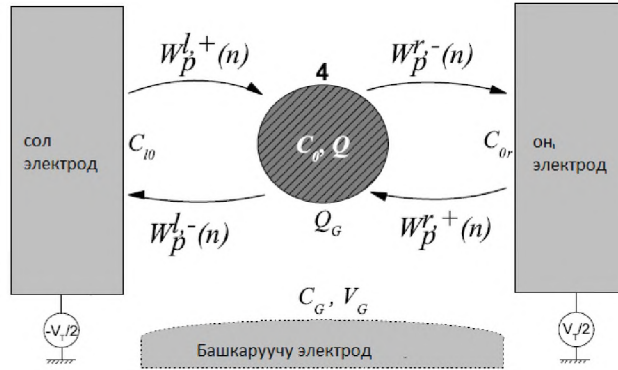
Бул иште бирэлектрондук туннелдештирүү кубулушу [1,2] жана эсептөөнүн негизинде молекулалардын начар байланышы бар бир электрондуу транзисторлордун иши каралат. Мындай шартта молекула жана туннелдүү электрондор бирдиктүү кванттык системаны түзбөйт. Туннелдүү өтүүнүн өткөргүчтүгү, кванттык бирдиктин өткөрүмдүүлүгүнөн  $\frac{e^2}{h}$  бир топ кичинелик кылат. Бул учурда транспорттоо процесси когеренттүү эмес мүнөздөмө болот ( молекуладагы алардын релаксация мүнөздөмөсү, электрондордун туннелдешүү убактысына салыштырмалуу болот) молекулалардын жана электроддордун арасындагы электрондордун ташылышын туннелдешүү актысынан көз каранды эмес удаалаштыгы катары кароого болот.

Бир бөлүктүү процессти караган молекулалык бир электрондуу транзистордо туннелдешүү процесси баяндалат. Бир бөлүктүү процесстин ыктымалдуулугу, көп бөлүктүү процесстин ыктымалдуулугунан бир топ кичине, ошондуктан начар байланыштагы система колдонулат. Ошентип каралып жаткан туннелдүү электроддор жана аралчанын моделинде бириндеген электрондордун резонанстык туннелдешүүсү болушу мүмкүн, туннелдүү өтүүнүн башка түрлөрү каралбайт. Башкаруучу электрод жана молекулярдуу объектинин ортосунда электростатикалык талааны кошпостон өз ара аракеттешүү, б.а. аралча жана башкаруучу электроддордун ортосунда туннелдик транспорттоо болбойт.

Процессти моделдөөдө жана эсептөөдө кинетикалык тендемелердин системасы чыгарылат, жогоруда айтылган шарттарды эске алуу менен төмөнкүдөй түрдө жазылат:

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = \sum_p (C_p^+ + C_p^- - D_p^+ - D_p^-) + R(t), \quad (1)$$

Мында  $\rho(t)$  - электрондуу конфигурациялардын функциясынын бөлүштүрүү ыктымалдуулугу,  $C_p^+$  жана  $D_p^+$  - молекулары  $p$  деңгээлинен электродго өткөрүүдөгү электрондун туннелдештирүү ыктымалдуулугу,  $C_p^-$  жана  $D_p^-$  - молекулары  $p$  деңгээлинен электродго өткөрүүдөгү электрондун туннелдештирүү ыктымалдуулугу,  $R(t)$  - электрондордун молекуладагы релаксациясын баяндап жазуудагы, кошулуучу.



Сүр.1 Молекулалык бирэлектрондуу транзистордогу молекула жана электроддордун ортосундагы туннелдик окуянын мүмкүнчүлүк схемасы.

Бир электрондуу транзистордун транспорттук мүнөздөмөсүн эсептөөдө Монте-Карлонун имитациялык моделдөө ыкмасын колдонушту [3]. Борбордук аралчанын дискреттик спектри менен жай электрондун релаксация чегинин режиминде аткарылды. (1) теңдемеси тикеден тике динамикадагы электрондуу туннелдүү транспортту изилдөөгө мүмкүндүк берет жана кинетикалык теңдемелердин системасын чыгаруунун жолун берет. Айрым алганда бирэлектрондуу транзистордо конкреттүү молекулалардын кандай абалдары жана алардын энергетикалык деңгээлдери молекуларынын туннелдүү транспорттоо процессинде катышаарын көргөзөт. 1-сүрөттө мономолекулярдуу бирэлектрондуу транзистордогу туннелдүү окуянын мүмкүн болгон 2 түрүнүн схемасы көрсөтүлгөн:

- электрон молекулары оң же сол өткөөл аркылуу таштап кетет,
- электрон молекулары оң же сол өткөөл аркылуу келет.

