
Helena Miljković i Aleksa Denčevski

Ispitivanje 2D struktura magnetnih čvrstih sfera u spoljašnjem magnetnom polju metodom molekularne dinamike

Neodijumske čestice predstavljaju gotovo idealne magnetne dipole. Ovakav model omogućava praćenje kretanja čestica u spoljašnjem magnetnom polju, kao i uvid u njihovu međusobnu dipol-dipolnu interakciju i interakciju sa spoljašnjim magnetnim poljem. Osnovni cilj projekta je ispitivanje dinamike dipola u spoljašnjem magnetnom polju polazeći od prstena, strukture sa minimalnom energijom pre uključivanja magnetnog polja, formiranog od N ($4 \leq N \leq 13$) čestica. Pokazano je da kada se ovoliko čestica postavi dovoljno blizu da mogu međusobno da interaguju, njihovo stabilno stanje (stanje sa minimalnom potencijalnom energijom) je prsten. Jedan od ciljeva projekta je utvrđivanje minimalne jačine magnetnog polja potrebnog da se prsten kao stabilna struktura raspadne, takođe i utvrđivanje oblasti u parametarskom prostoru $\alpha(B)$ gde se formiraju određene stabilne strukture. Sa α je označen ugao rotacije prstena u odnosu na pravac magnetnog polja na početku simulacije, a sa B je označena jačina magnetnog polja. Sve čestice, njihova međusobna interakcija i interakcija sa spoljašnjim magnetnim poljem modelovani su simulacijama. Korišćenjem tih simulacija prati se ponašanje čestica u zavisnosti od jačine spoljašnjeg magnetnog polja B i ugla rotacije α . U ovom radu ispitana je dinamika dvodimenzionalnih struktura sačinjenih od 7 i 9 čestica.

Helena Miljković (1998), Beograd, Mileve Marić Ajnštajn 21/54, učenica 4. razreda Matematičke gimnazije u Beogradu

Aleksa Denčevski (1998), Kraljevo, Zelena Gora 46/16, učenik 4 razreda Gimnazije u Čačku

Teorijski uvod

Magnetne čestice su modelovane potencijalom koji ima dve komponente, prva je dipol-dipolna magnetna interakcija, a druga je tvrda interakcija čvrstih sfera. 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 . Potencijalna energija dobijena ovom interakcijom definisana je formulom:

$$U(\vec{r}_{12}) = C \frac{1}{r_{12}^3} \left[\vec{m}_1 \cdot \vec{m}_2 - 3 \frac{(\vec{m}_1 \cdot \vec{r}_{12})(\vec{m}_2 \cdot \vec{r}_{12})}{r_{12}^2} \right]$$

gde je $r_{12} = |\vec{r}_{12}| = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$, a konstanta C se može izračunati kada se dve čestice postavljaju jedna do druge pri čemu se i dipolni momenti postavljaju

MENTORI:

dr Igor Stanković, viši naučni saradnik, Laboratorija za primenu računara u nauci Instituta za fiziku Univerziteta u Beogradu

Miljan Dašić, doktorant, Laboratorija za primenu računara u nauci Instituta za fiziku Univerziteta u Beogradu

paralelno u istom smeru $U_{\uparrow\uparrow} \equiv \frac{C m^2}{d^3}$, gde je d rastojanje između čestica (Stanković *et al.* 2016; Messina *et al.* 2014). Takođe, sila koja deluje između dva dipola je:

$$\vec{F} = \frac{3\mu_0}{4\pi r^4} \left((\vec{r} \times \vec{m}_1) \times \vec{m}_2 + (\vec{r} \times \vec{m}_2) \times \vec{m}_1 - 2\vec{r}(\vec{m}_1 \cdot \vec{m}_2) + 5\vec{r}((\vec{r} \times \vec{m}_1) \cdot (\vec{r} \times \vec{m}_2)) \right)$$

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.

Čestice će nakon proizvoljnog postavljanja u prostoru, bez uticaja magnetnog i električnog polja, zauzeti konformaciju u kojoj ceo sistem ima minimalnu potencijalnu energiju. U zavisnosti od broja čestica konformacije su različite. Ako je broj čestica $N < 4$, one zauzimaju konformaciju lanca (što je 1D struktura), ako je broj čestica $4 \leq N \leq 13$ one zauzimaju 2D konformaciju. Prilikom daljeg povećavanja broja čestica prelazi se na 3D konformacije. Kada se čestice nalaze u prostoru bez uticaja spoljašnjeg magnetnog polja one međusobno interaguju, a energija lanca se računa po formuli:

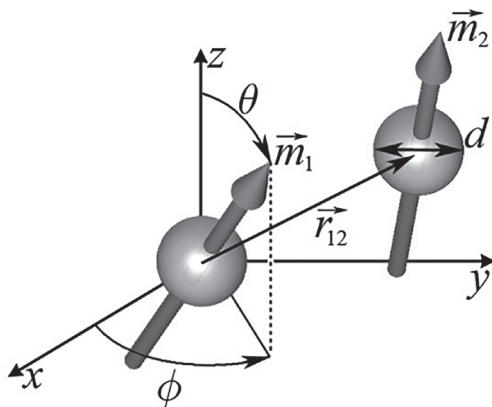
$$U_N^{(\text{lanca})} = \frac{-2}{N} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \frac{1}{(j-i)^3}$$

gde je N broj čestica u sistemu (Messina *et al.* 2014).

