

УДК 535.4+681.7

В. В. Румянцев, С. А. Федоров, А. Е. Рыбалка  
Федеральное государственное бюджетное научное учреждение  
«Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина», г. Донецк  
283114, г. Донецк, ул. Р. Люксембург, 72

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ

V. V. Rumyantsev, S. A. Fedorov, A. Ye. Rybalka  
Federal State Budgetary Scientific Institution  
«A. A. Galkin Donetsk Institute for Physics and Engineering»  
283114, c. Donetsk, R. Luxembourg str., 72

## MODELING OF THE PHYSICAL OBJECTS

В. В. Румянцев, С. А. Федоров, А. Е. Рыбалка  
Федеральна державна бюджетна наукова установа  
«Донецький фізико-технічний інститут ім. О. О. Галкіна»  
283114, м. Донецьк, вул. Р. Люксембург, 72

## МОДЕЛЮВАННЯ ФІЗИЧНИХ ОБ'ЄКТІВ

В общих чертах освещаются особенности моделирования физических объектов, в частности, наноструктурных. Рассмотрены: дисперсия поляритонных возбуждений в одномерном массиве нанопор, содержащих квантовые точки, и компьютерный «эксперимент», в рамках которого показано, что величина запрещенной зоны нанопленки зависит от ее толщины.

**Ключевые слова:** наноструктуры, квантово-размерный эффект, поляритонные возбуждения, квантовые точки, запрещенная энергетическая зона.

In general, the features of modeling physical objects, in particular, nanostructured ones, are highlighted. Considered: the dispersion of polariton excitations in a one-dimensional array of nanopores containing quantum dots, and a computer "experiment" in which it is shown that the magnitude of the band gap of a nanofilm depends on its thickness.

**Key words:** nanostructures, quantum-dimensional effect, polariton excitations, quantum dots, forbidden energy zone

У загальних рисах висвітлюються особливості моделювання фізичних об'єктів, зокрема, наноструктурних. Розглянути: дисперсія поляритонних збуджень в одновимірному масиві нанопор, що містять квантові точки, і комп'ютерний "експеримент" в рамках якого показано, що величина забороненої зони наноплівки залежить від її товщини.

**Ключові слова:** наноструктури, квантово-розмірний ефект, поляритонні збудження, квантові точки, заборонена енергетична зона

## Введение

В последнее время все чаще поднимается вопрос проектного развития общества. Решение этой проблемы тесно связано с необходимостью моделирования состояний внешней среды, с которой субъект (отдельный человек или общество в целом) связан мириадами связей – каналов информации, в виде образов, символов, с формулированием определенных правил и законов. Причем любая новая модель должна базироваться на разработанной прежде концептуальной модели (с учетом наличия взаимосвязи элементов в моделируемой структуре), и открывать перспективы ее дальнейшего развития (*модель управляющих воздействий*).

Сегодня особую актуальность приобретает рассмотрение вариантов взаимодействия «естественного» (человеческого) интеллекта со сложной модельной системой (киберструктурой) – искусственным интеллектом.

При моделировании современного социально-экономического развития необходимо учесть наиболее характерную его черту – *превращение науки в производительную силу общества*. Поэтому, прежде всего, кратко рассмотрим вопрос использования *моделирования в научных исследованиях*.

Часто первым шагом к изучению того или иного явления или процесса служит *наблюдение*, то есть, исследование предметов объективной реальности в том виде, в каком они существуют в природе, обществе, мышлении, познании и являются доступными восприятию человека. В отличие от обычного восприятия, научное наблюдение является целевым, ведется систематически и решает определенную задачу.

Одним из основных способов познания действительности является *эксперимент* – целенаправленное изучение явления в спланированных и точно учитываемых условиях, когда можно проследить за ходом его изменения, активно воздействовать на него с помощью комплекса приборов и средств, воспроизвести его многократно при тех же условиях (если в этом есть необходимость). В отличие от пассивного наблюдения, эксперимент – активное воздействие на изучаемый объект. Поэтому эксперимент играет большую роль не только в научных исследованиях, но и в практической (и в производственной) деятельности.

