

## Universidad Nacional de San Juan

## Facultad de Ciencias Exactas Físicas y Naturales

TESIS DOCTORAL

# Evolución colisional del polvo emitido por núcleos cometarios

Lic. María Belén Planes

Directora: Dra. Marcela Cañada Assandri Co-Director: Dr. Eduardo M. Bringa

> San Juan Argentina

> > 2022

## Agradecimientos

Desde que tengo memoria, mirar hacia el cielo me era inevitable, generando una pasión creciente por saber cada vez más sobre el universo. Recorrer este camino, a veces difícil, fue posible gracias a aquellas personas que salvaguardaron mi sueño y lucharon conmigo por alcanzarlo, algunas incluso durante toda mi vida. Gracias...

... a mi mamá Karina, el ejemplo más grande de mujer resiliente, quién me dio la libertad desde muy chica para emprender este camino pero sin soltar mi mano jamás, confiando en mí más de lo que podía hacerlo yo; y a mi abuela Elsa, mi segunda mamá, mi modelo perfecto de persistencia, dedicación y grandeza.

... a mis más grandes estrellas del cielo, mis hermanos Yazmeene y Nicolás, siempre estarán conmigo en mi corazón.

... a mi papá Daniel, a mis hermanos Christian y Natalia, mi abuela Sabina y a Rosario, llegaron a mi vida de forma impensada, hoy son mi familia.

... a mis amigos, principalmente a Sabrina Coria y Pablo Pineda, quienes siendo ajenos al tema han sido torturados con los relatos de esta tesis durante tanto tiempo. Y también a Poli, Laura, Tano, Rulo, los medallitas y tantos que sería muy difícil nombrar a todos, pero que han sido sopote en tantos momentos, siempre apoyándome en cada paso.

... a la FCEN-UNCuyo y sus personas increíbles que me ayudaron en este largo proceso. En especial a Cecilia Gauna, quien siempre motivó mi doctorado (laboral y personalmente).

... a mi directora, Marcela, quien me introdujo y me guió en este apasionante mundo de cometas, junto a Ricardo Gil-Hutton y a todo el grupo de ciencias planetarias de la FCEFN-UNSJ.

... al grupo Simaf, mi segunda casa, por las charlas y debates interminables. En especial a Emmanuel Millán, el mejor compañero de trabajo que se puede tener, y a mi codirector, Eduardo Bringa por todas sus enseñanzas cotidianas.

... a CONICET quién me otorgó una beca doctoral posibilitando el desarrollo de este trabajo.

Gracias por ser parte de este recorrido en búsqueda de respuestas pero también de abrir puertas a muchos interrogantes más, ya que la ciencia es una construcción que hacemos entre todos, día a día, mientras no dejemos nunca de preguntar.

## Resumen

Las colisiones entre agregados granulares de polvo son relevantes en muchos escenarios astrofísicos, uno de los cuales es la coma interna de los cometas, donde hasta el momento se han despreciado sistemáticamente. Sin embargo, recientes aportes de la misión Rosetta indican que existen colisiones del polvo de la coma interna. En este trabajo, inicialmente se estudiaron colisiones entre agregados granulares de sílica, variando la relación de masas entre ellos, su porosidad, y la velocidad de impacto. Para ello se utilizaron simulaciones computacionales de dinámica molecular, donde se contempla cada interacción individual que ocurre entre los granos que componen a los agregados. Esta técnica suele llamarse "método de elementos discretos" (discrete element method, DEM), ya que un grano se toma como un elemento discreto e indivisible. Estas simulaciones han permitido obtener una visión detallada de la evolución colisional entre dos agregados.

En segundo lugar, se exploraron colisiones entre dos agregados de hielo de  $H_2O$ , incluyendo un estudio paramétrico del rol de la energía superficial, que varía significativamente de acuerdo a la literatura, y que puede modificar los umbrales entre crecimiento y destrucción de agregados.

Finalmente, en base a los resultados para dos agregados de sílica, se construyó un código abierto de Monte Carlo (MC) que permite evaluar la evolución colisional de una población de agregados. El código MC permite elegir distribuciones iniciales de tamaño y porosidad y nos brinda la evolución de las distribuciones de masa, tamaño y porosidad luego de que ocurran un número determinado de colisiones al azar. Opcionalmente brinda también la porosidad de los agregados según intervalos de masa de los mismos. Estos resultados se analizan en el contexto de observaciones del polvo emitido por los núcleos cometarios en las cercanías del mismo.

Consideramos que el trabajo realizado aporta al debate sobre la relevancia de colisiones de polvo en las comas cometarias, mostrando que incluso un número pequeño de ellas puede generar cambios en la distribución global del polvo. Por otro lado, nuestros resultados pueden ayudar a la comprensión de la evolución colisional de polvo en otros ambientes astrofísicos donde aún hay muchos interrogantes al respecto como la formación protoplanetaria, los discos de escombro, anillos, entre otros.

# Originalidad

Los conceptos, ideas, resultados y programas de computación son originales de la autora, salvo expresa mención al respecto. Los resultados del Capítulo 3 fueron publicados en A&A Vol. 607, A19, año 2017 (Planes y col. 2017) y MNRAS: Letters, Vol. 487, Pag. L13–L17, año 2019 (Planes y col. 2019). Los resultados del Capítulo 4 fueron publicados en MNRAS Vol. 492, Pag. 1937–1946, año 2020 (Planes y col. 2020) y MNRAS Vol. 503, Pag. 1717–1733, año 2021 (Planes y col. 2021). Los resultados del Capítulo 6 han sido enviados para su publicación. Los correspondientes a los Capítulos 5 y 7 están próximos a ser enviados para su publicación.

# Índice general

Resumen			III	
0	Originalidad			
Ín	dice	genera	ป	VII
Ín	dice	de figu	iras	XI
Ín	dice	de tab	olas	XV
1.	MA	RCO '	TEÓRICO	1
	1.1.	La im	portancia de las micro-colisiones en la astronomía	1
	1.2.	Métod	los observacionales	3
		1.2.1.	Polarización	3
		1.2.2.	Albedo	4
		1.2.3.	Color	5
		1.2.4.	Emisión térmica	5
	1.3.	Cráter	es	7
	1.4.	Discos	protoplanetarios	9
		1.4.1.	Propiedades del polvo	10
		1.4.2.	Modelos de coagulación	13
	1.5.	Discos	de escombros	16
	1.6.	Comet	as	17
		1.6.1.	Origen	19
		1.6.2.	Misiones Espaciales a Cometas	20
		1.6.3.	Estructura de los Cometas	22
			1.6.3.1. Núcleo	23
			1.6.3.2. Coma	28
			1.6.3.3. Cola	29
		1.6.4.	Granos de Polvo en los Cometas	29
			1.6.4.1. Estructura y porosidad	30
			1.6.4.2. Composición	34

		1.6.4.3. Tamaños y masas $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	36
2.	MÉ	TODO	45
	2.1.	Simulaciones numéricas	45
		2.1.1. Dinámica molecular	46
		2.1.2. LAMMPS	46
	2.2.	Medio granular	47
		2.2.1. Física del contacto entre dos granos	47
	2.3.	Código Granular: Interacciones entre granos	49
		2.3.1. Fuerzas normales	50
		2.3.2. Fuerza tangencial	53
		2.3.3. Fricción rotacional	54
	2.4.	Construcción de las muestras	55
	2.5.	Selección de parámetros	56
-	aa		
3.		LISION DE AGREGADOS SOBRE UN MEDIO GRANU-	-
		Conference iter del Sistema	59 50
	ა.1. 2 ე	Configuración del Sistema	59 61
	3.2.	2.2.1 Apélicie de un case portioulor	01 61
		2.2.2. Volumon dol erátor	01 65
		3.2.2. Volumen del crater	60
	રર	S.2.3. Monologia del crater	08 71
	0.0.	3 3 1 Campo do ovocción	71 71
		3.3.2 Distribuciones de energía	74
	3.4	Disipación de energía y frenado del provectil	78
	0.1.	3.4.1 Análisis de un caso particular	78
		3.4.2 Frenado del provectil	80
		3.4.3. Profundidad alcanzada por los granos del provectil	84
		3.4.4. Tiempo de frenado	88
	3.5.	Conclusiones del capítulo	89
		1	
<b>4</b> .	CO	LISIONES ENTRE AGREGADOS GRANULARES POROSO	<mark>S</mark> 91
	4.1.	Colisiones entre agregados esféricos de igual tamaño	92
	4.2.	Colisiones asimétricas: Importancia de la porosidad	95
		4.2.1. Análisis de valores extremos de factor de llenado	96
		4.2.2. Diferencias visibles en las primeras etapas de la colisión	98
		4.2.3. Efecto pistón vs. estructura de pétalos	98
		4.2.4. Compactación	103
		4.2.5. Eyecta	105