Мындай процесстин ылдамдыгы:

$$W_p^+(n) = W_p^{l,+}(n) + W_p^{r,+}(n)$$

Берилген процесстер үч ыктымалдуулуктун көбөйтүндүсүнүн жыштыгы болот (системанын начар байланыштуулук шартынын күчүндө).

$$\begin{aligned} W_p^{l,+}(n) &= (1 - P(p,n)) \tilde{A}_p^l(n) f_p^{i,l}(n), \\ W_p^{r,+}(n) &= (1 - P(p,n)) \tilde{A}_p^r(n) f_p^{i,r}(n), \\ W_p^{l,-}(n) &= P(p,n) \tilde{A}_p^l(n) (1 - f_p^{f,l}(n)), \\ W_p^{r,-}(n) &= P(p,n) \tilde{A}_p^r(n) (1 - f_p^{f,r}(n)). \end{aligned} \quad (2)$$

$P(\rho, n) - n$  молекуласынын заряддуу абалында  $p$  деңгээлинин бош эместигинин ыктымалдуулугу,  $\tilde{A}_p^{l(r)}(n)$ -оң (сол) өткөөл аркылуу туннелдешүүнүн ыктымалдуулугу,  $f^{i(f),l(r)}(n)$  – температурасы  $T$  болгон оң (сол) электроддогу Ферми - Дирак  $f(E, T)$  бөлүштүрүү функциясынын мааниси.

$$f(E, T) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E}{k_A \bar{O}}\right)} \quad (3)$$

(3) формуласы энергиясы  $E$  болгон кванттык абалда болушунун ыктымалдуулугун көргөзөт. Оң (сол) өткөөл аркылуу туннелдешүүнүн мүмкүн болгон электрондордун энергиясы  $\varepsilon_p^{i(f),l(r)}(n)$  туннелдешүүнүн резонанстык шартынан аныкталат:

$$\begin{aligned} \varepsilon_p^{i,l}(n) &= E_p(n+1) + \eta eV_T - \varepsilon_F^l + \frac{\left(n - \frac{Q_G}{e} + \frac{1}{2}\right) e^2}{C_\Sigma}, \\ \varepsilon_p^{i,r}(n) &= E_p(n+1) - (1-\eta)eV_T - \varepsilon_F^r + \frac{\left(n - \frac{Q_G}{e} + \frac{1}{2}\right) e^2}{C_\Sigma}, \\ \varepsilon_p^{f,l}(n) &= E_p(n) + \eta eV_T - \varepsilon_F^l + \frac{\left(n - \frac{Q_G}{e} + \frac{1}{2}\right) e^2}{C_\Sigma}, \\ \varepsilon_p^{f,r}(n) &= E_p(n) - (1-\eta)eV_T - \varepsilon_F^r + \frac{\left(n - \frac{Q_G}{e} + \frac{1}{2}\right) e^2}{C_\Sigma}. \end{aligned} \quad (4)$$

Мында  $E_p(n)$  - бир жарым жартылай спектрдеги молекулалык объекттинин  $n$  заряддуу абалындагы  $p$  электроддук деңгээлинин энергиясы  $n$ ,  $\eta$  - оң (сол) электроддун энергиясы, молекулага тиркелген туннелдүү чыналуунун  $V_T, \varepsilon_p^{i(r)}$  бөлүштүрүү коэффициенти.

$C_\Sigma$ -системадагы суммалардын сыйымдуулугу,  $C_\Sigma = C_l + C_r + C_G$ ,  $Q_G - V_G (Q_G = C_G V_G)$  потенциалы менен башкарылуучу молекулалык аралчадагы индукцияланган заряд.

Ошондой эле молекуладагы электрондордун энергетикалык релаксация процесси эске алынышы керек. Мындай процесстин ылдамдыгы релаксация мүчөсү  $R(t)$  менен коюлат. Дүүлүккөн абалдан молекуланын жашоосунун убактысынын баасы  $\tau \sim 10^{-10} c$ . Маселени чыгаруудагы биздин моделде энергетикалык релаксацияны өтө жай чегине жакындатып колдонобуз. Ошондуктан биз колдонуп жаткан  $R(t)$  нөлгө барабар.