Результаты эксперимента изучаются, раскрываются отдельные закономерности исследуемого явления. После логического осмысления полученные *факты* с помощью простейших абстракций — *понятий* (которые являются важными структурными элементами науки) в систематизированном и обобщенном виде становятся составной частью научных знаний. Наиболее общие абстракции называют *категориями*. Важной формой структурирования знаний являются *принципы (постулаты), аксиомы*. Под принципом понимают исходные положения какой-либо отрасли наук (например, аксиомы евклидовой геометрии, постулаты Бора в физике и т. п.). Наиболее существенные, устойчивые, повторяющиеся объективные внутренние связи в природе, обществе, мышлении и познании отображаются в *научных законах*, которые представляют собой определенные соотношения понятий, категорий. Высшей степенью обобщения и систематизации знания является *теория* – совокупность научных сведений, подходов и методов, которая позволяет обобщить и познать существующие процессы и явления, проанализировать действие на них разных факторов, предложить рекомендации по использованию получаемых знаний в практической деятельности людей.

В процессе познавательной и практической деятельности исследователь из *образов* (изучаемых объектов, явлений, ситуаций и связей между ними), а также из *правил оперирования* этими образами строит *модели*. Для изучаемого круга явлений, свойств и связей во внимание принимаются только существенные. Причем создание модели базируется на соответствующей *гипотезе* – предположении, требующем проверки и доказывания причины, структуры исследуемых объектов, характера внутренних и внешних связей структурных элементов и т.п.

Каждая наука имеет собственную модель реальности, которая с ее точки зрения наиболее полно отражает свойства окружающего мира. Например, физика строит как общую модель физической реальности, так и частные модели в конкретных исследуемых случаях (здесь все тела, явления, процессы суть физические). Ниже рассмотрим подробнее примеры моделирования в физике.

## Модель физической реальности

Один и тот же объект в рамках физики (физический объект) в различных ситуациях может быть представлен различными моделями с помощью некоторого набора соответствующих понятий. На основе физических представлений строится *математическая модель* – количественное описание объекта, явления, процесса, которое представляет собой некоторую совокупность математических уравнений, аналитических соотношений, таблиц, графиков и т. п.

Дальнейшие исследования (наблюдения и эксперименты) позволяют проверить и уточнить полученную модель или построить новую модель. Таким образом, решение проблемы *схематически* можно представить так:

- 1) от совокупности известных фактов, результатов наблюдений и экспериментов (в том числе мысленных),
- 2) их теоретического обобщения и физической модели
- 3) к математической модели изучаемого явления – описанию физической модели с помощью математического аппарата
- 4) с дальнейшим анализом и обобщением результатов.

На основе 1) - 4) строятся модели реальности (например, физической, если модели – физические). Заметим, что языком физики является математика, она не подменяет собой физических проблем, но переводит их в сферу чисел. Эти числа получают в результате измерений. Свойства, качества и т.п., которыми оперирует физика, называют физическими величинами. *Методы получения физических величин:*

- 1) операционный (указывается физический объект, свойства которого приняты за единичные, и определяется процедура измерения, с помощью которой сравниваются свойства измеряемого объекта и единичного),
- 2) с помощью математических формул.

Итак, в начале любого процесса познания – установление *различия* между объектами физической реальности, *сравнение*. Процедура соотнесения физическим свойствам некоторых чисел таким образом, чтобы сравнение свойств можно было провести путем сравнения чисел, называют *измерением*. Измерение – сложный процесс взаимодействия измеряемого объекта, измерительного прибора и исследователя. Все факторы этого взаимодействия учесть невозможно. Более того, фраза «все факторы» лишена смысла, т.к. набор свойств и оттенков, характеризующих то или иное тело, бесконечен. Знание об объекте, на основе которого строится модель, представляет собой конечный ряд величин (определяемый уровнем познания). Повторяя процесс

измерения несколько раз, получают отличающиеся друг от друга наборы чисел. В таком случае принято говорить, что измерение проведено с некоторой *погрешностью (ошибкой)* или с некоторой степенью точности. Неверно, однако, полагать, что возможно «абсолютно точное» измерение (без погрешности) – это, в частности, следует из существования максимального предела точности для одновременного знания о нескольких переменных (например, о координате и импульсе материальной точки), определяемого принципом неопределенности Гейзенберга.