Sila koja se pojavljuje nakon ubacivanja sistema u spoljašnje magnetno polje je sila interakcije između čestice i magnetnog polja. Potencijalna energija koju ima čestica magnetizacije m_i prilikom ubacivanja u magnetno polje se računa po formuli:

$$U_B^i = \vec{m}_i \cdot \vec{B}_i$$

Pošto svi sistemi teže minimumu energije i potencijalna energija čestice se računa pomoću gornje formule uočavamo da prilikom smanjenja ugla između vektora magnetnog momenta m i vektora magnetnog polja B



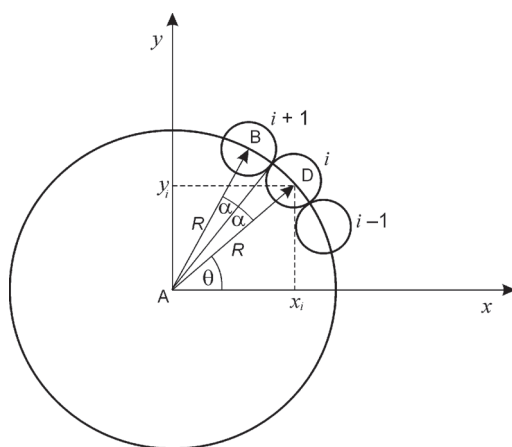
Slika 1. Šematski prikaz dve čestice koje međusobno interaguju. Predstavljene su u Dekartovom koordinatnom sistemu. Prikazan je vektor položaja \vec{r}_{12} kao i polarni ϕ i azimutni θ ugao koji određuju pravac i smer magnetnog momenta čestica. (Prema: Messina i Stanković 2015)

Figure 1. Schematic representation of two particles interacting. They are presented in the Cartesian coordinate system. The figure contains the position vector \vec{r}_{12} and the polar ϕ and azimuthal θ angle which determine the direction of the magnetic moment of the particles. (Adpt. from: Messina & Stanković 2015)

smanjuje se i potencijalna energija te čestice. U trenutku kada svi magnetni momenti čestica postanu paralelni i u smeru i pravcu magnetnog polja, sila koja deluje između čestica jednaka je nuli kao i sila dipol-dipolne interakcije, a ukupna potencijalna energija postaje minimalna. To stanje smatramo stabilnim nakon uključivanja spoljašnjeg magnetnog polja. Čestice možemo opisati pomoću poluprečnika čestice, koordinata u Dekartovom koordinatnom sistemu, takođe i preko polarnog i azimutnog ugla koji određuju pravac i smer magnetnog momenta čestice (slika 1). Notacija sa slike je korišćena u formulama.

Metod

Ispitujemo sistem pomoću programa napisanih u softverskom paketu MatLab . Simulacije su realizovane metodom molekularne dinamike, tj. integracijom Njutnovskih jednačina. Kako se sve čestice opisuju preko koordinata i magnetnog momenta čestice, potrebno ih je postaviti u početnu konformaciju. U slučaju koji ispituje to je prsten. Kako sve čestice imaju jednake jedinične prečnike može se opisati geometrija svakog prstena od N čestica. Na taj način programom određujemo početne uslove simulacije kao što su koordinate svake čestice, njihovo početno rastojanje od centra prstena i pravac i smer magnetizacije čestica.



Slika 2. Geometrijska struktura prstena. Manji krugovi u čijem centru se nalaze tačke B i D predstavljaju dvodimenzionalnu reprezentaciju čestica. Na slici vidimo projekciju koordinata jedne čestice, vektor položaja i -te čestice i ugao koji gradi sa x -osom.

Figure 2. Geometrical ring structure. Small circles with centers in points B and D, respectively, are a two-dimensional representation of particles. In the picture we also see the projection of one of the particles' coordinates, the position vector of the particle and the angle which it forms with the x axis.

Ugaoni korak predstavlja ugao između pravaca položaja dve susedne čestice u koordinatnom sistemu čiji se centar nalazi u centru prstena (slika 2). Ugaoni korak između centara dve susedne čestice je $\theta = 2\pi/N$, pozicioni korak predstavlja ugao za koji treba zarotirati vektor položaja svake čestice da bismo dobili vektor položaja druge čestice. Pozicioni korak za bilo koju česticu u prstenu počev od prve je $\theta_i = i \frac{2\pi}{N}$, gde je i broj čestice numerisane

od pozitivnog dela x ose. Posmatrajući rastojanje između centra dve čestice (slika 2), gde je prečnik svake čestice jediničan, tada je rastojanje centra

čestice od dodirne tačke sa drugom česticom jednako $\frac{1}{2}r$, a odavde vidimo da je ugaoni korak između dve susedne čestice $\alpha = \pi/N$. Odavde se može uočiti da poluprečnik prstena zavisi od broja čestica:

$$R = \frac{1}{2 \sin \frac{\pi}{N}}$$

Na početku simulacije svakoj čestici se dodeljuju pozicije u 2D prostoru. Jednačine koje definišu koordinate svake čestice u prstenu numerisane od pozitivnog dela x ose sa $i = \{1, N\}$:

$$x_i = R \cos\left(i \frac{2\pi}{N} + \alpha\right)$$

$$y_i = R \sin\left(i \frac{2\pi}{N} + \alpha\right)$$

$$z_i = 0$$

gde je R poluprečnik prstena, N broj čestica u prstenu i α ugao rotacije prstena u odnosu na pravac magnetnog polja.

Dipolni moment na početku simulacije definisan je na sledeći način:

$$\mu_{x_i} = R \cos\left(i \frac{2\pi}{N} + \frac{\pi}{2} + \alpha\right)$$

$$\mu_{y_i} = R \sin\left(i \frac{2\pi}{N} + \frac{\pi}{2} + \alpha\right)$$

$$\mu_{z_i} = 0$$

gde je redni broj čestice u prstenu numerisan sa $i = \{1, N\}$

Smer i pravac dipolnog momenta određene čestice dobijen je rotacijom vektora položaja posmatrane čestice za ugao od devedeset stepeni u retrogradnom smeru, zbog toga u trigonometrijskom predstavljanju ovog vektora figurišu svi uglovi kao i u trigonometrijskom prikazu vektora položaja čestice i dodat je ugao $\pi/2$. Intenziteti magnetnih momenata svih čestica su jednaki i jedinični (Kun *et al.* 2001).

Jedan od matematičkih modela koji aproksimira interakciju između dva neutralna atoma ili molekula je Lenard–Džonsov potencijal. Ovim modelom se pokazuje da između dve neutralne čestice postoji privlačna i odbojna sila. Na velikim rastojanjima sila je privlačna i ona je posledica pokretljivosti naelektrisanja zbog čega neutralne čestice jedna drugoj indukuju dipole koji se međusobno privlače. Na malim rastojanjima čestice se odbijaju i to je posledica prekrivanja naelektrisanja različitih čestica. U simulaciji je korišćen odsečen Lenard–Džonsov potencijal kako bi postojao samo odbojni deo. Nije posmatran potencijal za rastojanja manja od $r_{\min} = \sigma \cdot 2^{\frac{1}{6}}$ koje predstavlja rastojanje na kojem je potencijal minimalan. Lenard–Džonsov potencijal se računa po formuli:

$$V(r) = 4\varepsilon \cdot \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

gde je ε dubina potencijalne jame, σ radijus čestice predstavljene kao čvrsta sfera i r rastojanje između čestica. Posmatranjem uticaja članova jednačine na ukupnu međusobnu interakciju primećuje se da $(\sigma/r)^{12}$ predstavlja kratkodometni odbojni član, dok $(\sigma/r)^6$ predstavlja dugodometni privlačni član.