	4.3.	Colisiones asimétricas con variaciones de velocidad y porosidad: ¿Aglo-	107
			107
		4.3.1. Adnesion <i>vs.</i> fractura	108
		4.3.2. Velocidad de fractura: Posibles deseniaces	111
		4.3.3. Compactación	114
		4.3.4. Analisis energetico	117
		4.3.5. Efficiencias de erosion y acreción	119
		4.3.6. Distribución de masa de los agregados luego de la colisión .	123
	4 4	4.3.7. Crecimiento/Fractura	124
	4.4.	Conclusiones del capitulo	126
5.	CO	LISIONES ENTRE AGREGADOS DE HIELO	131
	5.1.	Parámetros del hielo	132
	5.2.	Comparación de resultados variando la energía superficial	134
	5.3.	Comparación de resultados variando la relación de masa	137
	5.4.	Recubrimiento de proyectiles	138
	5.5.	Resultados de todos los casos analizados	142
		5.5.1. Compactación $\ldots$	142
		5.5.2. Profundidad del proyectil	144
		5.5.3. Entierro del proyectil en el blanco	144
		5.5.4. Crecimiento de agregados de hielo	147
	5.6.	Conclusiones del capítulo	147
6.	EV	OLUCIÓN COLISIONAL DE AGREGADOS POROSOS	151
	6.1.	Introducción	151
	6.2.	Construcción de la población	152
		6.2.1. Parámetros de entrada	152
		6.2.2. Armado de agregados iniciales	154
	6.3.	Selección de agregados a colisionar	154
	6.4.	Resultado de las colisiones individuales	156
		6.4.1. Clasificación de una colisión individual	156
		6.4.2 Fragmentos resultantes de una colisión individual	157
	6.5	Distribuciones Finales	162
	0.0.	$6.5.1$ Distribuciones resultantes luego de $N_{\rm eff}$ colisiones	162
		$6.5.2$ Distribuciones resultantes luego de $N_{col}$ consistes $\dots$	163
		6.5.3 Salida del código	164
	6.6	Posibilidades futuras	167
	6.7	Conclusiones del capítulo	168
	0.1.		100
7.	CO	LISIONES DE POLVO EN COMAS COMETARIAS	171
	7.1.	Introducción	171

	7.2.	¿Los agregados de polvo colisionan en las comas cometarias?	173
		7.2.1. Antecedentes	173
		7.2.2. Estimación Teórica	174
		7.2.3. Aportes de la misión Rosetta	176
		7.2.3.1. Núcleos irregulares	177
		7.2.3.2. Jets y Outburst $\ldots$	179
		7.2.3.3. Re-deposición $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$	182
		7.2.4. Conclusiones y motivación	184
	7.3.	Aplicación del código MC a las colisiones de polvo en comas cometarias	184
		7.3.1. Fundamentos	185
		7.3.2. Parámetros y convergencia	186
		7.3.3. Distribución final de masa	186
		7.3.4. Distribución final de tamaño	187
		7.3.5. Distribución final de porosidad	188
		7.3.6. Distribuciones de masas y tamaños según la porosidad de los	
		agregados	189
		7.3.7. Sobre la convergencia de las simulaciones para pocas colisiones	192
	7.4.	Comparación con observaciones astronómicas	193
		7.4.1. Comparación con observaciones de masa y tamaño	193
		7.4.2. Comparación con observaciones de porosidad	196
	7.5.	Otras posibles aplicaciones	197
	7.6.	Conclusiones del capítulo	198
8.	Con	clusiones y posibilidades futuras	201
Bi	bliog	grafía	207
A	péndi	ice: Publicaciones	233
	Dust	t-aggregate impact into granular matter: A systematic study of the influence of projectile velocity and size on crater formation and grain	
		ejection	233
	Stop	pping of porous projectiles in granular targets	245
	Influ	nence of porosity on high-velocity mass-asymmetric collisions	250
	Colli	isions between micro-sized aggregates: Role of porosity, mass ratio,	
		and impact velocity	260

# Índice de figuras

1.1.	Coeficientes de absorción de masa de diferentes silicatos	11
1.2.	Efecto del tamaño y forma del grano en la eficiencia de extinción	12
1.3.	Coeficientes de absorción de masa de diferentes silicatos	13
1.4.	Posibles resultados de una colisión de agregados	15
1.5.	Distribución de tamaño de los granos en un disco de escombros	17
1.6.	Sistema Solar	20
1.7.	Estructura cometa	23
1.8.	Modelos núcleos cometarios	24
1.9.	Radio mínimo de partículas eyectadas del manto	26
1.10.	Capas núcleos cometarios	27
1.11.	procesos para una coma	28
1.12.	Morfología polvo cometario	32
1.13.	Agregados del cometa 67P/C-G - COSIMA	33
1.14.	Curva de fase para varios Cometas	35
1.15.	Distribución espectral de energía del cometa Hale-Bopp	38
1.16.	T versus distancia heliocéntrica	39
1.17.	Distribuciones de tamaño para varios cometas según Lasue y col. 2009	40
1.18.	Albedo cometario	41
1.19.	Efecto del tamaño y forma del grano en la eficiencia de extinción $ .$	42
2.1.	Geometría del contacto entre dos granos	48
2.2.	grados de libertad en el contacto entre dos partículas	49
0.1		<u> </u>
3.1.	Formación de cráter para $N_p = 50, v = 150$ m/s: Evolución temporal	62
3.2.	Variación del número de coordinación producida por un impacto	63
3.3.	Variación en la densidad relativa del blanco	64
3.4.	Campo vectorial de desplazamiento de los granos individuales	65
3.5.	Volumen cráter en relación con $E_{tot}$ , $v$ and $N_p$	66
3.6.	Relación de la profundidad cráter con $v \neq N_p \dots \dots \dots \dots \dots$	69
3.7.	Cráter semiesférico formado por el impacto de un proyectil con $N_p =$	
	$10 \text{ a } v = 25 \text{m/s} \dots \dots$	70
3.8.	Relación entre partículas eyectadas y volumen del cráter	72

3.9. Número de pa	rtículas eyectadas en función de $v$ y $N_p$	73
3.10. Energía y prof	undidad de las partículas eyectadas	75
3.11. Trayectoria de	granos eyectados para un caso representativo	77
3.12. Serie temporal	de una colisión con $N_p = 200$ y $v = 50$ m/s mostrando	
para granos in	dividuales: origen, velocidad vertical y energía cinética	78
3.13. Serie temporal	de una colisión con $N_p = 200$ y $v = 50$ m/s mostrando	
la coordinació	n de los granos individuales	79
3.14. Energía cinétie	ca de las partículas del proyectil en función de su pe-	
netración en e	l blanco	81
3.15. Parámetro $\lambda$ e	n función de la masa del proyectil 8	83
3.16. Criterios para	determinar la profundidad final del proyectil 8	84
3.17. Profundidad n	náxima alcanzada por el proyectil en el blanco en fun-	
ción de $N$ par	a varias $v$	85
3.18. Profundidad n	náxima alcanzada por el proyectil en el blanco en fun-	
ción de $v$ para	varias masas de proyectil	86
3.19. Posiciones fina	les $x, y$ del centro de masa del proyectil vs $v$ 8	87
3.20. Tiempo de fre	nado vs $N$	88
4.1 Cimulacionas	x = 1	റാ
4.1. Simulaciones (	$\mu = 1 \dots \dots$	93
4.2. Fragmentación	$\mu = 1  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots $	94 07
4.5. Deseniace de t	the constant con $v = 100$ m/s, $\phi = 0.15$ , $\mu = 60$	91 07
4.4. Desentace de t	ral de los granes en la etapa inicial de una colisión con	91
4.5. Velocidad late. v = 100 m/s y	$\mu = 60$ para $\phi = 0.15, 0.40$	08
v = 100 m/s y	$\mu = 00$ para $\psi = 0.13, 0.40$	90
4.0. Desentace de $0.15, 0.40; v$	una consion con $v = 100$ m/s y $\mu = 00$ para $\phi = 0$	aa
17 Deservation $0,10,0,40,0,2$	una colisión con $v = 100 \text{m/s}$ v $\mu = 60$ para $\phi =$	55
0.15 0.40 v	una consion con $v = 100 \text{m/s}$ y $\mu = 00$ para $\phi = 0$	aa
4.8 Dependencia f	remporal de las velocidades de expansión en la zona	55
colisionada	11	00
4.9 Estructura fin	al de agregados con $\phi = 0.20, 0.25, 0.30$ 10	02
4 10 Serie temporal	l de una colisión a $v = 100 \text{m/s}$ entre dos agregados	2
$\cos \phi = 0.25.$		03
4.11. Serie temporal	l de una colisión a $v = 100 \text{m/s}$ , entre dos agregados	50
$\cos \phi = 0.15.0$	).40 mostrando el número de contactos por grano	04
4.12. Número de co	ordinación al final de la colisión en función del factor	-
de llenado		05
4.13. Ganancia/pére	lida de masa en función de $\phi$ , para una colisión a $v =$	
100 m/s	$\ldots$	06
4.14. Estado final p	ara una colisión entre dos agregados con $\mu = 60$ . $\phi =$	
0,40 a diferent	es $v \ldots $	09
,		-

4.15.	Estado final para una colisión entre dos agregados con $\mu = 60, \phi =$	
	0,15 a differentes $v$	110
4.16.	Resultado para colisiones entre agregados con $\mu = 10$ y $\phi = 0.15, 0.40$ :	
	v límite para fractura	112
4.17.	Coordinación promedio final en función de la velocidad de impacto .	115
4.18.	Energía de impacto en función del número de contactos inicial	118
4.19.	Energía de impacto en función del factor de llenado	119
4.20.	Eficiencia de erosión y acreción en función de la velocidad inicial.	120
4.21.	Distribuciones de masa para los fragmentos	123
4.22.	Ganancia/pérdida de masa de acuerdo al número de partículas eyec-	
	tadas	124
51	Besultado de colisiones entre agregados de hiele con $\mu = 60$ $\alpha_{\rm e} =$	
0.1.	$0.11/m^2$ para diferentes $\phi y y$	13/
52	Begultado de colisiones entre agregados de hiele con $\mu = 60$ $\alpha =$	104
0.2.	$0.1 \text{ L/m}^2$ para diferentes $\phi \neq v$	136
5.3	Besultado de colisiones entre agregados de hielo con $\mu = 10$ $\gamma =$	100
0.0.	$0.11/m^2$ para diferentes $\phi \ge v$	137
5.4	Evolución temporal colisión entre agregados de hielo con $\mu = 60$ $\gamma_2$	101
0.1.	v v = 100 m/s	139
5.5.	Evolución temporal inicial colisión entre agregados de hielo con $\mu =$	100
0.01	$60, \gamma_2 \vee v = 100 \text{m/s} \dots \dots$	140
5.6.	Evolución temporal internedia colisión entre agregados de hielo con	-
	$\mu = 60, \gamma_2 \neq v = 100 \text{m/s}$	141
5.7.	Coordinación promedio final en función de la velocidad para colisio-	
	nes entre agregados de hielo	143
5.8.	Profundidad del proyectil en función de la velocidad para colisiones	
	entre agregados de hielo	144
5.9.	Resultado de colisiones entre agregados de hielo con $\mu = 10, \gamma =$	
	$0.1$ J/m <sup>2</sup> para diferentes $\phi$ y $v$	145
5.10.	Profundidad del proyectil y profundidad del cráter en función de la	
	velocidad para colisiones entre agregados de hielo	146
5.11.	Crecimiento de agregados de hielo en función de $v$ para varios valores	
	de $\gamma, \mu, \phi$	147
61	Comparación entre distribuciones de velocidades	154
0.1. 6 9	El mana de los posibles regultados de una colición	104 159
0. <i>2</i> .	Diagrama de fluie del cédige Monte Carle	100 166
0.0.		100
7.1.	Imágenes del cometa 67 P/C-G tomadas por NAVCAM $\hfill \ldots \hfill \hfill \ldots \hfill \ldots \hfill \ldots \hfill \hfill \ldots \hfill \$	177
7.2.	Direcciones normales sobre la superficie del cometa 67 P/C-G $\hdots$	178
7.3.	Trayectorias del polvo en la desga sificación del cometa $67 \mathrm{P/C}\text{-G}$	180

