

Analiza i razvoj modela konačnih dipolnih heliksa

Tema ovog rada su heliksi sastavljeni od konačnog broja čvrstih dipolnih sfera, poznati pod terminom konačni dipolni heliksi. Čvrste dipolne sfere interaguju preko dve vrste interakcija: dipol-dipolnom interakcijom i tvrdom interakcijom čvrstih sfera. Iako je sistem na prvi pogled jednostavan, ispoljava kompleksno ponašanje usled prirode dipol-dipolne interakcije, koja je anizotropna i dugodometna. Analizirali smo razne slučajevne interakcije heliksa sa probnom dipolnom sferom i sa identičnim heliksom, pri čemu su uzete u obzir različite magnetizacije heliksa, takozvana ST (single-thread) i MT (multi-thread) magnetizacija. Prvi deo rada predstavlja detaljnu analizu interakcija u kojima učestvuju dipolni heliksi, a drugi deo je vezan za razvoj modela konačnih dipolnih heliksa. Naime, formirali smo i ispitivali dve vrste modela heliksa koje predstavljaju pojednostavljenu zamenu za heliks, i proverili koliko mogu reprodukovati zadate interakcije.

Uvod

Čestice sa stalnim dipolnim momentom, kao što su magnetne kuglice, poznate su po samo-asemlirajućim osobinama. Magnetne strukture su popularne zato što imaju široku primenu u nanoelektronici i biotehnologiji (Whitesides i Grzybowski 2002). Što se tiče značaja tubularnih i helikoidnih struktura, u biologiji su to relevantni samo-asemlirajući objekti koji su pronađeni u nekim vrstama bakterija i u ćelijskim mikrotubulama. Magnetne nanočestice mogu se rasporediti tako da grade helikse, što je vrlo inte-

resantno da se na nano nivou mogu napraviti ovake strukture (Sellmayer 2002; Zeng *et al.* 2002).

U ovom radu posmatrano je ponašanje helikoidnih struktura sastavljenih od konačnog broja čvrstih dipolnih sfera, poznati pod terminom konačni dipolni heliksi. Pored toga modelovane su i uprošćene strukture početnog heliksa i ispitivana je njihova efikasnost. Dipolne sfere interaguju preko dve vrste interakcija: dipol-dipolna interakcija i tvrda interakcija čvrstih sfera.

Konkretno smo u ovom radu dipolne helikse implementirali u softverskom paketu Matlab. Kako se sve čestice opisuju preko prostornih koordinata i dipolnog momenta (magnetizacije) potrebno je postaviti ih u početnu konfiguraciju, pri čemu konfiguracija podrazumeva prostorni raspored i magnetizaciju. Pokazano je prethodnim radovima da interakcija između magnetskih sfera može dovesti do formiranja 3D struktura, ali da dimenzionalnost struktura zavisi od broja čestica u sistemu N . Naime, razmatrano je kako se čestice raspoređuju tako da imaju minimalnu energiju (takožvani ground state). Za mali broj čestica ($N = \{2, 3\}$) formiraju se lanci, za veći broj čestica ($3 < N < 14$) formiraju se prstenovi, dok za $N > 14$ optimalne strukture su heliksi. Jasno vidimo prelaz od 1D preko 2D do 3D struktura zavisno od broja čestica u sistemu (Boncheva *et al.* 2005).

U prvom delu rada detaljno je opisana dipol-dipolna interakcija i način formiranja heliksa. Takođe, ovaj deo rada posvećen je ispitivanju zavisnosti energije dipol-dipolne interakcije i sile od nametnutih uslova, poput promene rastojanja između ispitivanih struktura ili magnetizacije. Imamo slučajevne interakcije heliksa sa probnom česticom i sa identičnim heliksom. Pored ovoga, posmatran je i slučaj kada dolazi do promene

Nikola Petreski (2000), Šabac, Grmićka 3,
učenik 3. razreda Šabačke gimnazije

Mihailo Radojević (2000), Šabac, Kralja
Dragutina 8, učenik 3. razreda Šabačke
gimnazije

MENTORI:

Miljan Dašić, Institut za Fiziku, Beograd

Igor Stanković, Institut za Fiziku, Beograd

ugla magnetnog momenta jednog heliksa. U ovoj interakciji uzeti su magnetni momenti jednog heliksa i fiksirani a magnetni momenti drugog heliksa se u svakom koraku simulacije menjaju tako da opisuju ugao od 2π radijana.

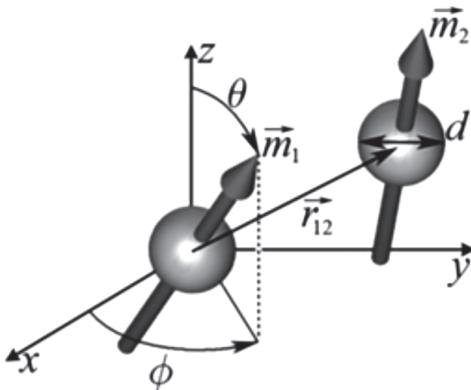
U drugom delu rada modelujemo helikse u nameri da uprostimo helikoidnu strukturu preko prstena i lanca. Uporedjivani su rezultati za dati heliks i njegove modele u slučaju kada se probna čestica udaljava po jednoj od koordinatnih osa. Korišćene su dve vrste modela:

Model 1: prsten sa cirkulirajućim magnetnim momentima i lanac sa momentima duž z ose. Broj dipola u lancu određen je prema ukupnom magnetnom momentu po z osi (m_z) heliksa.

Model 2: prsten sa cirkulirajućim magnetnim momentima i lanac iste visine kao heliks sa alternirajućim dipolnim momentima po x i y osi i $m_z = m_d$ komponentom duž z ose

Dipol-dipolna interakcija

Dipol-dipolna interakcija predstavlja interakciju između dve čestice magnetnog momenta \vec{m}_1 i \vec{m}_2 čiji se centri nalaze na pozicijama \vec{r}_1 i \vec{r}_2 (slika 1). Potencijalna energija dobijena ovom interakcijom definisana je formulom 1:



Slika 1. Šematski prikaz dve čestice koje međusobno interaguju. Nalaze se u Dekartovom koordinatnom sistemu, prikazan je vektor položaja \vec{r}_{12} kao i polarni ϕ i azimutni θ ugao koji određuju pravac i smer magnetnog momenta čestica (Messina *et al.* 2014).