U simulaciji je uračunato i postojanje Braunovog kretanja kako sistem ne bi ostao u nekom od lokalnih minimuma. Uračunavanjem Braunovog kretanja dajemo mali impuls proizvoljnog pravca i smera svim česticama u posmatranom sistemu da bi se narušila simetričnost sistema koja može dovesti do dobijanja lokalnog minimuma potencijalne energije sistema. Uključivanjem Braunovog kretanja dolazi do pojave magnetnog momenta i ponovne interakcije čestica sa spoljašnjim magnetnim poljem. Takođe, radi pojednostavljenja programa za simulaciju korišćeni su kvaternioni pomoću kojih su opisivane prostorne rotacije. Svaka čestica u sistemu se rotira u zavisnosti od momenta sile u svakom koraku, a to se postiže korišćenjem kvaterniona. Kvaternioni su numerički sistem koji se koristi za matematički prikaz posmatranih fizičkih sistema. Ovaj sistem kvaterniona proširuje sistem kompleksnih brojeva i obično se koristi za opisivanje kretanja tro-dimenzionalnih tela koja rotiraju, a takođe i za njihov grafički prikaz.

Parametri koji su varirani tokom simulacije su ugao prstena u odnosu na magnetno polje, broj čestica u prstenu i jačina magnetnog polja. Jačina spoljašnjeg magnetnog polja varirana je u rasponu od 0 do 10 arbitrarnih jedinica. Rotacijom celog prstena menja se x komponenta magnetnog dipola. Kako se x komponenta magnetnog dipola povećava, čestice će bolje pratiti spoljašnje magnetno polje koje je postavljeno u pravcu x ose. Tako one imaju manju potencijalnu energiju i sistem postaje stabilniji. Početni parametar u simulaciji je ugao rotacije prstena koji mora biti manji od ugaonog koraka između dve susedne čestice. Kako bi se ravnomerno ispitao ceo ugaoni korak, simulacije su vršene na svaku desetinu ugaonog koraka, tako da su kao ulazni parametri simulacija uzeti uglovi:

$$\alpha = \frac{2\pi}{N} \cdot \frac{i}{k}$$

gde i ima vrednost od 1 do 10, N predstavlja broj čestica u sistemu, a k broj koraka u kojem su vršena merenja.

Simulacija je napravljena tako da posmatra promene parametara kao što su pozicije, magnetni momenti, sila, energije dipol-dipolne interakcije i interakcije čestica sa spoljašnjim magnetnim poljem svake čestice u malom intervalu vremena. Podaci se čuvaju u folderima koji se formiraju za dati set ulaznih parametara simulacije. Takođe, program posle svakog odabranog malog intervala vremena vizualizuje stanje sistema, čime možemo da posmatramo ponašanje sistema. U slučaju da se prsten nije prekinuo izračunava se ekscentricitet elipse, pošto se u tom slučaju prsten deformiše u elipsu. Na početku simulacije u program unosimo ulazne parametre: ugao za koji se

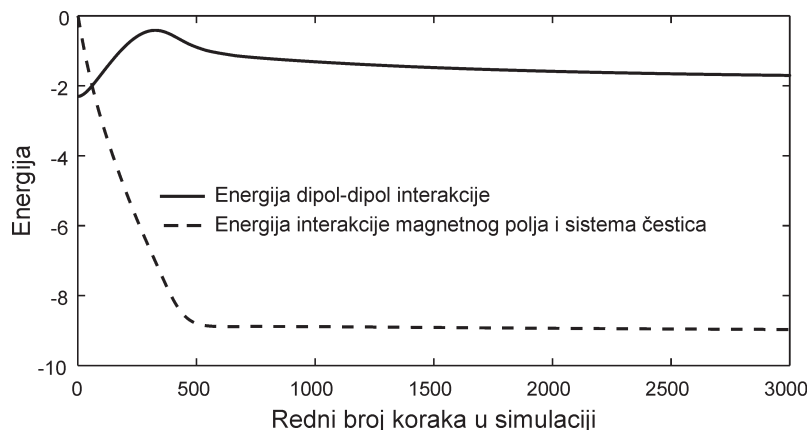
prsten rotira u odnosu na smer x ose (ugao rotacije prstena mora biti manji od ugaonog koraka između dve susedne čestice), pravac i intenzitet magnetnog polja u kojem je postavljena struktura, kao i broj čestica u strukturi.

Rezultati

Puštanjem simulacije, nakon postavljanja čestica u strukturu koju ispitujemo, čestice počinju da se kreću kako bi došle u stanje sa minimalnom energijom. Rotacijom celog prstena menja se x komponenta magnetnih dipola zbog čega se menja početno stanje sistema. Kako se x komponenta magnetnog dipola povećava čestice će bolje pratiti spoljašnje magnetno polje koje je postavljeno u pravcu x ose. Tako one imaju manju potencijalnu energiju i sistem postaje stabilniji.