## Особенности моделирования нанобъектов

Характеристики, отражающие свойства макроскопических твердотельных образцов (плотность, модуль Юнга, электрическое сопротивление, намагниченность и т.п.), представляют собой *результат усреднения соответствующих измеряемых величин*. Если измерения проводятся в микронном или нанометровом диапазоне, механические, электрические, оптические параметры свойств образцов существенно изменяются [1-5], наноструктурированные материалы проявляют необычные характеристики и «новые» свойства. При этом отметим, что основные физические и химические свойства материалов определяются соответствующими характеристическими или критическими длинами, большинство из которых лежит в нанометровом диапазоне. Например, электросопротивление объемного образца, которое возникает в результате рассеяния электронов проводимости на колебаниях атомов или примеси и характеризуется длиной свободного пробега электрона, отличается от его значения для нанобразца. Другим важным примером такого поведения являются частицы полупроводника с размерами порядка квантовой длины волны электрона или дырки в зоне проводимости – *квантовые точки* [6], лежащие в основе технологий создания лазеров на квантовых точках (они используются сегодня для чтения компакт-дисков). *Квантовые точки имеют нанометровые масштабы по всем трем измерениям*. Электронная структура твердотельного образца сильно зависит от числа измерений, по которым он имеет нанометровые масштабы. Если размеры трехмерной наноструктуры имеют *нанометровый порядок только в одном измерении, такая структура называется квантовой ямой*. Образцы, имеющие *нанометровые размеры в двух измерениях называются нанопроволоками*.

*Зависимость электронных свойств от размера объекта приводит к существенному отличию оптических характеристик нанобразцов от соответствующих параметров макротел, сказывается и на колебательных свойствах.*

Другая *существенная особенность*, которую надо учитывать при исследовании нанобъектов, состоит во *влиянии поверхности наноструктуры*. Например, у кремниевого стержня длиной 100 нм и толщиной 10 нм почти 10% атомов находится в приповерхностном слое. Такое количество приповерхностных атомов существенно влияет на механические свойства (прочность, упругость и т.п.).

## Эффект размерного квантования

При математическом моделировании вышеприведенных нанобъектов важно учесть наличие объединяющего их качества – *квантово-размерного эффекта*. Этот эффект отражает изменение термодинамических и кинетических свойств кристалла, проявляющееся в случае, если хотя бы один из его геометрических размеров становится соизмеримым с длиной волны де Бройля. Он связан с дискретизацией (квантованием) энергии носителей заряда, движение которых ограничено потенциальными

барьерами в одном, двух или трёх направлениях из-за нанометрового масштаба объекта в соответствующем измерении. В общем случае носители заряда имеют также дискретный спектр в любом ограниченном потенциальными стенками объёме, но из-за декогеренции, приводящей к уширению уровней, энергетический спектр выглядит, как непрерывный. Практически дискретизацию уровней энергии носителей заряда (квантово-размерный эффект) можно наблюдать лишь при достаточно малом в некотором направлении размере тела. Уширение этих уровней энергии за счет рассеяния не должно превышать расстояния между уровнями. Размеры области ограниченного движения должны быть много меньше длины свободного пробега. Необходимы малые размеры структур, низкая температура, высокая подвижность носителей заряда. Этого можно добиться при слабом рассеянии и достаточно низкой концентрации этих носителей, которая должна быть такой, чтобы при низких температурах уровень Ферми вырожденного газа носителей заряда был невелик.

## Компьютерный «эксперимент» в рамках теории функционала плотности

В настоящее время ключевым диэлектриком в кремниевых приборах является оксид кремния [7], [8], поэтому чрезвычайно интересным является изучение электронных свойств нанокристалла диоксида кремния в зависимости от размерных особенностей этого объекта. Авторы работы [9] показали, что величина запрещенной зоны  $E_G$  зависит от длины связи Si-O и угла связи Si-O-Si без учета количества связей. Причем корреляция рассчитанных значений  $E_G$  согласуется с ее экспериментальными значениями [10], [11]. Однако, зависимость параметров электронной структуры оксидов, образующих изолирующий слой, от размерности кристалла не исследована. Решение этой проблемы представлено в работе [11].