Figure 1. Schematic representation of two particle interaction. They are found in the Dekart coordinate system, the position vector \vec{r}_{12} as well as the polar ϕ and azimuthal θ angles which determine the direction of the magnetic moment of the particles are shown (Messina *et al.* 2014).

$$U(\vec{r}_{12}) = C \frac{1}{r_{12}^3} \left[\vec{m}_1 \cdot \vec{m}_2 - 3 \frac{(\vec{m}_1 \cdot \vec{r}_{12})(\vec{m}_2 \cdot \vec{r}_{12})}{r_{12}^3} \right] \quad (1)$$

gde je $\vec{r}_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$, a konstanta C se može izračunati kada se dve čestice postave jedna do druge pri čemu se i dipolni momenti postave paralelno u istom smeru. Pored energije u radu je računata i sila između dve čestice koja je definisana formulom 2:

$$\vec{F} = \frac{3\mu_0}{4\pi r^4} ((\vec{r} \times \vec{m}_1) \times \vec{m}_2 + (\vec{r} \times \vec{m}_2) \times \vec{m}_1 -$$

$$-2\vec{r}(\vec{m}_1 \cdot \vec{m}_2) + 5\vec{r}((\vec{r} \times \vec{m}_1) \cdot (\vec{r} \times \vec{m}_2))) \quad (2)$$

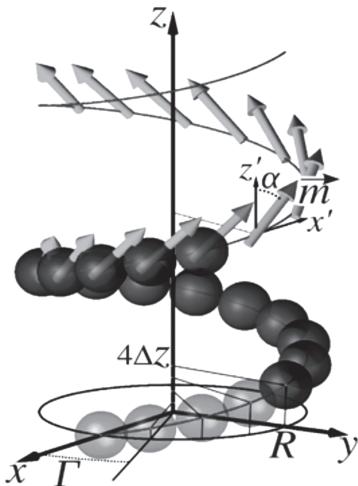
gde je μ_0 magnetna permeabilnost vakuuma, \vec{r} je vektor položaja druge čestice u odnosu na prvu, \vec{m}_1 i \vec{m}_2 su vektori magnetizacije čestica.

Geometrija heliksa

Heliks je sastavljen od čvrstih sfernih čestica koje su pakovane po cilindričnoj površi, tj. cilindar je formiran uvijanjem niti od čvrstih sfernih čestica na cilindričnoj površi poluprečnika R_{cyl} . Geometrijski parametri koji definisu heliks su: ugao između dve susedne čestice Γ i poluprečnik heliksa $R = R_{cyl} + d/2$, gde je d prečnik čestice. Poluprečnik R predstavlja najkraće rastojanje između ose cilindra i centra sferne čestice. Svakoj čestici definiše se početni položaj. Kordinate i -te čestice su: $x_i = R \cos(i\Gamma)$, $y_i = R \sin(i\Gamma)$, $z_i = i\Delta z$, gde je i ceo broj. Pored ugla i poluprečnika za formiranje heliksa je potreban i pomeraj po z osi (Δz). Pomeraj definisemo preko formule:

$$\Delta z = \sqrt{d^2 + 2 \cdot (\cos \Gamma - 1) \cdot R^2}$$

Odavde se vidi da su ovi elementi usko povezani, tj. da pomeraj zavisi od ugla između dve čestice i poluprečnika heliksa. Zbog povezanosti između čestica svaka od njih mora imati bar dva suseda, sem prve i poslednje čestice. Heliksi mogu imati i više suseda. Shodno tome mogu se formirati heliksi koji imaju 2, 4 ili 6 suseda. U ovom radu razmatrali smo helikse koji imaju 6 suseda, to su gusto pakovani heliksi. Na slici 2 data je ilustracija jednog heliksa sa svim relevantnim geometrijskim parametrima koji su ranije pomenuti u tekstu (R , Γ , Δz).



Slika 2. Geometrijska struktura heliksa. Na skici je prikazan način za formiranje heliksa na osnovu poluprečnika, ugaonog pomeraja i broja čestica (Messina *et al.* 2014).

Figure 2. The geometric structure of the helix. The figure shows a way of forming a helix based on radius, angular displacement and number of particles (Messina *et al.* 2014).

Rezultati i diskusija

Ispitivane su različite situacije u kojima se mogu naći heliksi, tako da su rezultati podeljeni u više slučajeva:

- 1) heliks i probna čestica – promena rastojanja;
- 2) dva identična heliksa – promena rastojanja;
- 3) dva identična heliksa – rotacija jednog od heliksa;
- 4) određivanje magičnog ugla;
- 5) dva identična heliksa – rotacija magnetnih momenata jednog od heliksa;
- 6) poređenje modela heliksa sa datim heliksom na primeru interakcije sa probnom česticom.

Analiza interakcije jednonitnog (ST) heliksa i probne čestice

ST (eng. single-thread) heliksi su specifični po tome što je vektor magnetizacije konstantan i

ne može se menjati. Single-thread znači da heliks ima samo jednu nit: svaka dipolna sfera prati sledeću i tako čine jednu nit. Vektori položaja datih dipolnih sfera određeni su formulama:

$$x_{i+jn} = R \sin(i\Gamma_1 + j\Gamma_2)$$

$$y_{i+jn} = R \cos(i\Gamma_1 + j\Gamma_2)$$

$$z_{i+jn} = i\Delta z + j\Delta z_2$$

gde je i iz Z , a $j = \{1, n\}$.

Svakoj sferi je određen i jedinstven magnetni moment, koji je dat formulom:

$$m_{i,j}^x = m^y \sin(i\Gamma_1 + j\Gamma_2)$$

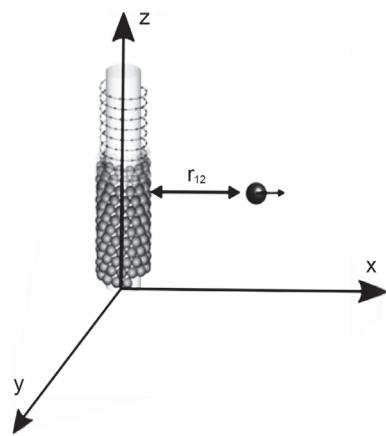
$$m_{i,j}^y = m^y \cos(i\Gamma_1 + j\Gamma_2)$$

$$m_{i,j}^z = m \Delta z / d$$

gde je i iz Z , a $j = \{1, n\}$.