Energija sistema

Na slici 3 predstavljena je promena energija u sistemu. Na kraju grafika vidimo stanje u kojem je ukupna srednja energija pojedinačne čestice minimalna. Rotacijom celog prstena menja se x komponenta magnetnih dipola zbog čega se menja početno stanje sistema. Kako se x komponenta magnetnog dipola povećava, čestice će imati manju energiju interakcije sa magnetnim poljem, $U_B^i = \vec{m}_i \cdot \vec{B}$. Pri pomeranju čestica postoji naglo pove-



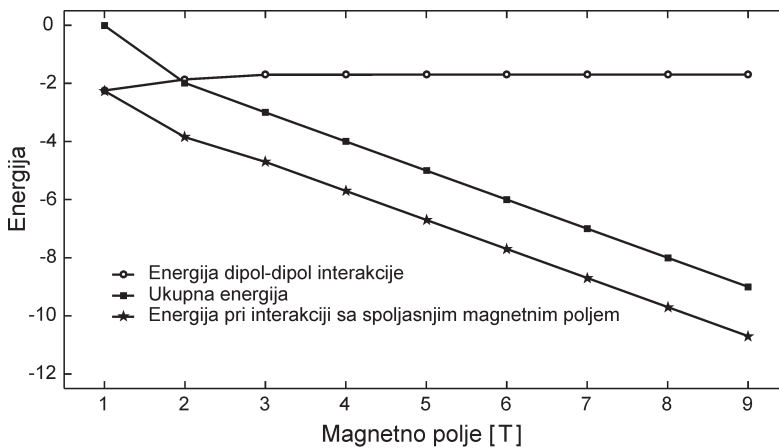
Slici 3. Grafik zavisnosti promene srednje vrednosti energije koju poseduje čvrsta sfera zbog dipol-dipol interakcije i interakcije magnetnog polja i sistema čestica u zavisnosti od broja koraka urađenih u simulaciji. Sistem se sastoji od jedanaest čvrstih sfera, $N = 11$, prsten je zarotiran za ugao $\alpha = 0.514$, dok je magnetno polje u koje je sistem ubačen $B = 9$ arbitrarnih jedinica.

Figure 3. Graph of the dependence of the change in the mean energy value of the solid sphere due to the dipole-dipole interaction (full line) and the interaction between the magnetic field and the particle system (dashed line) depending on the number of steps performed in the simulation. The system consists of eleven solid spheres, $N = 11$, the ring is rotated by $\alpha = 0.514$ while the magnetic field in which the system is situated is $B = 9$ arbitrary units.

ćanje energija dipol-dipolne interakcije. Razlog za to je izlazak sistema iz stanja u kojem je ova energija minimalna (Messina *et al.* 2014):

$$U(\vec{r}_{ij}) = C \frac{1}{r_{ij}^3} \left[\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j - 3 \frac{(\vec{m}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^2} \right]$$

Nakon toga energija dipol-dipolne interakcije počinje da se smanjuje kao i energija interakcije magnetnog polja sa česticom, tako da sistem počinje da se stabilizuje. Energija dipol-dipolne interakcije neće moći da dostigne vrednost na početku, ali zbog velikog smanjenja energije koja je dobijena prilikom interakcije sa magnetnim poljem dobija se znatno niža ukupna energija sistema od ukupne energije na početku simulacije (Stanković *et al.* 2016).



Slika 4. Prikazana je srednja energija dipol-dipolne interakcije i energije koju dobije sistem prilikom interakcije sa spoljašnjim magnetnim poljem, kao i ukupna energija koju poseduje čestica u sistemu sačinjenom od devet čestica, $N=9$, gde je prsten zarotiran za ugao od $\alpha = 0.0775$.

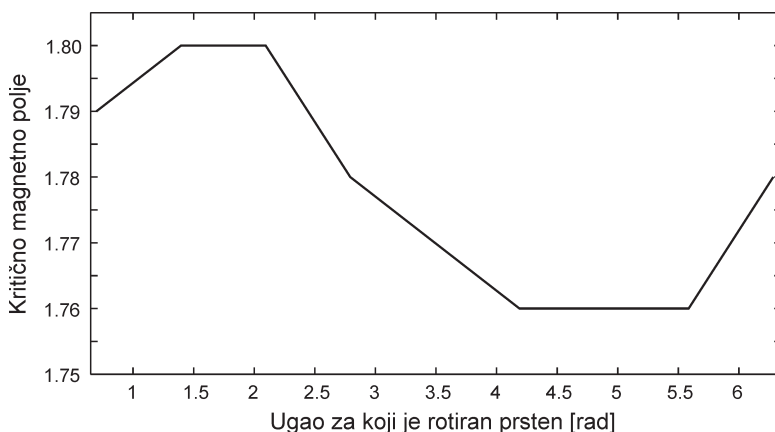
Figure 4. The mean energy of the dipole-dipole interaction (circle) and energy obtained by the system in interaction with the external magnetic field (star), as well as the total energy the particle possesses in a system composed of nine particles (square); $N=9$, where the ring is rotated for an angle of $\alpha = 0.0775$.

Upoređivanjem energija konačnih konfiguracija sistema uočeno je da ona ne zavisi mnogo od ugla prstena u odnosu na x osu. Njihova razlika je reda veličine 10^{-5} , što je zanemarljivo. Ona se linearno povećava sa povećanjem ugla. Iako se energija sistema ne povećava mnogo sa povećanjem ugla to ne važi i za povećanje magnetnog polja. Posmatranjem energija konačnih konfiguracija sistema koji se nalaze pod istim pozicionim korakom, ali pri različitim magnetnim poljem uočavamo da se energija menja po linearnoj zavisnosti. Prilikom povećanja magnetnog polja energija konačnih konfiguracija se smanjuje po linearnoj zavisnosti, što vidimo na slici 4.

Kritično magnetno polje

Kritično magnetno polje je intenzitet polja koji je potrebno dovesti da bi se prsten prekinuo.

Variranjem ugla za koji je zarotiran prsten u odnosu na početan položaj dobijena je velika razlika u kritičnoj vrednosti magnetnog polja. Na slici 5 možemo videti da je potrebno veće magnetno polje da bi se uništio prsten sačinjen od devet kuglica koji je zarotiran za ugao od 1.5 do 2.25 rad nego prsten koji je zarotiran za ugao od 4.5 do 5.5 rad. Slični rezultati se dobijaju i za prsten sačinjen od sedam kuglica.



