

UNIVERZITET U BEOGRADU
ELEKTROTEHNIČKI FAKULTET

MASTER RAD

Proračun strukture i energije
samoorganizovanih magnetnih čestica u
geometrijski ograničenoj sredini

mentor:
Prof. dr Dejan Gvozdić

student:
Miljan Dašić
br. indeksa: 3003/2013

Beograd, Jun 2014.

Sadržaj

1	Uvod	4
2	Magnetska dipol-dipolna interakcija	6
2.1	Prikaz privlačne dipol-dipolne interakcije	8
2.2	Prikaz odbojne dipol-dipolne interakcije	11
3	Izvođenje opštih izraza za sopstvenu i unakrsnu energiju u Leknerovom metodu	13
3.1	Izvođenje opšteg izraza za sopstvenu energiju u Leknerovom metodu	13
3.2	Izvođenje opšteg izraza za unakrsnu energiju u Leknerovom metodu	14
4	Proračun geometrije struktura	26
4.1	AA tuba	29
4.2	AB tuba	30
4.3	AC tuba	31
4.4	Heliks	31
5	Proračun energije struktura	39
5.1	Skaliranje energije struktura	42
5.2	Korelacija energije i gustine pakovanja	44
5.3	Poređenje heliksa sa tubama	50
6	Zaključak	53

Slike

2.1	<i>Skica sistema dva dipola koji interaguju magnetskom dipol-dipolnom interakcijom</i>	7
2.2	<i>Potencijal dipol-dipolne interakcije sistema dva dipola u zavisnosti od međusobne orijentacije dipola</i>	8
2.3	<i>Skica sistema dipola za prikaz privlačne interakcije</i>	9
2.4	<i>Zavisnost potencijala dipol-dipolne interakcije od položaja čestice 2</i>	10
2.5	<i>Zavisnost sile dipol-dipolne interakcije od položaja čestice 2</i>	10
2.6	<i>Skica sistema dipola za prikaz odbojne interakcije</i>	11
2.7	<i>Zavisnost potencijala dipol-dipolne interakcije od položaja čestice 2</i>	12
2.8	<i>Zavisnost sile dipol-dipolne interakcije od položaja čestice 2</i>	12
4.1	<i>Skica tri tipa tuba</i>	27
4.2	<i>Skica osnovnog prstena</i>	29
4.3	<i>Skica poprečnog preseka heliksa</i>	32
4.4	<i>AA tuba - struktura u perspektivi sa strane</i>	35
4.5	<i>AA tuba - projekcija na xy ravan</i>	35
4.6	<i>AB tuba - struktura u perspektivi sa strane</i>	36
4.7	<i>AB tuba - projekcija na xy ravan</i>	36
4.8	<i>AC tuba - struktura u perspektivi sa strane</i>	37
4.9	<i>AC tuba - projekcija na xy ravan</i>	37
4.10	<i>Heliks - struktura u perspektivi sa strane</i>	38
4.11	<i>Heliks - projekcija na xy ravan</i>	38
5.1	<i>Zavisnost energije AA/AC/AB tuba od radijusa prstena</i>	41
5.2	<i>Zavisnost energije AA/AC/AB tuba od broja kuglica u prstenu</i>	42
5.3	<i>Skaliranje AA/AC/AB tuba</i>	43
5.4	<i>Skaliranje heliksa</i>	44
5.5	<i>Ilustracija slučaja maksimalne gustine pakovanja</i>	45
5.6	<i>Ilustracija gustine pakovanja za slučaj AA tube</i>	46
5.7	<i>Zavisnost energije od normiranog koraka heliksa duž z-pravca</i>	49

5.8	<i>Zavisnost gustine pakovanja od normiranog koraka heliksa duž z-pravca</i>	49
5.9	<i>Zavisnost enegije od gustine pakovanja</i>	50
5.10	<i>Zavisnost energije od poluprečnika za AA i AB tubu</i>	51
5.11	<i>Zavisnost energije od poluprečnika za AA/AB tubu i za različite konfiguracije heliksa</i>	52

Glava 1

Uvod

Samoorganizacija magnetnih čestica je atraktivna istraživačka tema u kojoj se istražuje kako neuređeni skup magnetnih čestica može da formira uređenu strukturu u okviru geometrijski ograničene sredine. Interakcija koja postoji između svakog para magnetnih čestica jeste magnetska dipol-dipolna interakcija [1]. Primene struktura formiranih od magnetnih čestica su brojne. Izdvajaju se primene u nanoelektronici, nanomedicini i biotehnološkim disciplinama. Na primer, u nanotehnologiji, mešavine samoorganizovanih magnetnih nanočestica mogu dovesti do formiranja veoma jakih magneta [2,3]. Interakcija između magnetnih planarnih slojeva može dovesti do izuzetnih trodimenzionalnih (3D) struktura sa velikim potencijalom za primenu u mikrofabrikaciji 3D elektronskih naprava [4]. Detaljno su ispitana osnovna stanja mikrostruktura u ferrofluidnim monoslojevima, gde se upravo magnetska dipol-dipolna interakcija uzima kao osnovna interakcija [5]. Zanimljive su primene u biologiji. Neke bakterije imaju osobinu stalne namagnetisanosti i nazivaju se magnetotaktične bakterije [6]. U biohemijskim disciplinama, elastične interakcije ćelija mogu se modelovati interakcijama sličnim magnetskoj dipol-dipolnoj interakciji [7]. Vratimo se sa mnogobrojnih primena na stanovište teorijske fizike. Puno razumevanje magnetskih interakcija je izazovno usled toga što je magnetska dipol-dipolna interakcija dugodometna i anizotropna. Prema tome, za teorijsku fiziku je veoma korisno ispitivanje mikrostruktura formiranih od samoorganizovanih sferičnih magnetnih čestica. Polazna tačka ovog master rada jeste rad dat u referenci [8]. U tom radu ispitivane su strukture najniže energije (osnovno stanje) formirane od magnetnih čestica, bez prisustva spoljašnjeg magnetnog polja. Uzima se u obzir samo dipol-dipolna interakcija između svakog para čestica. Pokazano je da je za mali broj čestica ($N < 4$) osnovno stanje lanac. Za srednji broj čestica ($3 < N < 14$), lanac se zatvara u prsten. Na kraju, za dovoljno veliki broj čestica ($N > 13$) osnovno stanje nastaje slaganjem prstenova. Jasno se uo-

čava prelaz između tri tipa struktura sa porastom broja čestica N , pri čemu je lanac jedno-dimenzionalna (1D) struktura, prsten 2D, a naslagani prstenovi 3D strukture. Predmet ovog master rada je ispitivanje 3D struktura osnovnog stanja samoorganizovanih magnetnih čestica. Prvo će se detaljno ispitati magnetska dipol-dipolna interakcija radi boljeg razumevanja samoorganizacije magnetnih čestica koje interaguju ovom interakcijom. U tom smislu, posmatraće se dve magnetne čestice koje interaguju ovom interakcijom i to u dva slučaja: 1) Na zadanom rastojanju koje je fiksirano, ali se međusobna orijentacija dipolnih momenata može menjati. 2) Sa zadanim fiksiranim dipolnim momentima, ali se rastojanje može menjati. U tezi će biti ispitano kada se javlja privlačna, a kada odbojna interakcija između dva dipola. To je važno za razumevanje kako se čestice slažu minimizujući potencijalnu energiju strukture. Postoje tri specifična načina slaganja prstenova (AA/AB/AC slaganje), te razmatramo AA, AB i AC tube. Osim tuba, razmatramo i helikse. Tube su definisane poluprečnikom prstena ili brojem čestica (postoji relacija koja jednoznačno povezuje ova dva parametra), a heliksi su definisani poluprečnikom i korakom zavojnice duž pravca orijentacije. Geometrijsko ograničenje iz naslova rada znači da su strukture konfinirane unutar određenog poluprečnika. Cilj je napraviti određenu strukturu i proračunati njenu energiju usled magnetskih dipol-dipolnih interakcija svakog para čestica te strukture. Pravljenje strukture znači da treba svakoj čestici dodeliti koordinate položaja i komponente magnetskog dipolnog momenta, u Dekartovom koordinatnom sistemu. U radu koji nam služi kao polazna osnova pokazano je da prsten ima minimalnu energiju kada su dipolni momenti čestica orijentisani tako da prave zatvorenu petlju. Time se minimizuje ukupni vektor magnetizacije strukture i postiže minimalna energija. Naša hipoteza je da i 3D strukture imaju minimalnu energiju za istu orijentaciju magnetskih momenata čestica. Prvo će biti potvrđena ova hipoteza, a potom će biti pravljenе struktura sa takvim optimizovanim komponentama dipolnog momenta. Osim energije, definisan je parametar gustine pakovanja koji određuje koliki je faktor ispune zadanog ograničenog prostora česticama date strukture. Potrebno je utvrditi da li postoji korelacija između energije i gustine pakovanja. Hipoteza je da struktura najveće gustine pakovanja ima minimalnu energiju osnovnog stanja. U suštini, najbitniji cilj jeste poređenje energija AA tube, AB tube i heliksa na fiksnom poluprečniku. Tako se može proveriti da li je i kada, heliks energetski povoljnija struktura od tuba. Metode rada uključuju proučavanje fizike sistema, izvođenje analitičkih izraza za proračun energije, a potom njihovu implementaciju u nekom programskom jeziku ili paketu. Odlučili smo se za programiranje numeričkih simulacija u programskom paketu MATLAB. Listing svih napisanih kodova dat je u Glavi 7 i numerisan je nezavisno od ostatka rada radi lakše preglednosti.

Glava 2

Magnetska dipol-dipolna interakcija

Interakcija kojom modelujemo samoorganizovanje magnetnih sfernih čestica jeste magnetska dipol-dipolna interakcija. Postoji između dve čestice magnetskih momenata \vec{m}_1 i \vec{m}_2 . Potencijalna energija te interakcije ima sledeći oblik:

$$U_{\text{dd}}(\vec{r}_{12}) = C \left[\frac{(\vec{m}_1 \cdot \vec{m}_2)}{r^3} - 3 \frac{(\vec{m}_1 \cdot \vec{r}_{12})(\vec{m}_2 \cdot \vec{r}_{12})}{r^5} \right] \quad (2.1)$$

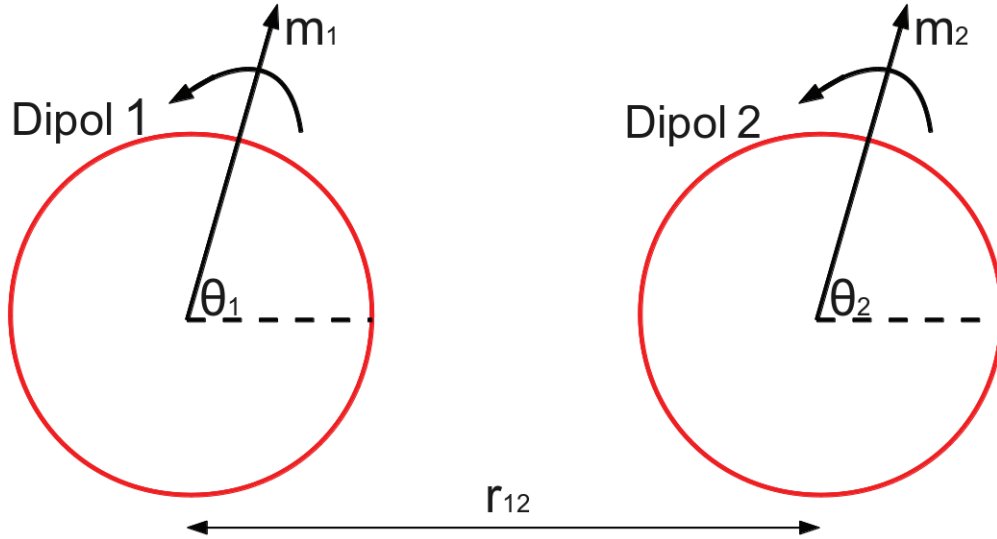
U gornjoj jednačini, konstanta C iznosi $C = \frac{\mu_0}{4\pi} = 10^{-7} \text{H/m}$, dok je vektor međusobnog položaja koji spaja posmatrane dve magnetne čestice: $\vec{r}_{12} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$. Rastojanje između čestica je moduo ovog vektora, $|\vec{r}_{12}| = r$. Pojednostavićemo potencijal dipol-dipolne interakcije izvodeći ga za slučaj da se magnetski momenti \vec{m}_1 i \vec{m}_2 nalaze u istoj ravni. Tada svaki od njih ima dve komponente, jednu normalnu na pravac vektora \vec{r}_{12} , m_n i jednu paralelnu njemu, m_p . Pošto važi

$$\begin{aligned} \vec{m}_1 \cdot \vec{r}_{12} &= m_{1p} r_{12} \\ \vec{m}_2 \cdot \vec{r}_{12} &= m_{2p} r_{12} \\ \vec{m}_1 \cdot \vec{m}_2 &= m_{1n} m_{2n} + m_{1p} m_{2p} \end{aligned}$$

Tako da se za potencijalnu energiju dobija:

$$\begin{aligned} U_{\text{dd}} &= C \frac{(m_{1n} m_{2n} + m_{1p} m_{2p})}{r^3} - 3 \frac{m_{1p} m_{2p} r^2}{r^5} \\ \Rightarrow U_{\text{dd}} &= C \frac{m_{1n} m_{2n} - 2 m_{1p} m_{2p}}{r^3} \end{aligned}$$

Na sledećoj slici data je skica sistema dva dipola koje analiziramo.



Slika 2.1: Skica sistema dva dipola koji interaguju magnetskom dipol-dipolnom interakcijom

Izveli smo potencijal dipol-dipolne interakcije za slučaj da su magnetski momenti u ravni. Normalizujemo vrednosti promenljivih u tom izrazu:

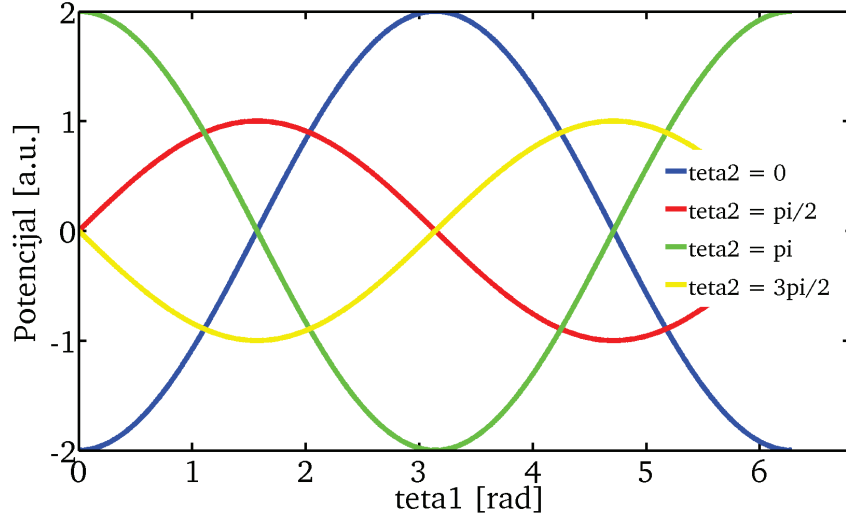
$$C = 1, |\vec{m}_1| = |\vec{m}_2| = 1, \vec{r}_1 = [0 \ 0 \ 0], \vec{r}_2 = [0 \ 1 \ 0]$$

Vektori \vec{m}_1 i \vec{m}_2 zaklapaju uglove θ_1 i θ_2 sa pravcem vektora \vec{r}_{12} . Možemo pisati $m_p = m \cos \theta, m_n = m \sin \theta$. Tada izraz za potencijal interakcije postaje:

$$U_{dd} = C \frac{m_1 m_2 \sin \theta_1 \sin \theta_2 - 2m_1 m_2 \cos \theta_1 \cos \theta_2}{r^3} \quad (2.2)$$

Ispitajmo kako potencijal zavisi od međusobne orijentacije magnetskih momenata čestica. Ugao θ_1 je ugao po kome se skenira u 1000 tačaka na celom opsegu, $[0, 2\pi]$, a ugao θ_2 uzima određene vrednosti: $\theta_2 = \{0, \pi/2, \pi, 3\pi/2\}$.