7.4.	Imágenes de Rosetta y análisis de la coma interna del comet a $67 \mathrm{P/C}\text{-}\mathrm{G}$	181
7.5.	Pozos de actividad detectados por Rosetta	183
7.6.	Rebote de material observado en la superficie del cometa $67 \mathrm{P/C}\text{-}\mathrm{G}$ .	184
7.7.	Distribución de masas para $N_{\rm col} = 5, 10, 100$	187
7.8.	Distribución de tamaños para $N_{\rm col} = 5, 10, 100$	188
7.9.	Distribución de porosidad para $N_{\rm col} = 5, 10, 100$	189
7.10.	Distribución de masas según intervalos de porosidad	191
7.11.	Comparación de convergencias para la distribución de tamaños	193
7.12.	Comparación distribución de tamaño simulada y obtenida por COSIMA $$	195

# Índice de tablas

3.1. 3.2.	Parámetros del material para granos de sílica $\dots \dots \dots \dots$ Número de agregados conteniendo $n$ granos, emitidos en 2 impactos	60
	representativos.	73
4.1.	Características del proyectil y blanco construidos con valores reque- ridos de factor de llenado $\phi$ para $\mu = 60$	96
4.2.	ridos de factor de llenado $\phi$ para $\mu = 10$	108
5.1.	Parámetros del material para granos de hielo	133
<ul><li>6.1.</li><li>6.2.</li></ul>	Distribuciones de entrada del código MC usadas en esta tesis Resumen de desenlaces de una colisión individual para rangos de $\mu$ , $\phi$ y $v$ ; y valores de $\tau$ y $Y_{\rm s}$ correspondientes a cada rango, según estudios previos. [1] Gunkelmann y col. (2016b) [2] Ringl, Bringa, Bertoldi y col. (2012) [3] Planes y col. (2021) [4] Planes y col. (2020) [5] Planes y col. (2017)	153 159
7.1.	Valores de camino libre medio y tiempo de colisión para diferentes cometas, cuyos tamaños, $r$ , han sido obtenidos de Lasue y col. 2009, asumiendo un valore de $n_{PC} = 1.5 \times 10^6 m^{-3}$ según Tenishev y col. 2011	176
7.2.	Cadenas recorridas y tiempo de cómputo para un número $N_{\rm col}$ de	110
	colisiones dado, para una convergencia $C_{\text{conv}} = 10^{-6}$	186
7.3.	Cadenas recorridas y tiempo de cómputo para un número $N_{\rm col}$ de colisiones dado, para una convergencia $C_{\rm conv} = 10^{-8}$ .	192

# Capítulo 1

# MARCO TEÓRICO

# 1.1. La importancia de las micro-colisiones en la astronomía

Las colisiones entre agregados granulares de polvo de tamaño sub-milimétrico tienen un rol crucial en muchas ramas de la astrofísica. Estos agregados son agrupaciones de granos individuales más pequeños (generalmente en la escala entre micrométrica y nanométrica) interconectados al azar. Un grano (también llamado monómero) es la unidad más pequeña de estudio, sólido y homogéneo en composición. Estos granos son creados por condensación, ya sea en el disco protoplanetario del Sistema Solar o previamente en el medio interestelar (ISM por sus siglas en inglés "*Interstellar Medium*") o por estrellas AGB (por sus siglas en inglés "*asymptotic giant branch*") (Alexander y col. 2007).

El polvo juega un papel fundamental en los procesos interestelares que determinan el estado del ISM, afectando el equilibrio térmico y químico del ISM al re-procesar las salidas radiativas de las estrellas, proporcionando fotoelectrones que calientan el gas y agotándolo de los elementos refractarios que son importantes agentes de enfriamiento del ISM. El polvo también sirve como catalizador para reacciones químicas, especialmente la formación de moléculas de  $H_2$  en la superficie de los granos de polvo (Nozawa y col. 2007). Según Ormel y col. (2009) está claro que la evaluación de los contenidos en las nubes moleculares, así como el estado general del proceso de formación de estrellas y planetas, están vinculados a las propiedades de los granos de polvo, en particular, su distribución del tamaño. Se espera que estas propiedades del polvo interestelar cambien durante su estadía en la fase de la nube molecular. Misiones espaciales recientes han permitido obtener información relevante sobre las propiedades del polvo en el interior de nubes densas. En particular, la comparación de los mapas de emisión de infrarrojo (IR) lejano tomados por los satélites IRAS y Spitzer y los mapas de extinción de IR cercano derivados de Two Micron All-Sky Survey ("2MASS") sugieren un crecimiento del grano en las regiones de mayor densidad (Schnee y col. 2008). También la coagulación, proceso por el cuál se forman los agregados, puede respaldarse por un análisis del perfil de absorción detallado de la banda de absorción de silicato de  $10\mu$ m en estos entornos (van Breemen y col. 2011).

En discos protoplanetarios, las colisiones entre agregados de polvo pueden producir la formación de agregados de mayor tamaño, que son intermediarios importantes en la construcción de planetas (Armitage 2010, Blum 2010). También estas colisiones están presentes en los discos de escombro, aunque en este tipo de entorno las condiciones llevan a un desenlace, en general, disruptivo. Asociado a este escenario, agregados de tamaño micrométrico de hielo y polvo resultantes de procesos colisionales, pueden encontrarse en objetos como los cometas, donde se alberga evidencia valiosa de este proceso de formación. Dado que este es el tema central de esta tesis, se abordará en más detalle en la sección 1.6.4.

Agregados de este tipo también componen los anillos de planetas y otros objetos menores (Burns y col. 2001). Según Burns y col. (1980), los pequeños granos en los anillos de Júpiter se generan por los impactos de los micrometeoroides, por las colisiones entre partículas de diferentes tamaños y por la auto fractura debido al estrés electrostático. Otro contexto extremadamente importante son los casos donde estos granos de polvo chocan con objetos mayores, como por ejemplo, los micrometeoritos que impactan sobre objetos del Sistema Solar, incluida la Tierra, lo que ha permitido su estudio y clasificación (Genge y col. 2008). También estas partículas pequeñas pueden producir cráteres en las superficies a las que impactan y eyección de material de las mismas. Así mismo, al impactar contra alguna sonda o satélite espacial pueden provocar daños irreversibles (Grossman v col. 2010). Por último, mencionamos que el regolito que cubre la superficie de muchos objetos, como por ejemplo la Luna, es un medio granular. El impacto de agregados en esta clase de superficies puede producir craterización y evección de materia, pero también puede provocar una mezcla del material superficial con el que se encuentra a un nivel más profundo, como resultado del impacto (McKay y col. 1991).

Algunos de estos escenarios serán los principales objetos de estudio de este trabajo, por lo cual serán comentados con más detalle en las próximas secciones. A tal fin, hay que remarcar que abordar el estudio del polvo en diferentes contextos ha requerido técnicas novedosas e implementación de muchos recursos para extraer información de las observaciones astronómicas realizadas desde la Tierra, como también misiones espaciales que pudieran contrastar *in-situ* la veracidad de los modelos propuestos para algunos cuerpos, como los cometas. En la próxima sección haremos una síntesis de los métodos comúnmente utilizados.

### 1.2. Métodos observacionales

Se resumirán los métodos más utilizados para la obtención de información del polvo a partir de observaciones terrestres, haciendo énfasis en los orientados al estudio de polvo cometario.

#### 1.2.1. Polarización

Las ondas electromagnéticas son ondas transversales, y cuando estamos lejos de las fuentes podemos considerarlas como ondas planas de modo que los campos eléctrico y magnético fluctuantes son perpendiculares entre sí y a su vez cada uno de ellos es perpendicular a la dirección de propagación. El estado de polarización de una onda que avanza según una dirección de propagación se define como la curva que describe el extremo del vector de campo eléctrico, E, en función del tiempo sobre un plano que es perpendicular a dicha dirección de propagación. La polarización lineal es un confinamiento del vector del campo a un plano dado a lo largo de la dirección de propagación. Si la radiación está linealmente polarizada, el grado de polarización lineal se determina experimentalmente mediante:  $\pi = (I_{max} - I_{min})/(I_{max} + I_{min});$ donde  $I_{max}$  y  $I_{min}$  son las intensidades máximas y mínimas que se observan a través del polarizador a medida que éste es rotado. Si llamamos I a las intensidades de la luz medida por una Polaroid cuando está orientada perpendicular y paralela al plano de dispersión, respectivamente,  $I_{\perp}$  y  $I_{\parallel}$  se corresponden con  $I_{max}$  y  $I_{min}$ , aunque dentro de unos intervalos de ángulo de fase  $I_{max}$  corresponde a  $I_{\perp}$  y en algunos otros es  $I_{\parallel}$ . El ángulo de fase  $\alpha$  es igual al arco subtendido por el observador y el Sol como se mide en el cuerpo. Como consecuencia, se utiliza en algunos casos el parámetro  $P_r$  (o a veces simplemente P), definido por:

$$P_r = \frac{I_\perp - I_\parallel}{I_\perp + I_\parallel},\tag{1.1}$$

para describir el estado de polarización lineal de objetos sin atmósfera del Sistema Solar.

