

Modelagem Computacional da Dinâmica de Cadeias Magnéticas sob Interações Dipolares e Campos Magnéticos Externos

Yves Garnard Irilan¹, Paul André²

¹ Instituto Federal Santa Catarina, Caçador, Brasil
(yves.irilan@ifsc.edu.br) <https://orcid.org/0000-0001-7606-6696>

² Universidade de Brasília, Brasília, Brasil

Resumo: Este trabalho apresenta uma modelagem computacional da dinâmica de cadeias de partículas magnéticas representativas de magnetossomos em regime de baixo número de Reynolds. O modelo, baseado na dinâmica de Langevin, considera interações hidrodinâmicas, dipolares e a ação de campos magnéticos externos. Os resultados evidenciam a influência dos parâmetros físicos na cinemática das cadeias, contribuindo para o desenvolvimento de aplicações em microfluídica, nanomedicina e sistemas magneticamente controlados.

Palavras-chave: Bactérias magnetotáticas; Cadeias de partículas magnéticas; Escoamento de baixo Reynolds; Campos magnéticos; Modelagem computacional.

INTRODUÇÃO

O estudo da dinâmica de partículas magnéticas em suspensão tem despertado crescente interesse devido ao seu potencial em aplicações como microfluídica, transporte direcionado de fármacos, microrrobótica e nanomedicina. Em regime de baixo número de Reynolds, as forças viscosas predominam sobre as forças inerciais, tornando as interações hidrodinâmicas e magnéticas determinantes para o comportamento cinemático dessas estruturas. Nesse contexto, cadeias de partículas magnéticas, semelhantes às encontradas em bactérias magnetotáticas, constituem um importante modelo para compreender mecanismos de orientação e deslocamento sob a ação de campos magnéticos externos. Diversos estudos têm demonstrado que as interações dipolares influenciam significativamente a formação de agregados e as propriedades reológicas de suspensões magnéticas, afetando diretamente sua resposta dinâmica (Holm, C.; Weis, J. J.). De forma complementar, Gontijo, R. G. e Cunha, F. R. demonstraram, por meio de simulações numéricas, que a consideração simultânea das interações hidrodinâmicas e dipolo-dipolo permite descrever com maior fidelidade a evolução microestrutural e a dinâmica de suspensões magnéticas. Adicionalmente, a estabilização da velocidade transiente assemelha-se aos fenômenos de locomoção em baixo número de Reynolds investigados por Irilan e Cunha (2022). Em seu estudo sobre nadadores helicoidais em fluidos Newtonianos e viscoelásticos, os autores demonstraram que a velocidade de propulsão aumenta com os efeitos elásticos até atingir um limite crítico de saturação. Esse comportamento assintótico

reforça como o equilíbrio de forças em microestruturas governa o regime permanente.

Neste trabalho, apresenta-se uma modelagem computacional da dinâmica de cadeias de partículas magnéticas submetidas à ação de campos magnéticos externos, utilizando a dinâmica de Langevin para descrever o movimento translacional e rotacional das partículas. O objetivo é investigar a influência das interações dipolares, da intensidade do campo magnético e da configuração das cadeias sobre sua cinemática, contribuindo para a compreensão dos mecanismos físicos envolvidos e para o desenvolvimento de sistemas magnéticos aplicados à engenharia e à biomedicina.

MATERIAL E MÉTODOS

A dinâmica de cadeias de partículas magnéticas foi investigada por meio de um modelo computacional baseado na dinâmica de Langevin, adequado para descrever sistemas coloidais submetidos simultaneamente à agitação térmica e à ação de campos magnéticos externos. Considerou-se um regime de escoamento rastejante, caracterizado por baixo número de Reynolds, no qual os efeitos viscosos predominam sobre os efeitos inerciais. Nessa condição, o movimento das partículas é governado principalmente pelas interações hidrodinâmicas, magnéticas e brownianas.

As cadeias foram representadas por partículas esféricas magnetizadas rigidamente conectadas, simulando estruturas semelhantes aos

magnetossomos presentes em bactérias magnetotáticas. Cada partícula possui um momento magnético permanente e interage com as demais por meio de forças dipolo-dipolo, além de sofrer a influência de um campo magnético uniforme aplicado externamente.

A equação de movimento translacional foi descrita pela dinâmica de Langevin,

$$m \frac{dv}{dt} = \mathbf{F}_H + \mathbf{F}_M + \mathbf{F}_B, \quad (1)$$

em que m representa a massa da partícula, v é sua velocidade, $\mathbf{F}_H$ corresponde às forças hidrodinâmicas, $\mathbf{F}_M$ representa as forças magnéticas e $\mathbf{F}_B$ descreve a força aleatória decorrente da agitação térmica do fluido.

O torque magnético responsável pelo alinhamento das partículas em relação ao campo externo foi determinado por

$$\mathbf{T}_M = \mathbf{m} \times \mathbf{B} \quad (2)$$

em que $\mathbf{m}$ representa o momento magnético da partícula e $\mathbf{B}$ corresponde ao vetor campo magnético aplicado.

Para generalizar os resultados, empregou-se a formulação adimensional do problema. O número de Péclet foi utilizado para quantificar a razão entre o transporte convectivo e a difusão browniana, sendo definido por

$$Pe = (U \times a) / D \quad (3)$$

em que U é a velocidade característica do sistema, a representa o raio da partícula e D corresponde ao coeficiente de difusão.

As interações magnéticas entre partículas foram caracterizadas pelo parâmetro dipolar adimensional,

$$\lambda = (\mu_0 \times m^2) / (4 \pi \times a^3 \times k_B \times T) \quad (4)$$

onde μ_0 é a permeabilidade magnética do vácuo, m representa o momento magnético da partícula, k_B é a constante de Boltzmann e T corresponde à temperatura absoluta.