Ошентип, бүт туннелдик транспорттоо процесси эки түрлүү окуяны баяндап жазуудан турат. Мында молекула көндөйдүн борборуна жайгаштырылган деп эсептелет. Монте-Карлонун моделдөө ыкмасынын жардамы менен бардык керек болгон параметрлер мономолекулярдуу бир электрондуу транзистордун транспорттук мүнөздөмөсүнө эсептелинген. Система берилген абалдан, каалаган башка абалга өтүүдө, мурунку өтүүнүн тарыхынан көз каранды эместигинин ыктымалдуулугу, жакшы белгилүү болгон Монте-

Карлонун имтациялык моделдөөсүнүн марковтук жакындашуусуна негизделет. Бул учурда туннелдүү токту эсептөө ар түрлүү электрондук абалдарды биринин артынан бирин удаалаш кароого туура келет, андагы системанын болуу убактысын жана ташылган заряддардын суммасын эсептөөгө туура келет. Ошентип, системадагы толук туннелдүү  $I_T$  тогун төмөнкү формула менен эсептөөгө болот.

$$I_T = \frac{e}{2} \frac{n_l + n_r}{\sum_i \tau_i}, \quad (5)$$

Мында  $n_i$  - молекула сол өткөөл аркылуу кирген электрондордун суммардык саны,  $n_r$  - молекулага оң өткөөл аркылуу кирген электрондордун суммардык саны,

$\tau_i$  - молекуланын учурдагы абалынын жашоо убактысы.

1) Алюминий- химиялык таблицадагы 13-группадагы элемент, үчүнчү мезгилдеги, атомунун номери 13, Al( латынча Aluminium) белгиси менен белгиленет жеңил металл группасына кирет, алюминий жогорку жылуулук жана электр өткөрүмдүүлүккө ээ. Алюминийдин жылуулук өткөрүмдүүлүгү төмөнкүгө барабар (300 K) 237 Вт/(м·К) .



Сүр. 2. Алюминийдин сырткы көрүнүшү, күмүш- ак өңдүү металл.

2) Жез- химиялык таблицада төртүнчү мезгилдеги, атомунун номери 29, Cu( латынча Cuprum) белгиси менен белгиленет ийилчектүү этопластикалык металл группасына кирет, өңү алтын-кызгылт болот, ал жогорку жылуулук жана электр өткөрүмдүүлүккө ээ. Жездин жылуулук өткөрүмдүүлүгү төмөнкүгө барабар (300 K) 401 Вт/(м·К)



Сүр.4. Жездин тышкы көрүнүшү алтын-кызгылт түстөгү металл

### Бирэлектрондуу түзүлүштүн параметрлерин изилдөө

Кадимки бирэлектрондук транзистор үчүн электрондук туннелдик транспорттоодо молекуланын спектринин энергетикалык дискреттүүлүгүнүн таасирин эске албай койсо болот, себеби металлдык аралчадагы электрондордун энергетикалык деңгээлинин арасындагы мүнөздүү аралык клондук энергиясына караганда өтө кичине  $\Delta \ll E_C$  Мисалы: алюминий менен жездин сфералык нанобөлүкчөсүн энергетикалык масштабда кванттык өлчөмдүү эффектиде аныкталды, ал  $\Delta$  жана кулондук энергия  $E_C$  катышында аныкталат.

Аралыктын мүнөзүнүн арасындагы электрондук деңгээлдин энергетикалык спектри өткөргүчтө төмөндөгү формула менен аныктаса болот [4,5]:

$$\Delta = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m_e k_F V} \quad (6)$$

$V$  – бөлүкчөнүн көлөмү,  $m_e$  – электрондун массасы,  $k_F$  – Ферманын толкундуу вектору

(алюминий үчүн  $5,3 \cdot 10^8 \text{ нм}^{-1}$ , жез үчүн  $2,5 \cdot 10^8 \text{ нм}^{-1}$  барабар),  $V = \frac{4}{3} \pi R^3$ .

1) Алюминий үчүн:

$$\Delta = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m_e k_F V} = 3,7 \cdot 10^2$$

2) Жез үчүн:

$$\Delta = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m_e k_F V} = 10,9 \cdot 10^2$$

Вакуумдагы сфералык сыйымдуулук үчүн электростатикадагы классикалык формуланы колдонуу менен заряддын энергияга  $E_C$  мүнөздүү алабыз:

$$E_C = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 R} = \frac{E_H}{2R} \quad (7)$$

R-сферанын радиусу атомдук бирдикте,  $E_H$  энергиянын атомдук бирдиги, Хартри,  $E_H=27,212$  эВ. (6) жана (7) деген туюнтма деңгээлдердин арасындагы мүнөздүү аралык жана кулондук деңгээл энергетикалык спектрдеги түзүлүштүн өлчөмүнүн өзгөрүшү болуп эсептелет.