Na sledećoj slici prikazan je potencijal dipol-dipolne interakcije dva dipola zavisno od njihove međusobne orijentacije. Energija je minimalna za slučaj da su dipolni momenti orijentisani u istom pravcu i smeru i to paralelno sa vektorom \vec{r}_{12} . Energija je maksimalna kada su dipolni momenti orijentisani



Slika 2.2: Potencijal dipol-dipolne interakcije sistema dva dipola u zavisnosti od međusobne orijentacije dipola

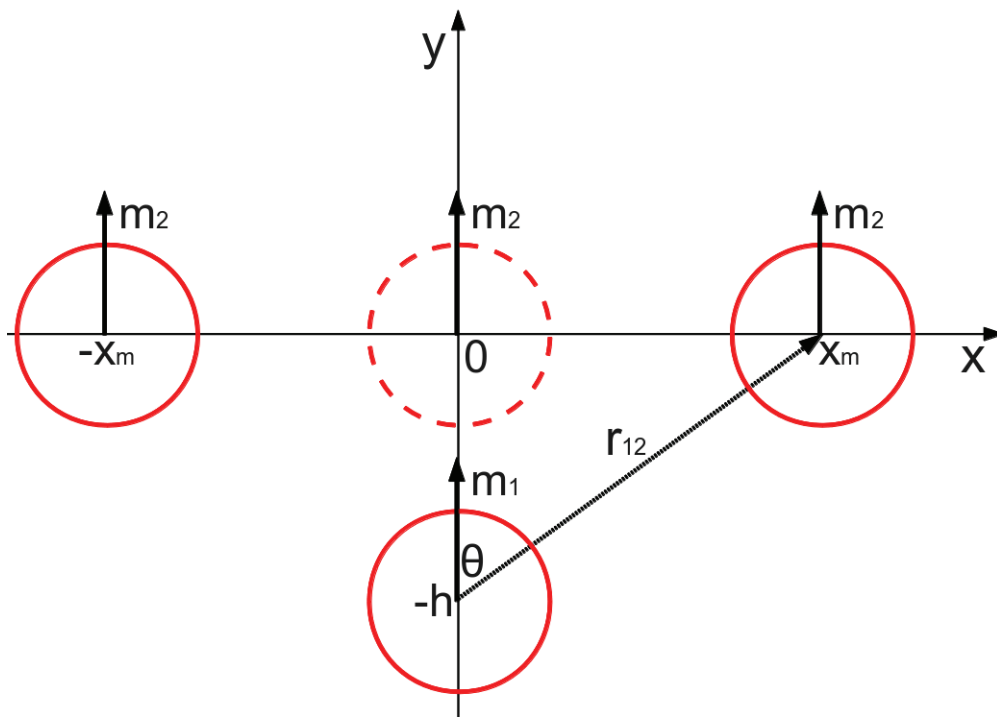
paralelno sa vektorom \vec{r}_{12} , ali sa suprotnim smerovima. Analogno važi i za pravac normalan na pravac vektora \vec{r}_{12} , samo su apsolutne energije vrednosti manje.

2.1 Prikaz privlačne dipol-dipolne interakcije

U prethodnom izlaganju razmatrana je potencijalna energija dipol-dipolne interakcije čestica fiksiranog položaja, pri čemu je varirana međusobna orijentacija njihovih dipolnih momenata. Sada se razmatraju dve čestice paralelnih momenata, usmerenih duž y-ose, čiji se međusobni položaj menja. Čestica 1, sa dipolnim momentom \vec{m}_1 je fiksirana na poziciji $(x, y) = (0, -h)$ dok se čestica 2, sa dipolnim momentom \vec{m}_2 pomera duž x-ose, sa pozicije $(x, y) = (-x_m, 0)$ na poziciju $(x, y) = (+x_m, 0)$. Na sledećoj slici prikazana je skica razmatranog sistema.

Podimo od izraza za potencijal interakcije:

$$U_{dd} = C \frac{m_{1n}m_{2n} - 2m_{1p}m_{2p}}{r^3} \quad (2.3)$$



Slika 2.3: *Skica sistema dipola za prikaz privlačne interakcije*

Za normalne i paralelne komponente dipolnih momenata važi:

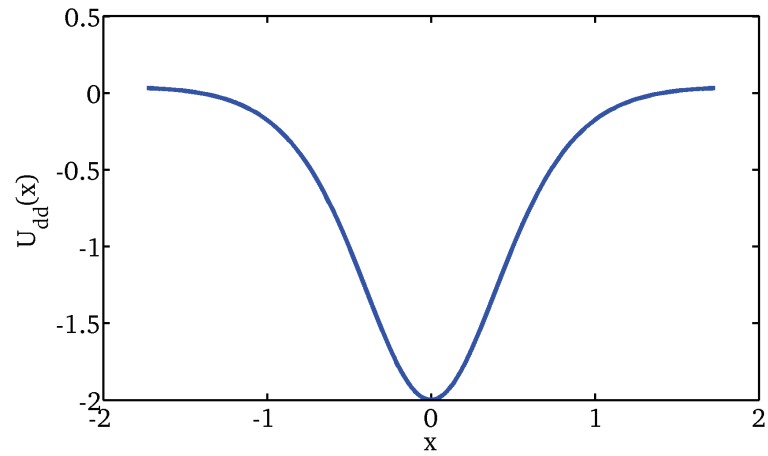
$$\begin{aligned} m_n &= m \frac{x}{r} \\ m_p &= m \frac{h}{r} \end{aligned} \quad (2.4)$$

Zamena u izraz za potencijal daje:

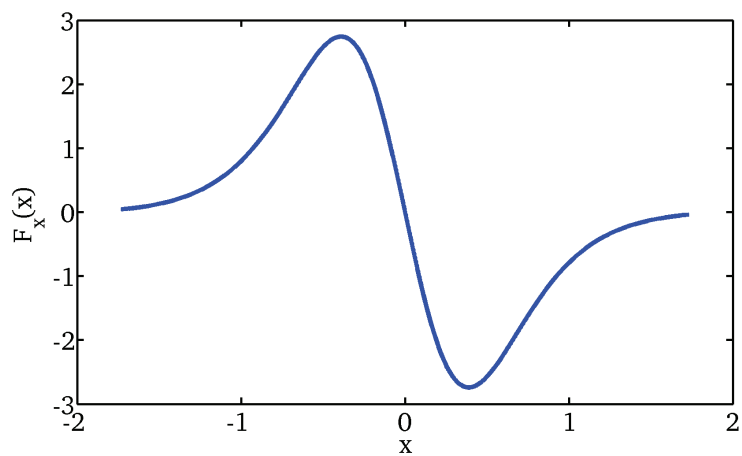
$$\begin{aligned} U_{dd} &= \frac{\left(\frac{x}{r}\right)^2 - 2\left(\frac{h}{r}\right)^2}{r^3} \\ \Rightarrow U_{dd} &= \frac{x^2 - 2h^2}{r^5} \end{aligned} \quad (2.5)$$

Prilikom privlačne interakcije, potencijal ima negativni predznak. Sa grafika zavisnosti potencijala od x-koordinate čestice 2, vidi se da je privlačna interakcija najjača kada su čestice najbliže i da simetrično slabi sa udaljavanjem iz tog položaja. Iz zavisnosti $U_{dd} = U_{dd}(x)$ izračunava se intenzitet sile duž x-ose preko:

$$F_x = -\frac{dU_{dd}}{dx}$$



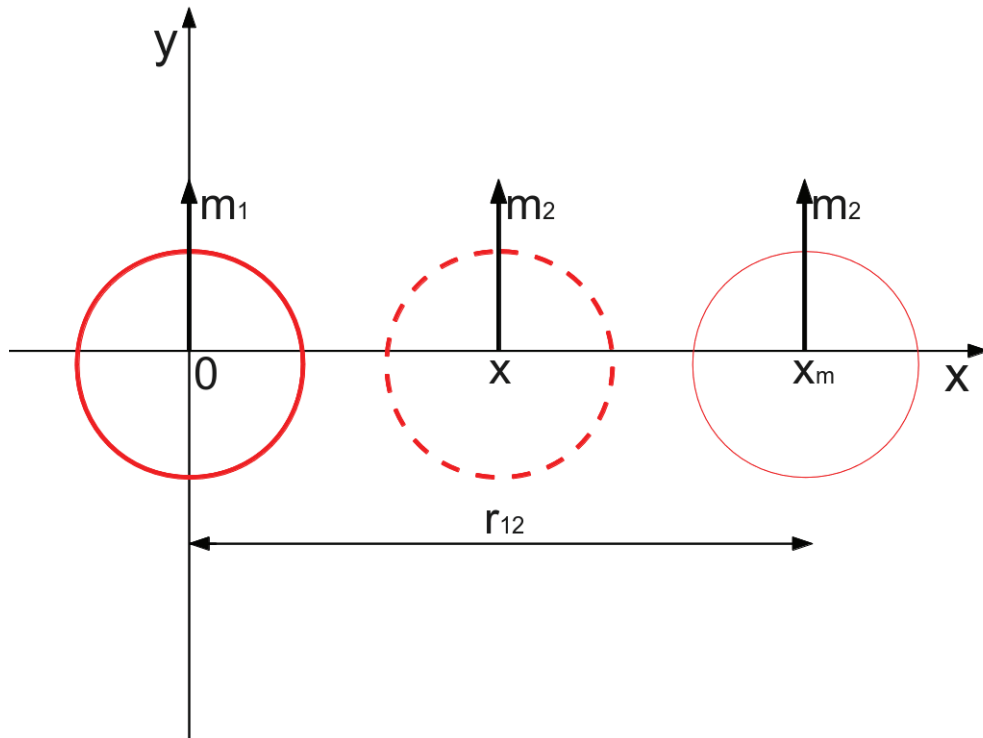
Slika 2.4: Zavisnost potencijala dipol-dipolne interakcije od položaja čestice 2



Slika 2.5: Zavisnost sile dipol-dipolne interakcije od položaja čestice 2

2.2 Prikaz odbojne dipol-dipolne interakcije

U ovom primeru ilustrujemo odbojnu interakciju. Postavka je slična kao u prethodnoj sekciji, samo što je pozicija čestice 1, $(x, y) = (0, 0)$.

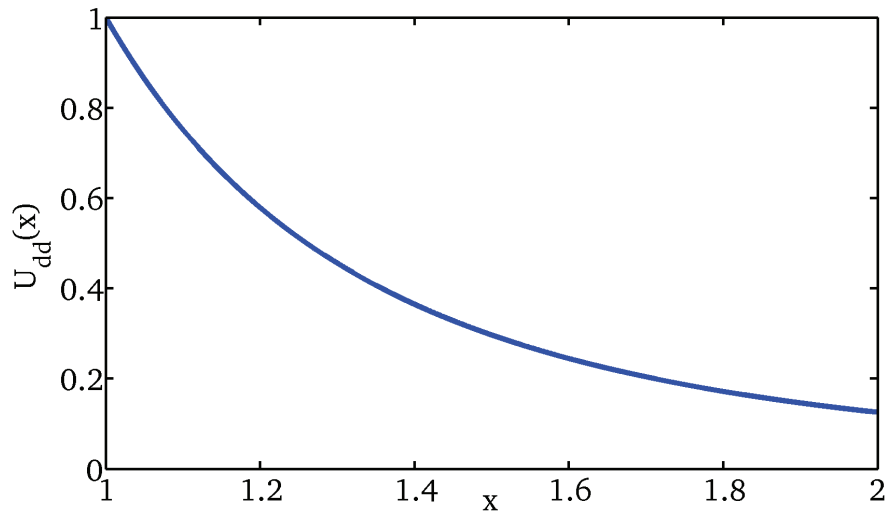


Slika 2.6: *Skica sistema dipola za prikaz odbojne interakcije*

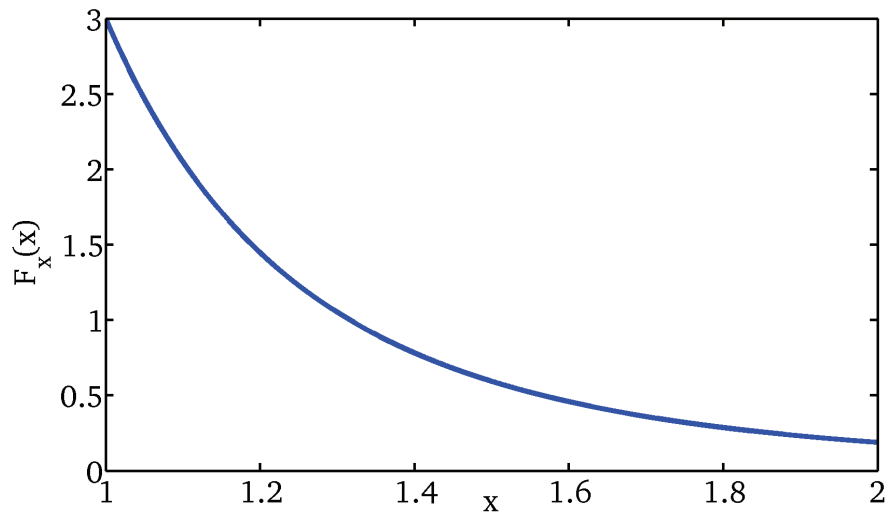
Potencijal ima jednostavni oblik:

$$U_{\text{dd}} = \frac{1}{x^3} \quad (2.6)$$

Sada dolazi do odbojne interakcije, te potencijal ima pozitivni predznak. Na grafiku zavisnosti potencijala od x-koordinate čestice 2 uočava se da je odbojna interakcija najjača kada su čestice najbliže. Isto kao u prethodnoj sekciji, sračunata je zavisnost intenziteta x-komponente sile od x-koordinate čestice 2.



Slika 2.7: Zavisnost potencijala dipol-dipolne interakcije od položaja čestice 2



Slika 2.8: Zavisnost sile dipol-dipolne interakcije od položaja čestice 2

Glava 3

Izvođenje opštih izraza za sopstvenu i unakrsnu energiju u Leknerovom metodu

Energija strukture sa konačnim brojem čestica može se izračunati direktnim sumiranjem energija dipol-dipolne interakcije svakog para čestica. Za strukture koje poseduju periodičnost duž pravca orijentacije (označen kao z-pravac) primenjuje se Leknerov metod sumiranja dipol-dipolne interakcije, koji daje energiju beskonačne strukture koja poseduje osnovnu ćeliju koja se periodično ponavlja. Leknerov metod sumiranja energija interakcije sistema sa periodičnošću u jednoj ili dve dimenzije prezentovan je u radu [9]. U tom radu prikazano je izvođenje izraza koji odgovaraju dipol-dipolnoj interakciji. Naša ideja bila je da sprovedemo generalizovano izvođenje Leknerovog metoda za sisteme koji su periodični duž jednog pravca (duž z-pravca).

3.1 Izvođenje opšteg izraza za sopstvenu energiju u Leknerovom metodu

Definišimo sumu $\Psi_0(s)$, koja je definisana za sve vrednosti m , osim za $m = 0$

$$\Psi_0(s) = \frac{1}{L_z^{2s}} \sum_{m \neq 0} |m|^{-2s} = \frac{1}{L_z^{2s}} \left(\sum_{m=-\infty}^{-1} |m|^{-2s} + \sum_{m=+1}^{+\infty} |m|^{-2s} \right) \quad (3.1)$$

U prethodnoj jednačini, veličina L_z ima fizički smisao dužine, određuje periodu strukture duž z-pravca. Kako važi jednakost: $\sum_{m=-\infty}^{-1} |m|^{-2s} = \sum_{m=+1}^{+\infty} |m|^{-2s}$,

onda izraz iz Jedn. 3.1 postaje:

$$\Psi_0(s) = \frac{2}{L_z^{2s}} \sum_{m=+1}^{+\infty} |m|^{-2s} \quad (3.2)$$

Izraz za ukupnu energiju interakcije dat je u Jedn. 5 u referenci [9], odakle uzimamo izraz za sopstvenu energiju:

$$\begin{aligned} E_{\text{self}}(s) &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left[|\vec{\mu}_i^z|^2 - 3(\mu_i^z)^2 \right] \Psi_0(s) \\ \Rightarrow E_{\text{self}}(s) &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left[|\vec{\mu}_i^p|^2 - 2(\mu_i^z)^2 \right] \Psi_0(s) \end{aligned} \quad (3.3)$$

Zamenom Jedn. 3.2 u Jedn. 3.3 i na osnovu definicije Zeta funkcije:

$$\zeta(s) = \sum_{m=1}^{+\infty} m^{-s}$$

dobija se opšti izraz za $E_{\text{self}}(s)$:

$$E_{\text{self}}(s) = \frac{1}{L_z^{2s}} \sum_{i=1}^N \left[|\vec{\mu}_i^p|^2 - 2(\mu_i^z)^2 \right] \zeta(2s) \quad (3.4)$$

3.2 Izvođenje opšteg izraza za unakrsnu energiju u Leknerovom metodu

Podimo od izraza za unakrsnu energiju iz Jedn. 5 u referenci [9]:

$$E_{\text{cross}}(s) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1, j \neq i}^N [\vec{\mu}_i^z \vec{\mu}_j^z \Psi_{\text{rij}}(s) + 3(\vec{\mu}_i^z \cdot \nabla_\xi)(\vec{\mu}_j^z \cdot \nabla_\xi) \Xi_{\text{rij}, \xi}(s) |_{\xi=0}] \quad (3.5)$$