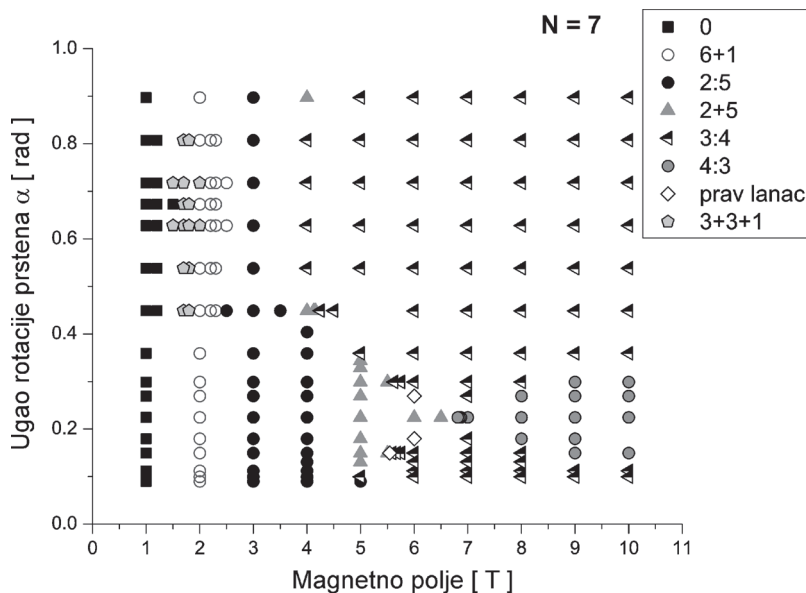
Slika 5. Grafik zavisnosti kritičnog magnetnog polja od ugla za koji je zarotiran prsten u odnosu na x osu, θ , za strukturu sačinjenu od devet čestica, $N = 9$

Figure 5. Graph of the dependence of the critical magnetic field on the angle for which the ring is rotated in relation to the x axis, θ , for a structure composed of nine particles, $N = 9$

Konačne konfiguracije

Konfiguracija predstavlja način na koji se čestice postavljaju u nekom trenutku. Pošto posmatramo konačne konfiguracije to znači da posmatramo način na koji se čestice postavljaju u trenutku kada se sistem stabilizuje. Prilikom interakcije prstena sačinjenog od čestica (struktura sa minimalnom energijom) sa magnetnim poljem, može doći do prekida prstena ili do menjanja oblika strukture (struktura ostaje zatvorena ali promeni ekscentricitet koji je različit od nule).

Posmatrane su konačne strukture od sedam čestica. Kako bi se ispitalo dejstvo magnetnog polja od 0 do 10 arbitrarnih jedinica i ugla rotacije, $\frac{2\pi}{7} \cdot \frac{1}{i}$, $\theta = \frac{2\pi}{7} \cdot \frac{i}{10}$, vrednosti iz datih opsega po oba parametra su ravnomerno uzimane. U zavisnosti od spoljašnjeg magnetnog polja dobijene su različite konfiguracije.



Slika 6. Fazni dijagram za $N = 7$ čestica. Konačne konfiguracije sistema sačinjenog od $N = 7$ čestica. Znak + označava da su se formirala dva lanca gde prvi broj predstavlja broj čestica u gornjem lancu, a drugi broj predstavlja broj čestica u donjem lancu. Znak : kazuje da su gornji i donji lanac spojeni.

Figure 6. Phase diagram of $N = 7$ particles. The picture shows the final configurations of the system made up of seven particles. The + sign indicates that two chains were formed, where the first number represents the number of particles in the upper chain, and the second number represents the number of particles in the lower chain. The sign : indicates that the upper and lower chains are connected.

Prva oblast faznog dijagrama pokazuje oblast u kojoj se sistem ne deformiše (slika 7A), ni pri većem magnetnom polju. To se objašnjava uglom rotacije celog prstena. U toj oblasti sistem čestica je postavljen tako da je jedna čestica orijentisana suprotno od spoljašnjeg magnetnog polja. Obrtni moment čestice koja je orijentisana suprotno od spoljašnjeg magnetnog polja teži da isprati kuglicu koja se nalazi ispred nje, tada se ceo sistem zarotira i sistem postaje uravnotežen.

Oblast kompresije predstavlja deo faznog dijagrama u kom prsten ne puca vec dolazi do deformacije prstena (slika 7B). Prsten se deformiše tako da je samo jedna čestica orijentisana suprotno od spoljašnjeg magnetnog polja. Četiri čestice su tako orijentisane da svaka ima svog para čiji je magnetni moment orijentisan surpotno. Spoljašnje magnetno polje nije dovoljno jako da razdvoji dve čestice ali omogućava da se prsten zarotira i naspramne čestice međusobno privuku. To se dešava jer se prsten deformiše odnosno skuplja, a tada je rastojanje između naspramnih čestica manje. Kada rastojanje dostigne kritičnu vrednost, između čestica se stvara privlačna sila. Brzina njihovog privlačenja je proporcionalna sili, te se

čestice u zavisnosti od spoljašnjeg magnetnog polja brže privlače sa povećanjem istog.

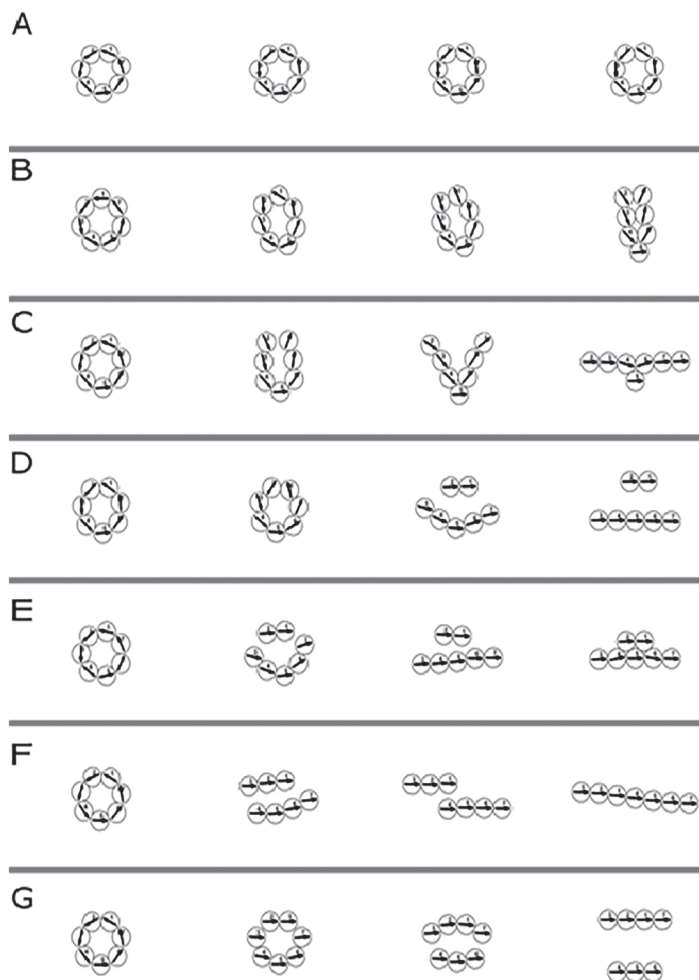
U trećoj oblasti dolazi do stvaranja jednog lanca sa česticom uz lanac (slika 7C). Pri svim vrednostima ugla rotacije i pri spoljašnjem polju od oko $B = 2$ dolazi do pucanja lanca na samo jednom mestu. Lanac puca na mestu gde dve susedne čestice imaju dipole koji su orijentisani suprotno, a teže da isprate ostale čestice koje su im susedne. U okolini ugla u kojem je samo jedna čestica orijentisana suprotno od spoljašnjeg magnetnog polja dolazi do nepovoljnog položaja čestica. Energija spoljašnjeg magnetnog polja je nedovoljna da zarotira lanac tako da čestice budu u povoljnom položaju. Njihovi magnetni momenti postanu paralelni kako bi došlo do pucanja lanca na jednom mestu. Takođe je u ovoj okolini potrebno jače magnetno polje da prsten pukne na dva mesta.