Авторы [11] провели компьютерный «эксперимент» - в рамках теории функционала плотности методом проекционных присоединенных волн были получены результаты неэмпирических расчётов электронной структуры квазидвумерного кристалла диоксида кремния. Результаты неэмпирических расчетов существенно уточнялись в GW-приближении. Рассматривались нанопленки диоксида кремния толщиной от 0.35 нм до 1.76 нм. Показано, что параметры электронной структуры качественно зависят от толщины двумерного SiO<sub>2</sub>. В частности, величина запрещенной зоны  $E_G$  существенно зависит от толщины и демонстрирует различные типы поведения. Так же показано, что нарушение правила Мота, происходящее при определенном соотношении числа атомов кремния и кислорода, приводит к качественным изменениям электронных свойств двумерного кристалла.

## Дисперсия поляритонных возбуждений в одномерном массиве нанопор, содержащих квантовые точки

Среди задач, которые приходится решать при создании новых нанокomпозитных материалов, как источников когерентного излучения, и устройств, работающих на их основе, встает проблема изучения особых структур – поляритонных кристаллов [12]. Последние представляют собой отдельный класс фотонных кристаллов [13], в которых реализуется сильная связь квантовых возмущений (экситонов) среды и оптического поля. Необходимость исследования поляритонных структур поро-

ждает новую область науки – поляритонику, как самостоятельный раздел фотоники. В качестве поляритонных структур рассматриваются как пространственно периодические системы связанных микропор (резонаторов) [14], [15], так и массивы квантовых точек, встроенных в фотонные наноструктуры [16], [17]. Значительно вырос в последнее время интерес к изучению оптических мод в комбинированной системе микрорезонаторов, содержащих квантовые точки.

Рассмотрим в качестве следующего примера наноразмерного эффекта дисперсию поляритонных возбуждений в одномерном неидеальном двухподрешеточном массиве туннельно связанных наноразмерных пор (резонаторов), содержащих в одной из подрешеток (например, в первой) атомарные нанокластеры – квантовые точки. Причем неидеальность исследуемой системы обусловлена вариацией положений пор. Концентрация этих структурных дефектов в данном случае  $C_1$  и  $C_2$ .

Поляритонный спектр  $\Omega(\vec{k})$  для такой системы получаем в рамках теоретической модели [18]. В соответствии с [18] в результате диагонализации усредненного гамильтониана системы и использования приближения виртуального кристалла получаем в приближении ближайших соседей систему линейных однородных уравнений, условием разрешимости которой является равенство нулю детерминанта:

$$\begin{vmatrix} \hbar\omega_1^{at} - V_{11}(k) - \hbar\Omega & g_1 & 0 \\ g_1 & \hbar\omega_1^{ph} - \hbar\Omega(k) & -A_{12}(k) \\ 0 & -A_{21}(k) & \hbar\omega_2^{ph} - \hbar\Omega(k) \end{vmatrix} = 0 \quad (1)$$

Здесь,  $A_{12(21)}$  - Фурье-образ матрицы  $A_{n_1m_2}$ , характеризующей перекрытие оптических полей резонаторов  $\vec{n}1$ -го и  $\vec{m}2$ -го узлов решетки и, следовательно, определяющей вероятность туннельного перехода соответствующего электромагнитного возбуждения,  $V_{11}$  –Фурье-образ матрицы  $V_{\vec{n}1\vec{m}1}$  резонансного взаимодействия квантовых точек в узлах  $\vec{n}1$  и  $\vec{m}1$ ,  $g_1$  – параметр резонансного взаимодействия квантовой точки в узле  $\vec{n}\alpha$  с локализованным в этом узле электромагнитным полем.