#### Curvas de fase

Generalmente, los resultados se expresan mediante una curva de fase, que describe el brillo que un cuerpo refleja como una función de su ángulo de fase. El valor absoluto de  $P_r$  (generalmente expresado como porcentaje) indica el grado de polarización del objeto, mientras que el signo indica si  $I_{\perp}$  corresponde a  $I_{max}$  o a  $I_{min}$ . El intervalo de  $\alpha$  donde  $P_r$  es negativo(positivo) se denomina rama negativa(positiva) de la polarización. El valor extremo de polarización negativa(positiva) normalmente se conoce como  $P_{min}(P_{max})$ . Se llama ángulo de inversión  $\alpha_{inv}$  al valor del ángulo de fase donde  $P_r$  pasa de ser negativo a positivo. Si después de alcanzar su valor  $P_{min}$ ,  $P_r$  muestra una variación lineal como función de  $\alpha$ , la pendiente de esta tendencia lineal, medida en  $\alpha_{inv}$ , se denomina pendiente polarimétrica, h, y es dada como porcentaje de la polarización por grado.

#### Polarimetría de Cometas

La polarización cometaria es causada generalmente por dos mecanismos (Sen y col. 1991): La dispersión de la luz solar por partículas cometarias y la emisión fluorescente por moléculas cometarias. La luz solar dispersada por la coma cometaria (medio ópticamente delgado) está polarizada linealmente (parcialmente). El valor observado de polarización lineal que es causado sólo por la dispersión del polvo generalmente es función de: (1) la longitud de onda incidente  $\lambda$ , (2) el ángulo de fase cometario ( $\alpha = 180^{\circ} - \theta$ , siendo  $\theta$  el ángulo de scattering), (3) el tamaño y geometría de las partículas de polvo, y (4) la composición química del polvo (Sen y col. 1991). La intensidad debe normalizarse con la distancia al Sol ( $R_h$ ) y al observador ( $\Delta$ ), lo cual no es sencillo para cometas donde la actividad varía con  $R_h$  y el tamaño aparente depende de  $\Delta$ .

Sin embargo, el grado de polarización, o bien  $P_r$  de la ecuación 1.1 pueden usarse directamente para obtener las curvas de fase mencionadas anteriormente (A. Levasseur-Regourd y col. 1996). Las variaciones en la polarización de la coma se relacionan con las propiedades mencionadas del polvo.

### 1.2.2. Albedo

Hay muchas definiciones de albedo (Lamy y col. 2004). El albedo de dispersión simple se define de forma general como la relación de la energía dispersada en todas las direcciones y la energía total removida del haz incidente por una partícula aislada (Kolokolova y col. 2004). Esta definición incluye todos los componentes dispersados (refractado, reflejado, difractado). Como se requiere el conocimiento sobre la luz dispersada en todas las direcciones, esta definición no es muy útil a la hora de estudiar ciertos materiales, entre ellos el polvo cometario. Una opción es comparar la energía dispersada con la energía absorbida re-irradiada en el IR para derivar un albedo al ángulo de fase de observación, método propuesto por Gehrz y Ney (1992). El albedo estimado de esta manera para polvo en diferentes objetos debe ser comparado al mismo ángulo de fase, ya que la radiación dispersada en dirección del observador depende de las posiciones relativas del Sol, la Tierra y el objeto de interés (Kolokolova y col. 2004). Otra opción es utilizar el albedo geométrico  $A_p$ , definido como la relación de la energía dispersada a  $\alpha = 0^{\circ}$  y la dispersada por un disco ideal lambertiano de igual sección transversal geométrica. Sin embargo, para objetos como cometas esta definición también es difícil de aplicar ya que raramente pueden ser observados a  $\alpha = 0^{\circ}$ . En estos casos se define  $A_p(\alpha)$  como el producto del albedo geométrico y la función de dispersión normalizada a cierto ángulo  $\alpha$  (Kolokolova y col. 2004). Diferencias de albedo pueden resultar de diferencias en composición químicas, tamaño o forma de las partículas, y estructura interna del polvo.

#### 1.2.3. Color

El color del polvo indica tendencias en la dependencia con la longitud de onda  $\lambda$  de la luz dispersada por el polvo. Usualmente se medía determinando la magnitud del objeto m en dos filtros diferentes. Por ejemplo, si se utilizan los filtros B (azul) y R(rojo) para medir las magnitudes respectivas, el color será  $C_{B-R} = m_B - m_R$ . Este color es una medida adimensional expresada como 2.5 el logaritmo de la relación entre las intensidades en los dos filtros.

Si bien aún se utilizan este tipo de análisis, actualmente la espectrofotometría define al color como el gradiente espectral de reflectividad, generalmente medido en % por 0,1 $\mu$ m, indicando el rango de  $\lambda$  en donde se midió, y este método es utilizado en cometas (Kolokolova y col. 2004). Para determinar los colores del polvo cometario de forma precisa, se requiere el uso de bandas continuas que estén verdaderamente libres de contaminación por gases. Las bandas que cumplen esto están en el IR-cercano (aunque otros aspectos deben tenerse en cuenta, como por ejemplo la emisión térmica de los granos calientes pueden contribuir a la banda K para cometas a distancias dentro de 1UA).

#### 1.2.4. Emisión térmica

La información térmica da dos resultados que pueden ser relacionados con propiedades físicas de las partículas: la distribución de energía térmica espectral (SED por sus siglas en inglés "*Thermal spectral energy distribution*") y la detección de características distintivas (como la marca característica de los silicatos a  $10\mu$ m). La emisión térmica del polvo resulta de la absorción de la radiación solar seguida de su re-emisión. Para esto se considera que el espectro del polvo es un continuo compuesto por una curva de cuerpo negro a 5800K debida a radiación solar dispersada y otra curva de cuerpo negro debida a partículas de polvo caliente que alcanzan el equilibrio térmico a temperaturas de algunos cientos de Kelvin (Fernandez 2006). La temperatura de equilibrio de un cuerpo negro  $(T_{BB})$  a una distancia heliocéntrica  $(R_h)$  esta dada por Gehrz y Ney (1992):

$$T_{\rm BB} = 278 \left(\frac{\rm UA}{R_{\rm h}}\right)^{1/2} [\rm K], \qquad (1.2)$$

donde UA es una unidad astronómica. Entonces se compara la temperatura de los granos  $T_{\rm gr}$  a la misma  $R_{\rm h}$ , que puede obtenerse del equilibrio entre las potencias absorbidas/emitidas de la luz solar:

$$\frac{L_{\odot}}{4\pi R_{\rm h}^2} \pi a^2 Q_{\rm a} = 4\pi Q_{\rm e} \sigma T_{\rm gr}^4.$$
(1.3)

Donde  $Q_{\rm a}$  es el factor de eficiencia de absorción promediado sobre la región de longitudes de onda incidentes donde la radiación solar está concentrada (visible), que dependerá del material y del radio del grano *a*;  $Q_{\rm e}$  es la eficiencia de emisión térmica del grano a una temperatura  $T_{\rm gr}$ ;  $\sigma = 5,670373 \times 10^{-8} {\rm W/m^2 K^4}$  es la constante de Stefan-Boltzmann; y  $L_{\odot} = 3,827 \times 10^{33} {\rm erg/s}$  es la luminosidad solar. De la ecuación 1.3:

$$T_{\rm gr} = \left(\frac{L_{\odot}Q_{\rm a}}{16\pi\sigma R_{\rm h}^2 Q_{\rm e}}\right)^{1/4} = T_{\rm BB} \left(\frac{Q_{\rm a}}{Q_{\rm e}}\right)^{1/4}.$$
 (1.4)

donde la temperatura de equilibrio para un cuerpo negro (ecuación 1.2) se obtiene de la ecuación 1.4 con  $Q_a = Q_e = 1$  (por ser cuerpo negro). Los granos absorbentes pequeños (como el grafito), tienen  $Q_a > Q_e$ , lo cual implica  $T_{\rm gr} > T_{\rm BB}$ . Los granos grandes (con radios mayores a unos pocos micrones) tienen  $Q_a \sim Q_e \sim 1$ , entonces  $T_{\rm gr} \rightarrow T_{\rm BB}$ . La relación  $T_{\rm gr}/T_{\rm BB}$  se suele denominar sobrecalentamiento ("superheat") (Gehrz y Ney 1992), y se suele utilizar como una medida para estimar el tamaño promedio de granos en el polvo. Si bien la emisión térmica permite inferir sobre la composición y tamaño de los granos de polvo presentes, también dependen del modelo utilizado para ajustar los datos como se verá más adelante.

Toda la información que se ha recolectado de observaciones ha sentado base para experimentos en laboratorios de alta complejidad y simulaciones, donde desde ambos enfoques se intenta recrear los procesos colisionales en condiciones que se asemejen a las del espacio. Estos estudios complementan a las observaciones y nos permiten estudiar más de cerca la evolución del sistema granular. Teniendo en cuenta todas estas aristas se describirán a continuación escenarios donde estudiar las colisiones granulares entre agregados de polvo tiene un rol fundamental.

