

Analiza konfajnment efekata na fundamentalne karakteristike fononskih nanofilmova razvijenim softverskim paketom JoigS

Jovan P. Šetrajčić^{1,2)}, Siniša M. Vučenović³⁾, Igor J. Šetrajčić¹⁾,
Matilda Vojnović⁴⁾, Ana J. Šetrajčić–Tomić⁴⁾, Nikola R. Vojnović⁵⁾

¹⁾ Akademija nauka i umjetnosti Republike Srpske, Banja Luka, Republika Srpska – BiH,
jovan.setrajcic@gmail.com, seki_1976@yahoo.com;

²⁾ Univerzitet Union – Nikola Tesla, Fakultet za sport, Novi Beograd, Vojvodina – Srbija,
jovan.setrajcic@gmail.com;

³⁾ Univerzitet u Banjoj Luci, Prirodno-matematički fakultet, Banja Luka, Republika Srpska – BiH,
vucenovic.s@gmail.com;

⁴⁾ Univerzitet u Novom Sadu, Medicinski fakultet, Novi Sad, Vojvodina – Srbija,
matilda.vojnovic@mf.uns.ac.rs, setrajcic.a@gmail.com,

⁵⁾ Univerzitet u Novom Sadu, Fakultet tehničkih nauka, Novi Sad, Vojvodina – Srbija
nikola.vojnovic@ftn.uns.ac.rs

Sažetak – JoigS je računski paket za proračun i prikaz svojstava fononskog sistema. Zasniva se na teoriji perturbacija u fizici čvrstog stanja koja koristi Green-ove funkcije i metodologiju diferenčnog računa. Mora se koristiti unutar Wolfram-Mathematica i uz podršku adekvatnog softvera za grafičko uređivanje. Paket je lako upotrebljiv za određivanje osnovnih (mikro) svojstava fonona, ali sa mogućnošću proširenja na proračun termodinamičkih (makro) svojstava širokog spektra materijala dimenzija od masivnih (balki) do nanoskopskih struktura. Ovde smo predstavili proračun i grafičko predstavljanje energetskih spektara i prostorne raspodele stanja fonona u ultratankim kristalnim filmovima sa različitim graničnim uslovima.

Ključne reči – računarski paket, fononi, spektri i stanja, ultratanak film, konfajnment efekti (computer package, phonons, spectra and states, ultra-thin film, confinement effects)

I. UVOD

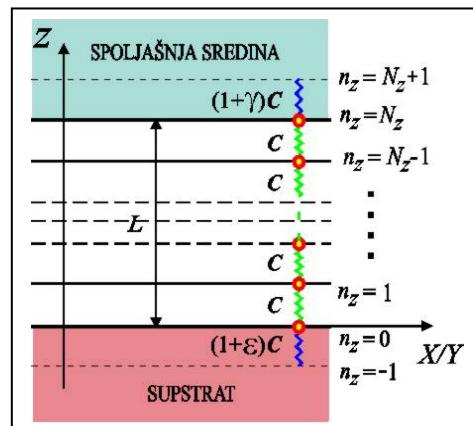
A. Fononi u kristalnim filmovima

Tanki kristalni filmovi predstavljaju ograničene kristalne strukture [1,2] kod kojih je translaciona simetrija narušena duž pravca normalnog na film (z -pravac, sl.1) i gde se uslovi na granicama razlikuju od onih u unutrašnjosti. U ovom radu posmatraćemo modelni ultratanki film proste kubne kristalne strukture, čiji su osnovni kristalografski parametri [3,4]:

$$a_x = a_y = a_z \equiv a; N_x = N_y \sim 10^8; N_z \sim 10;$$

$$\begin{aligned} C_{\vec{n}, \vec{m}}^{\alpha, \beta} &= C_{\vec{n}, \vec{m}}^{\alpha, \alpha} = C_{\vec{n}, \vec{n} \pm \vec{\lambda}}^{\alpha} \equiv C_{n_x, n_y, n_z; n_x \pm 1, n_y, n_z}^{\alpha} = C_{n_x, n_y, n_z; n_x, n_y \pm 1, n_z}^{\alpha} = \\ &= C_{n_x, n_y, n_z; n_x, n_y, n_z \pm 1}^{\alpha} \equiv C^{\alpha} \equiv C; \quad \varepsilon, \gamma \in [-1, 0; +1, 5]; \\ C_{N_z, N_z+1} &= C_{N_z+1, N_z} = (1+\gamma)C; \quad C_{-1, 0} = C_{0, -1} = (1+\varepsilon)C, \end{aligned}$$

gde je a konstanta kristalne rešetke, $N_{x/y/z}$ su brojevi atoma duž x , y i z ose, C je Hukova konstanta elastičnosti na istezanje-sabijanje i $n_z \in (0, 1, 2, \dots, N_z)$ indeks rešetke duž z -pravca. Vektor $\vec{\lambda}$ povezuje atom na mestu \vec{n} sa najbližim susedima.



Slika 1. Model ultratankog kristalnog filma.
(Model of ultrathin crystalline film)

Dakle, o postavljenom modelu može se zaključiti sledeće, za analizu – najbitnije činjenice:

- ultratanki kristalni film poseduje dve beskonačne granične površi paralelne XY ravnima (i to za $z = 0$ i $z = L_z = N_z a$), dok u z -pravcu ima nanoskopsku debljinu: $N_z \in [2, 10]$;
- duž z -ose locirano je $N_z + 1$ atoma (atomskih motiva), odnosno, toliko atomskih ravn ili N_z kristalnih slojeva;
- radi fleksibilnosti graničnih površi, mora se obračunati da atomi sa tih ravn interaguju sa atomima spoljašnjim sredi-

nama, tj. granični atomi su spregnuti izmenjenim Hukovim silama za atome sredina – supstrata koji ih okružuju. U skladu sa napred navedenim uslovima, konstante elastičnosti koje opisuju interakcije atoma graničnih površina sa spoljašnjim sredinama, modifikovane su odgovarajućim koeficijentima ε i γ .

Za ovako definisani model kristalnog filma, hamiltonijan fononskog podsistema u aproksimaciji najbližih suseda ima „standardan“ oblik [5,6]:

$$H = \sum_{\alpha; \vec{n}} \frac{p_{\alpha; \vec{n}}^2}{2M} + \sum_{\alpha, n_x, n_y} \sum_{n_z=-1}^{N_z+1} \frac{C_{n_z}^\alpha}{4} \left[\left(u_{\alpha; n_x+1, n_y, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 + \left(u_{\alpha; n_x-1, n_y, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 + \left(u_{\alpha; n_x, n_y+1, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 + \left(u_{\alpha; n_x, n_y-1, n_z} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 + \left(u_{\alpha; n_x, n_y, n_z+1} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 + \left(u_{\alpha; n_x, n_y, n_z-1} - u_{\alpha; n_x, n_y, n_z} \right)^2 \right], \quad (1)$$

pri čemu: $u_{\alpha; \vec{n}}$ su projekcije malih pomeraja atoma na mestu \vec{n} iz svog ravnotežnog položaja u pravcu α , dok su $p_{\alpha; \vec{n}}$ projekcije odgovarajućih impulsa, a M – masa atoma.