Нахождение корней кубического уравнения относительно частоты  $\Omega$ , возникающего при раскрытии детерминанта (1) проведено с использованием программы из библиотеки Matlab fzero.m, в основе которой лежит итерационный алгоритм Ньютона. Причем при численном моделировании соответствующих параметров, определяющих особенности спектра квазичастичных возбуждений  $\Omega(\vec{k})$ , взяты те же значения величин, что и в работе [18].

Поскольку квантовые точки по составу не варьируются, параметр  $g_1$  резонансного взаимодействия квантовой точки в любом узле с локализованным в этом узле электромагнитным полем один и тот же.

На рис.1 представлены поверхности, описывающие дисперсионную зависимость частот  $\Omega_{1,2,3}(k, C_1, C_2)$  исследуемых коллективных возбуждений (поляритонов) в исследуемой 1D решетке микрорезонаторов, содержащих квантовые точки (нумерация поверхностей – снизу вверх). Волновое число  $k$  изменяется в пределах первой зоны Бриллюэна:  $-\frac{\pi}{d(C_1, C_2)} < k < \frac{\pi}{d(C_1, C_2)}$  (затемненная область плоскости  $(k, C_{1(2)})$  на рис. 1).

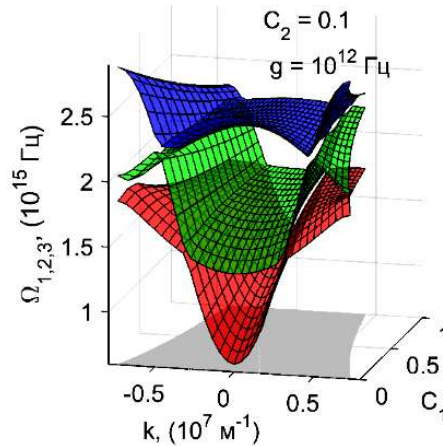


Рисунок - 1 Зависимость дисперсии поляритонов  $\Omega_{1,2,3}(k, C_1, C_2)$  от концентрации дефектов структуры при значении параметра  $g \equiv g_1/\hbar$  резонансного взаимодействия квантовой точки в узле с локализованным в этом узле электромагнитным полем, [18].

Особенности формы дисперсионной поверхности  $\Omega_3(k, C_1, C_2)$  на рис.1 свидетельствуют о возможности существования при определенных концентрациях дефектов структуры бозе-эйнштейновского поляритонного конденсата, благодаря наличию у дисперсионных поверхностей  $\Omega_3(k, C_1, C_2)$  локального минимума при значениях  $k \neq 0$  (дополнительно к обнаруженному поляритонному конденсату при  $k = 0$ ).

## Заключение

Одним из важных элементов пакета современных технологий являются нанотехнологии. Это такие, используемые в производственных процессах, технологии, которые позволяют создавать материалы, устройства и технические системы, функционирование которых определяется наноструктурой (см., например, [19]). Нанотехнологии открывают возможность контролируемого манипулирования отдельными атомами и молекулами с целью создания нанометровых объектов и наноструктурированных материалов, представляющих интерес для технологических применений, а также их диагностики. Заметим, что нанотехнологии качественно отличаются от традиционных технологий, поскольку на наномасштабах привычные макроскопические технологии обращения с материей часто неприменимы, а микроскопические явления (взаимодействие отдельных атомов, молекул и их агрегатов), пренебрежимо слабые на привычных масштабах, становятся намного значительнее. Поэтому адекватное описание свойств нанообъектов требует учета квантово-размерного эффекта. Эта особенность моделирования физических процессов в нанообъектах отражена в данной работе: в представленном компьютерном «эксперименте» и исследовании дисперсии поляритонных возбуждений в цепочке микропор, содержащих квантовые точки.

В отличие от традиционных технологий, нанотехнологии характеризуются повышенной наукоемкостью и затратностью, а также междисциплинарностью научных оснований – самая очевидная связь их прослеживается с физикой, химией, биологией. В частности, в современной медицине родилось направление, основанное на использовании уникальных свойств наноматериалов и нанообъектов для отслеживания, конструирования и изменения биологических систем человека на молекулярном уровне.

Использование в нанотехнологиях передовых научных достижений позволяют относить их к высоким технологиям.