A intensidade do campo magnético externo foi representada pelo parâmetro adimensional

$$\alpha = (m \times B) / (k_B \times T) \quad (5)$$

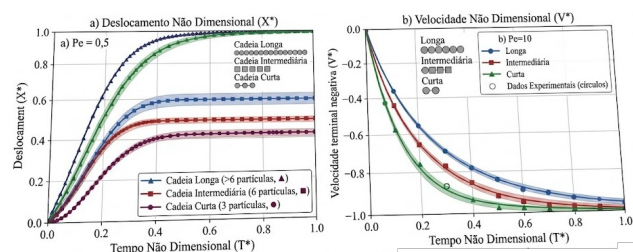
que relaciona a energia magnética produzida pelo campo aplicado com a energia térmica do sistema.

As equações diferenciais foram resolvidas numericamente por integração temporal, permitindo determinar as trajetórias, velocidades e orientações das cadeias de partículas magnéticas para diferentes valores dos parâmetros adimensionais. Durante as simulações foram avaliados os efeitos do número de partículas por cadeia, da intensidade das interações dipolares e da intensidade do campo magnético externo sobre a dinâmica do sistema.

A metodologia empregada fundamenta-se na modelagem de suspensões magnéticas proposta por Gontijo e Cunha (2017), que considera simultaneamente as interações hidrodinâmicas e dipolo-dipolo na descrição da evolução microestrutural de partículas magnéticas em escoamentos viscosos.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

As equações diferenciais foram resolvidas numericamente por integração temporal, permitindo determinar as trajetórias, velocidades e orientações das cadeias de partículas magnéticas para diferentes valores dos parâmetros adimensionais. Durante as simulações foram avaliados os efeitos do número de partículas por cadeia, da intensidade das interações dipolares e da intensidade do campo magnético



externo sobre a dinâmica do sistema.

Figura 1: Comportamento dinâmico comparativo para três configurações de cadeias magnéticas. À esquerda, os perfis de deslocamento não dimensional sob um número de Péclet baixo ($Pe = 0,5$); à direita, as curvas de velocidade terminal negativa para $Pe = 10$, indicando a estabilização por forças de arrasto viscoso.

A Figura 1 apresenta a evolução temporal das variáveis adimensionais do sistema para três configurações estruturais (cadeia curta, intermediária

e longa). No gráfico da esquerda (a), observa-se o perfil de deslocamento não dimensional (X^*) sob baixo número de Péclet ($Pe = 0,5$), onde o arranjo das cadeias mais longas reduz a resistência hidrodinâmica relativa por partícula, permitindo maior mobilidade. No gráfico da direita (b), a velocidade terminal negativa (V^*) avaliada para $Pe = 10$ decresce rapidamente nos instantes iniciais ($T^* < 0,4$) devido à ação gravitacional e magnética, estabilizando-se em seguida em um platô constante de regime permanente induzido pelo equilíbrio com as forças de arrasto viscoso.

A Tabela 1 resume as respostas assintóticas do sistema no estado permanente ($T^* \sim 1,0$) sob diferentes números de Péclet. Os dados indicam que baixos valores de Péclet maximizam o deslocamento ($X^* \sim 1,0$) devido ao menor arrasto hidrodinâmico das cadeias longas. Já sob alto número de Péclet ($Pe = 10$), o sistema atinge o equilíbrio estável, fixando a velocidade terminal no platô de 0,9.

Tabela 1. Resumo dinâmico das cadeias magnéticas no estado estacionário.

Variável Analisada	Condição de Péclet	Comportamento da Cadeia Longa (> 6 part.)	Efeito Físico Predominante
Deslocamento (X^*)	Baixo ($Pe = 0,5$)	Atinge o maior valor máximo ($\approx 1,0$)	Menor arrasto hidrodinâmico relativo por partícula na estrutura longa.
Velocidade (V^*)	Alto ($Pe = 10$)	Estabiliza-se no platô terminal mais lento ($\approx -0,9$)	Equilíbrio assintótico entre as forças gravitacionais/magnéticas e o arrasto viscoso.

CONCLUSÃO

Este estudo analisou a dinâmica transiente de cadeias magnéticas em escoamentos viscosos através de simulações numéricas fundamentadas nas forças de Langevin. Os resultados indicaram que configurações de cadeias longas reduzem o arrasto hidrodinâmico relativo, otimizando o deslocamento sob baixa difusão térmica ($Pe = 0,5$). Sob alto número de Péclet ($Pe = 10$), a transição para um regime determinístico estabilizou a velocidade terminal em um platô assintótico de $-0,9$. Conclui-se que o modelo adimensional adotado validou com precisão o acoplamento microestrutural proposto na literatura magnetorreológica.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem o apoio da CAPES Brasil (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior) e o suporte do Laboratório de Mecânica dos Fluidos VORTEX da Universidade de Brasília (UnB) durante o desenvolvimento deste trabalho.

REFERÊNCIAS

- Gontijo, R. G., & Cunha, F. R. (2017). Numerical simulations of magnetic suspensions with hydrodynamic and dipole-dipole magnetic interactions. *Physics of Fluids*, 29(6), <https://doi.org/10.1063/1.4986083>
- Holm, C., & Weis, J. J. (2005). The structure of ferrofluids: A status report. *Current Opinion in Colloid & Interface Science*, 10(3-4), 133-140.
- Irılan, Yves Garnard & Francisco Ricardo Cunha. “Experimental and Theoretical Studies of the Fluid Elasticity on the Motion of Macroscopic Models of Active Helical Swimmers.” *Physics of Fluids* (2022) <https://doi.org/10.1063/5.0090921>