Zadatak je odrediti dve nepoznate funkcije koje se pojavljuju u gornjoj jednačini. Iz Jedn. 2 u referenci [9] dobija se definicija sume $\Psi_r(s)$:

$$\Psi_r(s) = \frac{1}{L_z^{2s}} \sum_m \left[\left(\frac{\rho}{L_z} \right)^2 + \left(\frac{z}{L_z} + m \right)^2 \right]^{-s} \quad (3.6)$$

Ova suma računa se upotrebom integralne reprezentacije gama funkcije:

$$a^{-s} = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_{t=0}^{+\infty} t^{s-1} e^{-at} dt \quad (3.7)$$

U Jedn. 3.6 prepoznavamo da je:

$$a = \left(\frac{\rho}{L_z}\right)^2 + \left(\frac{z}{L_z} + m\right)^2$$

Dakle, dobijamo izraz koji se vraća u Jedn. 3.6:

$$a^{-s} = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_{t=0}^{+\infty} t^{s-1} e^{-\left[\left(\frac{\rho}{L_z}\right)^2 + \left(\frac{z}{L_z} + m\right)^2\right]t} dt \quad (3.8)$$

=>

$$\Psi_r(s) = \frac{1}{L_z^{2s}\Gamma(s)} \sum_m \int_{t=0}^{+\infty} t^{s-1} e^{-\left[\left(\frac{\rho}{L_z}\right)^2 + \left(\frac{z}{L_z} + m\right)^2\right]t} dt \quad (3.9)$$

Sada zamenimo mesta sume i integrala u jednačini i izdvojimo sumu po m unutar integrala po dt :

$$\Psi_r(s) = \frac{1}{L_z^{2s}\Gamma(s)} \int_{t=0}^{+\infty} t^{s-1} e^{-\left(\frac{\rho}{L_z}\right)^2 t} \sum_m e^{-\left(\frac{z}{L_z} + m\right)^2 t} dt \quad (3.10)$$

Koristimo opštu formu Poasonove sumacione formule koja glasi:

$$\sum_{m=-\infty}^{m=+\infty} e^{-\left(\frac{u+c}{L_0} + m\right)^2 t} e^{-i\xi_0 L_0 \left(\frac{u+c}{L_0} + m\right)} = \left(\frac{\pi}{t}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} e^{i2\pi k \frac{u+c}{L_0}} e^{-\frac{(2\pi k + \xi_0 L_0)^2}{4t}} \quad (3.11)$$

Primenimo Poasonovu sumacionu formulu, zajedno sa sledećim jednakostima do kojih smo došli posmatrajući Jedn. 3.10, tako da sledi:

$$u + c = z, L_0 = L_z, \xi_0 = \xi_z$$

Dodajući član

$$e^{-i\xi_z L_z \left(\frac{z}{L_z} + m\right)}$$

pod uslovom koji obezbeđuje da je jednak nuli ($\xi_z = 0$):

$$\sum_m e^{-\left(\frac{z}{L_z} + m\right)^2 t} e^{-i\xi_z L_z \left(\frac{z}{L_z} + m\right)} = \left(\frac{\pi}{t}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} e^{i2\pi k \frac{z}{L_z}} e^{-\frac{(2\pi k + \xi_z L_z)^2}{4t}} \quad (3.12)$$

$$\Rightarrow \Psi_{rij}(s) = \frac{1}{L_z^{2s}\Gamma(s)} \int_{t=0}^{+\infty} t^{s-1} e^{-\left(\frac{\rho}{L_z}\right)^2 t} \left(\frac{\pi}{t}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} e^{i2\pi k \frac{z}{L_z}} e^{-\frac{(2\pi k + \xi_z L_z)^2}{4t}} dt \quad (3.13)$$

U ovom koraku, menjamo mesta sume i integrala tako da integral po dt ide unutar sume po k :

$$\Rightarrow \Psi_{\text{rij}}(s) = \frac{\pi^{1/2}}{L_z^{2s}\Gamma(s)} \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} e^{i2\pi k \frac{z}{L_z}} \int_{t=0}^{+\infty} t^{s-3/2} e^{-\left(\frac{\rho}{L_z}\right)^2 t} e^{-\frac{(2\pi k + \xi_z L_z)^2}{4t}} dt \quad (3.14)$$

Sada treba rešiti integral:

$$I = \int_{t=0}^{+\infty} t^{s-3/2} e^{-\left(\frac{\rho}{L_z}\right)^2 t} e^{-\frac{(2\pi k + \xi_z L_z)^2}{4t}} dt \quad (3.15)$$

Rešenje ovog integrala jeste:

$$I = 2^{3/2-s} \left(\frac{(\xi_z L_z + 2\pi k)^2 L_z^2}{4\rho^2} \right)^{s/2-1/4} K_{s-1/2} \left(|\xi_z L_z + 2\pi k| \frac{\rho}{L_z} \right) \quad (3.16)$$

Ovaj izraz može se pojednostaviti na sledeći način:

$$I = 2^{3/2-s} \left(\frac{(\xi_z L_z + 2\pi k) L_z}{2\rho} \right)^{(2s-1)/2} K_{s-1/2} \left(|\xi_z L_z + 2\pi k| \frac{\rho}{L_z} \right)$$

Uvedimo smenu:

$$|\xi_z L_z + 2\pi k| \frac{\rho}{L_z} = \alpha$$

$$\Rightarrow \Psi_{\text{rij}}(s) = \frac{\pi^{1/2}}{L_z^{2s}\Gamma(s)} \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} e^{i2\pi k \frac{z}{L_z}} \alpha^{(2s-1)/2} K_{s-1/2}(\alpha) \quad (3.17)$$

Primenimo uslov $\xi_z = 0$ tako da se suma po k može predstaviti kao:

$$\sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} e^{i2\pi k \frac{z}{L_z}} \left(\frac{\pi^2 k^2 L_z^2}{\rho^2} \right)^{s/2-1/4} K_{s-1/2} \left(|2\pi k| \frac{\rho}{L_z} \right) = \sum_{k=-\infty}^{k=+\infty} e^{i2\pi k \frac{z}{L_z}} f(k) \quad (3.18)$$

Ako pretpostavimo da je $f(k)$ parna funkcija po k , tada usled:

$$\cos(2\pi k \frac{z}{L_z}) = \frac{e^{i2\pi k \frac{z}{L_z}} + e^{-i2\pi k \frac{z}{L_z}}}{2}$$

$$\Rightarrow \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{i2\pi k \frac{z}{L_z}} f(k) = \left(2 \sum_{k=1}^{k=+\infty} \cos(2\pi k \frac{z}{L_z}) f(k) \right) + f(0) \quad (3.19)$$

Dakle, treba odrediti $f(0)$.

$$f(0) = \lim_{k \rightarrow 0} \left(\frac{\pi k L_z}{\rho} \right)^{(2s-1)/2} K_{s-1/2} \left(|2\pi k| \frac{\rho}{L_z} \right) \quad (3.20)$$

$$\Rightarrow f(0) = \frac{\pi^{1/2}}{L_z^{2s} \Gamma(s)} \left(\frac{\rho}{L_z} \right)^{1-2s} \Gamma \left(s - \frac{1}{2} \right)$$

Dakle, ovako izgleda konačni izraz za sumu rešetke:

$$\Psi_{\text{rij}}(s) = \frac{4\pi^{1/2}}{L_z^{2s} \Gamma(s)} \sum_{k=1}^{+\infty} \left(\cos \left(2\pi k \frac{z}{L_z} \right) \left(\frac{\pi^2 k^2 L_z^2}{\rho^2} \right)^{s/2-1/4} K_{s-1/2} \left(2\pi k \frac{\rho}{L_z} \right) \right) + \frac{\pi^{1/2}}{L_z^{2s} \Gamma(s)} \left(\frac{\rho}{L_z} \right)^{1-2s} \Gamma \left(s - \frac{1}{2} \right) \quad (3.21)$$

Druga nepoznata funkcija iz Jedn. 3.5 jeste:

$$\Xi_{r,\xi}(s) = \frac{e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}}}{L_z^{2s}} \sum_m \left[\left(\frac{\rho}{L_z} \right)^2 + \left(\frac{z}{L_z} + m \right)^2 \right]^{-s} e^{-i\xi_z(z+mL_z)} \quad (3.22)$$

Primenimo istu proceduru kao u prethodnom izvođenju prve nepoznate funkcije sume rešetke, tako da:

$$\Xi_{r,\xi}(s) = \frac{e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}}}{L_z^{2s} \Gamma(s)} \sum_m e^{-i\xi_z(z+mL_z)} \int_{t=0}^{+\infty} t^{s-1} e^{-\left[\left(\frac{\rho}{L_z} \right)^2 + \left(\frac{z}{L_z} + m \right)^2 \right] t} dt \quad (3.23)$$

Sada koristimo kompletnu Poasonovu sumacionu formulu ($\xi_z \neq 0$) koja vodi do:

$$\Xi_{r,\xi}(s) = \frac{e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}} \pi^{1/2}}{L_z^{2s} \Gamma(s)} \int_{t=0}^{+\infty} t^{s-3/2} e^{-\left(\frac{\rho}{L_z} \right)^2 t} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{i2\pi k \frac{z}{L_z}} e^{-\frac{(2\pi k + \xi_z L_z)^2}{4t}} dt \quad (3.24)$$

Prethodni izraz može se transformisati premeštanjem sume izvan i rešavanjem integrala:

$$\Xi_{r,\xi}(s) = \frac{e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}} \pi^{1/2}}{L_z^{2s} \Gamma(s)} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{i2\pi k \frac{z}{L_z}} \int_{t=0}^{+\infty} t^{s-3/2} e^{-\left(\frac{\rho}{L_z} \right)^2 t} e^{-\frac{(2\pi k + \xi_z L_z)^2}{4t}} dt \quad (3.25)$$

Ovo je finalni izraz za $\Xi_{r,\xi}(s)$:

$$\Xi_{r,\xi}(s) = \frac{e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}} \pi^{1/2}}{L_z^{2s} \Gamma(s)} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{i2\pi k \frac{z}{L_z}} \left(\frac{(\xi_z L_z + 2\pi k)^2 L_z^2}{4\rho^2} \right)^{s/2-1/4} K_{s-1/2}(\alpha) \quad (3.26)$$

Sledeći korak je primena operatora:

$$(\vec{\mu}'_i \cdot \nabla_\xi)(\vec{\mu}'_j \cdot \nabla_\xi)$$

gde iz razloga jednostavnosti uvodimo promenljive $\eta^z = \frac{2\pi z}{L_z}$ i $\eta^\rho = \frac{2\pi\rho}{L_z}$. Prvo primenimo skalarni proizvod:

$$(\vec{\mu}'_j \cdot \nabla_\xi) = \left(\mu'_j{}^x \frac{\partial}{\partial \xi_x} + \mu'_j{}^y \frac{\partial}{\partial \xi_y} + \mu'_j{}^z \frac{\partial}{\partial \xi_z} \right) \quad (3.27)$$

Možemo zapisati smenu:

$$A = \frac{\sqrt{\pi}}{L_z^{2s} \Gamma(s)}$$

a deo funkcije $\Xi_{r,\xi}(s)$ koji zavisi samo od ξ_z označimo sa $F(\xi_z)$.

$$\Rightarrow \Xi_{r,\xi}(s) = A e^{-i(\xi_x x + \xi_y y)} F(\xi_z) \quad (3.28)$$

Sada delovanjem operatora $(\vec{\mu}'_j \cdot \nabla_\xi)$ na $\Xi_{r,\xi}(s)$ dobijamo: (1)

$$\mu'_j{}^x \frac{\partial}{\partial \xi_x} \Xi_{r,\xi}(s) = \mu'_j{}^x (-ix) A e^{-i(\xi_x x + \xi_y y)} F(\xi_z) \quad (3.29)$$

(2)

$$\mu'_j{}^y \frac{\partial}{\partial \xi_y} \Xi_{r,\xi}(s) = \mu'_j{}^y (-iy) A e^{-i(\xi_x x + \xi_y y)} F(\xi_z) \quad (3.30)$$

Ponovo iz razloga jednostavnosti daljeg računa, argument modifikovanih Besselovih funkcija dat je sa:

$$\alpha = \left(|\xi_z L_z + 2\pi k| \frac{\rho}{L_z} \right)$$

(3)

$$\begin{aligned} \mu'_j{}^z \frac{\partial}{\partial \xi_z} \Xi_{r,\xi}(s) &= \mu'_j{}^z A e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}} \times \\ &\sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta^z} \left[\left(\frac{L_z}{2\rho} \right)^{(2s-1)/2} \left(\frac{2s-1}{2} \right) (\xi_z L_z + 2\pi k)^{(2s-2)/3} L_z K_{s-1/2}(\alpha) + \right. \\ &\left. \left(\frac{(\xi_z L_z + 2\pi k) L_z}{2\rho} \right)^{(2s-1)/2} \rho \frac{\partial K_{s-1/2}(\alpha)}{\partial \alpha} \right] \end{aligned} \quad (3.31)$$

Radi dobijanja kompletnog izraza saberimo sve tri komponente. Pre konačnog izraza pogodno je zapisati deo članova koji potiču od x, y komponenti odvojeno od dela člana koji potiče od z komponente:

$$P_{xy} = (-i) (\mu_j^x x + \mu_j^y y) \left(\frac{(\xi_z L_z + 2\pi k) L_z}{2\rho} \right)^{(2s-1)/2} K_{s-1/2}(\alpha)$$

$$P_z = \mu_j^z \left[\left(\frac{L_z}{2\rho} \right)^{(2s-1)/2} \left(\frac{2s-1}{2} \right) (\xi_z L_z + 2\pi k)^{(2s-2)/3} L_z K_{s-1/2}(\alpha) + \left(\frac{(\xi_z L_z + 2\pi k) L_z}{2\rho} \right)^{(2s-1)/2} \rho \frac{\partial K_{s-1/2}(\alpha)}{\partial \alpha} \right]$$

Dakle, kada se skalarni proizvod $(\vec{\mu}_j \cdot \nabla_\xi)$ primeni na $\Xi_{r,\xi}(s)$, dobija se:

$$(\vec{\mu}_j \cdot \nabla_\xi) \Xi_{r,\xi}(s) = A e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta z} (P_{xy} + P_z) \quad (3.32)$$

Radi jednostavnosti daljeg izvođenja, uvedimo sledeće tri promenljive:

$$\begin{aligned} \alpha &= (|\xi_z L_z + 2\pi k|) \frac{\rho}{L_z} \\ \beta &= \frac{(\xi_z L_z + 2\pi k) L_z}{2\rho} \\ \gamma &= (\xi_z L_z + 2\pi k) \end{aligned}$$

Izraz u Jedn. 3.32 može se podeliti u tri glavna člana, koji će biti analizirani svaki posebno.

Član #1

$$C_1 = (-i) \vec{\mu}_j^{\vec{\rho}} \cdot \vec{\rho} A e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta z} \beta^{(2s-1)/2} K_{s-1/2}(\alpha) \quad (3.33)$$

Član #2

$$C_2 = A e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}} \mu_j^z \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta z} \left(\frac{L_z}{2\rho} \right)^{(2s-1)/2} \left(\frac{2s-1}{2} \right) \gamma^{(2s-2)/3} L_z K_{s-1/2}(\alpha) \quad (3.34)$$

Član #3

$$C_3 = Ae^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}} \mu_j^z \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta z} \beta^{(2s-1)/2} \rho \frac{\partial K_{s-1/2}(\alpha)}{\partial \alpha} \quad (3.35)$$

Sledeći korak je primena skalarnog proizvoda:

$$\vec{\mu}_i \cdot \vec{\nabla}_\xi = \mu_i^x \frac{\partial}{\partial \xi_x} + \mu_i^y \frac{\partial}{\partial \xi_y} + \mu_i^z \frac{\partial}{\partial \xi_z}$$

na Jedn. 3.32, a to dovodi do nastanka novih članova. U skalarnom proizvodu postoje tri nezavisna operatora koja deluju na svaki od tri člana $\{C_1, C_2, C_3\}$ čime respektivno nastaje devet novih članova, numerisanih kao C_{ij} , gde važi da je $i \in \{1, 2, 3\}$, $j \in \{1, 2, 3\}$.