Развитие нанонауки и нанотехнологий в XXI веке не сводится лишь к получению новых научных результатов. Оно все более и более будет оказывать влияние на социально-экономические параметры современной цивилизации и, в конечном счете, может стать основой формирования новой фазы человеческого развития. Этот факт превращения науки в важнейшую производительную силу общества необходимо учитывать при создании соответствующей модели общественного развития.

## Список литературы

1. Лифшиц И. М. Об осцилляциях термодинамических величин для вырожденного ферми-газа при низких температурах [Текст] / И. М. Лифшиц, А. М. Косевич // Изв. АН СССР. Сер. физ. — 1955. — № 19. — С. 395.
2. Сандомирский В. Б. К теории квантовых эффектов в электропроводности полупроводниковых пленок [Текст] / В. Б. Сандомирский // Радиотехника и электроника. — 1962. — № 7. — С. 1971.
3. Огрин Ю. Ф. О наблюдении квантовых размерных эффектов в пленках  $Bi$  [Текст] / Ю. Ф. Огрин, В. Н. Луцкий, М. И. Елинсон // Письма в ЖЭТФ. — 1966. — № 3. — С. 114-118.
4. Тавгер Б. А. Квантовые размерные эффекты в полупроводниковых и полуметаллических пленках [Текст] / Б. А. Тавгер, В. Я. Демиховский // УФН. — 1968. — Т. 96. — С. 61
5. Комник Ю. Ф. Наблюдение квантового и классического размерных эффектов в поликристаллических тонких пленках висмута [Текст] / Ю. Ф. Комник, Е.И. Бухштаб // ЖЭТФ. — 1968. — Т. 54. — С. 63-68.
6. Румянцев В.В. наночастицы: синтез, свойства, применение. Учебное пособие [Текст] / Румянцев В.В., Петренко А.Г., Паладян Ю.А. - Донецк: ДонНУ, 2022. 94с
7. Перевалов Т. В. Применение и электронная структура диэлектриков с высокой диэлектрической проницаемостью [Текст] / Т. В. Перевалов, В. А. Гриценко // УФН — 2010. — Т.180, N 6. — С. 587-603.
8. Векслер М. И. Повышение эффективности кремниевого туннельного МДП-инжектора горячих электронов при использовании оксидов с большой диэлектрической проницаемостью [Текст] / Векслер М. И. // Письма в ЖТФ — 2015. — V.41, N17. — С.103-110
9. Li Y. P. Band structures of all polycrystalline forms of silicon dioxide [Текст] / Y. P. Li and W. Y. Ching // Phys. Rev. - В 31, 2172 (1985).
10. Proceedings of the Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices SISPAD, Boston, USA, Sept. 3–5, 2003 [Текст] / B. Govoreanu, P. Blomme, K. Henson, J. van Houdt, and K. de Meyer // IEEE, Computer Society Press. - 2003, 287p
11. Хачатурова Т. А. Электронная структура и свойства двумерного диоксида кремния [Текст] / Т. А. Хачатурова, В. Г. Бутько, А. А. Гусев // Письма в ЖЭТФ. - 2022. - Т. 115, вып.1. - С. 47-50.
12. Sedov E.S., Alodjants A.P, Arakelian S.M., et al., Phys. Rev. A. [Текст] / 89 (2014) 033828.
13. Photonic Crystals. Molding the Flow of Light [Текст] / Joannopoulos J.D., Johnso S.G., Winn J.N., Meade R.D. / Second Edition. Princeton: Princeton University Press, 2008.
14. Kaliteevskii M. A. Tech. Phys. Lett. [Текст] / Kaliteevskii M. A. - 23(2) (1997) 120.
15. Vahala K.J. Nature [Текст] / Vahala K.J. - 424 (2003) 839-846.
16. Shiqi Xia, Ajith Ramachandran, Shiqiang Xia et al. Phys Rev Lett. [Текст] / 121 (2018) 263902.
17. Tighineanu P., Sørensen A. S., Stobbe S., and Lodahl P., The Mesoscopic Nature of Quantum Dots in Photon Emission, in: P. Michler (Ed.) [Текст] / *Quantum Dots for Quantum Information Technologies. Nano-Optics and Nanophotonics* [Текст] / Cham: Springer, 2017.
18. Features of light-matter coupling in non-ideal lattice of coupled microcavities containing quantum dots [Текст] / Rumyantsev V.V., Fedorov S.A., Gumennyk K.V, Rybalka A.E. // Condensed Matter. - 2023, - V.8(2). - P. 41
19. Алферов Ж.И. Наноматериалы и нанотехнологии [Текст] / Ж.И. Алферов, А.Л. Асеев, С.В. Гапонов, П.С. Копьев, Р.А. Сулис // Микросистемная техника. — 2003. — № 8. — С. 3-13.
20. Румянцев В. В. Моделирование генерации экситонных поляритонов в алмазоподобных полупроводниках полем движущейся  $b$ -частицы [Текст] / В. В. Румянцев // Проблемы искусственного интеллекта. — 2019. — № 1 (12). — С. 27–40.