Teorijsku analizu opisanog modela fononskog sistema, potražićemo primenom dvovremenske temperaturske Grinove funkcije pomerajnog tipa [6,7], sledećeg oblika:

$$G_{\vec{n}, \vec{m}}^\alpha(t-t') \equiv \langle \langle u_{\alpha; \vec{n}}(t) | u_{\alpha; \vec{m}}(t') \rangle \rangle = \Theta(t-t') \langle \langle u_{\alpha; \vec{n}}(t), u_{\alpha; \vec{m}}(t') \rangle \rangle_0, \quad (2)$$

koja zadovoljava jednačinu kretanja:

$$-M\omega^2 G_{\vec{n}, \vec{m}}^\alpha(\omega) = -\frac{i\hbar}{2\pi} \delta_{\vec{n}, \vec{m}} + \frac{1}{i\hbar} \langle \langle [p_{\alpha; \vec{n}}, H] | u_{\alpha; \vec{m}} \rangle \rangle_\omega, \quad (3)$$

odnosno definicionu jednačinu iz koje se izračunavaju tražene Grinove funkcije. Zbog narušenja translacione invarijantnosti samo duž z -pravca, neophodno je izračunati odgovarajuće komutatore, tj. odrediti Grinove funkcije posebno za atome graničnih slojeva, a posebno za atome iz unutrašnjosti filma. Zamenom nađenih komutatora u (3), te primenom delimičnih Furije-transformacija, za Grinove funkcije (2) dobija se sistem od N_z+1 diferencijalnih jednačina [7,8] oblika:

$$G_{n_z-1, m_z}^\alpha + \rho_k^\alpha G_{n_z, m_z}^\alpha + G_{n_z+1, m_z}^\alpha = K \delta_{n_z, m_z}. \quad (4)$$

Determinanta nađenog sistema jednačina ima sledeću formu:

$$D_{N_z+1}(\rho) = \begin{vmatrix} \rho - \varepsilon & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \rho & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \rho & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \rho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & \rho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & \rho - \gamma \end{vmatrix}_{N_z+1} \quad (5)$$

pri čemu je:

$$\rho \equiv \rho_k(N_z, \gamma, \varepsilon) = \frac{\omega^2}{\Omega_\alpha^2} - 4 \sin^2 \frac{ak_x}{2} - 4 \sin^2 \frac{ak_y}{2} - 2. \quad (6)$$

B. Energetski spektar fonona

Da bi se odredio spektar dozvoljenih fononskih energija u tankom kristalnom filmu potrebno je odrediti nule determinante (5) sistema jednačina (4). Ovaj problem nema uopšteno analitičko rešenje, ali se može potražiti numerički.

Uvođenjem bezdimenzione energije:

$$\mathcal{E}_\nu(k) \equiv \frac{E_\nu(k)}{\hbar\Omega} = \frac{\hbar\omega_k(\nu)}{\hbar\Omega},$$

dolazi se do sledećeg izraza za zakon disperzije fonona u ultratakom kristalnom filmu:

$$\mathcal{E}_{k, \nu}^2 = \mathcal{R}_k + \mathcal{S}_\nu; \quad (7)$$

$$\mathcal{R}_k \equiv -2(\cos ak_x + \cos ak_y); \quad \mathcal{S}_\nu \equiv \rho_\nu - 6,$$

gde su ρ_ν , $\nu = 0, 1, 2, \dots, N_z$ – koren determinante (5). Zbog lepšeg i lakšeg prikaza izabran je kvadrat energije fonona u zavisnosti od vrednosti 3 granična parametra: N_z , ε i γ .

C. Prostorna distribucija fononskih stanja

Jedno od izuzetno bitnih analiza kod strukturno deformisanih kristalnih sistema je pitanje prostorne raspodele mogućih stanja elementarnih pobuđenja sistema [5,6], jer upravo narušeni homogeni taj raspored diktira bitnu promenu osobina posmatrane strukture.