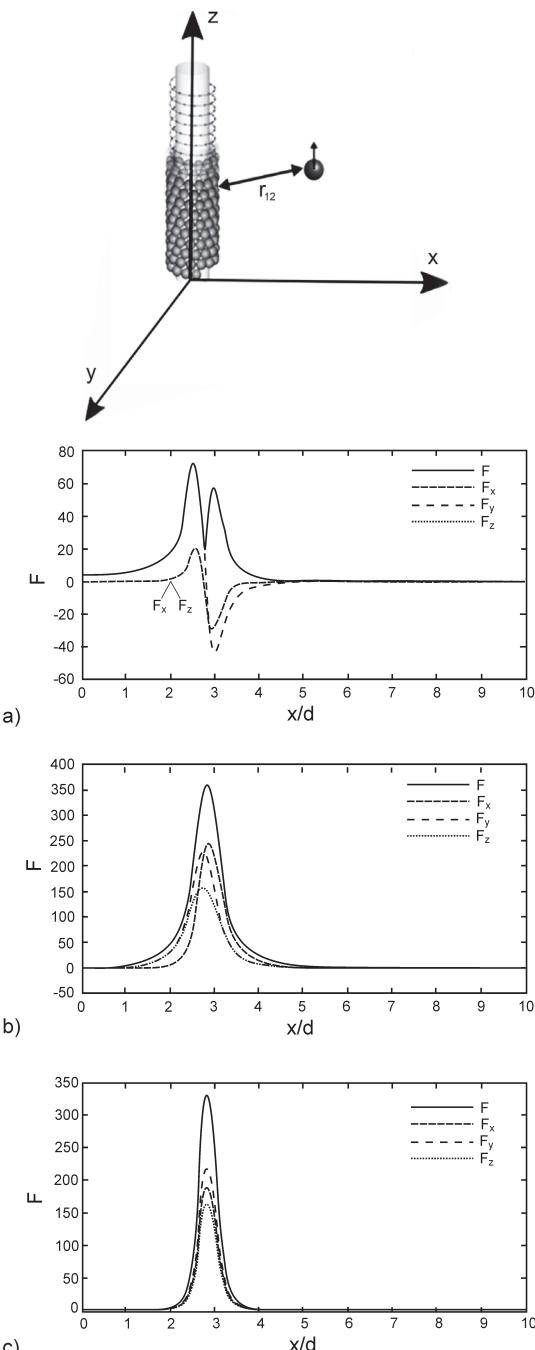
Kod ST heliksa ukupna m_x i m_y komponenta je jednaka nuli i ostaje samo ukupna m_z komponenta koja je jednaka $N \cdot \Delta z$, poštoo imaju N čestica sa dipolnim momentom duž z ose od Δz .

Posmatrana je interakcija datog heliksa sa probnom česticom koja u početnom trenutku ima koordinate $(0, 0, N(\Delta z)/2)$, pri čemu je čestica pomerana duž x ose (zbog radijalne simetrije pomeranje duž y ose daje iste rezultate) i z ose. Na slici 3 je data ilustracija ST heliksa i probne čestice. Kada se postavi probna čestica dolazi do interakcije između nje i heliksa. Pomeranjem



Slika 3. Šematski prikaz interakcije heliksa i probne čestice pri kretanju čestice po x osi

Figure 3. Schematic representation of the interaction between helix and test particle which is moving along the x axis

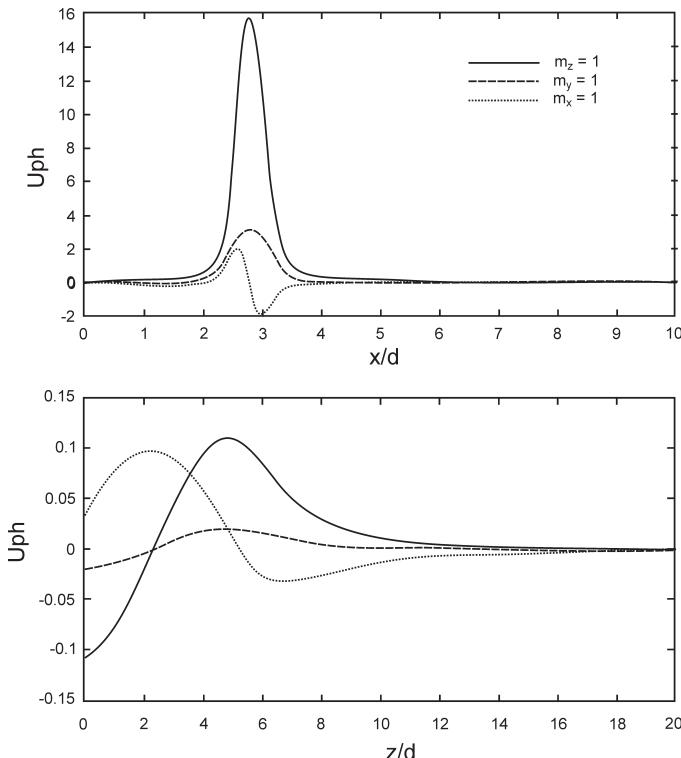


Slika 4. Šematski prikaz interakcije heliksa i probne čestice pri kretanju čestice po z osi

Figure 4. Schematic representation of the interaction between helix and test particle which is moving along the z axis

Slika 5. Grafički prikaz zavisnosti sile F između probne čestice i heliksa u zavisnosti od pomeraja po x i z osi. Razlikujemo tri slučaja, kada probna čestica ima $m_x = 1$ (a), $m_y = 1$ (b), $m_z = 1$ (c).

Figure 5. Dependence of the force between the test particle and the helix as a function of the x and z axes displacement. We have three cases, first test particle with $m_x = 1$ (a), $m_y = 1$ (b), $m_z = 1$ (c).



Slika 6. Grafički prikaz zavisnosti energije između probne čestice i heliksa (Uph) u zavisnosti od pomeraja po x i z osi

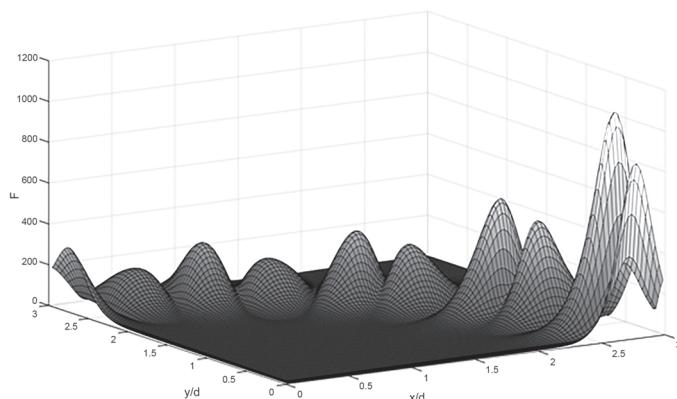
Figure 6. Dependence of the energy between the test particle and the helix (Uph) as a function on the x and z axes displacement

čestice duž x i z ose menjaju se energija i sila međusobne interakcije heliksa i čestice. Za oba slučaja pomeranja čestice duž x i duž z ose imamo tri nezavisne situacije, naime dipolni moment čestice usmeren je duž jedne od osa, tako da imamo slučajevе (a) $m_x = 1$, (b) $m_y = 1$ (c) $m_z = 1$.

Pošto je heliks simetričan kada se posmatraju x i y osi ovi rezultati će biti identični, dok kada posmatramo česticu koja se kreće od koordinatnog početka po z osi (slika 4) očekuju se raz-

ličiti rezultati u odnosu na kada se čestica kreće po x ili y osi.