## 1.3. Cráteres

Los impactos en medios granulares pueden dejar un cráter en la superficie y eyectar material. Las superficies cubiertas de regolito como algunos satélites planetarios y asteroides son constantemente objeto de impacto de partículas de polvo y micrometeoritos (Beitz y col. 2016), que producen consecuencias en la composición y propiedades mecánicas de esas superficies (Schwartz y col. 2014, Speyerer y col. 2016). Este proceso también puede ser considerado como el caso extremo de colisiones muy asimétricas en las cuales un agregado de polvo muy pequeño impacta contra uno mucho mayor. Tales colisiones son típicas también en discos protoplanetarios, donde pueden ocurrir a altas velocidades relativas ya que los grandes agregados pueden haberse desacoplado del gas que rota con el disco (Birnstiel y col. 2016). Lo mismo podría suceder con los agregados de polvo que son desprendidos del núcleo cometario y pasan a formar parte de su coma. El tamaño del proyectil aglomerado y la velocidad del impacto son los factores que repercutirán en el crecimiento (o erosión) del material impactado (Blum 2010, Birnstiel y col. 2016).

Se han realizado numerosos estudios teóricos y experimentales incluyendo las fuerzas de frenado relevantes, las leyes generales que gobiernan el comportamiento del blanco granular y la gravedad (Uehara y col. 2003, Lohse y col. 2004, Ciamarra y col. 2004, Hou y col. 2005, Katsuragi y Durian 2007). Una revisión muy completa reciente fue publicada por Katsuragi (2016). Tales estudios han permitido obtener leyes de escala generales para el proceso de craterización. La mayoría de los trabajos, sin embargo, se han focalizado en el estudio del impacto de un proyectil rígido y duro (como un bloque de roca, o una esfera sólida) contra un blanco granular, como regolito. Estas investigaciones han sido complementadas con estudios sobre procesos de craterización en rocas porosas (Melosh 1989, Melosh 2011, Güldemeister y col. 2015) y asteroides (Scheeres y col. 2015, Jutzi y col. 2015).

A escala microscópica, simulaciones de mecánica granular han sido capaces de capturar el comportamiento de granos individuales durante el impacto. Tales simulaciones han sido aplicadas exitosamente para entender el comportamiento colisional de agregados de polvo compuestos por miles de granos y determinar las características de los procesos de erosión y crecimiento (Wada y col. 2007, Paszun y Dominik 2009, Wada y col. 2011, Ringl, Bringa, Bertoldi y col. 2012, Gunkelmann y col. 2016b, Y. Li y col. 2016). Esta técnica también fue aplicada al proceso de formación de cráteres en colchones granulares (Ringl, Bringa y Urbassek 2012, Hurley y col. 2015, Z. Li y col. 2015) aunque los proyectiles aquí eran monómeros, es decir, indestructibles. Muchos experimentos en laboratorios y simulaciones han sido realizados en impactos sobre blancos o clusters atómicos con el objetivo de explorar la dependencia del tamaño del cráter y del material eyectado de las características del proyectil (Anders y col. 2004, Anders y col. 2009, Seah y col. 2014, Anders y Urbassek 2013). En estos estudios se encontró que (sobre un cierto valor umbral), la principal característica del proyectil que afecta al volumen del cráter y a la eyección producida, es la energía total del proyectil al momento de impactar. Este simple comportamiento está en contraste con los conocimientos disponibles sobre la formación de cráteres en blancos granulares en el regimen de "strength" (Katsuragi 2016), muy posiblemente debido a la gran disipación intergranular en nuestras simulaciones.

Por lo tanto, parecería a priori que las leyes no son idénticas en las macro escalas que en escalas sub-milimétricas. Por ello, no podemos extrapolar directamente los resultados a todas las escalas y nuevas investigaciones son necesarias para poder corroborar dependencias preexistentes o bien, proponer nuevas.

Como hemos visto hasta aquí, muy pocos estudios han tratado el impacto de proyectiles que estén compuestos en sí mismos de materia granular (Bartali y col. 2013). Sin embargo, ya hemos visto que en el entorno astrofísico muchas veces el impactor en sí mismo es un agregado granular que posee una alta porosidad. Los cometas tienen atribuida una porosidad mayor de la que se asumía anteriormente, según algunos autores del 72-74 % (Kofman y col. 2015, Pätzold y col. 2016), y lo mismo aplica a asteroides, que alcanzan porosidades del 40-60 % (Britt y SJ 2001, Fujiwara y col. 2006, Beitz y col. 2016). En adición, los aglomerados de polvo, que son muy abundantes en los sistemas planetarios, tienen una alta porosidad. Mientras que su composición depende ciertamente del objeto en estudio, las partículas de polvo interplanetario presentan distribuciones en cuanto a su porosidad con picos en valores de 0-4 %, y cuya cola alcanza valores que superan el 50 % (Corrigan y col. 1997). Estos son fuente frecuente de impactos sobre el regolito superficial de asteroides y satélites rocosos (Yamamoto 2002, Nakamura y col. 2013). En todos los casos, la caracterización cuantitativa de la forma del cráter formado no es simple, ya que las ecuaciones que gobiernan la deformación y el flujo granular no se encuentran bien establecidas (Katsuragi 2016).

En todos estos procesos, generalmente lo importante es poder obtener información sobre:

 morfología del cráter producido (ancho, profundidad, forma) y cómo varía si cambian propiedades del proyectil (masa, composición, tamaño, porosidad, etc.) o características del impacto (velocidad relativa, ángulo respecto a la superficie, orientación del proyectil si éste no es uniforme, etc).

- material eyectado: materia total eyectada, origen (blanco o proyectil), con que energía se eyecta, si hay redeposición del mismo, distribución de tamaño del material eyectado, etc.
- formación/modificación de estructuras producidas por el impacto: formación de una cresta en el borde del cráter ("rim"), compactación de la materia circundante, etc.
- composición y distribución final del blanco granular: el impacto puede desplazar, agregar o mezclar material. Algunos estudios buscan medir estos procesos, ver la penetración y alcance que tuvieron las partículas del proyectil en el medio, ver si quedan expuestas en el cráter o si son cubiertas por materia, etc.

### 1.4. Discos protoplanetarios

La formación de estrellas se lleva a cabo en densas nubes moleculares que colapsan debido a su propia gravedad, generando luego de unos 100000 años un objeto central rodeado por un disco de acreción. Este disco se denomina protoplanetario porque provee el material disponible para la formación de planetas y cuerpos menores, que no es otra cosa que una cantidad finita de masa estelar que quedó dispersada (Dullemond y col. 2006). En las regiones interiores del disco las temperaturas pueden superar los 2000K inicialmente, donde la materia estaría en estado gaseoso. Algunos materiales condensarán en partículas de polvo a tiempos posteriores o por estar lejos del centro del disco donde las temperaturas son menores. Si bien observaciones de distribuciones de energía espectral e imágenes directas prueban que las estrellas jóvenes están rodeadas por discos protoplanetarios (Dullemond y col. 2007), también se han observado exoplanetas orbitando púlsares y material rodeando en forma de disco a remanentes de supernovas. Aunque no se puede asegurar su origen, los mismos podrían haber sido formados, por ejemplo, por discos de escombros. Según Blum y Wurm (2008), esto sugiere que la formación planetaria podría no estar exclusivamente ligada a la formación estelar. Sin embargo, otros autores han afirmado posteriormente que los planetas se forman como un subproducto de la formación de estrellas (Venturini y col. 2020).

En estos discos el proceso por el cual las partículas de polvo protoplanetarias de tamaño (sub)micrón se convierten en planetesimales de kilómetros es aún enigmático (Blum y Wurm 2008, Johansen y col. 2014): más allá de los recientes progresos realizados en el área de formación planetaria, no hay modelos que puedan explicar satisfactoriamente la formación de planetas desde el crecimiento de partículas de polvo de tamaño micrón (Drążkowska y col. 2016). La imposibilidad de modelar un crecimiento que se corresponda con las observaciones astronómicas parece basarse en que, para que dos agregados de sílica se adhieran entre sí la velocidad de colisión debe ser inferior a 1m/s, cuando en realidad esta velocidad dentro de discos protoplanetarios suele ser mucho más alta (Ormel y Cuzzi 2007). Este límite de velocidad se basa en experimentos de laboratorio (Güttler y col. 2010, Kothe y col. 2013) que no necesariamente reproducen las condiciones en el espacio. Para solventar este problema, modelos recientes han sugerido inestabilidad de flujo en el disco protoplanetario, lo que causa un aumento en el número de colisiones en algunas regiones que puede favorecer el crecimiento de los agregados (Johansen y Youdin 2007, Carrera y col. 2015); o la inclusión de pebbles y planetesimales (Drążkowska y col. 2016, Lenz y col. 2019).

En particular, el entender las propiedades físicas de los agregados es lo que nos dará la clave para entender la historia de la formación planetesimal.

#### 1.4.1. Propiedades del polvo

En cuanto al tamaño de los granos individuales y al tamaño de los agregados, es difícil estimar un rango de valores de forma exacta que sea válido para todos los discos protoplanetarios. Esto se debe a muchos factores, donde uno de los principales es que la coagulación (proceso por el cuál los granos colisionan y se pegan formando agregados y también por el cuál los agregados colisionan y se pegan formando agregados más grandes y así hasta formar los planetesimales) modifican el tamaño promedio de estos granos, por lo cual, dependiendo de la etapa en que se encuentre el disco, este tamaño podrá ser muy diferente. La mayoría de los autores asume una distribución de tamaños en ley de potencia sujeto a un valor de tamaño mínimo y uno de tamaño máximo. Por ejemplo, Min y col. (2012) relacionan los efectos de crecimiento de grano con señales polarimétricas de observaciones, utilizando un exponente s = -3 en la ley de potencia mencionada y valores de tamaño mínimo:  $a_{\min} = 0,3\mu$ m y máximo:  $a_{\max} = 3$ mm.