Nakon daljeg praćenja stanja u spoljašnjem magnetnom polju, pri daljem njegovom povećanju dolazi do pucanja prstena na dva mesta. Tada se stvaraju dva lanca koji se ili privuku ili odbiju, a pri određenim vrednostima spoljašnjeg magnetnog polja i ugla rotacije prstena dolazi do spajanja nastalih lanaca i do formiranja konfiguracije koja predstavlja stabilno stanje sa minimumom energije za manji broj čestica.

Prvi odnos pucanja prstena na dva lanca je 2 prema 5 (slika 7 D), to je konfiguracija u kojoj prsten puca na dva mesta pri čemu se stvaraju dva lanca od po 2 i 5 čestica, ta dva lanca se međusobno odbijaju i postaju paralelni prateći spoljašnje magnetno polje. Pucanje prstena se događa na dva mesta, tada dve čestice na vrhu imaju komponente magnetnog dipola takve da im se dipoli isprate i tada su orijentisane suprotno od njihovih suseda, što omogućava pucanje prstena sa obe strane ovog para čestica. Sa faznog dijagrama se mogu uočiti minimalna i maksimalna vrednost spoljašnjeg magnetnog polja pri kojem prsten puca na dva mesta i nastaju dva lanca. Takođe, pri povećanju magnetnog polja nakon ovog stanja dolazi do stvaranja dva nova stanja od kojih je jedno privlačno a drugo odbojno stanje. Konfiguracija u kojoj je privlačna sila između dva lanca dovoljno velika da se oni sastave nastaje za opseg ugla u kojem su dve čestice suprotno orijentisane od spoljašnjeg magnetnog polja ili kada su projekcije dipolnog momenta tako uređene da lanac pukne na dva mesta. Između dva lanca deluje privlačna sila i oni se spajaju (slika 7E). Ako je dipolni moment jedne čestice orijentisan suprotno od spoljašnjeg magnetnog polja, potrebno je manje energije da lanac pukne na dva mesta i to tako da kritična čestica bude spojena sa po jednom česticom sa obe strane, jer one imaju povoljne projekcije dipolnog momenta, tako da lanac baš na tom mestu puca. Tu se javljaju odbojne sile između ova dva novonoastala lanca od po 3 čestice i od po 4 čestice (slika 7G). Na faznom dijagramu se može uočiti ostrvo gde se nalazi konfiguracija od 7 čestica. Ona se može smatrati kao prelazna konfiguracija stanja 2+5 i 3:4, jer prvobitno prsten puca na dva lanca sa po 3 i 4 čestice i to je odlika konfiguracije 3:4, dok postoji i privlačna sila između ovih lanaca i oni se privuku tako da im se krajnja i početna čestica oba lanca sastave. Privlačna sila takođe potiče iz privlačne konfiguracije 2+5. Lanac od 7 čestica (slika 7F) nastaje pri tačno određenim

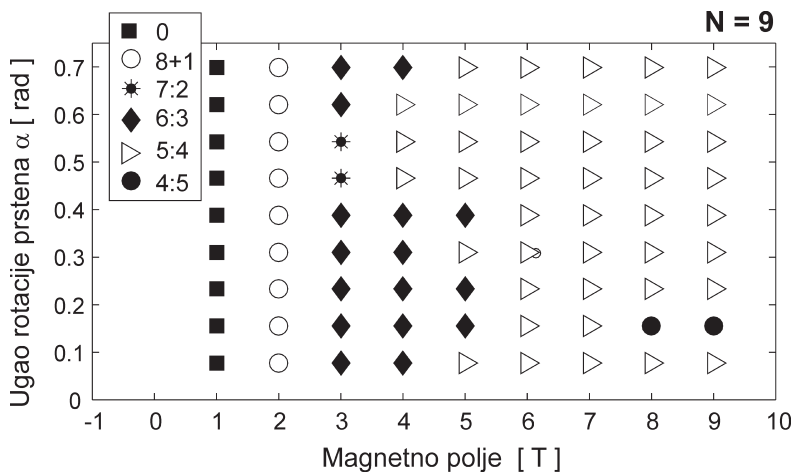
vrednostima spoljašnjeg magnetnog polja i ugla rotacije prstena. Ova konfiguracija se ne javlja uvek između prethodno pomenutih konfiguracija, već od njih uzima povoljne osobine za nastajanje pravog lanca koji je odlika minimuma energije za sisteme koji imaju manje čestica. Na faznom dijagramu se vidi da je poslednja konfiguracija u nizu 3:4. Brzina formiranja ova dva lanca je proporcionalna jačini spoljašnjeg magnetnog polja koje deluje na prsten, tako da sa povećanjem jačine magnetnog polja opada vreme formiranja ova dva lanca.