Pošto je probna kuglica u početnom trenutku postavljena u koordinatni početak, ukupan intenzitet sile će rasti, a nakon trenutka kada kuglica prođe dužinu poluprečnika heliksa sila počinje da opada i konvergira nuli. Na slici 5 po red ukupnog inteziteta sile, prikazano je i kako x , y , i z kordinata sile zavise od položaja kuglice prijenom pomeranju po x i z osi. Na slici 6 na kojoj



Slika 7. Grafički zavisnosti ukupnog inteziteta sile od položaja probne čestice u prostoru

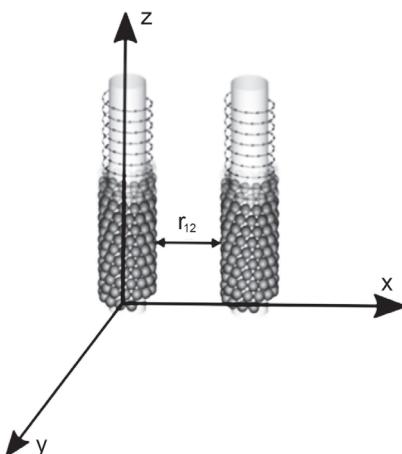
Figure 7. Dependence of the intensity of the total force between the test particle and the helix as a function of the space coordinate

je se nalazi zavisnost energije od položaja probne čestice u interakciji sa heliksom, uočeno je da će se energija menjati na sličan način kao i sila. Početno raste i najveći intezitet na rastojanju od koordinatnog početka koje je jednako poluprečniku heliksa, a nakon toga opada i konvergira nuli. Ovo nam pokazuje prirodu dipol-dipolne interakcije, koja je anizotropna i dugodometna.

Pošto su ose x i y međusobno simetrične, moguće je posmatrati kako će se menjati ukupan intezitet sile i energije u prostoru, a ne samo po jednoj osi. Ovo smo uradili tako što smo u programu pustili da se po jednoj osi čestica pomera za određenu dužinu i u svakoj iteraciji po simetričnoj osi pušta za unapred određenu dužinu i računa energija ili ukapan intezitet sile. Na slici 7 može se videti kako zavisi ukapan intezitet sile u odnosu na određeni deo prostora.

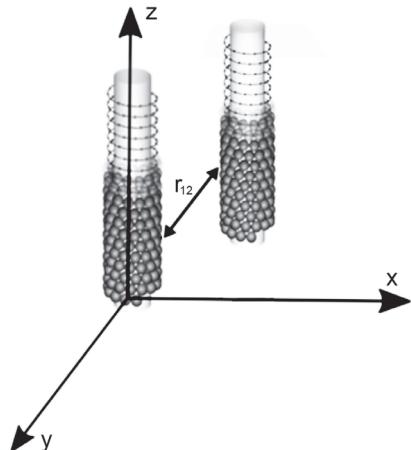
Analiza interakcije između dva identična heliksa

U ovom delu rada interesuje nas interakcija dva identična heliksa. Prvi heliks je formiran oko z ose i fiksiran, a drugi heliks je pomeran duž x i z ose, slično kao u slučaju sa probnom česticom. Na slikama 8 i 9 mogu se videti skice posmatranih situacija.



Slika 8. Šematski prikaz interakcije dva heliksa pri kojem je jedan heliks fiksiran a drugi se pomera po x osi

Figure 8. Schematic representation of the two helix interaction where the first helix is fixed and the second helix is moving along the x axis



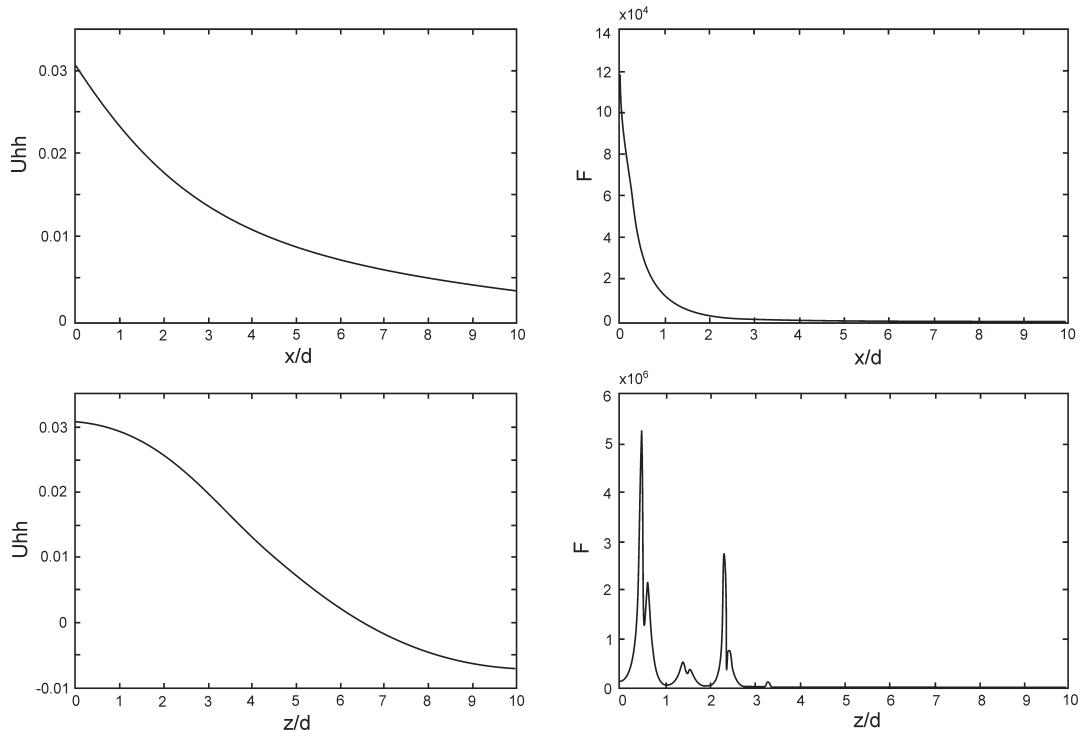
Slika 9. Šematski prikaz dva heliksa pri kojem je jedan heliks fiksiran a drugi se pomera po z osi

Figure 9. Schematic representation of two helices where the first helix is fixed and the second helix is moving along the z axis

Na osnovu dobijenih rezultata prikazanih na slici 10 zaključuje se da u interakciji dva heliksa dobijaju slični rezultati kao pri interakciji probne čestice i heliksa. Primetno je da će energija opadati pri udaljavanju jednog heliksa i po x i po z osi, što je i očekivano, dok je ponašanje ukupnog inteziteta sile nešto kompleksnije u odnosu na prvi slučaj, usled delovanja velikog broja čestica međusobno, i njihovog ugla magnetizacije i početne konfiguracije. Pri udaljavanju jednog heliksa po x osi ukupan intezitet sile će naglo opadati i konvergirati nuli. Kod z ose je nešto drugačije, pošto se pri svakoj iteraciji po z osi osim početne pozicije čestice menja i ugao magnetizacije između nje i ostalih čestica.