Član (1.1)

$$C_{11} = \mu_i^x \frac{\partial}{\partial \xi_x} \left[(-i) \vec{\mu}_j^p \cdot \vec{\rho} Ae^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta z} \beta^{(2s-1)/2} K_{s-1/2}(\alpha) \right] \quad (3.36)$$

Pošto važi:

$$\frac{\partial}{\partial \xi_x} e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}} = (-ix) e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}}$$

finalni izraz za član C_{11} postaje:

$$C_{11} = \mu_i^x (-x) \vec{\mu}_j^p \cdot \vec{\rho} Ae^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta z} \beta^{(2s-1)/2} K_{s-1/2}(\alpha) \quad (3.37)$$

Član (2.1)

$$C_{21} = \mu_i^y \frac{\partial}{\partial \xi_y} \left[(-i) \vec{\mu}_j^p \cdot \vec{\rho} Ae^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta z} \beta^{(2s-1)/2} K_{s-1/2}(\alpha) \right] \quad (3.38)$$

Pošto važi:

$$\frac{\partial}{\partial \xi_y} e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}} = (-iy) e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}}$$

finalni izraz za član C_{21} postaje:

$$C_{21} = \mu_i^y (-y) \vec{\mu}_j^p \cdot \vec{\rho} Ae^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta z} \beta^{(2s-1)/2} K_{s-1/2}(\alpha) \quad (3.39)$$

Član (1.2)

$$C_{12} = \mu_i^x \frac{\partial}{\partial \xi_x} \left[A e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{p}} \mu_j^z \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta z} \left(\frac{L_z}{2\rho} \right)^{(2s-1)/2} \left(\frac{2s-1}{2} \right) \gamma^{(2s-2)/3} L_z K_{s-1/2}(\alpha) \right] \quad (3.40)$$

Kao u prethodnim koracima:

$$\frac{\partial}{\partial \xi_x} e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{p}} = (-ix) e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{p}}$$

tako da finalni izraz za član C_{12} postaje:

$$C_{12} = \mu_i^x \mu_j^z (-ix) \left[A e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{p}} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta z} \left(\frac{L_z}{2\rho} \right)^{(2s-1)/2} \left(\frac{2s-1}{2} \right) \gamma^{(2s-2)/3} L_z K_{s-1/2}(\alpha) \right] \quad (3.41)$$

Član (2.2)

$$C_{22} = \mu_i^y \frac{\partial}{\partial \xi_y} \left[A e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{p}} \mu_j^z \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta z} \left(\frac{L_z}{2\rho} \right)^{(2s-1)/2} \left(\frac{2s-1}{2} \right) \gamma^{(2s-2)/3} L_z K_{s-1/2}(\alpha) \right] \quad (3.42)$$

Kao u prethodnim koracima:

$$\frac{\partial}{\partial \xi_y} e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{p}} = (-iy) e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{p}}$$

tako da finalni izraz za član C_{22} postaje:

$$C_{22} = \mu_i^y \mu_j^z (-iy) \left[A e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{p}} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta z} \left(\frac{L_z}{2\rho} \right)^{(2s-1)/2} \left(\frac{2s-1}{2} \right) \gamma^{(2s-2)/3} L_z K_{s-1/2}(\alpha) \right] \quad (3.43)$$

Član (1.3)

$$C_{13} = \mu_i^x \frac{\partial}{\partial \xi_x} \left[A e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{p}} \mu_j^z \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta z} \beta^{(2s-1)/2} \rho \frac{\partial K_{s-1/2}(\alpha)}{\partial \alpha} \right] \quad (3.44)$$

Finalni izraz za član C_{13} postaje:

$$C_{12} = \mu_i^x \mu_j^z (-ix) A e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{p}} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta z} \beta^{(2s-1)/2} \rho \frac{\partial K_{s-1/2}(\alpha)}{\partial \alpha} \quad (3.45)$$

Član (2.3)

$$C_{23} = \mu_i^y \frac{\partial}{\partial \xi_y} \left[A e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}} \mu_j^z \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta_z} \beta^{(2s-1)/2} \rho \frac{\partial K_{s-1/2}(\alpha)}{\partial \alpha} \right] \quad (3.46)$$

Finalni izraz za član (2.3) postaje:

$$C_{23} = \mu_i^y \mu_j^z (-iy) A e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta_z} \beta^{(2s-1)/2} \rho \frac{\partial K_{s-1/2}(\alpha)}{\partial \alpha} \quad (3.47)$$

Član (3.1)

$$C_{31} = \mu_i^z \frac{\partial}{\partial \xi_z} \left[(-i) \vec{\mu}_j^p \cdot \vec{\rho} A e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta_z} \beta^{(2s-1)/2} K_{s-1/2}(\alpha) \right] \quad (3.48)$$

Ovde imamo dva dela koja zavise od ξ_z i zato dobijamo dva sabirka unutar zagrada:

$$\begin{aligned} C_{31} = & (-i) \left(\vec{\mu}_j^p \cdot \vec{\rho} \right) \mu_i^z A e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}} \times \\ & \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta_z} \left[\frac{(2s-1)}{2} \beta^{(2s-3)/2} \frac{L_z^2}{2\rho} K_{s-1/2}(\alpha) + \right. \\ & \left. \beta^{(2s-1)/2} \rho \frac{\partial K_{s-1/2}(\alpha)}{\partial \alpha} \right] \end{aligned} \quad (3.49)$$

Član (3.2)

$$C_{32} = \mu_i^z \frac{\partial}{\partial \xi_z} \left[A e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}} \mu_j^z \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta_z} \left(\frac{L_z}{2\rho} \right)^{(2s-1)/2} \left(\frac{2s-1}{2} \right) \gamma^{(2s-2)/3} L_z K_{s-1/2}(\alpha) \right] \quad (3.50)$$

Slično, imamo dva člana koja zavise od ξ_z i dobijamo dva sabirka unutar zagrada

$$\begin{aligned} C_{32} = & \mu_i^z \mu_j^z A e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}} \times \\ & \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta_z} \left[\frac{L_z}{2\rho} \beta^{(2s-1)/2} \left(\frac{2s-1}{2} \right) \left(\frac{2s-2}{3} \right) \gamma^{(2s-5)/3} L_z^2 K_{s-1/2}(\alpha) + \right. \\ & \left. \left(\frac{L_z}{2\rho} \right)^{(2s-1)/2} \left(\frac{2s-1}{2} \right) \gamma^{(2s-2)/3} L_z \rho \frac{\partial K_{s-1/2}(\alpha)}{\partial \alpha} \right] \end{aligned} \quad (3.51)$$

Član (3.3)

$$C_{33} = \mu_i^z \frac{\partial}{\partial \xi_z} \left[A e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}} \mu_j^z \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta_z} \beta^{(2s-1)/2} \rho \frac{\partial K_{s-1/2}(\alpha)}{\partial \alpha} \right] \quad (3.52)$$

Ponovo imamo dva člana koja zavise od ξ_z i dobijamo dva sabirka unutar zagrada:

$$\begin{aligned} C_{33} = & \mu_i^z \mu_j^z A e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}} \times \\ & \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta_z} \rho \left[\left(\frac{2s-1}{2} \right) \beta^{(2s-3)/2} \left(\frac{L_z^2}{2\rho} \right) \frac{\partial K_{s-1/2}(\alpha)}{\partial \alpha} + \right. \\ & \left. \beta^{(2s-1)/2} \rho \frac{\partial^2 K_{s-1/2}(\alpha)}{\partial \alpha^2} \right] \end{aligned} \quad (3.53)$$

Nakon dobijanja svih članova C_{ij} , $i, j \in \{1, 2, 3\}$, potrebno je grupisati slične od njih.

Grupa 1

Ova grupa sadrži faktor:

$$\left(\vec{\mu}_i^\rho \cdot \vec{\rho} \right) \left(\vec{\mu}_j^\rho \cdot \vec{\rho} \right)$$

$$G_{r1} = C_{11} + C_{21}$$

$$\begin{aligned} G_{r1} = & - \left(\vec{\mu}_i^\rho \cdot \vec{\rho} \right) \left(\vec{\mu}_j^\rho \cdot \vec{\rho} \right) A e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}} \times \\ & \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta_z} \beta^{(2s-1)/2} K_{s-1/2}(\alpha) \end{aligned} \quad (3.54)$$

Grupa 2

Ova grupa sadrži faktor:

$$\left(\vec{\mu}_i^\rho \cdot \vec{\rho} \right) \mu_j^z$$

$$G_{r2} = C_{12} + C_{22}$$

$$G_{r2} = (-i) \left(\vec{\mu}_i^{\vec{\rho}} \cdot \vec{\rho} \right) \mu_j^z A e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}} \times \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta_z} \left(\frac{L_z}{2\rho} \right)^{(2s-1)/2} \left(\frac{2s-1}{2} \right) \gamma^{(2s-2)/3} L_z K_{s-1/2}(\alpha) \quad (3.55)$$

Grupa 3

Ova grupa sadrži faktor:

$$\left(\vec{\mu}_i^{\vec{\rho}} \cdot \vec{\rho} \right) \mu_j^z$$

$$G_{r3} = C_{13} + C_{23}$$

$$G_{r3} = (-i) \left(\vec{\mu}_i^{\vec{\rho}} \cdot \vec{\rho} \right) \mu_j^z A e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}} \times \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta_z} \beta^{(2s-1)/2} \rho \frac{\partial K_{s-1/2}(\alpha)}{\partial \alpha} \quad (3.56)$$

Grupa 4

Ova grupa sadrži faktor:

$$(\mu_i^z \mu_j^z)$$

$$G_{r4} = C_{32} + C_{33}$$

Potrebno je zapisati i jednu zamenu kako bi finalni izraz bio preglednije napisan,

$$J = \rho \left[\left(\frac{2s-1}{2} \right) \beta^{(2s-3)/2} \left(\frac{L_z^2}{2\rho} \right) \frac{\partial K_{s-1/2}(\alpha)}{\partial \alpha} + \beta^{(2s-1)/2} \rho \frac{\partial^2 K_{s-1/2}(\alpha)}{\partial \alpha^2} \right]$$

$$G_{r4} = (\mu_i^z \mu_j^z) A e^{-i\vec{\xi}_\rho \cdot \vec{\rho}} \times \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta_z} \left\{ \frac{L_z^{(2s-1)/2}}{2\rho} \left(\frac{2s-1}{2} \right) \left(\frac{2s-2}{3} \right) \gamma^{(2s-5)/3} L_z^2 K_{s-1/2}(\alpha) + \left(\frac{L_z}{2\rho} \right)^{(2s-1)/2} \left(\frac{2s-1}{2} \right) \gamma^{(2s-2)/3} L_z \rho \frac{\partial K_{s-1/2}(\alpha)}{\partial \alpha} + J \right\} \quad (3.57)$$

Grupa 5

Ova grupa sadrži faktor:

$$\left(\vec{\mu}_j^{\rho} \cdot \vec{\rho}\right) \mu_i^z$$

$$G_{r5} = C_{31}$$

$$\begin{aligned}
 G_{r5} = & (-i) \left(\vec{\mu}_j^{\rho} \cdot \vec{\rho}\right) \mu_i^z A e^{-i\vec{\xi}_{\rho} \cdot \vec{\rho}} \times \\
 & \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ik\eta z} \left[\frac{(2s-1)}{2} \beta^{(2s-3)/2} \frac{L_z^2}{2\rho} K_{s-1/2}(\alpha) + \right. \\
 & \left. \beta^{(2s-1)/2} \rho \frac{\partial K_{s-1/2}(\alpha)}{\partial \alpha} \right] \tag{3.58}
 \end{aligned}$$

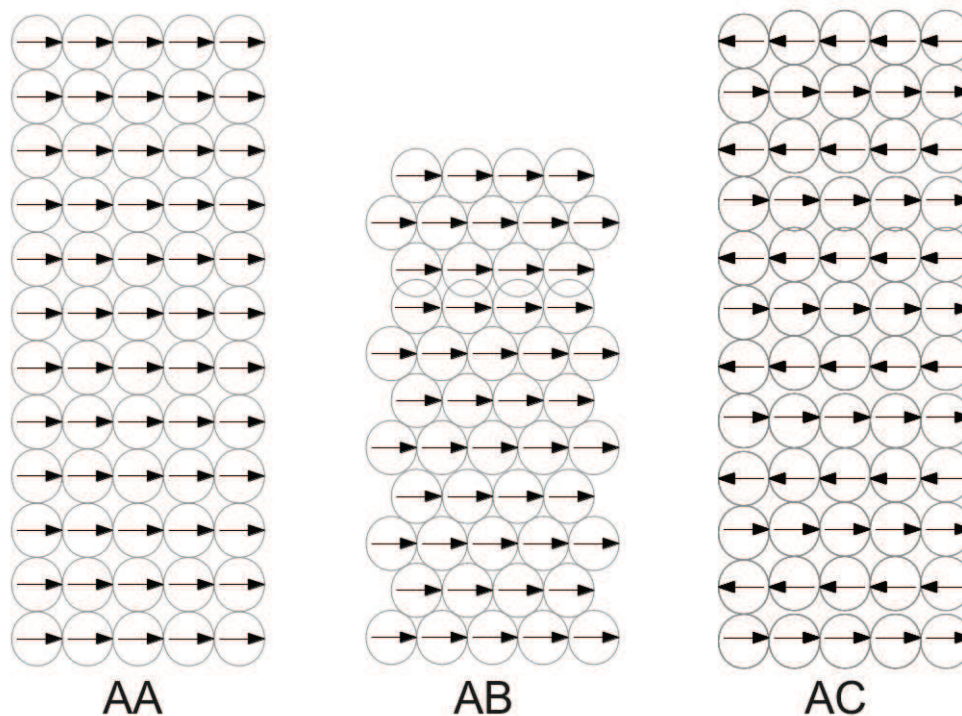
Dakle, izvedeni su opšti izrazi koji definišu sopstvenu i unakrsnu energiju u Leknerovom metodu. Kada se analizira specijalni slučaj magnetske dipol-dipolne interakcije, date u Jedn. 1 u referenci [9], kao i u Jedn. 2.1 u ovoj master tezi, za eksponent se uzima $s = \frac{3}{2}$. Izrazi za sopstvenu i unakrsnu energiju koji važe pod ovim uslovom implementirani u programskom paketu MATLAB.

Glava 4

Proračun geometrije struktura

Kao što je istaknuto u uvodu, razmatramo 3D strukture formirane samoorganizacijom magnetnih čestica. To su tube nastale slaganjem prstenova i heliksi koji se dobijaju kada se čestice slože u helikoidu. U početnoj analizi ključno pitanje jeste kako izabrati orijentaciju dipolnih momenata tako da energija strukture bude minimalna moguća. U radu koji nam služi kao polazna osnova [8], pokazano je da prsten ima minimalnu energiju kada su dipoli svake od čestica orijentisani tako da prave zatvorenu petlju. Time se minimizuje ukupni vektor magnetizacije strukture i postiže minimalna energija. Naša pretpostavka je da i 3D strukture imaju minimalnu energiju za istu orijentaciju magnetnih momenata čestica (magnetni momenti se nadovezuju i imaju pravac tangencijalan na konturu strukture). Napravljena je struktura sa dipolnim momentima koji su orijentisani po pretpostavci optimalne orijentacije. Zamislimo da je vektor dipolnog momenta smešten u sferni koordinatni sistem. Uvedene su popravke ovog vektora po ugao θ i ϕ . Te popravke su uzimale vrednosti iz punog opsega, odnosno $\theta = [0, \pi]$ i $\phi = [-\pi, +\pi]$. Za svaku konkretnu vrednost popravke sračunata je energija strukture. Pokazano je da je energija najmanja kada su vrednosti popravki zanemarljive. To praktično znači da optimalna konfiguracija (konfiguracija najmanje energije) odgovara pretpostavljenoj. Dipolni momenti su tangencijalni na konturu strukture i nadovezuju se. Uvedimo termin za ovakvu orijentaciju dipola - optimalna orijentacija. Provera je konkretno urađena primenom ugrađene metode optimizacije u MATLAB-u (funkcija `fmincon` koja nalazi minimum nelinearne funkcije više promenljivih pod zadatim ograničenjima) [10]. Kod celog programa za optimizaciju dat je u Glavi 7 (Listing kodova). Nakon potvrde o tome kako treba orijentisati dipolne momente, prešlo se na pravljenje željenih struktura, tuba i heliksa. Jednu konkretnu konfiguraciju tube određuje geometrijski raspored čestica i orijentacija njihovog dipolnog momenta. Dakle,

postoji veliki broj različitih konfiguracija tube. Uzete su tri karakteristične konfiguracije koje predstavljaju specijalne slučajeve. Na osnovu kristalografske terminologije, gde postoje nazivi za određeno slaganje molekula, uzeti su nazivi AA, AC i AB tuba. Na sledećoj slici prikazana je šema ove tri tube.