21. Галинский М. К. Математическое моделирование структуры электромагнитного пространственно-временного волнового пакета [Текст] / М. К. Галинский, В. В. Румянцев, С. А. Федоров // Проблемы искусственного интеллекта. – 2021. – № 1 (20). – С. 37–43.
22. Румянцев В. В. Введение в поляритонику [Текст] / В. В. Румянцев, С.А. Федоров // Проблемы искусственного интеллекта. – 2022. – № 2 (25). – С. 29–40.

## References

1. M. Lifshitz and A.M. Kosevich. About oscillation of thermodynamic quantities for degenerated Fermi gas at low temperatures. *Izv. AN SSSR, Ser. Fiz.* 19 (1955) 395.
2. V.B. Sandomirsky On the theory of quantum-size effects in electrical conductivity of semiconductor films. *Radiotech. Electron. (Moscow)* 7 (1962) 1971-1972.
3. Ogrin, Yu F., V. N. Lutskii, and M. I. Elinson. Observation of quantum size effects in thin bismuth films. *ZhETF Pisma Redaktsiiu* 3 (1966) 114.
4. B.A. Tavger, , and V.Y. Demikhovskii. Quantum size effects in semiconducting and semimetallic films. *Uspekhi Fizicheskikh Nauk* 96.1 (1968) 61-86.
5. Yu F. Komnik, E.I. Bukhshtab. Observation of the quantum and classical size effects in polycrystalline thin bismuth films. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics* 27 (1968) 34.
6. V.V. Rummyantsev, A.G. Petrenko, Yu.A. Paladyan. Quantum nanoparticles: synthesis, properties, applications. Teaching guide. Donetsk National University, Donetsk, 2022. 94p.
7. T.V. Perevalov, V.A. Gritsenko. Application and electronic structure of high-permittivity dielectrics *Phys. Usp.* 53 (2010) 561–575.
8. M.I. Veksler. Increasing the effectiveness of a silicon tunnel MOS-injector of hot electrons using oxides with high dielectric permeability. *Technical Physics Letters*. 41 #17 (2015)103-110..
9. Y. P. Li and W. Y. Ching, Band structures of all polycrystalline forms of silicon dioxide //Phys. Rev. B 31, 2172 (1985).
10. B. Govoreanu, P. Blomme, K. Henson, J. van Houdt, and K. de Meyer, in Proceedings of the Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices SISPAD, Boston, USA, Sept. 3–5, 2003, IEEE, Computer Society Press, 2003, 287p.
11. T. A. Khachaturova, V.G. But'ko, A.A. Gusev. Electronic structure and properties of two-dimensional silicon dioxide. *JETP Lett.* 115 (2022) 41–44.
12. Sedov E.S., Alodjants A.P, Arakelian S.M., et al., Phys. Rev. A. 89 (2014) 033828.
13. Joannopoulos J.D., Johnso S.G., Winn J.N., Meade R.D. Photonic Crystals. Molding the Flow of Light / Second Edition. Princeton: Princeton University Press, 2008.
14. Kaliteevskii M. A. Tech. Phys. Lett., 23(2) (1997) 120.
15. Vahala K.J. Nature, 424 (2003) 839-846.
16. Shiqi Xia, Ajith Ramachandran, Shiqiang Xia et al. Phys Rev Lett. 121 (2018) 263902.
17. Tighineanu P., Sørensen A. S., Stobbe S., and Lodahl P., The Mesoscopic Nature of Quantum Dots in Photon Emission, in: P. Michler (Ed.), *Quantum Dots for Quantum Information Technologies*. Nano-Optics and Nanophotonics, Cham: Springer, 2017.
18. Rummyantsev V.V., Fedorov S.A., Gumennyk K.V, Rybalka A.E. Features of light-matter coupling in non-ideal lattice of coupled microcavities containing quantum dots // Condensed Matter. - 2023, - V.8(2). - P. 41
19. Zh.I. Alferov, A.L. Aseev, S.V. Gaponov, P.S. Kopjev, V.I. Panov, E.A. Poltoratsky, N.N. Sibeljdin, R.A. Suris, Алферов Ж.И. Nanomaterials and nanotechnologies. *Nano- and microsystems technology* # 8 (2003) 3-13.
20. Rummyantsev V. V. Modelirovaniye generatsii eksitonnykh polyaritonov v almazopodobnykh poluprovodnikakh polem dvizhushcheyasya b-chastitsy [Simulation of exciton polariton generation in diamond-like semiconductors by the field of a moving b-particle]. *Problemy iskusstvennogo intellekta* [Problems of artificial intelligence]. 2019, No 1 (12), P. 27-40.
21. Galinsky M. K., Rummyantsev V. V., Fedorov S. A. Mathematical Modeling of the Structure of an Electromagnetic Space-Time Wave Packet Problems of Artificial Intelligence [Problemy iskusstvennogo intellekta], 2021, no. 1(20), pp. 37-43.
22. Rummyantsev V. V., Fedorov S. A Introduction to Polaritonics [Vvedeniye v polyaritoniku]. Problems of artificial intelligence [Problemy iskusstvennogo intellekta]. 2022 № 2 (25), P. 29-40.