Da bismo ovo odredili, zapisaćemo sistem jednačina (4) u matričnom obliku:

$$\hat{\mathcal{D}}_{N_z+1} \hat{\mathcal{G}}_{N_z+1} = \hat{\mathcal{K}}_{N_z+1} \Rightarrow \hat{\mathcal{G}}_{N_z+1} = \hat{\mathcal{D}}_{N_z+1}^{-1} \hat{\mathcal{K}}_{N_z+1};$$

$$\hat{\mathcal{G}}_{N_z+1} \equiv \begin{pmatrix} G_{0, m_z} \\ G_{1, m_z} \\ \vdots \\ G_{n_z, m_z} \end{pmatrix}; \quad \hat{\mathcal{K}}_{N_z+1} \equiv K \begin{pmatrix} \delta_{0, m_z} \\ G_{1, m_z} \\ \vdots \\ G_{n_z, m_z} \end{pmatrix}; \quad K = \frac{i\hbar}{2\pi C}, \quad (7)$$

gde je $\hat{\mathcal{D}}_{N_z+1}$ matrica koja odgovara determinanti (5). Na osnovu primene opšte teorije matričnog računa [9–11], pokazuje se da se multipolne Grinove funkcije mogu izraziti u sledećoj formi:

$$G_{n_z} \equiv G_{n_z, m_z} = K \sum_{\nu=1}^{N_z+1} \frac{g_{n_z}(\nu)}{\rho - \rho_\nu}, \quad (8)$$

gde spektralne težine:

$$g_{n_z}(\nu) = \frac{B_{n_z}(\nu) B_{N_z-n_z}(\nu)}{\left. \frac{d}{d\rho} D_{N_z+1}(\rho) \right|_{\rho=\rho_\nu}}; \quad (9)$$

$$B_{n_z}(\rho) = \begin{vmatrix} \rho - \varepsilon & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \rho & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \rho & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \rho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & \rho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & \rho \end{vmatrix}_{n_z}$$

$$B_{N_z - n_z}(\rho) = \begin{vmatrix} \rho & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \rho & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \rho & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \rho & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & \rho & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & \rho - \gamma \end{vmatrix}_{N_z - n_z}$$

predstavljaju prostornu distribuciju (po ravnima, duž n_z) mogućih fononskih energija.

II. FUNKCIJE SOFTVERA JOIGS

U toku istraživanja razradili smo računarski program *JoigS* pomoću kojeg smo mogli numerički da nalazimo korene determinante (5) za proizvoljno izabran broj atomskih ravnih filma: $2 \leq N_z \leq 10$ i za proizvoljne vrednosti graničnih parametara: $(\varepsilon, \gamma) \in [-0,99\dots, +5,0]$ (ali i više!). Za brojeve kristalografskih ravnih filma $N_z < 2$ naš model „ne funkcioniše“, a za $N_z > 10$, efekti dimenzionog kvantovanja se minimiziraju [1–4]. Mi smo se odlučili za $N_z = 4$. Perturbacioni parametri ne mogu da imaju vrednosti ispod $-0,99\dots \approx -1$, jer za vrednost -1 nema interakcije graničnih atoma filma sa. Ako bi pak ovi parametri bili manji od -1 , onda bi se promenio znak (priroda) međuatomskih interakcija.

A. Određivanje energetskog spektra fonona

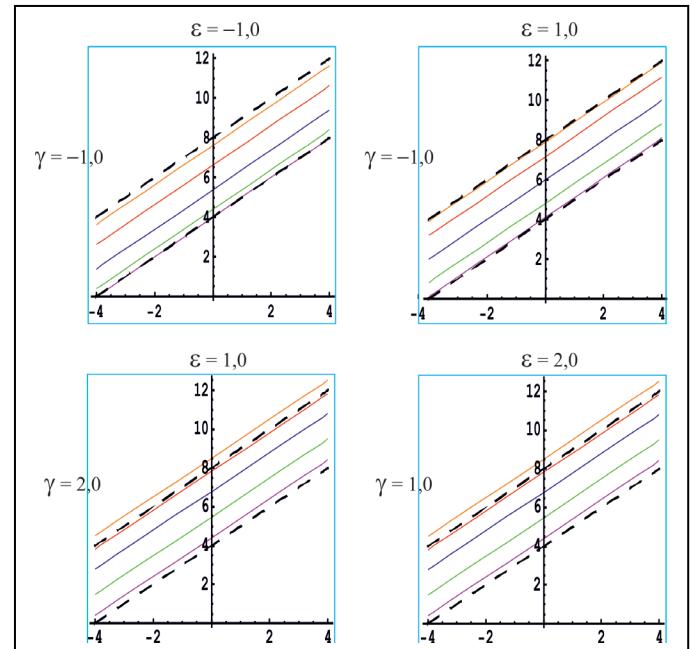
Da bi se odredio spektar dozvoljenih fononskih energija u četvoroslojnem kristalnom filmu potrebno je odrediti nule-korene determinante (5) sistema jednačina (4). Ovaj problem nema uopšteno analitičko rešenje, ali se može potražiti numerički.