Slika 4.1: *Skica tri tipa tuba*

Pri računanju energije beskonačne periodične strukture Leknerovim metodom potrebno je pravilno odrediti osnovnu ćeliju. Osnovna ćelija predstavlja deo strukture koji se periodično ponavlja duž pravca narastanja. Kod AA tube prstenovi se slažu jedan preko drugog, tako da su čestice pozicionirane jedna iznad druge. Njena osnovna ćelija je jedan prsten sa *optimalnom orijentacijom* dipolnih momenata. U AB tubi je situacija malo komplikovanija. Naime, osnovnu ćeliju čine dva prstena. Između svake dve čestice donjeg prstena ugnježena je po jedna čestica gornjeg prstena. Dipoli su takođe *optimalno orijentisani*. AC tuba geometrijski je ista kao AA tuba, samo što su dipoli u svakom drugom prstenu orijentisani suprotno od dipola iz njemu prethodnog, tačnije dolazi do alterniranja orijentacije dipola. Oni su tangencijalni u odnosu na konturu strukture, ali u svakom neparnom prstenu usmereni su na jednu stranu, a u svakom parnom prstenu na suprotnu

stranu. Kod AC tuba, osnovna ćelija je sačinjena od jednog takvog para prstenova. Manipulacijom milimetarskih magnetnih čestica i slaganjem u ove tri konfiguracije tuba, stekla se inicijalna pretpostavka o njihovoj energetskoj povoljnosti. Pretpostavka je da je AB struktura najmanje energije i zato je nazvana - *stabilna konfiguracija*. Najnepovoljnija je AA tuba. Kao što je pokazano u uvodnom delu gde je ispitana interakcija dva dipola, najjače odbijanje (maksimum potencijalne energije) javlja se kada se čeonu dodiruju dva dipola iste orijentacije. Prema tome, AA tuba je *nestabilna konfiguracija*. Za AC tubu je očekivano da je između ova dva ekstrema, pa je nazvana *metastabilna konfiguracija*. Takođe, manipulacijom milimetarskih magneta uočeno je da se magnetne čestice mogu slagati tako da formiraju heliks, pa su proučeni i heliksi. Dakle, jednostavnim eksperimentom sa magnetnim česticama došlo se do ideje o relevantnim konfiguracijama koje su potom simulirane na računaru. Prvo je potrebno objasniti formiranje struktura.

Radi normalizacije fizičkog sistema koji razmatramo, uvedene su dimenziona i energetska skala. Po dimenzionoj skali, prečnik svake od čestica jednak je $d = 1$. Rastojanje između dve čestice računa se od centra do centra, pa je tako rastojanje između dve čestice koje su u čeonom kontaktu jednako jedan. Sa druge strane, veoma je praktično uvesti i energetska skalu, tako da se energija ne izražava u džulima ili elektronvoltima nego kao [a. u.]. Energetska skala definisana je preko $U_{dd} \equiv \frac{Cm^2}{d^3}$ koja fizički predstavlja odbojni potencijal za dva paralelna dipola u čeonom kontaktu. Takođe, vrednosti dipolnog momenta su normalizovane tako da je $|\vec{m}| = 1$.

Sada ćemo objasniti formiranje geometrije struktura. Za sve tri vrste tuba osnova je prsten formiran od magnetnih čestica. Na sledećoj slici data je šema geometrijske postavke na osnovu koje je izvedena relacija koja povezuje poluprečnik prstena i broj čestica.

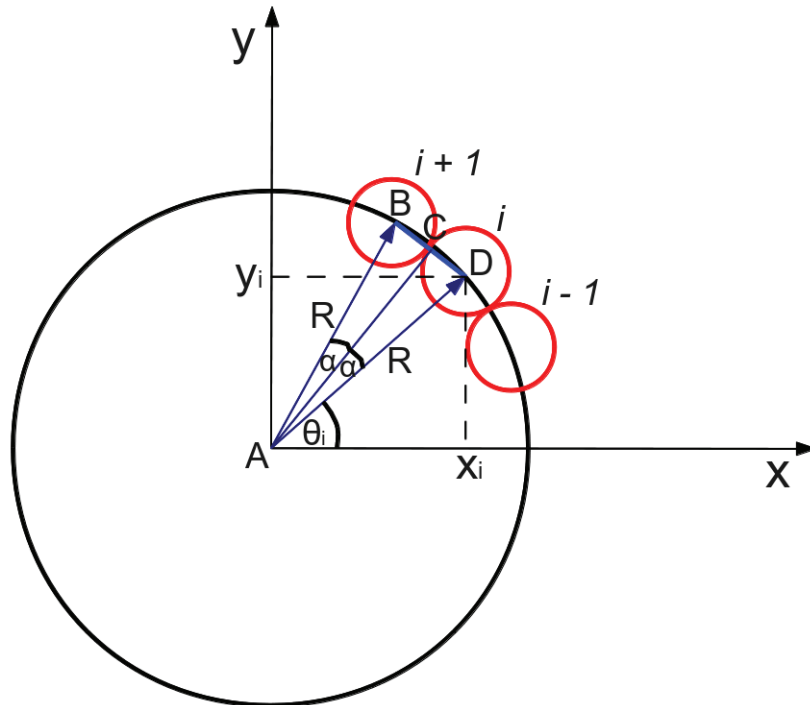
Uzmimo da prsten formira N čestica koje se dodiruju. Ugaoni razmak dve uzastopne čestice iznosi $\Delta\theta = 2\pi/N$. Za proizvoljnu i -tu česticu definisan je njen ugaoni položaj meren u odnosu na pozitivnu x-poluosu, $\theta_i = i\frac{2\pi}{N}$. Posmatrajmo pravougli trougao ABC sa Sl. 10. Kako je rastojanje između čestica jednako jedan, to je dužina $BC = \frac{1}{2}$. Važe relacije:

$$\sin(\alpha) = \frac{1}{2R}$$

$$2\alpha = 2\frac{\pi}{N} \Rightarrow \alpha = \frac{\pi}{N}$$

Dakle, relacija između poluprečnika prstena i broja čestica jeste

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



Slika 4.2: *Skica osnovnog prstena*

Sa slike se jasno vidi kako se mogu odrediti x i y koordinata proizvoljne čestice.

4.1 AA tuba

Osnovna ćelija je prsten sa česticama optimalne orijentacije dipola. Sledeći skup jednačina definiše koordinate čestica, $i = 1, N$.

$$\begin{aligned}
 x_i &= \frac{1}{2\sin\left(\frac{\pi}{N}\right)} \cos\left(\frac{2\pi i}{N}\right) \\
 y_i &= \frac{1}{2\sin\left(\frac{\pi}{N}\right)} \sin\left(\frac{2\pi i}{N}\right) \\
 z_i &= 0
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

Dipolni momenti definisani su na sledeći način, $i = 1, N$.

$$\begin{aligned}\mu_{x_i} &= \cos\left(\frac{2\pi i}{N} + \frac{\pi}{2}\right) \\ \mu_{y_i} &= \sin\left(\frac{2\pi i}{N} + \frac{\pi}{2}\right) \\ \mu_{z_i} &= 0\end{aligned}\tag{4.2}$$

Perioda duž z-ose koja se koristi u Leknerovom metodu je L_z . U ovom slučaju iznosi $L_z = 1$.

4.2 AB tuba

Osnovna ćelija je par prstenova sa česticama optimalne orijentacije dipola. Imamo dva skupa jednačina, jedan je skup jednačina za donji i drugi za gornji prsten. Za donji prsten koordinate čestica su definisane na sledeći način:

$$\begin{aligned}x_i &= \frac{1}{2\sin\left(\frac{\pi}{N}\right)}\cos\left(\frac{2\pi i}{N}\right) \\ y_i &= \frac{1}{2\sin\left(\frac{\pi}{N}\right)}\sin\left(\frac{2\pi i}{N}\right) \\ z_i &= 0\end{aligned}\tag{4.3}$$

Javio se problem određivanja z-koordinate čestica u gornjem prstenu koji je rešen na sledeći način. Posmatrajmo dve proizvoljne čestice iz donjeg prstena (čestice A i B) i jednu česticu iz gornjeg prstena (čestica C) koja je ugnježdjena između njih dve. Kako je rastojanje $AC = BC = 1$, to se iz tog uslova može odrediti za koliko su pomerene čestice iz gornjeg prstena u odnosu na čestice iz donjeg prstena, duž z-pravca:

$$\Delta z = \sqrt{1 - (x_A - x_C)^2 - (y_A - y_C)^2}$$

Za gornji prsten koordinate čestica su definisane na sledeći način:

$$\begin{aligned}x_i &= \frac{1}{2\sin\left(\frac{\pi}{N}\right)}\cos\left(\frac{2\pi i}{N} + \frac{\pi}{N}\right) \\ y_i &= \frac{1}{2\sin\left(\frac{\pi}{N}\right)}\sin\left(\frac{2\pi i}{N} + \frac{\pi}{N}\right) \\ z_i &= \Delta z\end{aligned}\tag{4.4}$$

Za AB tubu važi $L_z = 2\Delta z = 2\sqrt{1 - (x_A - x_C)^2 - (y_A - y_C)^2}$.

4.3 AC tuba

Osnovna ćelija sadrži dva prstena gde su čestice jedna iznad druge, ali dipolni momenti alterniraju. Za donji prsten važi:

$$\begin{aligned}x_i &= \frac{1}{2\sin\left(\frac{\pi}{N}\right)} \cos\left(\frac{2\pi i}{N}\right) \\y_i &= \frac{1}{2\sin\left(\frac{\pi}{N}\right)} \sin\left(\frac{2\pi i}{N}\right) \\z_i &= 0\end{aligned}\tag{4.5}$$

$$\begin{aligned}\mu_{x_i} &= \cos\left(\frac{2\pi i}{N} + \frac{\pi}{2}\right) \\ \mu_{y_i} &= \sin\left(\frac{2\pi i}{N} + \frac{\pi}{2}\right) \\ \mu_{z_i} &= 0\end{aligned}\tag{4.6}$$

U AC tubi je parametar $\Delta z = 1$. Za gornji prsten važi:

$$\begin{aligned}x_i &= \frac{1}{2\sin\left(\frac{\pi}{N}\right)} \cos\left(\frac{2\pi i}{N}\right) \\y_i &= \frac{1}{2\sin\left(\frac{\pi}{N}\right)} \sin\left(\frac{2\pi i}{N}\right) \\z_i &= \Delta z\end{aligned}\tag{4.7}$$

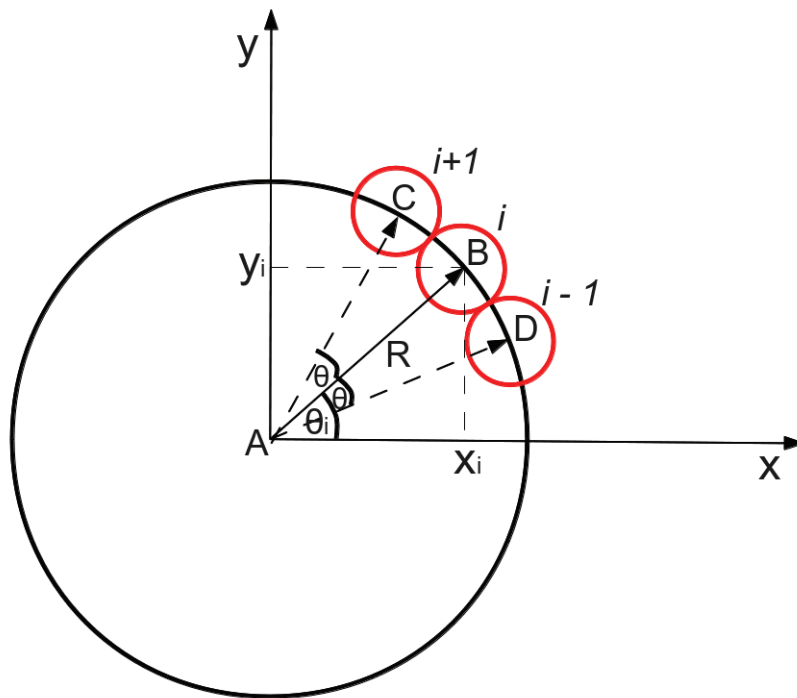
$$\begin{aligned}\mu_{x_i} &= -\cos\left(\frac{2\pi i}{N} + \frac{\pi}{2}\right) \\ \mu_{y_i} &= -\sin\left(\frac{2\pi i}{N} + \frac{\pi}{2}\right) \\ \mu_{z_i} &= 0\end{aligned}\tag{4.8}$$

Kako osnovna ćelija ima dva prstena to važi $L_z = 2\Delta z = 2$.

4.4 Heliks

Prethodno izloženim skupom formula definisana je struktura tuba. Sada ćemo prikazati kako se formira heliks. Videli smo da je tuba definisana samo

jednim parametrom, a to je broj čestica ili ekvivalentno poluprečnik tube. Heliks je definisan pomoću tri parametra, a to su broj čestica, poluprečnik i ugaoni pomeraj. Ugaoni pomeraj jeste ugaono rastojanje između dve susedne čestice u projekciji heliksa na xy-ravan. Projekcijom heliksa na xy-ravan dobija se prsten kao i kod tube. Na slici je ugaoni pomeraj označen sa θ .



Slika 4.3: *Skica poprečnog preseka heliksa*

Jednostavno je odrediti x i y koordinatu proizvoljne čestice, međutim bilo je potrebno shvatiti kako se određuje z -koordinata. U heliksu postoji pomeraj duž z -ose između svake dve uzastopne čestice. Prva čestica ima z koordinatu jednaku nula, a svaka sledeća je pomerena za istu vrednost Δz . Na isti način kao kod AB tube određeno je koliko iznosi ova veličina na osnovu uslova da je rastojanje dve čestice koje se dodiruju jednako jedinici.

$$\Delta z = \sqrt{1 - [(\cos\theta - \cos 2\theta)^2 + (\sin\theta - \sin 2\theta)^2]} R^2$$

Sledećim skupom formula određuju se koordinate čestica u heliksu:

$$\begin{aligned}x_i &= R \cos(i\theta) \\y_i &= R \sin(i\theta) \\z_i &= (i-1) \Delta z\end{aligned}\tag{4.9}$$

Dužina heliksa određuje njegovu periodičnost duž z-ose, pa tako za heliks napravljen od N čestica važi $L_z = N\Delta z$. Korisno je uvesti veličinu $M = \sqrt{1 - \left(\frac{dz}{R}\right)^2}$. Dipolni momenti su optimalno orijentisani:

$$\begin{aligned}\mu_{x_i} &= M \cos\left(i\theta + \frac{\pi}{2}\right) \\ \mu_{y_i} &= M \sin\left(i\theta + \frac{\pi}{2}\right) \\ \mu_{z_i} &= \frac{\Delta z}{R}\end{aligned}\tag{4.10}$$

Bitna osobina heliksa jeste ta da tri parametra koja ga definišu nisu nezavisni već su povezani. Naime, jedan namotaj heliksa definiše prsten u projekciji na xy-ravan. Ako postoji ukupno l namotaja, tada je ukupni broj čestica heliksa jednak:

$$N = \frac{2\pi l}{\theta}$$

. Ovde mora biti zadovoljeno da $\{N, l\} \in \mathbb{N}$. Takođe, izabrani poluprečnik i ugaoni pomeraj moraju da budu takvi da ne dolazi do preklapanja namotaja. Došli smo do zaključka da se za fiksnu vrednost θ poluprečnik može nalaziti u intervalu $R \in [R_{\min}, R_{\max}]$. Iz uslova da je pomeraj duž z-ose pozitivna veličina dobijamo uslov za maksimalnu vrednost poluprečnika pri fiksnom ugaonom pomeraju:

$$\begin{aligned}dz &= \sqrt{1 - [(\cos\theta - \cos 2\theta)^2 + (\sin\theta - \sin 2\theta)^2]} R^2 \geq 0 \\ \Rightarrow & [(\cos\theta - \cos 2\theta)^2 + (\sin\theta - \sin 2\theta)^2] R^2 \leq 1\end{aligned}$$

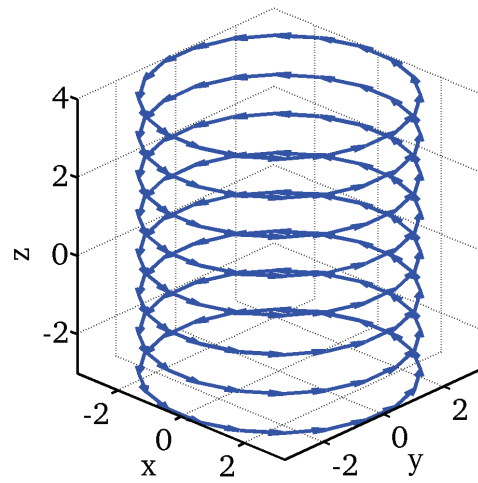
Dakle, uslov za maksimalnu vrednost poluprečnika pri fiksnom ugaonom pomeraju jeste:

$$R_{\max} = \frac{1}{\sqrt{(\cos\theta - \cos 2\theta)^2 + (\sin\theta - \sin 2\theta)^2}}$$

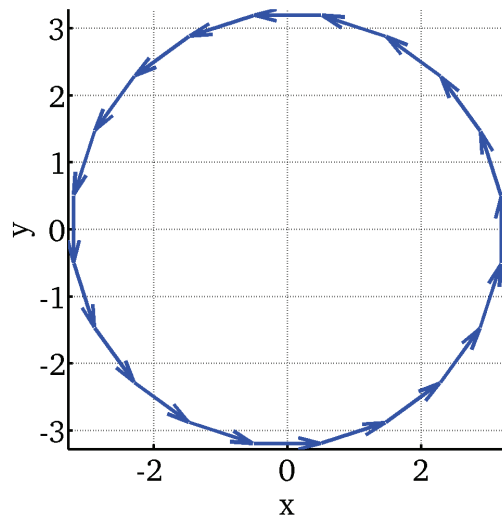
Sa druge strane, uslov za minimalnu vrednost poluprečnika je sledeći:

$$R_{\min} = \sqrt{\frac{1 - \left(\frac{\theta}{\pi}\right)^2}{(\cos\theta - \cos 2\theta)^2 + (\sin\theta - \sin 2\theta)^2}}$$

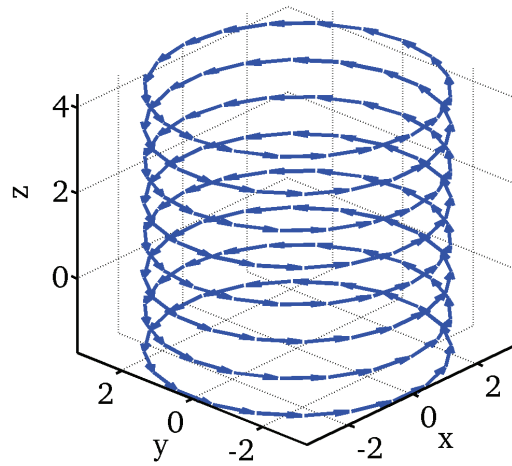
Na sledećim slikama prikazane su geometrije tuba i heliksa, dobijene proračunima u MATLAB-u. Pokazano je kako strukture izgledaju gledane sa strane i u projekciji na xy -ravan.