La composición del polvo protoplanetario también está lejos de ser trivial (ver Min y Flynn 2010, capítulo 6). Sin embargo, algunos estudios han intentado estimar con gran precisión los componentes mediante observaciones puntuales de un objeto, o bien, promediando sobre los datos obtenidos de varios objetos de estudio que presentaban discos protoplanetarios en sus estructuras. Por ejemplo, Min y col. (2012) obtiene la siguiente composición para los agregados de polvo (en relación a la masa): 58 % silicatos, 18 % sulfuros de hierro, y 24 % carbón amorfo. Otros encuentran que en algunos discos, la sílica puede llegar a ser de hasta un 90 % (Min y Flynn 2010). El análisis de las características de la luz dispersada por el disco, junto con otros observables como el contenido de gas, la química y la forma de la distribución de energía espectral (SED), puede ser usada para estimar cuánto ha evolucionado la composición del polvo respecto a la que se observa en el medio interestelar, y marcar diferencias sustanciales entre estos tipos de agregados. Por



**Figura 1.1:** Coeficientes de absorción de masa para granos de distintos tipos de silicatos. Se han asumido esferas homogéneas para los granos amorfos y una distribución de esferas huecas para forsterita cristalina, enstatita y sílica amorfa. Las líneas sólidas representan un radio de  $0,1\mu$ m y las punteadas de  $1,5\mu$ m. Por comparación, se muestra el espectro de un Hidrocarburo Aromático Policíclico. Imagen extraída de Henning y Meeus 2009.

ejemplo, los silicatos cristalinos no han sido observados en agregados del medio interestelar pero son un componente esencial en algunos cometas y en partículas de polvo interplanetarias del Sistema Solar (van Boekel y col. 2003).

Ahora bien, los espectros de los discos también nos pueden dar información sobre la composición (tipo de silicato, por ejemplo) y tamaño de los granos. Los silicatos amorfos con la misma estequiometría que piroxenos y olivinos (tienen diferente estructura pero la misma composición química básica) muestran típicamente dos amplias bandas infrarrojas en aproximadamente  $10\mu m$  y  $18\mu m$  (en general más



**Figura 1.2:** (a)Eficiencia de extinción para esferas de silicatos amorfos de diferentes tamaños. (b) Eficiencia de extinción para partículas de sílice de diferente forma. Imágenes extraídas de Henning y Meeus (2009).

débil), correspondientes al estiramiento Si - O y a las vibraciones de la ligadura O - Si - O, respectivamente. Estas bandas son frecuentemente observadas en el espectro de discos protoplanetarios. La posición exacta de la primera banda depende del nivel de topología del  $SiO_4$ , como ejemplo, la banda se ubica en  $9\mu$ m para granos (sub)micrón de silica pura  $SiO_2$  y en  $10.5\mu$ m para miembros de la forsterita  $Mg_2SiO_4$  (Henning y Meeus 2009). Entonces, las partículas de silicatos muestran una caracterización diversa en el IR, que se relacionan con su composición química y su estructura, como también con su tamaño y el de los granos que la componen, como se aprecia en la Figura 1.1 para longitudes de onda en el rango  $8 - 13\mu$ m. También el espectro IR puede darnos información sobre el tamaño de grano y la forma del mismo. A modo de ilustrar cómo cambia el espectro bajo estas variables se muestran: en la Figura 1.2(a) los cambios que puede producir un tamaño de grano diferente y en la Figura 1.2(b) un factor de forma diferente. Para más detalles ver Henning y Meeus (2009).

La forma de obtener información sobre los agregados de polvo de diferentes objetos es, en primer lugar obtener el espectro del objeto, y luego comparar con los distintos espectros teóricos producidos por granos de diferente tamaño y composición. Como ejemplo se muestra la Figura 1.3. Esta es una tarea compleja, ya que hay factores difíciles de incorporar en el modelo, como por ejemplo: cómo afecta la porosidad de los agregados, qué espectro se obtiene si el agregado está compuesto por esferas de diferente tamaño, que sucede si hay alta densidad de agregados provocando una alta reflexión interna de luz y por ende alterando el espectro resultante, etc. Hay modelos actuales que han abordado estos y otros problemas para mejorar esta técnica y tener información mucho más precisa sobre estos agregados de polvo.



**Figura 1.3:** Espectro obtenido con Spitzer de una estrella tipo M4 de 9Ma RECX5 comparada con el espectro obtenido con ISO ("Infrared Space Observatory") del cometa Hale-Bopp. Se superpone el espectro de emisión producido por una distribución de esferas huecas de forsterita (radio  $0.1 \mu m$ ) a T=200K (Henning y Meeus 2009).

Por último, una propiedad no menos importante es la porosidad que tienen estos agregados. Si bien este parámetro es muy variable también, los agregados protoplanetarios tienen alta porosidad (> 60 %). Durante las etapas de formación planetaria se estima que los granos de polvo pueden llegar a tener un factor de llenado (definido como  $\phi = 1 - P$  donde P es la porosidad) tan bajo como  $\phi = 10^{-4}$  (Okuzumi y col. 2012, Kataoka y col. 2013, Krijt y col. 2015, Krijt y col. 2016). Sin embargo, a medida que chocan entre sí, los procesos de compactación pueden hacer que la porosidad disminuya considerablemente. El proceso en detalle sobre cómo esto sucede no es entendido actualmente, y es un área de estudio que ha tomado impulso en el último tiempo.

#### 1.4.2. Modelos de coagulación

Los modelos que estudian las primeras etapas de la evolución del disco planetario, en general, se centran en la componente gaseosa (que se estima, posee 99 % de la masa total). Las partículas sólidas, que en masa representan cerca del 1 % de la masa del disco, se distribuyen en agregados pequeños que están embebidos en esta gran masa de gas. En comparación, las masas de polvo estimadas mediante observaciones poseen entre un 0.2 % hasta un 20 % de la masa de la estrella central.

Sin embargo, por más de que sean pequeñas y estén acopladas al movimiento del gas, tienen siempre una velocidad relativa al gas causada por el movimiento browniano (para granos muy pequeños) o por el movimiento sistemático debido al asentamiento vertical o al movimiento sub-kepleriano del gas o por turbulencias (Blum y Wurm 2008). Como el movimiento de esas partículas depende de su masa, los granos de polvo poseen velocidades relativas entre sí, y por lo tanto, pueden colisionar. Estas velocidades relativas con las que chocan, llamadas velocidades de impacto o velocidades de colisión, suelen, en general, ser pequeñas ( $\simeq 1$ m/s), pero pueden alcanzar valores altos de hasta 60 – 100m/s (Blum y Wurm 2008, Brauer y col. 2008). También a medida que los cuerpos aumentan en tamaño, las velocidades relativas de colisión pueden ser considerablemente mayores (San Sebastián y col. 2019). La pregunta central es si luego de colisionar estas partículas permanecerán pegadas formando un agregado mayor, proceso conocido como aglomeración de polvo o coagulación.

Un modelo de coagulación busca encontrar los parámetros que influirán en el resultado de la colisión y los valores umbrales que permitirán el crecimiento de los agregados. En este contexto el resultado de una colisión entre agregados de polvo puede depender de:

- velocidad relativa de los agregados que chocan.
- propiedades de los agregados: composición, forma, masa, porosidad, tamaño de las partículas que lo constituyen, la estructura de ordenamiento de estas partículas dentro del agregado, etc.
- ángulo de la colisión (puede o no ser central).
- relación de masas: qué tan grande es un grano respecto al otro.
- si no hay una simetría clara de los agregados, la orientación de los mismos respecto a la dirección de colisión.

Además de si los agregados quedarán pegados o no, se busca saber cómo será su estructura final: las propiedades del nuevo agregado si se forma uno sólo; o si este no es el caso, se abre un abanico de posibilidades que van desde el rebote de los agregados (donde cada uno es idéntico antes y luego de la colisión) hasta la destrucción total de los mismos (donde resultarán muchos agregados pequeños con características diferentes.)

Güttler y col. (2010) realizan un resumen extremadamente completo de los experimentos realizados hasta el momento y a raíz de los resultados observados propone posibles desenlaces del proceso colisional, que se puede observar en Figura 1.4. Las clases principales son: adhesion ("*sticking*", S), Rebote ("*bouncing*", B) y Fragmentación ("*fragmentation*", F). Dentro de éstas hay subdivisiones, para más detalles ver Güttler y col. (2010). En la mayoría de las situaciones observadas en la Figura 1.4 además del resultado global mencionado, se produce una eyección de material, es decir, materia del blanco o del proyectil o de ambos que escapa al espacio. Es de interés estudiar cuánta materia se eyecta, con cuánta energía y la distribución de tamaños correspondiente.



**Figura 1.4:** Clasificación de los resultados posibles de una colisión: Adhesión (S), Rebote (B), Fragmentación (F) según Güttler y col. 2010.

El estudio de estas colisiones granulares ha sido abordado a menudo con el uso de códigos de mecánica granular, en donde las colisiones entre agregados pueden ser modeladas por la simulación numérica de la interacción entre los granos que los componen. Algunos de estos códigos se han desarrollado y/o aplicado en colisiones astrofísicas (Dominik y Tielens 1997, Wada y col. 2007, Paszun y Dominik 2009, Ringl y Urbassek 2012). En este ámbito, la interacción entre agregados de igual masa se ha estudiado con particular intensidad, variando parámetros como la porosidad del agregado, la velocidad de impacto o el parámetro de impacto (Wada y col. 2008, Wada y col. 2009, Wada y col. 2011, Suyama y col. 2008, Paszun y Dominik 2009, Ringl, Bringa, Bertoldi y col. 2012, Gunkelmann y col. 2016a). Sin embargo, las colisiones reales serán probablemente asimétricas, es decir, el tamaño (y la masa) de los agregados que colisionen serán diferentes (Birnstiel y col. 2016).