Softver koji podržava ove proračune je dat ispod.

```
d=.
d[n_]:=r d[n-1]-d[n-2]
d[0]:=1
d[-1]:=0
d[-2]:=0
d[-3]:=0
d[-4]:=0
d[1]:=r
d[2]:=r^2-1
Print["Ovde se definišu čebiševljevi polinomi i zadaje broj slojeva
filmova (N)"]
n=4
Print["Popravka na konst. elast. iznad gornjeg sloja, Epsilon"]
eps=0
Print["Popravka na konst. elast. ispod donjeg sloja, Gama"]
gam=0
k=.
r=.
m=.
s=.
```

```
Do[{k=(j \[Pi])/10,rr=N[Solve[(r-eps) (r-gam) d[n-1]-((r-eps)+(r-
gam)) d[n-2] + d[n-3]==0,r]],rrr=Table[Re[Sort[(r+6)/.rr]],s[{j}]=Table[{N[-4 Cos[k]],N[rrr[[i]]-4 Cos[k]]},{i,1,n+1}],Print[s[{j}]],m=Table[{s[{0}],s[{1}],s[{2}],s[{3}],s[{4}],s[{5}],s[{6}],s[{7}],s[{8}],s[{9}],s[{10}]}],{j,0,10}]
(* j Znači broj tačaka pomoću kojih ćemo crtati disperzije prave.
odabrano je 10. Rešava se jednačina u kojoj figurišu čebiševljevi
polinomi, a rešenja su energije r (rho). Te energije se zatim sortiraju i
formiraju matrice s i m u kojima figurišu parovi tačaka koje definisu
disperzije duži u bezdimenzionom obliku*)
Print[m]
Print["Kvadrati redukovane energije za vrednosti funkcije R=[-4,+4]
i za vrednosti parametarske funkcije S=[0,+4]"]
g=Transpose[m]
Print["Graficki prikaz kvadrata energija u funkciji R sa param. S"]
Show[gg1=ListPlot[g[[1]],PlotJoined->True,PlotStyle->\{Magenta\}],
gg2=ListPlot[g[[2]],PlotJoined->True,PlotStyle->\{Green\}],
gg3=ListPlot[g[[3]],PlotJoined->True,PlotStyle->\{Blue\}],
gg4=ListPlot[g[[4]],PlotJoined->True,PlotStyle->\{Red\}],
gg5=ListPlot[g[[5]],PlotJoined->True,PlotStyle->\{Orange\}],
q=Plot[{4+x},{x,-4,4},PlotStyle->\{Dashing[\{.05, .05\}],Black\}],
p=Plot[{8+x},{x,-4,4},PlotStyle->\{Dashing[\{.05, .05\}], Black\},
PlotRange->Automatic, AxesStyle->\{Directive[Bold,Thick,18],
Directive[Bold,Thick,18]\}, Frame->False]
```

Numerička obada je tako sprovedena da smo, pored brojnih vrednosti za kvadrate redukovanih energija, odmah dobijali i grafičku prezentaciju tih energija u funkciji od dvodimenzione veličine $R_k \in [-4; +4]$. Na graficima sa slike 2 predstavljeni su neki karakteristični slučajevi za: $\gamma, \varepsilon = -1,0; 1,0$ i $2,0$. Na taj način, svaki diskretan energetski nivo predstavljen je skupom od pet različito obojenih duži, a isprekidane crne duži označavaju baklovske granice.