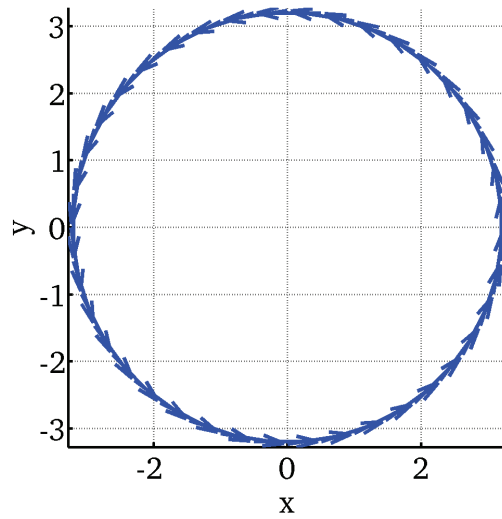
Slika 4.4: *AA tuba - struktura u perspektivi sa strane*



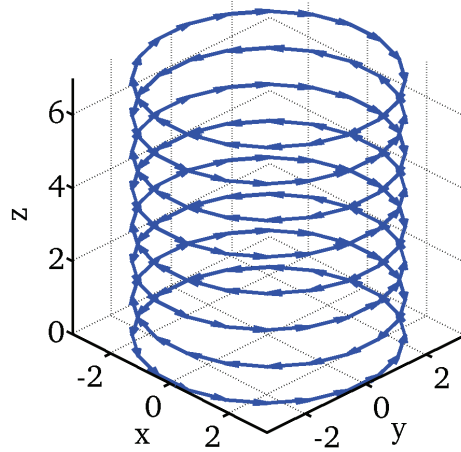
Slika 4.5: *AA tuba - projekcija na xy ravan*



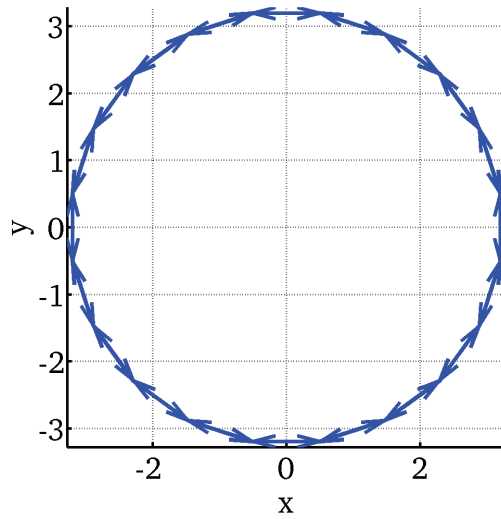
Slika 4.6: *AB tuba - struktura u perspektivi sa strane*



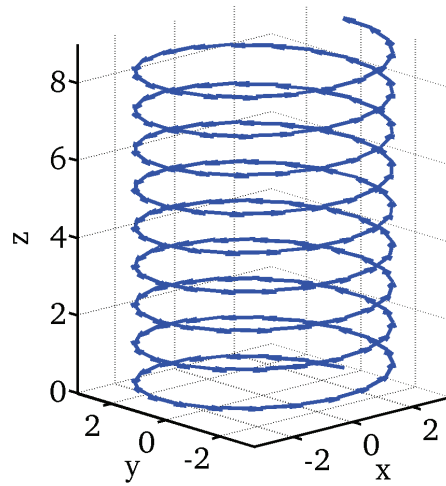
Slika 4.7: *AB tuba -projekcija na xy ravan*



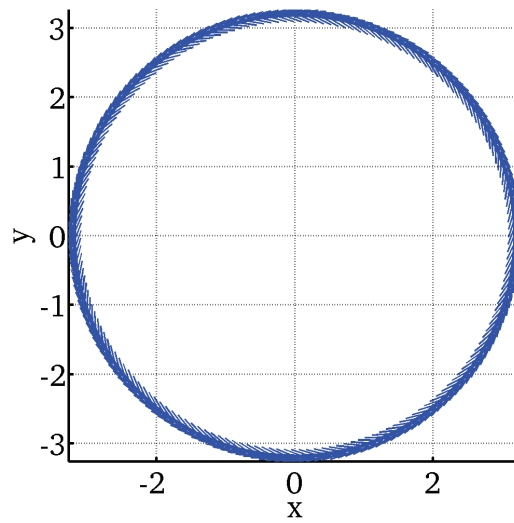
Slika 4.8: *AC tuba - struktura u perspektivi sa strane*



Slika 4.9: *AC tuba - projekcija na xy ravan*



Slika 4.10: *Heliks - struktura u perspektivi sa strane*



Slika 4.11: *Heliks - projekcija na xy ravan*

Glava 5

Proračun energije struktura

U prethodnom poglavlju pokazano je kako se formiraju tube i heliksi. Kada se formira struktura, može se preći na proračun njene energije. Pre svega, jasno se izdvajaju dva moguća tipa struktura, a to su konačne i beskonačne periodične. Kod konačne strukture se energija sračuna jednostavnim sumiranjem dipol-dipolne interakcije svakog para čestica, a za proračun energije beskonačnih periodičnih struktura koristi se Leknerov metod. Neka interaguju i -ta i j -ta čestica. Izraz za potencijal njihove interakcije jeste:

$$U_{\text{dd}}(\vec{r}_{ij}) = \left[\frac{(\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j)}{r^3} - 3 \frac{(\vec{\mu}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{\mu}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r^5} \right]$$

Napisana je funkcija *dipole.m* koja računa potencijal interakcije para čestica. Bitno je napomenuti da se energija izražava po čestici. To znači da se sumira potencijal interakcije svakog para čestica, pa se ta vrednost podeli sa brojem čestica, a time se dobija srednja vrednost energije po čestici, E . Ovo se mora uraditi da bi se strukture mogle porediti po ovako sračunatoj energiji. Ako se ne bi računala energija po čestici, onda se ne bi mogle porediti strukture sa različitim brojem čestica. Međutim, uočeno je da kod konačnih struktura postoje efekti krajeva. Tako se došlo na ideju da se računa ne samo srednja energija po čestici, već i da se računa energija srednje čestice. To znači da se uzima čestica koja je u sredini strukture, ako je N ukupan broj, njen indeks je $i = \frac{N}{2}$ i sračuna dipol-dipolna interakcija te srednje čestice sa svakom od preostalih čestica strukture. Ta energija označena je u kodovima simulacija kao EO . Prethodno predstavljeni metod proračuna energije je referentan zato što primenjuje direktno sumiranje dipol-dipolnih interakcija. Bilo je korisno implementirati ga za sve ispitivane strukture zato što se poređenjem sa rezultatima ovog metoda može proveriti ispravnost implementiranog Leknerovog metoda. Što se tiče Leknerovog metoda, ukupna energija strukture data je kao zbir sopstvene (Eself) i unakrsne (Ecross) energije.

Sopstvena i unakrsna energija računaju se u okviru osnovne ćelije date strukture, pri čemu je N ukupan broj čestica osnovne ćelije. Sopstvena energija računa se na sledeći način [9]:

$$E_{\text{self}} = \frac{1}{L_z^3} \frac{\sum_{i=1}^N (1 - 3\mu_{z_i}^2 \zeta(3))}{N} \quad (5.1)$$

Unakrsna energija računa se na sledeći način [9]:

$$E_{\text{cross}} = \frac{\sum_{i \neq j} U_{\text{cross}}(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{\mu}_i, \vec{\mu}_j, L_z)}{N} \quad (5.2)$$

U gornjem izrazu je sa $U_{\text{cross}}(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{\mu}_i, \vec{\mu}_j, L_z)$ označena funkcija koja računa unakrsnu energiju dipolne interakcije čestica i, j pri čemu je $i \neq j$. Sada će biti detaljno prikazana ova funkcija. Uvedimo prvo sledeće veličine:

$$\vec{\rho} = (r_{x_i} - r_{x_j}, r_{y_i} - r_{y_j}, 0)$$

$$z = r_{z_i} - r_{z_j}$$

$$\mu_\rho = (\mu_x, \mu_y, 0)$$

$$\eta_z = \frac{2\pi z}{L_z}$$

$$\eta_\rho = \frac{2\pi \rho}{L_z}$$

Bitno je napomenuti da postoje dve varijante izraza za U_{cross} u zavisnosti od toga da li je ispunjen uslov $\vec{\rho} \neq 0$. U slučaju da pomenuti uslov važi, unakrsna energija definisana je preko četiri sume:

$$U_{\text{cross}} = S_1 + S_2 + S_3 + S_4$$

U tim sumama figuriše modifikovana Beselova funkcija druge vrste, nultog i prvog reda označena sa $K_0(k\eta_\rho)$ i $K_1(k\eta_\rho)$ respektivno, pri čemu k predstavlja indeks sumiranja.

$$S_1 = \frac{-8\pi}{L_z^2} \left[\frac{2(\vec{\mu}_{\rho_i} \cdot \vec{\rho})(\vec{\mu}_{\rho_j} \cdot \vec{\rho})}{\rho^3} - \frac{\vec{\mu}_{\rho_i} \cdot \vec{\mu}_{\rho_j}}{\rho} \right] \times \sum_{k=1}^{+\infty} k \cos(k\eta_z) K_1(k\eta_\rho)$$

$$S_2 = \frac{-16\pi^2}{L_z^3} \left[\frac{(\vec{\mu}_{\rho_i} \cdot \vec{\rho})(\vec{\mu}_{\rho_j} \cdot \vec{\rho})}{\rho^2} - \mu_{z_i} \mu_{z_j} \right] \times \sum_{k=1}^{+\infty} k^2 \cos(k\eta_z) K_0(k\eta_\rho)$$

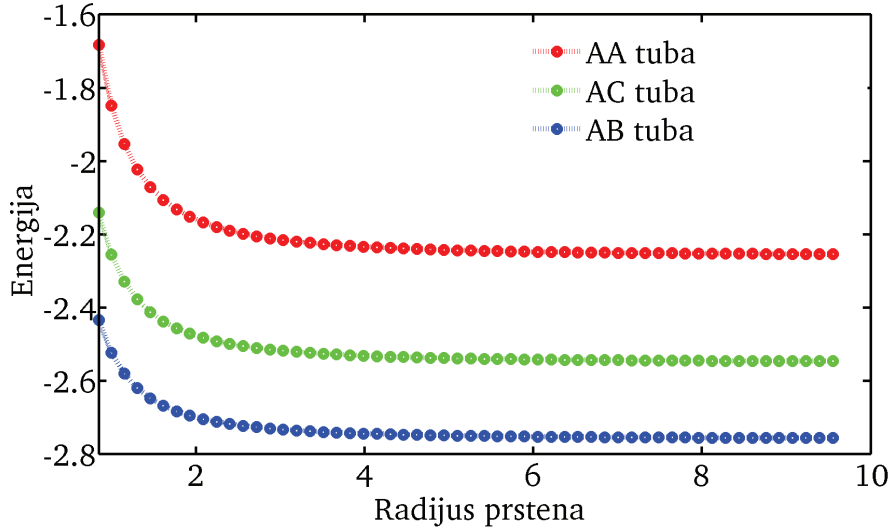
$$S_3 = \frac{2}{L_z} \left[\frac{2 (\vec{\mu}_{\rho_i} \cdot \vec{\rho}) (\vec{\mu}_{\rho_j} \cdot \vec{\rho})}{\rho^4} - \frac{\vec{\mu}_{\rho_i} \cdot \vec{\mu}_{\rho_j}}{\rho^2} \right]$$

$$S_4 = \frac{-16\pi^2 (\vec{\mu}_{\rho_i} \cdot \vec{\rho}) \mu_{z_j} + (\vec{\mu}_{\rho_j} \cdot \vec{\rho}) \mu_{z_i}}{L_z^3 \rho} \times \sum_{k=1}^{+\infty} k^2 \sin(k\eta_z) K_1(k\eta_\rho)$$

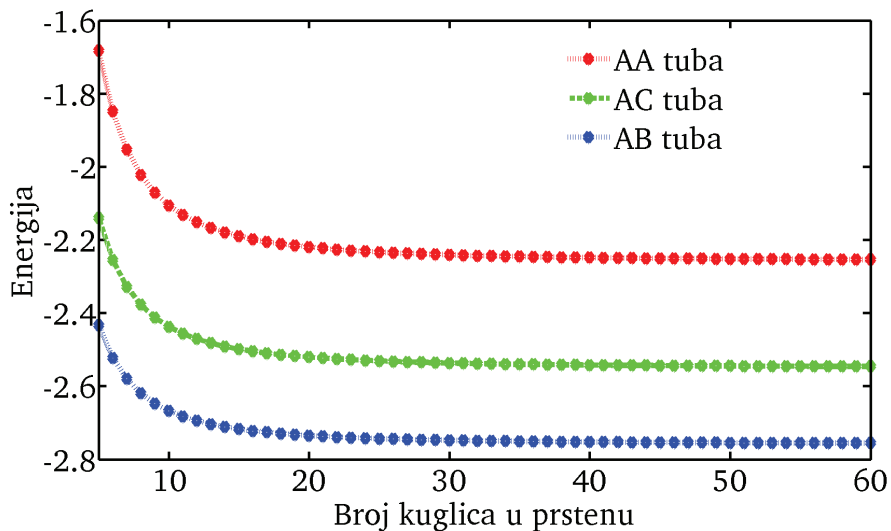
Dakle, prikazali smo kako se računa unakrsna energija u slučaju da važi $\vec{\rho} \neq 0$. Kada je $\vec{\rho} = 0$ unakrsna energija računa se preko jedne sume [9]:

$$U_{\text{cross}} = -\frac{(\vec{\mu}_{\rho_i} \cdot \vec{\mu}_{\rho_j} - 2\mu_{z_i}\mu_{z_j})}{L_z^3} \left[\psi''\left(\frac{z}{L_z}\right) + \pi^3 \cos\left(\pi \frac{z}{L_z}\right) \sin^{-3}\left(\pi \frac{z}{L_z}\right) \right]$$

gde $\psi''\left(\frac{z}{L_z}\right)$ jeste tetra-gama funkcija. Na sledećim slikama prikazana je zavisnost energije beskonačnih periodičnih tuba od poluprečnika i od broja čestica. Kao što je i očekivano, najmanju energiju na datom poluprečniku (pri datom geometrijskom ograničenju) ima AB tuba, najveću ima AA tuba, dok je energija AC tube između ova dva ekstrema.