Las colisiones asimétricas en masa fueron estudiadas experimentalmente y resumidas en Güttler y col. (2010) y Schräpler y col. (2018). Para agregados de sílica de tamaños de mm y cm ellos encuentran que la barrera entre el crecimiento y la fragmentación está situada en una velocidad de colisión de  $\simeq 1 \text{m/s}$ , independientemente de la relación entre masas que haya entre los agregados, para cierto rango de valores de masas del proyectil. Esto está en acuerdo con estudios previos de Blum y Wurm (2008). Más experimentos fueron realizados por Whizin y col. (2017), quienes estudiaron colisiones entre agregados de polvo de tamaño de mm con agregados porosos de tamaño de cm. Para relaciones de masa de  $\simeq 60$ , porosidades del  $\simeq 70 \%$  y velocidades por encima de 1m/s, encuentran fragmentación en la mayoría de sus experimentos y en algunos pocos casos erosión. Sin embargo, discuten la dependencia entre la velocidad umbral que separa los regímenes de fractura del de crecimiento (que denominan  $v_{\text{thr}}$ ) con la relación de masas entre agregados ( $\mu$ ) y obtienen:

$$v_{\rm thr} = 1.01 \mu^{1.54} {\rm cm/s.}$$
 (1.5)

En este estudio de Whizin y col. (2017), no se discute la dependencia con la porosidad del agregado. La influencia de la porosidad en las colisiones entre agregados de polvo ha sido estudiada por Meru y col. (2013) quienes modelaron colisiones asimétricas de agregados usando simulaciones de hidrocódigo con SPH. Ellos encontraron que la probabilidad de crecimiento de los agregados es baja si las porosidades son altas (casi nula para porosidades mayores a 0,37) y generalmente aumentan a medida que la porosidad disminuye. Gunkelmann y col. (2016b) usaron mecánica granular para estudiar la influencia de la porosidad pero sólo en colisiones simétricas a velocidades por encima de 1m/s. Encontraron que la velocidad crítica para fracturar a los agregados disminuye con la porosidad de los agregados. Recientemente, San Sebastián y col. (2020) mediante experimentos en laboratorio, muestran que a medida que aumenta la velocidad de impacto en muestras granulares de sílica (granos de tamaño  $1 - 5\mu$ m), la compactación también aumenta.

Si bien todos estos avances mejoran nuestra comprensión sobre los procesos de coagulación en los discos protoplanetarios, realizar un sólo modelo completo y realista que tome todos estos factores en cuenta sigue siendo una tarea compleja.

#### 1.5. Discos de escombros

Cuando se ha disipado la componente gaseosa el disco, y se han formado planetesimales y protoplanetas, empieza una nueva etapa colisional en un disco circumestelar que se conoce como disco de escombros. Esta etapa puede extenderse desde los 10 Ma hasta varios Ga. El nombre proviene del hecho de que comienzan a observarse muchos escombros, que son el remanente de colisiones continuas entre planetesimales, asteroides, cometas, etc. Por tanto, se cree que los discos de escombros son creados y mantenidos por colisiones mutuas, y (posiblemente) por actividad de tipo cometaria de algunos cuerpos menores, similares a asteroides, cometas y a objetos del cinturón de Kuiper del Sistema Solar. El polvo evoluciona a través de una cascada de colisiones bajo la acción de la gravedad estelar y las fuerzas de radiación (Krivov y col. 2006). Por lo tanto no puede decirse que es el mismo material que en los discos protoplanetarios y de ninguna manera estos agregados estarán sujetos a exactamente los mismos procesos.



**Figura 1.5:** Distribución de tamaño de granos en un disco de escombros rocoso a 100UA luego de 10Ma con un perfil inicial  $\propto r^{-4}$  y excentricidades de 0 hasta 0.375 (línea sólida). Se muestran resultados para diferentes tipos de órbita (Krivov y col. 2006).

Si bien se observan granos compuestos de sílica (Gáspár y col. 2013), y una predominancia en tamaño de grano en escala micrón (ver la Figura 1.5), una de las principales características diferenciables es que las velocidades de colisión entre las partículas de polvo suelen ser mucho más altas, de al menos decenas de m/s y excediendo fácilmente el km/s (Krivov y col. 2006, Krivov 2010). Para más detalles ver el trabajo de Gáspár y col. (2013), que además cuenta con una compilación extensa de los catálogos de Spitzer y Herschel para observaciones a 24, 70 y 100  $\mu$ m.

### 1.6. Cometas

Los cometas han captado las miradas de los seres humanos desde hace milenios. Su belleza cósmica (atribuida mayormente a su larga cola brillante) y su aparición repentina sobre el cielo siempre fueron factores cautivantes. A través de la historia, su existencia ha sido atribuida a eventos místicos, señales divinas y malos augurios (Schechner y Genuth 1999). Si bien inicialmente aparecían como eventos aislados e impredecibles en el cielo, algunas comunidades comenzaron a documentar estos eventos, como los chinos (Needham 1974), quienes realizaron observaciones meticulosas en la antigüedad de cometas y otros fenómenos que se preservan hasta el día de hoy, cubriendo el periodo desde  $\simeq 1100$  AC hasta 1700 DC. Desde que comenzaron a documentarse y hasta el siglo XVIII, el registro fue escaso (de apenas 25 cometas por siglo). En los siglos siguientes, el número de registros aumentó a 40-50 por siglo (Fernandez 2006). Una clave en este proceso fue la invención del telescopio. Uno de los primeros catálogos completos fue producido por Stanislaus de Lubienietz, donde figuran las observaciones de tiempos lejanos hasta su presente (de Lubienietz 1666).

Además del espectáculo celeste impactante, los cometas tienen un elevado interés científico basados en que la mayoría de los planetesimales formados a partir de la nebulosa solar fueron acretados por los planetas, acretados por el Sol, o fueron eyectados del sistema; sin embargo una pequeña fracción de estos planetesimales sobrevivió a estos procesos y aun podemos observarlos como objetos menores y, particularmente, como cometas (Tsiganis y col. 2005, Morbidelli 2010). Por ello, los cometas nos pueden dar mucha información sobre la formación del Sistema Solar, ya que son objetos primordiales remanentes del proceso de formación y que representan las muestras posiblemente más antiguas y mejor preservadas del material original de donde se formó nuestro sistema planetario (sección 1.4). Estos objetos contienen gran cantidad de volátiles en forma de hielos, en su mayoría hielo de agua, pero también se observan hielos de otras especies. Por ejemplo, se han encontrado hielos de amoniaco  $NH_3$  y metano  $CH_4$ , que al pertenecer a la composición pristina del disco protoplanetario, también están presentes en el núcleo cometario. Según Kawakita y col. (2004) la presencia de hielo de agua amorfo que nunca ha experimentado temperaturas mayores a  $T \simeq 30 - 150 \text{K}$  confirma que se formaron en las regiones externas de la nebulosa solar a distancias no menores a las que corresponden en la actualidad a las órbitas de Urano y Neptuno.

Cuando un cometa se acerca al Sistema Solar interior parte del hielo que lo forma se sublima y el polvo que se encuentra mezclado con el hielo se libera y es arrastrado por el gas en expansión. El movimiento del polvo dependerá de la topografía del núcleo y de la forma de interacción entre el gas y el polvo en las cercanías de este.

Hace algunos años la sonda Stardust capturó y trajo a la Tierra granos de polvo de la coma del cometa 81P/Wild 2 (Brownlee y col. 2006), los cuales presentaban una gran diversidad en materiales refractarios como, por ejemplo, fragmentos de condrulas, inclusiones de Calcio - Aluminio y silicatos amorfos y cristalinos (M. Zolensky y col. 2008, Joswiak y col. 2009, Joswiak y col. 2012), concordando con la detección de silicatos amorfos y cristalinos en estrellas tipo T Tauri y otros objetos que podrían estar formando sistemas planetarios a su alrededor (Lisse y col. 2009). También la fracción de masa de silicatos cristalinos encontrada en la coma de algunos cometas es llamativamente alta (M. E. Zolensky y col. 2006), quizás tan alta como 0,5 - 0,6 (Westphal y col. 2009). Por lo tanto, el estudio de los granos de polvo en los cometas también nos provee información sobre cuáles eran las condiciones de formación de estos objetos en la nebulosa planetaria y nos ayuda a relacionar el material que se observa en los cometas hoy con el que existió en la nube molecular de la cual se formó el Sistema Solar (Ehrenfreund y col. 2004).

La presencia de estos materiales en polvo cometario es un dato que no deja de sorprender, ya que algunos silicatos cristalinos (por ejemplo, las olivinas) requieren temperaturas de más de 1000 K para formarse, lo que se contradice con los modelos
de formación planetaria (Pollack y col. 1996, Ida y Lin 2008) donde el disco externo es un lugar frío y la formación de planetas es muy poco probable ya que las escalas de tiempo de formación de núcleos sólidos son muy largas debido a la baja masa disponible para acretar (Rafikov 2011). Como la temperatura más allá de un radio de  $R_{\rm h} \simeq 10$ UA se espera que se mantenga por debajo de los 100 K, en el contexto de los modelos de formación la presencia en cometas de materiales hechos a T > 1000K sugiere necesariamente un transporte radial del material de las regiones interiores (distancias heliocéntricas  $R_{\rm h} \leq 1$ UA) a las regiones exteriores ( $R_{\rm h} > 10 - 30$ UA) del Sistema Solar (Wooden y col. 2005, Scott 2007).