Slika 2. Zakon disperzije fonona u filmu.
(Dispersion law of phonons in film)

B. Određivanje raspodele fononskih stanja

Da bi se odredila prostorna raspodela nađenih fononskih energija u tankom kristalnom filmu potrebno je izračunati statističke verovatnoće (9). Za numeričko rešavanje i predstavljanje ovoga napravljen je drugi deo softvera. Važno je napomenuti da ovaj deo softvera koristi podatke o energetskim vrednostima određenih u prethodnom delu.

```
Print["Graficki prikaz verovatnoca kvadrata redukovanih energija,
tj. parametarske funkcije g, po slojevima za R=0"]

11 = ListPlot[s[{1}], PlotJoined -> True,
PlotRange -> {{0, 4}, {0, 0.45}}, PlotStyle -> Magenta,
AxesStyle -> {Directive[Bold, Thick, 16],
Directive[Bold, Thick, 16]}, Frame -> False]

12 = ListPlot[s[{2}], PlotJoined -> True,
PlotRange -> {{0, 4}, {0, 0.45}}, PlotStyle -> Green,
AxesStyle -> {Directive[Bold, Thick, 16],
Directive[Bold, Thick, 16]}, Frame -> False]

13 = ListPlot[s[{3}], PlotJoined -> True,
PlotRange -> {{0, 4}, {0, 0.45}}, PlotStyle -> Blue,
AxesStyle -> {Directive[Bold, Thick, 16],
Directive[Bold, Thick, 16]}, Frame -> False]

14 = ListPlot[s[{4}], PlotJoined -> True,
PlotRange -> {{0, 4}, {0, 0.45}}, PlotStyle -> Orange,
AxesStyle -> {Directive[Bold, Thick, 16],
Directive[Bold, Thick, 16]}, Frame -> False]

15 = ListPlot[s[{5}], PlotJoined -> True,
PlotRange -> {{0, 4}, {0, 0.45}}, PlotStyle -> Red,
AxesStyle -> {Directive[Bold, Thick, 16],
Directive[Bold, Thick, 16]}, Frame -> False]
```

```
Print["Zbirni prikaz verovatnoca kvadrata redukovanih energija, tj.
parametarskih funkcija g, po slojevima za R=0"]

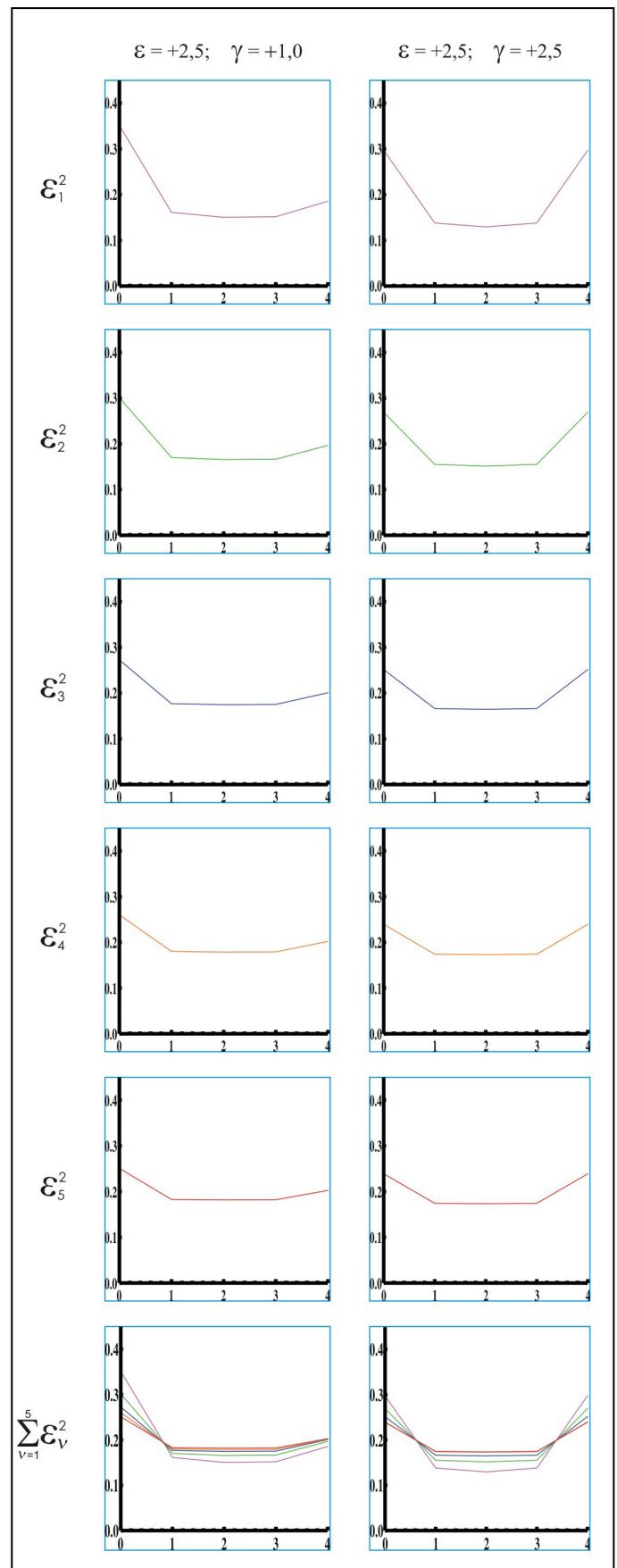
Show[11, 12, 13, 14, 15, PlotRange -> {{0, 4}, {0, 0.45}},
AxesStyle -> {Directive[Bold, Thick, 18],
Directive[Bold, Thick, 18]}, Frame -> False]
```