Na faznom dijagramu se može uočiti još jedna kriva i ona označava minimalnu vrednost spoljašnjeg magnetnog polja pri kojem prsten puca na neku od pomenutih konfiguracija. Maksimalna vrednost polja da bi došlo do pucanja lanca na jednom mestu je ugao rotacije pri kojem je jedna čestica orijentisana suprotno od spoljašnjeg magnetnog polja. Tada se ceo sistem zarotira ponovo kako bi se čestice dipolno međusobno pratile i sistem postaje uravnotežen.



Slika 7. Konfiguracije nastale pri uticaju spoljašnjeg magnetnog polja na prsten sastavljen od 7 čestica koje međusobno interaguju. Slika prikazuje formiranje svake konfiguracije u vremenu.

Figure 7. Configurations resulting from the influence of an external magnetic field on a ring made up of 7 particles interacting with one another. The image shows the formation of each configuration in time.

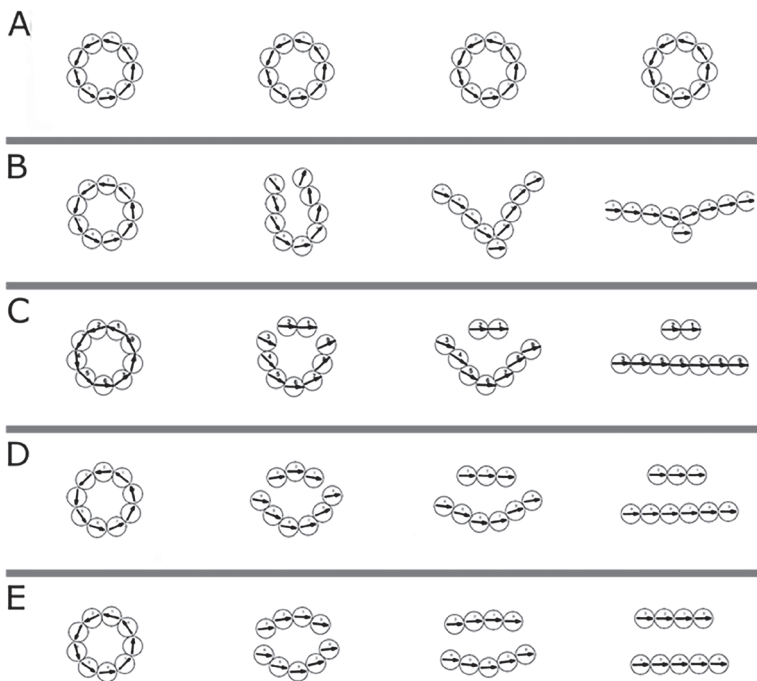


Slika 8. Fazni dijagram za $N = 9$ čestica. Na slici su prikazane konačne konfiguracije sistema sačinjenog od devet čestica. Znak + označava da su se formirala dva lanca, gde prvi broj predstavlja broj čestica u gornjem lancu, a drugi broj predstavlja broj čestica u donjem lancu. Znak : kazuje da su gornji i donji lanac spojeni.

Figure 8. Phase diagram of $N = 9$ particles. The picture shows the final configurations of the system made up of nine particles. The + sign indicates that two chains were formed, where the first number represents the number of particles in the upper chain, and the second number represents the number of particles in the lower chain. The sign : indicates that the upper and lower chains are connected.

Ispitivane su konačne strukture prstena sačinjenog od devet čestica. Kako bi se ravnomerno ispitao ceo opseg magnetnog polja (od 0 do 9 arbitrarnih jedinica) i ugla rotacije, $\theta = 2\pi/9$, opsezi su deljeni na po devet delova. U zavisnosti od spoljašnjeg magnetnog polja dobijene su različite konfiguracije.

Struktura sačinjena od devet čestica se raspada na pet načina u zavisnosti od magnetnog polja u koje je ubačena, kao i ugla između prstena i magnetnog polja. Posmatrajući grafik primećuje se da konačne konfiguracije sistema koji se nalaze u polju koje je dovoljno veliko da bi uništilo strukture, uglavnom formiraju dva lanca. Za razliku od faznog dijagrama za sedam čestica, fazni dijagram na slici 8 ne sadrži konfiguracije pravog lanca. Posmatranjem faznog dijagrama dobijenog za sedam i devet čestica primećuje se sličnost u načinu ponašanja nakon raspadanja struktura. Odnosi između lanaca koji se dobiju su slični. Prilikom traženja konačnih konfiguracija za sistem sačinjen od devet čestica uočava se da postoji šest različitih raspodela. Pri uključivanju magnetnog polja koje je malo veće od granične vrednosti, nastaje struktura koja je napravljena tako da ima lanac za koji je pilepljena jedna čestica (slika 9B). Ako nastavimo sa povećanjem magnetnog polja dolazi do podele prstena na dva dela nakon čega nastaju dva paralelna lanca. Prelazne strukture su 2:7 i 3:6 (slika 9 i D). Način na koji se prsten deli je sličan kao kod prstena sa sedam čestica,



Slika 9.
Konfiguracije nastale pri uticaju spoljašnjeg magnetnog polja na prsten sastavljen od 7 čestica koje međusobno interaguju. Slika prikazuje formiranje svake konfiguracije u vremenu.

Figure 9.
Configurations formed during the influence of an external magnetic field on a ring made of seven particles, which at the same time interact with each other. The image shows the formation of each configuration in time.

odnos između broja čestica je sličan. U slučaju za veća magnetna polja odnos između broja čestica u oba lanca je približno jednak jedan, tj. pošto je broj čestica u prstenu neparan, razlika između broja čestica u oba lanca će biti jednaka jedan. Ovakve strukture se formiraju nakon ubacivanja prstena u jako magnetno polje, (slika 9E). Postoje dva simetrična slučaja 4:5 i 5:4.

Zaključak

U ovom radu je posmatrano ponašanje neodijumskih kuglica u magnetnom polju. Neodijumske kuglice imaju stalni magnetni dipolni moment, te interaguju sa spoljašnjim magnetnim poljem. Broj kuglica koje su postavljene u magnetno polje iznosio je sedam i devet. Ovaj parametar je biran tako da je struktura sa minimalnom energijom pre uključivanja magnetnog polja dvodimenzionalna, odnosno prsten. Zbog osobine kuglica da su idealni dipoli, strukture sačinjene od njih se ponašaju na sličan način kao neki biološki, tehnološki i teorijski interesantni sistemi.