Slika 5.1: Zavisnost energije AA/AC/AB tuba od radijusa prstena



Slika 5.2: Zavisnost energije AA/AC/AB tuba od broja kuglica u prstenu

5.1 Skaliranje energije struktura

Implementirana su dva metoda za proračun energije struktura - direktni za konačne i Leknerov za beskonačne strukture. Čest problem statističke fizike i fizike kompleksnih sistema jeste skaliranje. Skaliranje pokazuje kako se osobine sistema menjaju povećavanjem njegove veličine i složenosti. U konkretnom slučaju tuba i heliksa, potrebno je ispitati kako se energija ovih struktura skalira sa povećavanjem broja čestica. Da li se povećavanjem konačne strukture može u beskonačnosti postići energija sračunata za beskonačnu periodičnu strukturu? Ukoliko se ispostavi da je to moguće, implementirani Leknerov metod je ispravan. Sa druge strane, ispitujemo skaliranje što znači da određujemo na koji način će povećavanjem konačne strukture njena energija konvergirati ka energiji u beskonačnosti. Na sledećim slikama prikazano je kako se smanjuje razlika između energije konačne strukture i energije beskonačne, sa povećanjem broja čestica u konačnoj strukturi. Potrebno je da se razlika između energije konačne i beskonačne strukture smanjuje, ali tako da energija konačne strukture konvergira sa gornje strane, odnosno da se data razlika sve više i više smanjuje, dok sa gornje strane ne iskonvergira ka energiji beskonačne strukture. U radu [8] pokazano je da je minimalna energija beskonačne ravni sa magnetnim česticama jednaka $E_{\min} = -2.759$ tako da je bilo jako korisno znati ovu vrednost jer ona određuje minimum koji se ne sme probiti pri proračunima energije bilo koje strukture koju analiziramo.

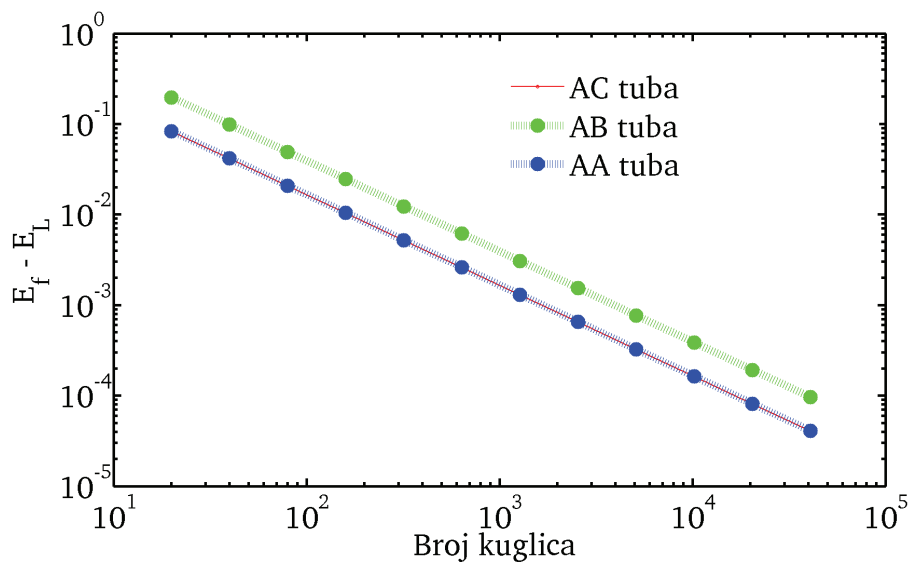
Za naš sistem očekivano je da skaliranje bude opisano sledećim zakonom [8]:

$$(E_f - E_L) \propto E_0 \times N^{-\alpha}$$

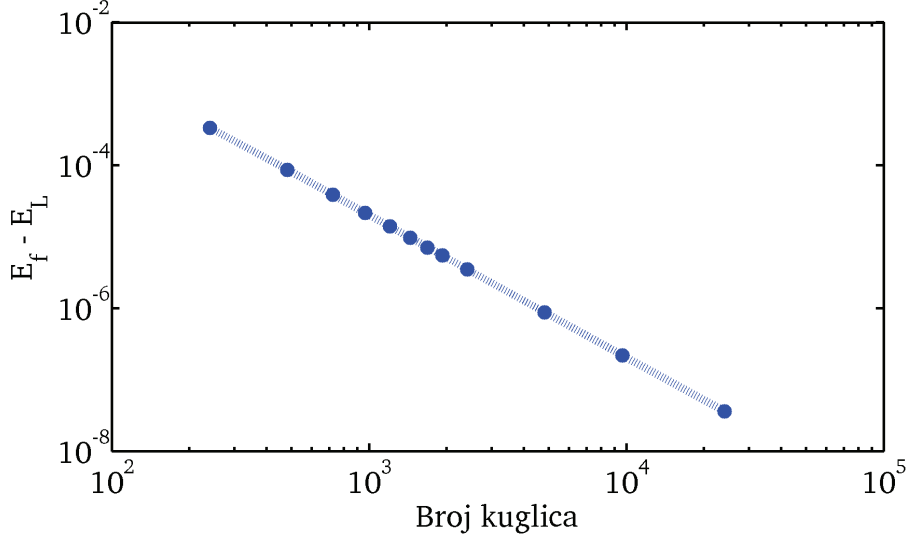
Kada se gornja jednakost logaritmuje dobija se:

$$\log(E_f - E_L) \propto -\alpha \log N + \log E_0$$

Prema tome, ako se razlika energija $(E_f - E_L)$ i broj čestica konačne strukture N logaritmuju i prikažu kao y i x osa, respektivno, dobiće se linearno opadajuća zavisnost. Na osnovu rezultata skaliranja za tube i za heliks, zaključujemo da je Leknerov metod validan, kao i da važi izneti zakon o skaliranju.



Slika 5.3: Skaliranje AA/AC/AB tuba



Slika 5.4: Skaliranje heliksa

5.2 Korelacija energije i gustine pakovanja

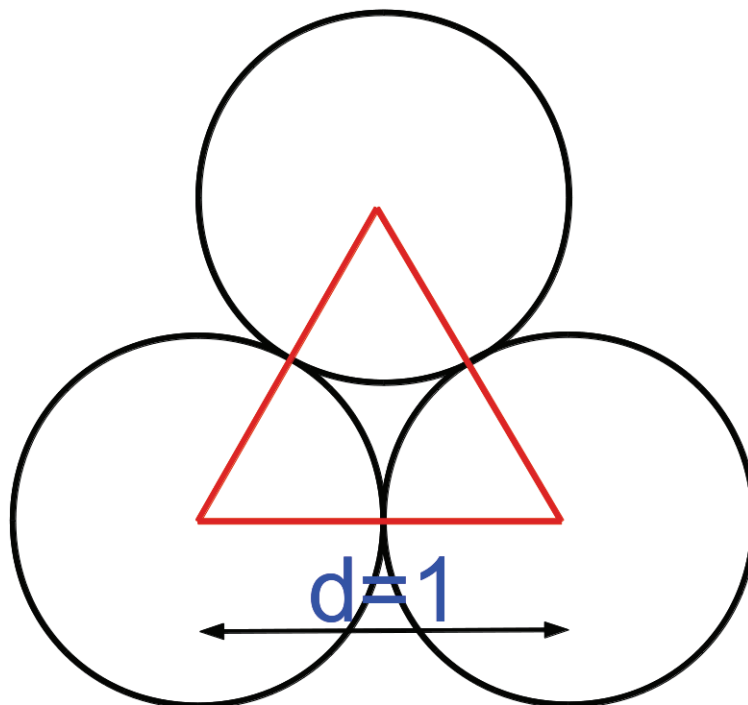
U razmatranjima struktura, parametar koji je relevantan jeste gustina pakovanja. Za naše strukture definisan je na sledeći način:

$$\Phi = \frac{S}{S_{\text{uk}}}$$

Ovo je bezdimenzioni parametar koji predstavlja odnos površine koju zauzimaju čestice i ukupne površine date strukture. Na sledećoj slici prikazan je raspored čestica pri kome one zauzimaju najveću moguću površinu. Ovaj slučaj je referentni i za njega će biti izvedena vrednost parametra gustine pakovanja, Φ_{maks} . U crveni trougao ulazi tačno tri puta po šestina jedne čestice. Površina jedne čestice jeste $S_c = \frac{1}{2} \pi = \frac{\pi}{4}$. Površina dodeljena česticama (zauzeta površina) jednaka je $S = \frac{3}{6} \frac{1}{2} \pi = \frac{\pi}{8}$. Kako je crveni trougao jednakostraničan, njegova površina iznosi $S_{\text{uk}} = \frac{\sqrt{3}}{4}$. Dakle, maksimalna gustina pakovanja iznosi:

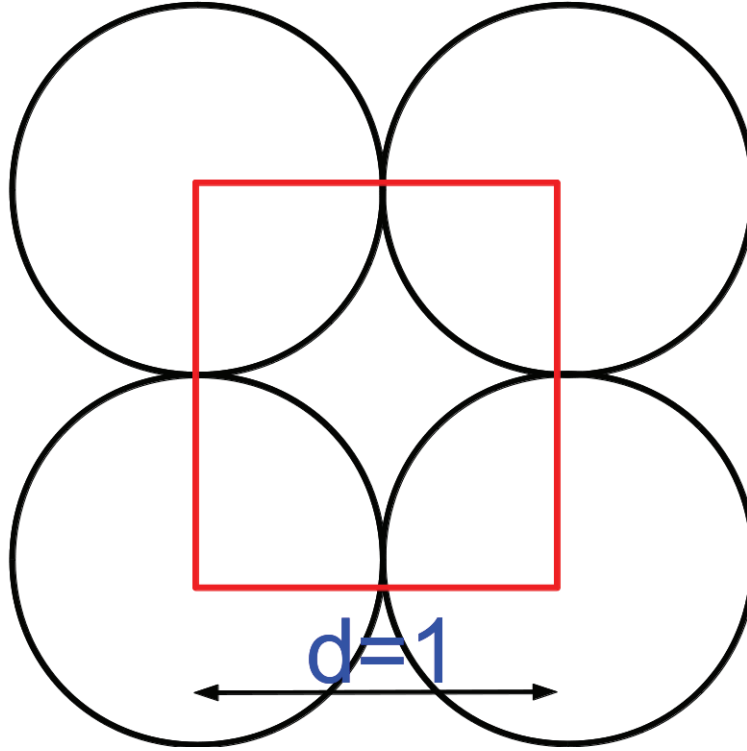
$$\Phi_{\text{maks}} = \frac{\pi}{2\sqrt{3}} \approx 0.91$$

U slučaju tuba očigledno je da na fiksnom geometrijskom ograničenju (fiksno poluprečniku), AB tuba ima veću gustinu pakovanja od AA tube, a i da ima manju energiju. Naime, kod AB tuba se uočava elementarni



Slika 5.5: *Ilustracija slučaja maksimalne gustine pakovanja*

trougao (prikazan na prethodnoj slici koja pokazuje slučaj najveće gustine pakovanja) dok kod AA tube imamo elementarni kvadrat, kao što vidimo na sledećoj slici.



Slika 5.6: *Ilustracija gustine pakovanja za slučaj AA tube*

Zaključak je da su kod tuba energija i gustina pakovanja korelisane tako da veća gustina pakovanja podrazumeva manju energiju strukture. Kod heliksa se korelacija ne može jednostavno odrediti. U tu svrhu napisana je simulacija koja pri fiksnom poluprečniku pravi razne konfiguracije heliksa i za svaku ponaosob računa energiju i gustinu pakovanja. Prvo prikažimo kako se izvodi formula za računanje gustine pakovanja kod heliksa. Posmatrajmo jedan pun obrtaj, odnosno jednu zavojnicu heliksa. Ukupan broj čestica je N , a broj obrtaja je l . Svaka čestica je u odnosu na njoj prethodnu podignuta za Δz duž pravca narastanja. Ukupni pomeraj duž z - ose dobija se množenjem broja čestica u jednom obrtaju, $\frac{N}{l}$ i pomeraja po čestici, Δz :

$$h = \frac{N}{l} \Delta z$$

Česticama se dodeljuje ugaoni pomeraj iz opsega $[0, 2\pi]$ pri čemu su ti ugaoni pomeraji linearno ekvidistantni. Tako se praktično parametrizuje jedna zavojnica heliksa. Na taj način se dobijaju koordinate proizvoljne čestice:

$$\begin{aligned}
x &= R\cos\theta \\
y &= R\sin\theta \\
z &= \frac{\phi}{2\pi}h
\end{aligned} \tag{5.3}$$

Odredimo dužinu luka koji određuje jedan pun obrtaj heliksa, na sledeći način:

$$l = \int_{\phi=0}^{2\pi} \sqrt{\left(\frac{dx}{d\phi}\right)^2 + \left(\frac{dy}{d\phi}\right)^2 + \left(\frac{dz}{d\phi}\right)^2} d\phi$$

Kako je $\left(\frac{dx}{d\phi}\right)^2 + \left(\frac{dy}{d\phi}\right)^2 = R^2$ i kako je $\left(\frac{dz}{d\phi}\right)^2 = \frac{h^2}{4\pi^2}$, to sledi:

$$l = \int_{\phi=0}^{2\pi} \sqrt{R^2 + \frac{h^2}{4\pi^2}} d\phi = \sqrt{(2\pi R)^2 + h^2}$$

. Sada kada je poznata dužina luka jednog obrtaja, vratimo se na izvođenje formule za gustinu pakovanja:

$$\Phi = \frac{\frac{N}{l} \frac{\pi}{4}}{lh} = \frac{\frac{N}{l}}{l \frac{N}{l} \Delta z} = \frac{\frac{\pi}{4}}{l \Delta z}$$

Konačno, izraz za gustinu pakovanja kod heliksa je:

$$\Phi = \frac{\pi}{4\sqrt{(2\pi R)^2 + h^2} \Delta z} \leq \Phi_{\text{maks}}$$

. Simulacija je realizovana na sledeći način. Uzimaju se različite konfiguracije beskonačnih periodičnih heliksa pri fiksnom poluprečniku R . Zadaje se ukupni broj čestica N i određeni opseg vrednosti za broj obrtaja l . Ugaoni pomeraj se određuje kao:

$$\theta = \frac{2\pi l}{N}$$

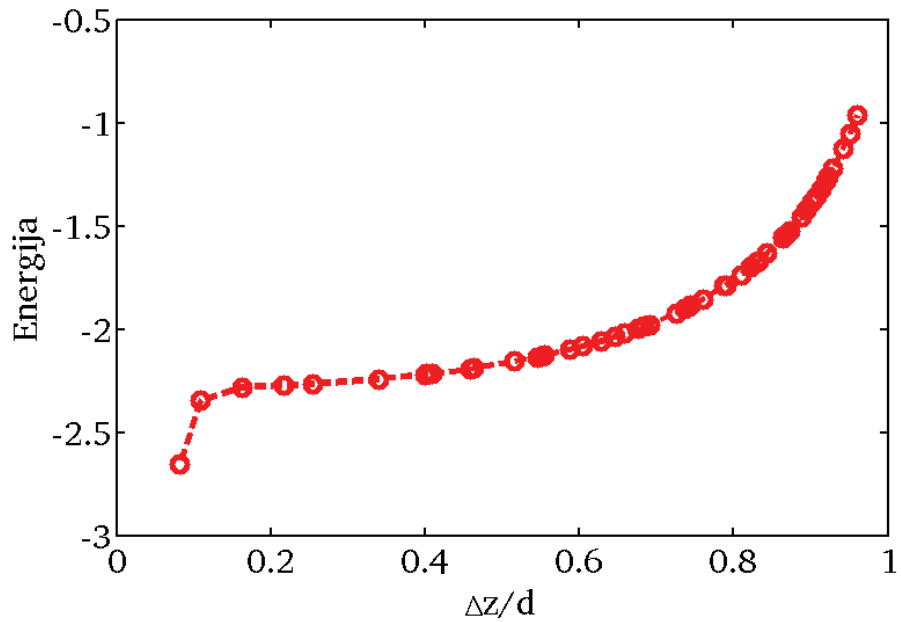
. Kako je parametar l zadat preko niza vrednosti, to i ugaoni pomeraj predstavlja niz različitih vrednosti. Za svaku od vrednosti θ proverava se da li je data konfiguracija validna. To se postiže pozivom funkcije `costValue`, koja je data u Glavi 7 (Listing kodova).