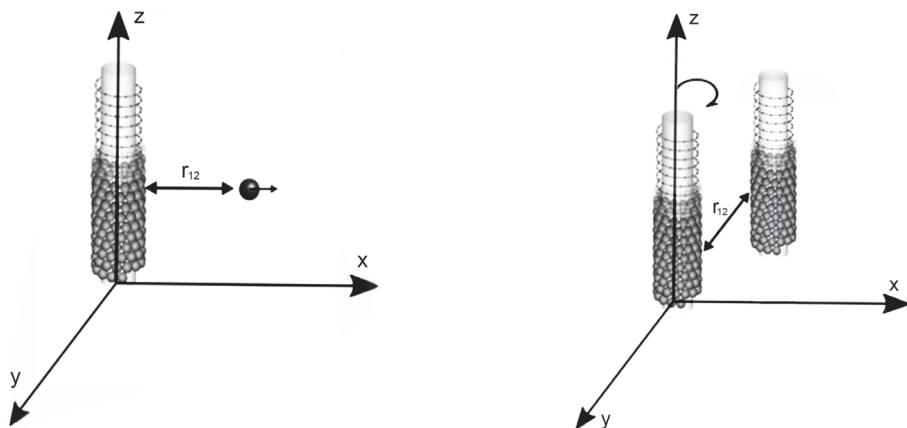
Analiza interakcije između dva identična heliksa od kojih se jedan rotira

U interakciji dva heliksa može doći do rotacija. Prema tome, hteli smo da ispitamo kako rotacija jednog heliksa utiče na interakciju sa fiksiranim heliksom. Jedan heliks je fiksiran na z osi dok se drugi prostorno rotira oko odabrane ose. Slično kao u prethodnim primerima, razmatramo x i z osu, odnosno rotaciju oko x i z ose (slike 11 i 12).



Slika 10. Grafički prikaz zavisnosti energije i ukupnog inteziteta sile između dva heliksa u zavisnosti od pomeraja po x i z osi

Figure 10. Dependence of the energy and total force intensity between two helices as a function of the x and z axes displacement

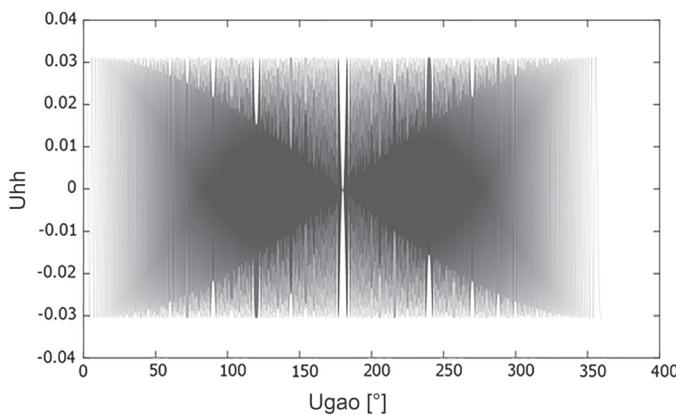


Slika 11. Šematski prikaz dva heliksa pri kojem je jedan heliks fiksiran a drugi se rotira oko x ose

Figure 11. Schematic representation of the two helix interaction where the first helix is fixed and the second helix is rotated around the x axis

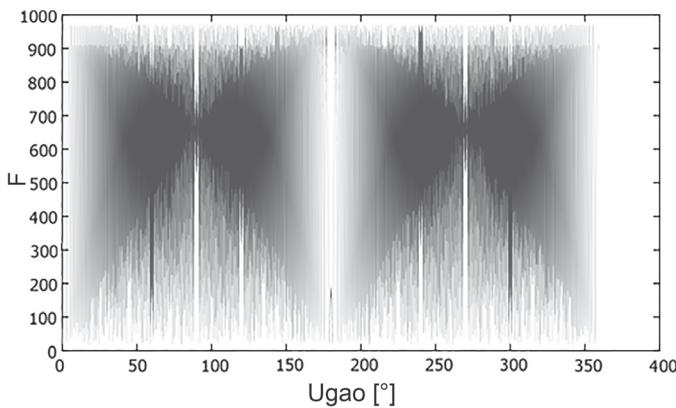
Slika 12. Šematski prikaz dva heliksa pri kojem je jedan heliks fiksiran a drugi se rotira oko z ose

Figure 12. Schematic representation of two helices where the first helix is fixed and the second helix is rotated around the z axis



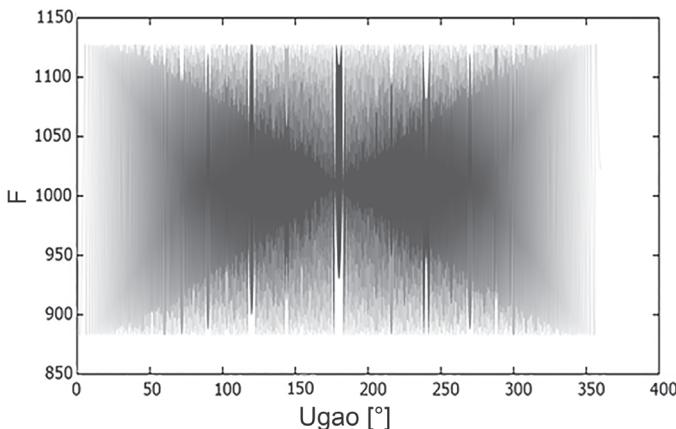
Slika 13. Zavisnost energije između dva heliksa od ugla rotacije oko x -ose

Figure 13. Dependence of the energy between two helices as a function of the angle rotation around the x axis



Slika 14. Grafički prikaz zavisnosti sile između dva heliksa u zavisnosti od rotacionog pomeraj po x osi

Figure 14. Dependence of the total force intensity between two helices as a function of angle rotation around the x axis



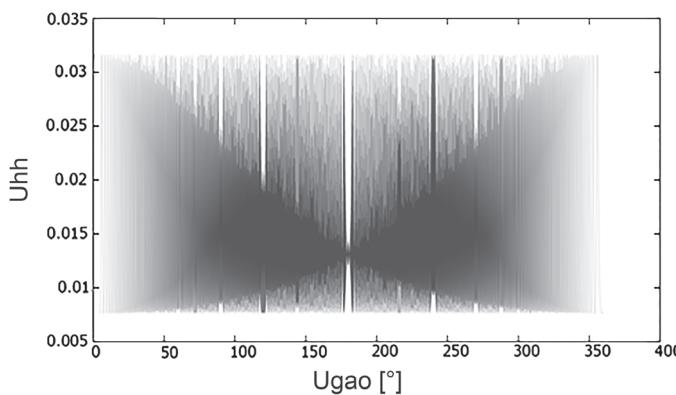
Slika 15. Zavisnost intenziteta ukupne sile između dva heliksa od ugla rotacije oko z ose

Figure 15. Dependence of the total force intensity between two helices as a function of angle rotation around the z axis

Primetna je simetrija sistema pri rotaciji jednog heliksa oko x i z osi. Energija i sila su simetrične u odnosu na trenutak kada jedan heliks zarođen za ugao od π radijana. Razlog ove simetrije je pravac magnetizacije koji se održava

tokom cele simulacije dok se pozicije menjaju. Rezultati energije i sile tokom rotiranja jednog heliksa po x osi su dati na slikama 13 i 14.