1)  $E_C = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 R} = \frac{E_H}{2R} = 0,95 \text{ эВ}$  алюминий үчүн,

2)  $E_C = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 R} = \frac{E_H}{2R} = 1,06 \text{ эВ}$  жез үчүн

элемент	$k_F, 10^8 \text{ нм}^{-1}$	$R, \text{ пм}$	$\Delta, 10^2 \text{ эВ}$	$E_C, \text{ эВ}$
Al (алюминий)	5,3	143	3,7	0,9
Cu (жез)	2,5	128	10,9	1,06

Ошентип энергетикалык деңгээлдердин орточо аралыгы кулондук энергиялар менен салыштырмалуу болуп калат. Комнаталык температурада ( $T=3000$  К) энергия  $E_C$  термикалык флуктуациянын энергиясынан алда канча чоң болот  $k_F T \approx 25$  мэВ. Молекуланын спектринин энергетикалык бир бөлүкчөсүнүн бирдей эместиги дискреттүүлүгү менен шартталган өзгөчөлүгү электрондуу транспорттоо чоң өлчөмдүү объектиде байкалат. Бир молекуланын энергетикалык спектри электрондук ядро менен өз ара аракеттешүүсүнүн эсебинен өзгөрөт ар кандай молекуланын орбитасынын арасындагы аралык түзүлөт.

**Жыйынтык:** Транзистордун арасындагы электрондук энергетикалык деңгээлдеринин орточо аралыгы чоңдуктардын ирети менен аралчанын кулондук энергиясына барабар.

$$\Delta \sim E_C \quad (8)$$

Электрондордун коррелировандык туннелдешүүсүнүн ортодо калуу теориясы электрондуу транспорттоодо эң негизги бирден бир шарты, электрондун энергетикалык спектринин үзгүлтүксүз жаза албайт.

### Колдонулган адабияттар

1. Абраимов И.И. Классификация приборных структур одноэлектроники/ И.И. Абраимов, Е.Г. Новик //Физика и техника полупроводников, 1999. Т. 33.- №11.-С.1388-1394.
2. Кузминь Л.С.Прямое наблюдение дискретного коррелированного одноэлектронного туннелирования /Л.С. Кузминь , К.К Лихарев // Письма в ЖЭТФ. 1987. Т. 45.- С.385.
3. Лихарев К.К. Одноэлектроника / К.К. Лихарев, Т. В. Класов //В мире науки, 1992.-Т.8.
4. Солдатов Е.С. Одноэлектронный транзистор на основе одиночной класстерно молекулы при комнатной температуре/ Е.С. Солдатов, В.В. Ханин и др. // Письма в ЖЭТФ. 1996. -Т. 64
5. Молекулярный одноэлектронный транзистор, работающий при комнатной температуре/ Е.С. Солдатов, В.В. Ханин, А.С. Трифионов и др. //УФН. 1998. Т. 168. -№ 2.- С. 217-219.

УДК 621.762

### ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКЦИОННОГО СПЕКАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ В АТМОСФЕРЕ АЗОТА

*Касмаматов Нурбек Кыдырмышевич, д.ф.-м.н., профессор кафедры физики и микроэлектроники КРСУ, Кыргызстан, 720000, Киевская 44, e-mail:nurkas@mail.ru.*

*Кайрыев Нурлан Жутанович, к.ф.-м.н, доцент кафедры физики и микроэлектроники КРСУ, Кыргызстан, 720000, Киевская 44, e-mail: n.kajryev@mail.ru*

*Сатаев Лесбек Орынгалиевич, аспирант кафедры физики Кыргызского Государственного Университета им. И.Арабаева, Кыргызстан,720026, Раззакова 51, e-mail: [Leke1974@mail.ru](mailto:Leke1974@mail.ru)*

В статье разработана двухмерная нестационарная физико-математическая модель, позволяющая рассчитать пространственно-временные зависимости эволюции нагрева в процессе реакционного спекания кристаллических порошков кремния в газовой среде азота.

**Ключевые слова:** двумерная модель, реакционное спекание, нитрид кремния, дифференциальные уравнения, краевые и начальные условия, эффективные коэффициенты.

### TWO DIMENSIONAL TRANSIENT MODEL OF REACTING SILICON SINTERING IN THE NITROGEN ATMOSPHERE

*Kasmamytov Nurbek Kydyrmyshevich, D.Sc., professor of Physics and Microelectronics department KRSU, Kyrgyzstan, 720000, Kievskaya, 44, e-mail: nurkas@mail.ru*

*Kajryyev Nurlan Zhutanovich, Cand., assistant professor of Physics and Microelectronics department KRSU, Kyrgyzstan, 720000, Kievskaya, 44, e-mail: n.kajryev@mail.ru*

*Sataev Lesbek Oryngalievich, grad student of Physics department in Kyrgyz State University, Kyrgyzstan, 720026, Razzakova, 51, e-mail: leke1974@mail.ru*

Two dimensional transient physical and mathematical model that allows us to calculate the spatial-temporal evolution dependence in the process of heating the reacting crystalline silicon powder sintering in nitrogen gases was developed in the article.

**Keywords:** two dimensional model, reacting sintering, silicon heating, differential equations, boundary and initial conditions, effective coefficients.