Prvi uslov jeste provera da li je sama konfiguracija geometrijski ostvariva (nema preklapanja susednih zavojnica heliksa), a drugi uslov koji mora

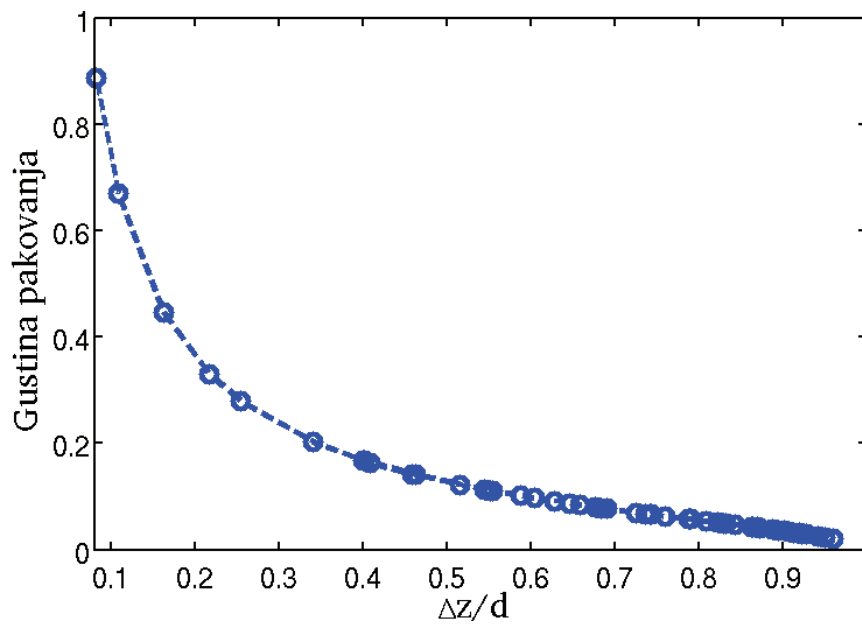
važiti jeste da ukupni broj čestica nije deljiv sa tekućom vrednošću broja obrtaja zato što to obezbeđuje da nema ponavljanja osnovne ćelije u Leknerovoj sumi, već je osnovna ćelija za dati par vrednost (N, l) jedinstvena. Na početku nismo pazili na ovaj uslov i to je dovelo do divergencije Leknerovih suma, a kada je taj uslov uveden tada su Leknerove sume konvergirale. Kada data konfiguracija ispunji tražene uslove, za nju se izračunaju energija i gustina pakovanja. Snimljeni rezultati se programski ekstrahuju iz fajlova i svi zajedno prikazuju na jednom grafiku koji pokazuje zavisnost energije i gustine pakovanja od koraka duž z-ose, za različite konfiguracije beskonačnih periodičnih heliksa, na fiksnom poluprečniku R . Bilo je problematično izabrati broj čestica i broj obrtaja tako da se pokrije pun opseg, sve do tačke minimalne energije posle koje dolazi do preklapanja zavojnica heliksa i od koje više nijedna konfiguracija nije moguća. Uočeno je da u okolini tačke minimuma energije važi sledeći odnos između ukupnog broja čestica i broja obrtaja, $\frac{N}{l} \approx 10.58333 = X$. Kako bismo izbegli problem deljivosti ukupnog broja čestica i broja obrtaja, rešenje je nađeno u uzimanju prostih brojeva. Dakle, da rezimiramo, uzimaju se parovi prostih brojeva (N, l) za koje važi odnos

$$\frac{N}{l} \approx 10.58333 = X$$

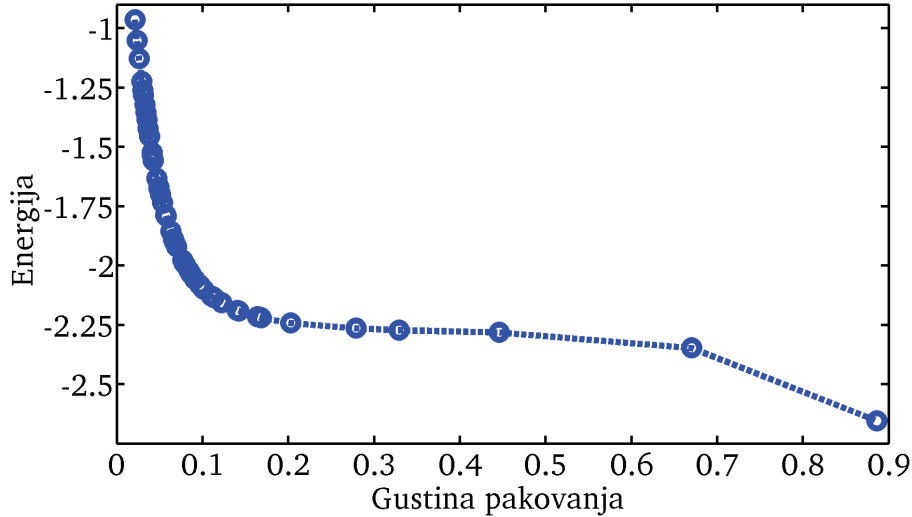
. Na ovaj način je postignuto povećanje broja tačaka koje padaju oko tačke minimalne energije. Nacrtane su zavisnosti energije i gustine pakovanja od normiranog koraka heliksa duž z-pravca, $\frac{\Delta z}{d}$. Kako se ovaj korak smanjuje, to se više teži ka konfiguraciji sa minimalnom energijom, posle koje više nijedna konfiguracija nije moguća usled preklapanja uzastopnih zavojnica heliksa. Takođe, vidi se da ova tačka najmanjeg $\frac{\Delta z}{d}$ odgovara najvećoj vrednosti gustine pakovanja. Radi efektivnog prikaza korelacije energije i gustine pakovanja nacrtana je i zavisnost energije od gustine pakovanja. Sa grafika zaključujemo da su energija i gustina pakovanja kod heliksa takođe obrnuto korelisani, kao i kod tuba.



Slika 5.7: Zavisnost energije od normiranog koraka heliksa duž z-pravca



Slika 5.8: Zavisnost gustine pakovanja od normiranog koraka heliksa duž z-pravca



Slika 5.9: Zavisnost enegije od gustine pakovanja

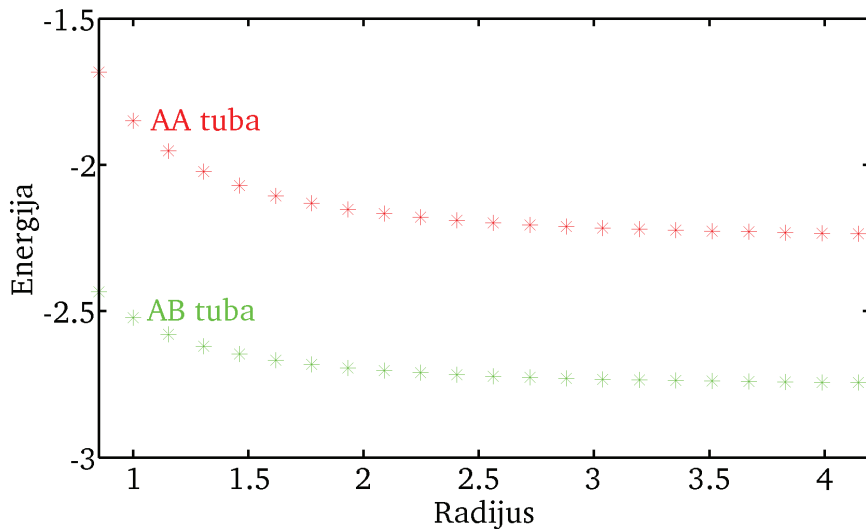
5.3 Poređenje heliksa sa tubama

Pošto je pokazana korelacija energije i gustine pakovanja, sledeći logičan korak jeste poređenje energije tuba i heliksa. Postavljeno je pitanje, da li je heliks pri određenoj konfiguraciji energetski povoljnija struktura od tube. Sračunata je zavisnost energije od poluprečnika prstena za AA i AB tubu, kao dva ekstremna slučaja. Na sledećoj slici prikazan je rezultat ovih proračuna. Pretpostavka je da će ove dve krive zapravo biti anvelope između kojih će se nalaziti energija heliksa.

Napisan je program koji za različite konfiguracije heliksa izračunava energiju. Svi ti podaci snimaju se u fajlove i potom se pomoćnim programom sortiraju i dodaju na isti grafik zajedno sa rezultatima prikazanim na prethodnoj slici. Kao ulazni parametri zadaju se ukupni broj čestica N i broj obrtaja u opsegu $l \in [2, 10]$. Ugaoni pomeraj je fiksiran relacijom

$$\theta = \frac{2\pi l}{N}$$

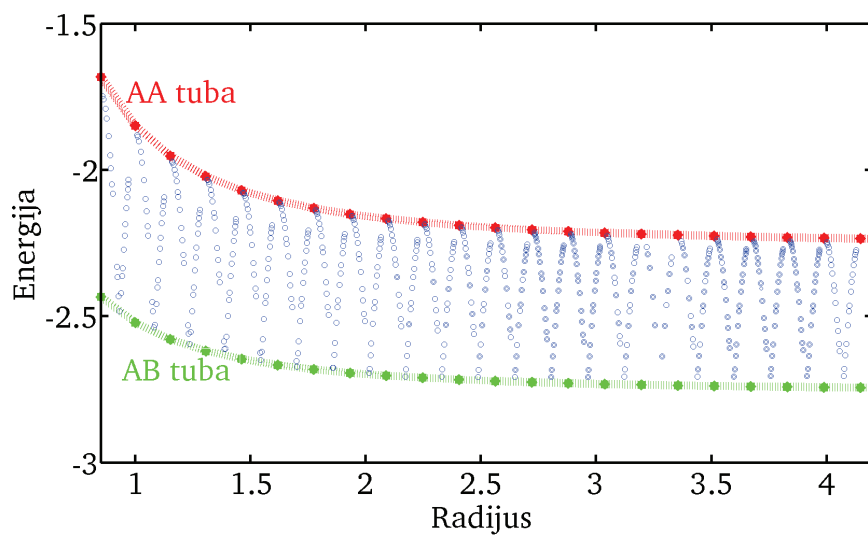
. Za jednu fiksiranu vrednost θ odrede se minimalna i maksimalna moguća vrednost poluprečnika, R_{\min} , R_{\max} . Potom se napravi niz potencijalnih konfiguracija heliksa, tako što se uzima $N_r = 10^6$ vrednosti iz opsega $[R_{\min}, R_{\max}]$ koje su linearno ekvidistantno odabrane. Program je napisan tako da pozivom funkcije $Costrange(N, \theta, R)$ proverava da li je konfiguracija moguća. Konfiguracije su moguće sve dok se ne dođe do tačke minimalne energije na-



Slika 5.10: Zavisnost energije od poluprečnika za AA i AB tubu

kon koje dolazi do preklapanja uzastopnih zavojnica, tada se petlja prekida i poziva se funkcija koja računa energiju beskonačnog periodičnog heliksa $EnergyHelix(N, \theta_1, R, l)$. Sračunati podaci upisuju se u fajl. Praktično se kao rezultat uzima samo minimalna energija za datu vrednost N i dati poluprečnik R . Kako bi se prebrisao širok opseg poluprečnika, simulacija je pokretana za različiti ukupni broj čestica, $N \in [4, 27]$. Pre dodavanja ovih rezultata na grafik sa anvelopama, potrebno je sortirati podatke. Napisan je program koji ih sortira i čuva u novim nizovima koji se potom dodaju na grafik sa anvelopama. Na sledećoj slici prikazana je zavisnost energije od poluprečnika prstena za AA/AB tubu i helikse različitih konfiguracija.

Kako je AA tuba struktura najmanje gustine pakovanja, a AB tuba najveće, heliks je između, tako da je očekivano da je energija heliksa smeštena između energija AA i AB tuba na datom poluprečniku (za dato geometrijsko konfiniranje).



Slika 5.11: Zavisnost energije od poluprečnika za AA/AB tubu i za različite konfiguracije heliksa

Glava 6

Zaključak

U programskom paketu MATLAB napisane su simulacije koje formiraju 3D strukture samoorganizovanih magnetnih čestica i računaju njihovu energiju usled magnetskih dipol-dipolnih interakcija,

Realizovane strukture su AA, AC, AB tuba i heliks. Za konačne strukture energija se računa direktnim sumiranjem dipol-dipolnih interakcija, a kod beskonačnih periodičnih struktura preko Leknerovih suma.

Naša hipoteza da i 3D strukture imaju minimalnu energiju za istu orijentaciju magnetnih momenata čestica je potvrđena. Sve strukture pravljene su sa takvim optimizovanim orijentacijama dipolnog momenta.

Iz rezultata zaključujemo da sva tri tipa tuba imaju negativnu energiju, što znači da su fizički moguće. Mogu se klasifikovati na sledeći način: 1) AA tuba ima najvišu energiju - nestabilno stanje, teško se realizuje manipulacijom milimetarskih magnetnih kuglica; 2) AB tuba ima najnižu energiju - stabilno stanje, lako se realizuje manipulacijom milimetarskih magnetnih kuglica; 3) AC tuba ima energiju između ova dva ekstrema - metastabilno stanje

Poznato je da je problem skaliranja važan problem u statističkoj fizici, pa je provereno skaliranje sistema, odnosno kako se sa povećanjem broja čestica (slaganjem novih prstenova) može konvergirati ka energiji sračunatoj Leknerovim metodom za beskonačnu strukturu. Zaključak je da je Leknerova suma pravilno implementirana i potvrđen je pretpostavljeni zakon skaliranja, koji važi za sve ispitivane strukture.

Proračunom energije i gustine pakovanja za različite strukture dobijena je korelacija ove dve veličine. Energija monotono opada sa smanjivanjem koraka zavojnice heliksa u z-pravcu, Δz , sve do tačke kada je dalje smanjivanje te veličine nemoguće jer dolazi do preklapanja uzastopnih namotaja heliksa. Ta specifična, minimalna moguća vrednost koraka zavojnice Δz , određuje najpovoljniju konfiguraciju heliksa pri datom geometrijskom ograničenju (na

datom poluprečniku). Gustina pakovanja monotono raste sa smanjivanjem koraka zavojnice heliksa i dostiže maksimalnu vrednost u tački najpovoljnije konfiguracije na datom poluprečniku. Prema tome, zaključujemo da korelacija gustine pakovanja i energije strukture, pri datom geometrijskom ograničenju, postoji i povećanje gustine pakovanja dovodi do smanjenja energije. Urađeno je poređenje energija AA tube, AB tube i heliksa, na fiksnom poluprečniku, čime se stiče uvid u to koja je struktura najpovoljnija, a takođe je i predviđen mogući prelaz iz heliksa u AB i AA tubu. Uočava se da sa porastom poluprečnika nastaje specifično oscilovanje energije heliksa u zavisnosti od poluprečnika i to tako da tačka maksimuma energije odgovara energiji AA tube, a tačka minimuma energije heliksa se nalazi između dve susedne konfiguracije AB tube.

Nadogradnja ovog rada jeste uključivanje spoljašnjeg magnetnog polja i ispitivanje njegovog dejstva na date strukture. Mogu se testirati različiti oblici i jačine tog magnetnog polja, čime se može dobiti bogata fazna dinamika sistema. Osim toga, analiza interakcije između dva heliksa je zanimljiva zbog analogije sa biomolekulima i njihovim međumolekularnim interakcijama.

Zahvalnost

Velika zahvalnost ide mom mentoru sa Elektrotehničkog fakulteta u Beogradu, prof. dr Dejanu Gvozdiću, koji me je podržao u mom naučnom radu i od koga sam puno naučio.

Veoma sam zahvalan dr Igoru Stankoviću, svom mentoru sa Instituta za fiziku, na korisnim idejama, sugestijama i diskusijama, kao i na pomoći u programiranju simulacija.

Takođe, zahvaljujem se kolegama iz Laboratorije za primenu računara u nauci (Scientific Computing Laboratory, SCL) na podršci i pomoći u rešavanju konkretnih problema prilikom pisanja ove teze.

Zahvaljujem se svojoj porodici, ocu Draganu, majci Smilji i bratu Stefanu, na beskonačnoj podršci i podsticaju.

Bibliografija

- [1] G. M. Whitesides and B. Grzybowski, „Self-Assembly at All Scales“, *Science*, Vol. 225, No. 29, (2002)
- [2] D. J. Sellmayer, „Strong magnets by self-assembly“, *Nature*, Vol. 420, No. 28, (2002)
- [3] H. Zeng et al., *Nature*, Vol. 420, No. 395, (2002)
- [4] M. Boncheva et al., *Proc. Natl. Acad. Sci.*, USA 102, 3924, (2005)
- [5] T. A. Prokopieva, V. A. Danilov, S. Kantorovich and C. Holm, „Ground state structures in ferrofluid monolayers“, *Phys. Rev. E*, 80, 031404, (2009)
- [6] R. Blakemore, *Science*, Vol. 190, No. 377, (1975)
- [7] U. S. Schwarz and S. A. Safran, *Phys. Rev. Lett.*, 88, 048102, (2002)
- [8] R. Messina, L. A. Khalil and I. Stankovic, „Self-assembly of magnetic balls: From chains to tubes“, *Phys. Rev. E*, 89, 011202(R), (2014)
- [9] A. Grzybowski and A. Brodka, „Lekner type method for summing the dipole-dipole interactions“, *Molecular Physics*, Vol. 101, No. 8, (2003)
- [10] MathWorks Documentation Center, opis fmincon funkcije, dostupno na <http://www.mathworks.com/help/optim/ug/fmincon.html>