Kao i kod x ose, primetna je simetrija i kod z ose. Ovo pokazuje da prilikom rotacije dolazi do



Slika 16. Zavisnost energije između dva heliksa od ugla rotacije oko z ose

Figure 16. Dependence of the energy between two helices as a function of the angle rotation around the z axis

stalnih promena u interakciji između dve helikoidne strukture i da su ovakvi sistemi izuzetno nestabilni. Oscilacije primetne na ovim graficima (slika 15 i slika 16) su posledica smera magnetnog momenta i trenutne konfiguracije čestica, što nam ponovo pokazuje koliko je dipol-dipolna interakcija osetljiva na promenu parametara.

Određivanje magičnog ugla za interakciju dva identična heliksa

Za interakciju dve čestice sa dipolnim momentom pokazuje se da postoji određeni ugao između dipolnog momenta čestice koja se pomeri i vektora međusobnog položaja čestice, pri kome je potencijal dipol-dipolne interakcije jednak nuli, i taj ugao se naziva magični ugao. Jedna čestica se postavi za prečnik ispod druge i fiksira se, dok se ta druga čestica pomeri po x -osi. Njenim pomeranjem menja se potencijal dipol-dipolne interakcije između čestica i za jednu poziciju postaje nula. Ugao između međusobnog vektora položaja i dipolnog momenta te čestice koja se pomeri definiše magični ugao.

Formula koja određuje magični ugao između dve dipolne sfere je:

$$U_{dd} = C \frac{m_1 m_2 \sin \theta_1 \sin \theta_2 - 3 m_1 m_2 \cos \theta_1 \cos \theta_2}{r^3},$$

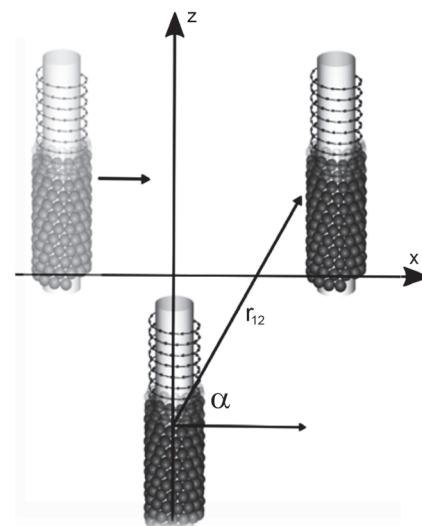
odakle se dobija da je magični ugao za dve dipolne sfere jedinstven i da iznosi 54.74° .

Odredili smo magični ugao za interakciju dva heliksa. Postavili smo helikse na identičan način kao u slučaju čestica i pomerali jedan heliks duž x ose slika 17.

Na slici 18 vidimo da postoji magični ugao i za helikse. On se menja u zavisnosti od broja čestica u heliksu, tako da nije jedinstven kao u slučaju dve čestice, već zavisi od odabranog heliksa.

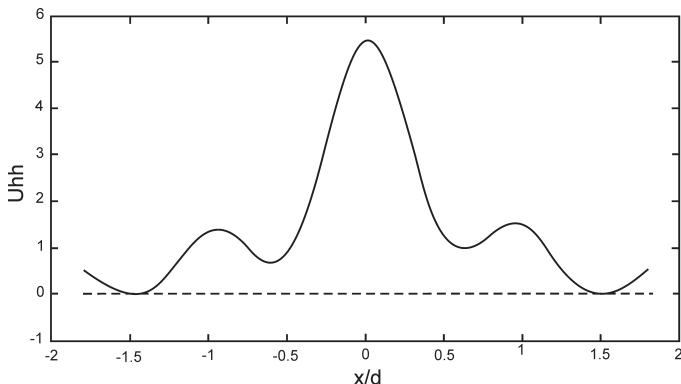
Analiza MT heliksa

MT (eng. multi-thread) se od ST heliksa razlikuju po nagnutosti magnetskih momenata u odnosu na xy ravan (slika 19). Ispitivane su iste interakcije kao i kod ST heliksa i uočeno je da su



Slika 17. Šematski prikaz određivanja magičnog ugla kod heliksa

Figure 17. Schematic representation of the observed situation

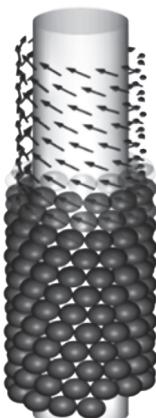


Slika 18. Zavisnost energije između dva heliksa – magični ugao

Figure 18. Dependence of the energy between two helices – magic angle

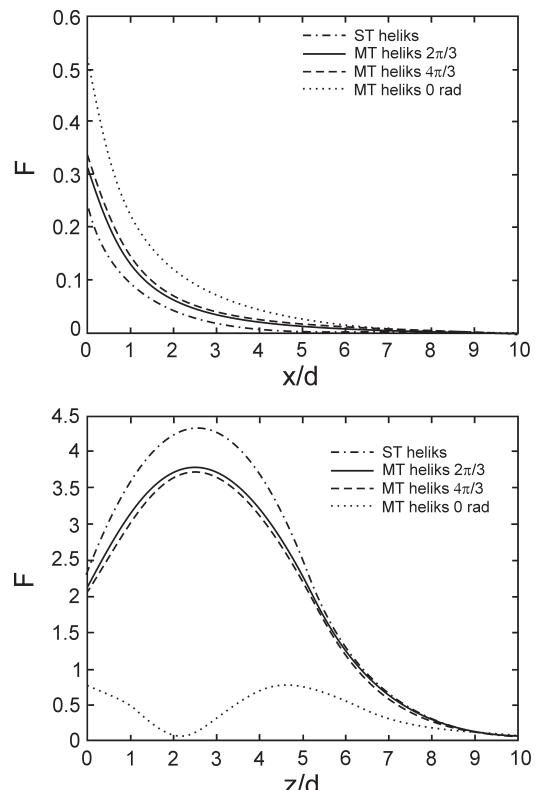
krive na graficima slične, ali da se menja intenzitet. Na graficima su data poređenja zavisnosti intenziteta sile od rastojanja između heliksa i probne čestice, kada se čestica pomera duž x i duž z ose, za ST heliks i tri vrste MT heliksa (slika 20). Vidimo da se MT heliksi po interakciji sa probnom česticom razlikuju od ST heliksa, što je i očekivano sa obzirom na promenu vrste magnetizacije heliksa.

Posmatrani su slučajevi kada MT heliksi imaju ugao magnetizacije od $0, 2\pi/3$ i $4\pi/3$ rad. Sa grafika (slika 20) se može zaključiti da se kod MT heliksa ukupan intenzitet sile razlikuje od ST heliksa. Intenzitet ukupne sile se menja sa uglom magnetizacije, i iz tog razloga smo ispitivali kako se promeni za bilo koji ugao.