## RESUME

*V. V. Rumyantsev, S. A. Fedorov, A. Ye. Rybalka*  
**Modeling of the Physical Objects**

The review presented by the authors is based on the previously obtained results of the use of modeling options for various objects in scientific research, in particular, physical.

Review of literature sources, numerical modeling

A review of the use of modeling in scientific research is carried out. As an example, we consider: the dispersion of polariton excitations in a one-dimensional array of nanopores containing quantum dots, and a computer "experiment" in which it is shown that the magnitude of the band gap of a nanofilm depends on its thickness.

This paper presents an overview of the features of modeling various objects. In particular, physical - nanostructural. Both general, related to scientific and practical modeling, questions and particular – modeling of physical objects are considered.

Today, science is turning into a productive force of society, therefore, the problem of modeling in scientific research has acquired special relevance. This fact of the transformation of science into the most important productive force of society must be taken into account when creating an appropriate model of social development.

## РЕЗЮМЕ

*В. В. Румянцев, С. А. Федоров, А. Е. Рыбалка*  
**Моделирование физических объектов**

Представленный авторами обзор опирается на ранее полученные результаты использования вариантов моделирования различных объектов в научных исследованиях, в частности, физических.

Материалы и методы: обзор литературных источников, численное моделирование.

Выполнен обзор использования моделирования в научных исследованиях. В качестве примера рассмотрены: дисперсия поляритонных возбуждений в одномерном массиве нанопор, содержащих квантовые точки, и компьютерный «эксперимент», в рамках которого показано, что величина запрещенной зоны нанопленки зависит от ее толщины.

В работе представлен обзор особенностей моделирования различных объектов. В частности, физических - наноструктурных. Рассмотрены как общие, связанные с научными исследованиями, вопросы моделирования, так и частные – моделирование физических объектов.

Сегодня наука превращается в производительную силу общества, поэтому проблема моделирования в научных исследованиях приобрела особую актуальность. Этот факт превращения науки в важнейшую производительную силу общества необходимо учитывать при создании соответствующей модели общественного развития.

Статья поступила в редакцию 30.01.2023