Numerička obada je tako sprovedena da smo, pored brojnih vrednosti za verovatnoće pojavljivanje određenih energija, odmah dobijali i grafičku prezentaciju tih verovatnoća u funkciji od boja kristallografske ravni $\nu \in [0, 4]$. Na graficima sa slike 3 predstavljeni su samo neki karakteristični slučajevi, samo za: $\gamma, \varepsilon = 1,0$ i $2,5$. Na taj način, verovatnoće za svaki diskretan energetski nivo predstavljene su skupom od pet različito obojenih izlomljenih duži.

Slika 3. Prostorna raspodela energetskih stanja fonona.
(Spatial distribution of phonon energy states)

III. ZAKLJUČAK

U radu smo predstavili softverski paket *JoigS* koji se sastoji iz dva dela i koji omogućava izračunavanje i grafičko predstavljanje spekara i stanja fononskog podsistema u ultratankim kristalnim filmovima. Pošto analitičkog rešavanje nema, ovaj softver nam je onogućio da uvidimo odredimo, te ocenimo različitost pononskih energija i njihovog prostornog rasporeda (duž nanoskopski ograničene njegove debljine) u odnosu na neograničene kristalne strukture.



Pomoću ovog softvera našli smo uslove za pojavu lokalizovanih fononskih stanja vezanih za granične slojeve kristala [3,11]. Ova stanja imaju značajnu ulogu u određivanju specifično drugačijeg termodinamičkog ponašanja i transportnih svojstava ultratankih slojeva, npr. kod visoko-temperaturskih superprovodnika [7,12].