Slika 19. Nagnutost magnetnih momenta u slučaju MT heliksa i njihova struktura

Figure 19. Inclination magnetic moment in case of MT helices and their structure

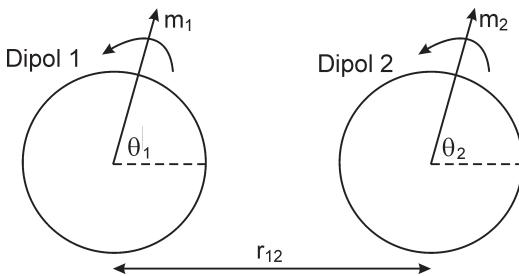


Slika 20. Grafički prikaz zavisnosti intenziteta sile kod ST I MT heliksa sa probnom česticom po x i z osi

Figure 20. Dependence of the total force intensity between helix (MT and ST) and test particle as a function of x and z axes displacement

Analiza interakcije između dva identična heliksa u zavisnosti od međusobne orientacije

U prethodnim radovima na ovu temu posmatrana je zavisnost potencijala dipol-dipolne interakcije od međusobne orientacije dve dipolne sfere. Orientacija dipolnog momenta jedne čestice je fiksirana i menja se u koracima od po $\pi/2$ radijana, dok se dipolni moment druge čestice rotira za puni ugao od 2π radijana. Na slici 21 dat je šematski prikaz ove situacije. Isti postupak primjenjen je na helikse, naime uzeta su dva identična heliksa i dipolni momenti jednog se rotiraju u koracima tako da uzimaju vrednosti $(0, \pi/2, \pi, 3\pi/2)$ dok se kod drugog heliksa za svaki od navedena 4 slučaja rotiraju za puni krug.



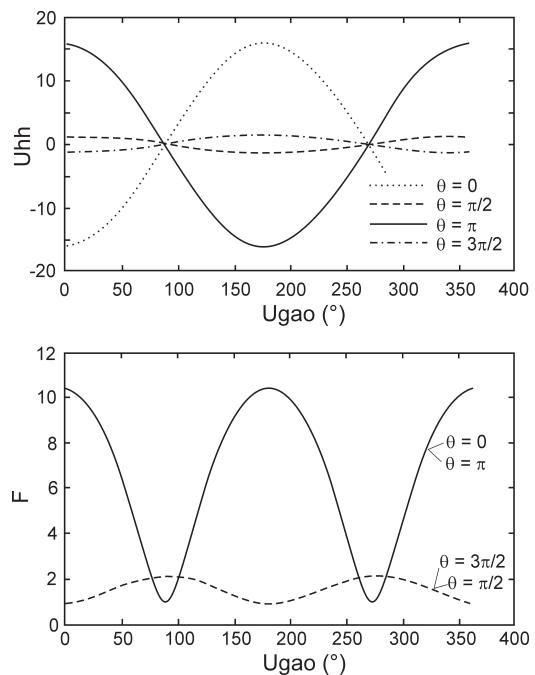
Slika 21. Šematski prikaz određivanja zavisnosti energije od ugla magnetizacije

Figure 21. Schematic representation of the observed situation

Sa grafika na slici 22 se zaključuje da je energija minimalna kada su magnetni momenti paralelni i imaju različit smer, dok je maksimalna kada imaju isti smer. Isti je slučaj kada su magnetni momenti međusobno normalni samo su apsolutne vrednosti energije manje nego u slučaju kad su magnetni momenti paralelni. Kada posmatramo silu, ukupani inteziteti sile za uglove 0 i π radijana se poklapaju kao i za početne uglove od $\pi/2$ i $3\pi/2$, zbog simetrije sistema grafik je simetričan u odnosu na ugao od 180° .

Razvoj modela

Drugi deo ovog rada posvećen je uprošćavanju početne helikoidne strukture uz pomoć lanca i prstena. Što se tiče poređenja, heliks i probna kuglica se porede sa modelom 1 i mode-

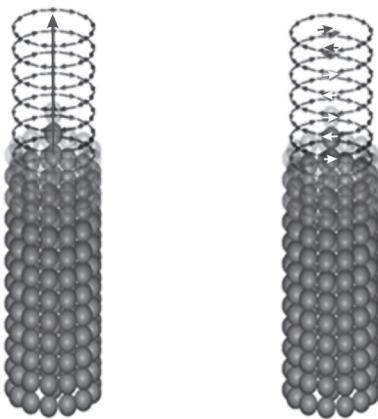


Slika 22. Grafički prikaz zavisnosti energije i ukupnog inteziteta sile u zavisnosti od ugla magnetizacije

Figure 22. Dependence of the energy and total force intensity between two helices as a function of the angle of magnetization

lom 2 i probnom kuglicom. Heliks ima samo ST orientaciju, ali posmatrane su dve vrste tuba AA i AB tube. AA tube su formirane tako što se prsteni pakuju jedan na drugi, broj prstena je jednak broju dipolnih sfera u lancu oko kog se postavljaju prsteni. Svaka od dipolnih sfera prstena ima $m_z = 0$, iz tog razloga svaka dipolna sfera lanca ima $m_z = 1$. AB tube se formiraju tako što se prsteni pakuju jedan na drugi tako da uvek između dve dipolne sfere jedna upadne iz sledećeg prstena. Da jedan deo lanca ne bi virio iz AB tube ona se formira dok visine ne postanu iste. Kao i kod AA tuba svaka dipolna sfera prstena ima $m_z = 0$, pa svaka čestica lanca ima $m_z = 1$. Ovo je slučaj za prva dva modela (slika 23).

Kod druga dva modela imamo lanac sa alternirajućim dipolnim momentima. Njega smo formirali da svaka dipolna sfera lanca ima magnetni moment usmeren u drugom smeru, a kod



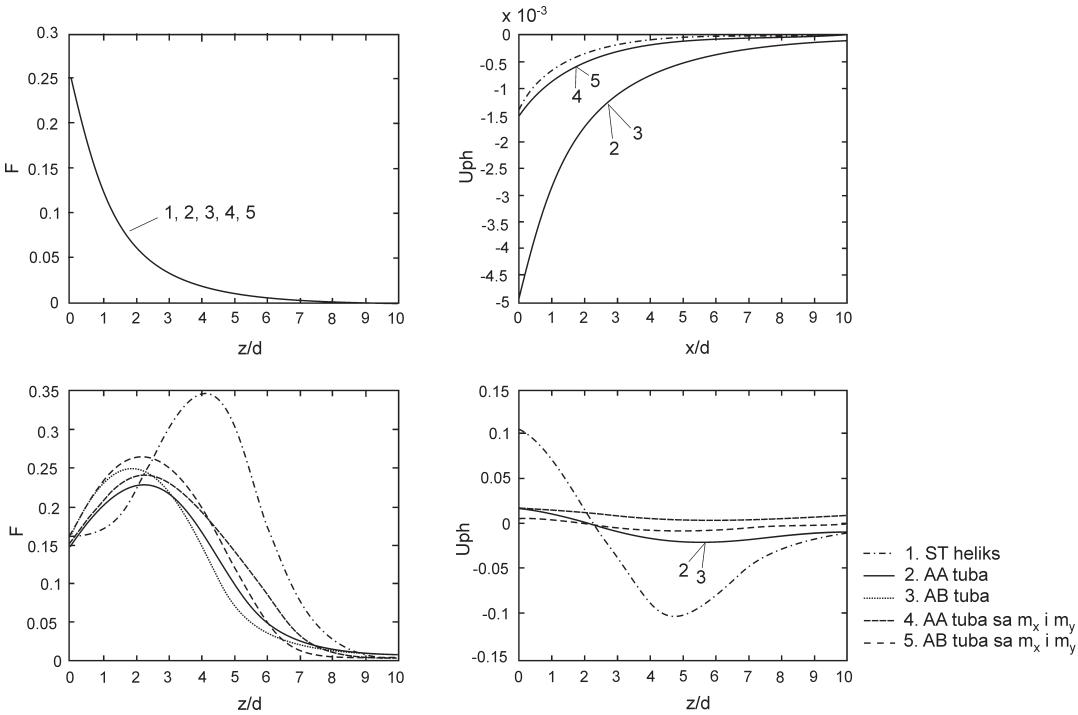
Slika 23. Šematski prikaz izabranih modela