Kretanje kuglica u magnetnom polju simulirano je metodom molekularne dinamike, gde se u svakom vremenskom koraku rešava Njutnova jednačina kretanja za svaku kuglicu ponaosob, određuju kinematički parametri (brzina i ubrzanje) i u skladu sa time kuglice se pomeraju, pri čemu svaka simulacija radi zadati broj koraka. Ispitivanje struktura od magnetnih kuglica u spoljašnjem magnetnom polju pomoću ovog modela omogućava nam da pratimo silu koja deluje na kuglice. Sila nastaje usled interakcije kuglica sa spoljašnjim magnetnim poljem, kao i usled dipol-dipolne interakcije među

kuglicama. Osim sila, pratimo i energiju sistema u svakom trenutku, čime određujemo njegovu dinamiku. U ovom radu je ispitivan najjednostavniji slučaj homogenog (usmereno duž x -ose koordinatnog sistema) i konstantnog polja ($B_x = \text{const}$). Variranjem ugla za koji je prsten zarotiran u odnosu na početni položaj i jačine magnetnog polja, pokriven je ceo opseg za ugao i opseg od 0 do 9 arbitrarnih jedinica za magnetno polje, pri čemu su oba opsega pokrivena ravnomerno. Prilikom ispitivanja primećeno je da se vrednost kritičnog magnetnog polja drastično menja u zavisnosti od ugla za oba ispitivana sistema. Mnogo je teže prekinuti prsten sačinjen od devet kuglica koji je zarotiran za ugao od 1.5 do 2.25 rad nego prsten koji je zarotiran za ugao od 4.5 do 5.5 rad. Takođe, primećeno je da vrednost spoljašnjeg magnetnog polja pri kojem puca prsten zavisi od broja čestica koje su orijentisane suprotno od spoljašnjeg magnetnog polja.

Tokom rada došli smo do saznanja da su ovi sistemi veoma kompleksni i da se pri tačno određenim vrednostima spoljašnjeg magnetnog polja i ugla rotacije prstena javljaju stabilne konfiguracije. Prav lanac, tipičan za sisteme sa manjom energijom i sa manjim brojem čestica, otkriven je u sistemu od 7 čestica, a u sistemu od 9 čestica nije. Takođe, prav lanac predstavlja stabilnu konfiguraciju koja se javlja između tačno dve konfiguracije, uzimajući osobine svake od njih. Prav lanac se ne mora uvek naći između dve konfiguracije, ali one predstavljaju preduslov za nastanak lanaca. Između svakih konfiguracija se javlja određena deformacija jer struktura ima osobine obe ključne konfiguracije između kojih se nalazi i ne može da dođe do pucanja lanca.

Kao ključni rezultat nacrtani su fazni dijagrami koji pokazuju sve različite strukture koje se javljaju za zadati fazni prostor $\alpha(B)$. Tako možemo za zadato α pratiti dinamiku struktura, odnosno koje sve strukture se javljaju sa povećanjem magnetnog polja. Važi i obrnuto, može se na fiksnom B zavisno od α pratiti koje se strukture pojavljuju. Primećeno je da su fazni dijagrami slični za sedam i devet kuglica. Razlog za to je nesimetričnost prstena na početku simulacije. Oba sistema su sačinjena od neparnog broja kuglica zbog čega se dipolni momenti na sličan način postavljaju u odnosu na magnetno polje.

Dalja istraživanja na ovu temu bi uključivala posmatranja sistema čestica u nehomogenom i vremenski promenljivom polju.

Zahvalnost. Zahvaljujemo se svojim mentorima dr Igoru Stankoviću, višem naučnom saradniku i Miljanu Dašiću, doktorantu, članovima Laboratorije za primenu računara u nauci Instituta za fiziku Univerziteta u Beogradu. Takođe, zahvaljujemo se rukovodiocu seminara fizike Vladanu Pavloviću, doktorantu Prirodno-matematičkog fakulteta Univerziteta u Nišu. Pomenutim saradnicima IS Petnica i rukovodiocu našeg seminara zahvalni smo na korisnim savetima i nesebičnoj pomoći prilikom organizacije i realizacije projekta.

Ovo istraživanje je delom izvedeno kao deo obrazovnih aktivnosti u okviru Horizon 2020 projekta DAFNEOX podržanog od strane Evropske komisije (br. ugovora 645658).

Literatura

- Kun F., Wen W., Pál K. F., Tu K. N. 2001. Breakup of dipolar rings under a perpendicular magnetic field. *Physical review E*, **64**: 061503.
- Messina R., Khalil A. L., Stanković I. 2014. Self-assembly of magnetic balls: From chains to tubes. *Physical review E*, **89**: 011202.
- Messina R., Stankovic I. E. 2015. Self-assembly of Magnetic Spheres in Two Dimensions: the Relevance of Onion-like Structures. *EPL*, **110**: 46003.
- Stanković I., Dašić M., Messina R. 2016. Structure and cohesive energy of dipolar helices. *Soft matter*, **12**: 3056.

Helena Miljković and Aleksa Denčevski

Molecular Dynamics Investigation of 2D Structures Composed of Magnetic Hard Spheres in External Magnetic Field

Neodymium particles represent almost ideal magnetic dipoles. This model allows us to track the movement of particles in the external magnetic field and to see the mutual dipole-dipole interaction and the interaction between particles and the external magnetic field. The main aim of the project was to examine the dynamics of the dipoles in an external magnetic field starting from the ring, a structure with a minimum energy before switching on the magnetic field, formed by N ($4 \leq N \leq 13$) particles. It has been shown that when this many particles are placed close enough to each other to interact, their steady state (a state with a minimum potential energy) is a ring. One of the goals of the project was to determine the minimum magnetic field strength required to break the ring structure, and also to determine the field in the parameter space $\alpha(B)$ where some stable structures are formed. The angle of rotation of the ring relative to the direction of the magnetic field at the beginning of the simulation is labeled α , and the magnetic field strength is marked B . All particles, their mutual interaction and interaction with the external magnetic field are modeled with simulations. Using these simulations we monitored the behavior of particles depending on the strength of the external magnetic field B and the rotation angle α . This paper investigates the dynamics of two-dimensional structures composed of 7 and 9 particles.