ZAHVALNICA

Rezultati izneti u ovom radu deo su istraživanja koja su finansijski podržana od strane Ministarstva prosvete, nauke i tehnološkog razvoja Republike Srbije (ON-171039) i Ministarstva za naučni i tehnološki razvoj, visoko obrazovanje i informaciono društvo Vlade Republike Srpske (19/6-020/961-21/18 i 19/6-020/961-35/18).

LITERATURA

- [1] M.G.Cottam, D.R.Tilley, *Introduction to Surface and Super-lattice Excitations*, Cambridge: Univ.Press, 1989.
- [2] S.G.Davison, M.Steslicka, *Basic Theory of Surface States* Oxford: Clarendon, 1996.
- [3] A.A.Balandin, D.L.Nika, „*Phononics in Low-Dimensional Materials*“, *Materials Today*, Vol. 15, No. 6, pp. 266-275, 2012.
- [4] J.P. Šetrajčić, S.K.Jaćimovski, D.Raković and D.I.Ilić, “*Phonon Spectra in Crystalline Nanofilms*”, pp.146-151, in *Electrical and Computer Engineering Series: Advances in Simulation, Systems Theory and Systems Engineering*. Eds. N.E.Mastorakis, V.V.Kluev and Đ.Koruga, Int.: WSEAS Press 2003.
- [5] G.Mahan, *Many Particle Physics*, New York: Plenum, 1990.
- [6] G.Rickayzen, *Green's Functions and Condensed Matter*, London: Acad. Press 1980.
- [7] J.P. Šetrajčić, V.M.Zorić, S.M.Vučenović, D.Lj.Mirjanić, V.D.Sajfert, S.K.Jaćimovski, D.I.Ilić, “*Phonon Thermo-dynamics in Crystalline Nanofilms*”, *Materials Science Forum*, Vol. 555, pp.291-296, 2007.
- [8] S.K.Jaćimovski, J.P.Šetrajčić, V.M.Zorić, B.Markoski, D.I.Ilić i M.Lovre, *Fononi u kristalnim nanofilm-strukturama*, Zbornik radova 52. ETRAN, MO 4.2, 1-4 (2008).
- [9] D.S.Mitrinović, D.Mihajlović, P.M.Vasić, *Linearna alge-bra, polinomi, analitička geometrija*, Beograd: Grad.knjiga, 1990.
- [10] J.P.Šetrajčić Adequate determination of micro and macro properties of optical nano-crystals, *Opto-Electron.Rev.* 25/4, 303-310 (2017).
- [11] J.P.Šetrajčić, V.D.Sajfert, and S.K.Jaćimovski, Fundamental preferences of the phonon engineering for nanostructural samples, *Rev.Theor.Sci.* 4/4, 353-401 (2016); doi:10.1166/rits.2016.1067.
- [12] J.P.Šetrajčić, D.I.Ilić, and S.K.Jaćimovski, “The Influence of the Surface Parameter Changes onto the Phonon States in Ultrathin Crystalline Films”, *Physica A*, Vol. 496, pp. 434-445, 2018.

ABSTRACT

JoigS is a computational package for calculating and expounding phonon system properties. It is based on the theory of perturbations in solid state physics using Green's functions and methodology of difference equation calculus. It must be used within Wolfram Mathematica and with the support of adequate graphic editing software. The package is easy to use to determine the basic (micro) properties of phonons, but with the ability to extend to the calculation of thermodynamic (macro) properties of a wide range of materials ranging from massive (balk) to nanoscopic structures. Here we present a calculation and graphical representation of the energy spectra and spatial distribution of phonon states in ultrathin crystalline films with different boundary conditions.

ANALYSIS OF CONFINEMENT EFFECTS ON THE FUNDAMENTAL CHARACTERISTICS OF PHONON NANOFILMS DEVELOPED BY SOFTWARE PACKAGE JoigS

J.P. Šetrajčić, S.M. Vučenović, I.J. Šetrajčić,
M.Vojnović, A.J. Šetrajčić-Tomić, N.R. Vojnović