Figure 23. Schematic representation of the observed situation

svake druge se ti smerovi poklapaju. Zbog simetrije sistema u ova dva slučaja, neophodno je da u lancu ima paran broj dipolnih sfera (slika 23).

Tako je upoređivano 5 krivih na istom grafiku: ST heliks i probna čestica, model 1a (AA tuba i lanac sa $m_z = 1$) i probna čestica, model 1b (AB tuba i lanac sa $m_z = 1$) i probna čestica, model 2a (AA tuba i lanac sa alternirajućim dipolnim momentima) i probna čestica, model 2b (AB tuba i lanac sa alternirajućim dipolnim momentima) i probna čestica. Za alternirajuće dipolne momente mora biti paran broj kuglica u lancu kako bi se poništile x i y komponente uzastopnih kuglica.

Na osnovu rezultata sa grafika na slici 24 može se zaključiti da je nemoguće formirati zamenu za helikoidnu strukturu u vidu modela koje smo mi izabrali. Razlog ovome je poklapanje datih rezultata po x osi a ne poklapanje po z osi.



Slika 24. Grafički prikaz zavisnosti energije i ukupnog inteziteta sile kod modela i početnog heliksa

Figure 24. Dependence of the energy and total force intensity between the models and test particle as a function of the x and z axes displacement

Ovo se dešava zato što svaka čestica početnog heliksa ima z komponentu magnetnog momenta dok kod naših modela nemaju sve čestice z komponentu. U ovom slučaju ponovo možemo uočiti osetljivost dipol-dipolne interakcije. Iako su modeli napravljeni tako da magnetni momenti po komponentama imaju istu sumu nije moguće modelovati na ovaj način uprošćeniju strukturu zbog ugla magnetizacije.

Zaključak

Primećeno je da intezitet ukupne sile i energija opadaju pri udaljavanju od početnog heliksa i kod probne čestice a i kod složenijih struktura kao što su heliksi. Pri rotaciji heliksa oko koordinatne ose dobijene su oscilacije ukupnog inteziteta sile i energije, simetrične u odnosu na ugao od π rad. Ovo je posledica različitog ugla magnetizacija i trenutne konfiguracije čestica. Postoji magični ugao pri kojem je energija interakcije između dva heliksa jednaka 0, ali nije jedinstven kao za slučaj dve čestice već zavisi od broja čestica u heliksu. Energija interakcije između dva heliksa je maksimalna ako su magnetni momenti paralelni, dok je minimalna kada su međusobno normalni. Uprošćeni modeli ne mogu zameniti početnu helikoidnu strukturu. Rad se može proširiti dodavanjem novih modela i uključivanjem spolašnjeg magnetnog polja.

Zahvalnost. Zahvaljujemo se svojim mentorima Miljanu Dašiću i Igoru Stankoviću, članovima Laboratorije za primenu računara u nauci Instituta za fiziku Univerziteta u Beogradu. Takođe, zahvaljujemo se rukovodiocu seminaru

fizike Petru Bojoviću, sa Fizičkog fakulteta Univerziteta u Beogradu. Pomenutim saradnicima IS Petnica i rukovodiocu našeg seminara zahvalni smo na korisnim savetima i pomoći prilikom organizacije i realizacije ovog rada.

Literatura

- Boncheva M., Andreev S., Mahadevan L., Winkelman A., Reichman D. R., Prentiss M. G., *et al.* 2005. Magnetic self-assembly of three-dimensional surfaces from planar sheets. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, **102**: 3924.
- Grzybowski A., Brodka A. 2003. Lekner type method for summing the dipole-dipole interactions. *Molecular Physics*, **101** (8): 1079.
- Kocbach L., Lubbad S. 2010. Geometrical simplification of the dipole-dipole interaction formula. *Physics Education*, **45** (4): 345.
- Messina R., Khalil L. A., Stanković I. 2014. Self-assembly of magnetic balls: From chains to tubes. *Physical Review E*, **89**: 011202(R).
- Prokopieva T. A., Danilov V. A., Kantorovich S., Holm C. 2009. Ground state structures in ferofluid monolayers. *Physical Review E*, **80**: 031404.
- Stanković I., Dašić M. Messina R. 2016. Structure and cohesive energy of dipolar helices. *Soft Matter*, **28** (12): 3056.
- Sellmayer D. J. 2002. Strong magnets by self-assembly. *Nature*, **420**: 374.
- Whitesides G. M., Grzybowski B. 2002. Self-Assembly at All Scales. *Science*, **295**: 2418.
- Zeng H., Li J., Liu J. P., Wang Z. L., Sun S. 2002. Exchange-coupled nanocomposite magnets by nanoparticle self-assembly. *Nature*, **420**: 395.

Nikola Petreski and Mihailo Radojević

Analysis and Development of the Model of Finite Dipole Helices

The topic of this paper is helicoides composed of a finite number of solid dipole spheres, known as the finite dipole helix. Solid dipole spheres have two types of interactions, such as: dipole-dipole interaction and hard interaction of solid spheres. Although at first glance it can be done simply, such a system exhibits complex behavior due to the nature of the dipole-dipole interaction, which is long-term and anisotropic. We explored various cases of helix interaction

with the test dipole sphere, as well as identical helices, taking into account the different dipole orientations of the helix, the so-called ST (single-thread) and MT (multi-thread) dipole orientations. The first part of our paper presents a detailed analysis of the interactions involving final dipole helix, and the other part is related to the development of the model of the given helix. In modeling, the aim is to replace the helix with a simplified structure that includes a ring and a chain, and to check if such a simplified structure on interaction behaves as a model helix. We also formed two types of helices that represent a simplified substitute for a helix and checked to what extent they can reproduce the given interactions.