# 1.6.1. Origen

El estudio sobre los cometas y sobre su posible origen es relativamente contemporáneo. Hace menos de un siglo Plutón fue descubierto, lo que llevó a extender los límites de nuestro Sistema Solar para incluir posibles objetos más allá de la orbita de Neptuno, conocidos actualmente como "transneptunianos". Para ilustrar, la Figura 1.6 es una representación de nuestro Sistema Solar, junto con las distancias (en UA), que nos brinda una noción espacial (no están incluidos los planetas Mercurio ni Venus). En la misma, la heliosfera es la región espacial que se encuentra bajo la influencia del viento solar y su campo magnético. Alejándose del Sol, el punto donde el flujo del viento solar se vuelve subsónico es el "Shock terminal", el punto donde el medio interestelar y las presiones del viento solar se equilibran es la heliopausa, y el punto donde el flujo del medio interestelar se vuelve subsónico sería el "Shock de Bow". Más allá, los átomos de hidrógeno no cargados del espacio interestelar disminuyen su velocidad al chocar con las partículas del viento solar. Esa acumulación que dispersa la luz ultravioleta se denomina pared de hidrógeno.

En la Figura 1.6 también podemos distinguir el cinturón de Kuiper (aproximadamente entre 35 y 50 UA), y la Nube de Oort (cascarón esférico ubicado a aproximadamente entre 50000 y 100000 UA). Hace algunas décadas se consideraba que todos los cometas provenían de la nube de Oort, inclusive los cometas de la familia de Júpiter (JF) eran capturados desde allí por Júpiter. Hasta que Fernández (1980) da la primera explicación sobre la región transneptuniana como fuente de estos cometas, que había sido sugerida previamente por Edgeworth y Kuiper (Edgeworth 1943, Edgeworth 1949, Kuiper 1951).

Actualmente, en líneas generales, se considera que los cometas de largo periodo (mayor a 200 años), denominados LP por sus siglas en inglés "*Long Period*", provienen de la nube de Oort y los de corto periodo, denominados SP por sus siglas en inglés "*Short Period*", provienen del cinturón de Kuiper, aunque hay excepciones (por ejemplo, el cometa Halley que es de periodo corto proviene de la nube de Oort). También debemos mencionar que existen cometas capturados por nuestro Sistema



Figura 1.6: Representación gráfica de nuestro Sistema Solar (extraída de https://solarsystem.nasa.gov/resources).

Solar pero que no han sido originados en el mismo. Un caso actual en estudio es el cometa interestelar 2I/Borisov (Bolin y col. 2020).

# 1.6.2. Misiones Espaciales a Cometas

A diferencia de otros escenarios mencionados en secciones previas, los cometas son objetos que pertenecen a nuestro Sistema Solar, y ofrecen la posibilidad de estudiarlos de una forma más cercana. Sin embargo, es un poco desconsolador el número de misiones que han sido enviadas específicamente a estudiarlos. Aun si sumamos las que han tenido como un objetivo de segundo plano estudiar a estos objetos, el número sigue siendo menor a una decena. Siguiendo la descripción brindada por la ESA (https://www.esa.int/Science\_Exploration/Space\_Science) podemos dar un resumen de las misiones que con éxito han aportado al conocimiento a través de observaciones, y recolección y análisis de muestras *in-situ* de cometas.

 ICE ("International Cometary Explorer") Se lanzó en 1978 por la NASA. Logró el primer encuentro con un cometa. Una vez completada su misión original, fue reactivada y desviada para pasar por la cola del cometa 21P/Giacobini-Zinner en el año 1986, acercándose a 7860 km. El mismo año voló a una distancia de 31 millones de km del cometa Halley.

- Vega-1 y Vega-2 Lanzadas en 1984, estas dos sondas rusas dejaron un módulo de aterrizaje en Venus mientras se dirigían a investigar y fotografiar al cometa Halley. Vega-1 tuvo una máxima aproximación al cometa de 8890km y Vega-2 de 8030km.
- Sakigake y Suisei Lanzados en 1985, estas dos naves espaciales gemelas fueron las primeras misiones al espacio profundo lanzadas por Japón y tenían como propósito la exploración del cometa Halley en su viaje hacia el Sistema Solar interno. Suisei se aproximó a 151000km para observar sus interacciones con el viento solar. Sakigake se aproximó a 7 millones de km.
- Giotto Lanzada en 1985, Giotto fue la primera misión europea al espacio profundo, y obtuvo la imagen espacial más cercana a un cometa hasta el momento. Pasó a menos de 600km del núcleo del Halley y luego a menos de 200 km del cometa 26P/Grigg-Skjellerup (26P/G-S).
- Deep Space 1 Esta misión de la NASA se lanzó en 1998. Su misión principal era testear 12 nuevas tecnologías. En la misión extendida se encontró con el cometa Barrelly en el 2001 y obtuvo imágenes e información del mismo.
- Stardust Lanzada el 1999, esta misión de la NASA viajó en la nube de hielo y polvo que rodeaba al núcleo del cometa 81P/Wild-2, llegando a 240 km del núcleo. Allí, recolectó partículas de polvo y las devolvió a la Tierra en el 2006. En una misión extendida conocida como Stardust-NExT ("New Exploration of Tempel-1") la nave espacial visitó al cometa 9P/Tempel en el año 2011.
- CONTOUR ("COmet Nucleus TOUR") Lanzada por la NASA en 2002, pretendía mejorar nuestra comprensión sobre los núcleos cometarios, pero lamentablemente la misión falló.
- Dust Impact Esta misión de la NASA se lanzó en el año 2005. Consistió en dos naves, la principal realizó un vuelo sobre el cometa 9P/Tempel y grabó imágenes y datos; la segunda era el "impactor", cuyo objetivo al impactar con el cometa fue excavar escombros para que la nave principal pudiera analizar la composición de la superficie y del interior de un cometa. En una fase de misión extendida, fue reasignado como EPOXI, combinación de dos nuevas misiones: DIXI ("Deep Impact Extended Investigation Mission") y EPOCh ("Extrasolar Planet Observation and Characterization"). La fase EPOCh se llevó a cabo en el camino hacia el cometa 103P/Hartley-2 que pasó en el 2010. EPOXI observó al cometa Garradd (C/2009 PI) desde lejos en el año 2012, estudiando su órbita y actividad de superficie. En 2013 la nave también observó al cometa ISON (C/2012 S1).

• Rosetta La misión más ambiciosa a un cometa fue lanzada por la ESA en Marzo del 2004, llegando a su objetivo en Agosto del 2014: el cometa 67/P Churymov-Gerasimenko (67P/C-G de ahora en adelante). Rosetta siguió al cometa mientras este orbitaba alrededor del Sol manteniendo distancias de 10-30 km. Fue la primera misión de la historia que logró descender en un cometa, a través de su módulo Philae, el 12 de Noviembre de 2014, aunque su batería se agotó 2 días después. Este módulo transportó el instrumento DIM (por sus siglas en inglés "Dust Impact Monitor"), que grababa el impacto de los granos cometarios. Además, la misión contaba con instrumental que permitieron realizar mediciones *in-situ* de distintas propiedades del polvo cometario, entre los que podemos nombrar: MIDAS (por sus siglas en inglés "Micro-Imaging Dust Analysis System") enfocado en estudiar la morfología del polvo sub- $\mu$ m con un microscópio de fuerza atómica; COSIMA (por sus siglas en inglés "Cometary Secondary Ion Mass Analyser") cuyo objetivo era estudiar la morfología y la composición del polvo mediante un analizador de masas iónicas secundario; GIADA (por sus siglas en inglés "Grain Impact Analyser and Dust Accumulator") encargado de la medición de la velocidad y tamaño del polvo a partir de la señal de luz dispersada cuando éste cruzaba una cortina láser ("Grain Detection System", GDS) y de la estimación de su densidad a través de su momento obtenido cuando el polvo colisionaba con el "Sensor de Impacto" (IS); y OSIRIS (por sus siglas en inglés "Optical, Spectroscopic, and Infrared Remote Imaging System"): una cámara que observaba dentro de la coma interna partículas de polvo individuales (pero aún no resueltas), así como una señal difusa de un gran conjunto de partículas indistinguibles. Para su interpretación se complementó con el espectrómetro VIRTIS (por sus siglas en inglés "Visible and Infrared Thermal Imaging Spectrometer") que podía resolver espectralmente la coma difusa para inferir el color y la temperatura del polvo no resuelto. En el 2016 la misión Rosetta finalizó descendiendo sobre la superficie del cometa.

A través de las técnicas observacionales descriptas en la sección 1.2 y de estas misiones espaciales, podemos tener un mejor conocimiento de los cometas en general y de la composición, propiedades, trayectoria, etc. del polvo cometario que resumiremos en la próxima sección.

## 1.6.3. Estructura de los Cometas

La estructura general de un cometa consta básicamente de tres partes: núcleo, coma y colas. En la Figura 1.7 se muestra un esquema con las distintas partes de un cometa, que se abordarán individualmente a continuación.



**Figura 1.7:** Estructura de un cometa. Imagen extraída de http://www.setterfield.org/ Astronomy/CometsandMeteors.

### 1.6.3.1. Núcleo

El núcleo del cometa es la parte más difícil de estudiar. Como tiene una gran abundancia de hielos (principalmente agua en estado sólido) (Altwegg y col. 2019), estos subliman a medida que el cometa se aproxima al Sol formando una capa de vapor de agua, polvo y otros elementos, que forman un envoltorio brillante alrededor del núcleo, lo que torna difícil obtener datos del mismo desde la Tierra. Aquí describiremos algunas generalidades, aunque cada cometa tiene su marca única.

Los diámetros típicos del núcleo se han estimado entre 1-20 km. Son cuerpos irregulares y con cráteres. Se estima que exhiben una porosidad global de al menos 0.5. En algunos casos la porosidad de los agregados que conforman al núcleo pueden presentar porosidades de hasta 0.8-0.85 (Sierks y col. 2015, Greenberg y Hage 1990, Voshchinnikov y col. 2005).

Los componentes del núcleo pueden ser volátiles o refractorios. La composición de hielo del núcleo de algunos cometas analizados es aproximadamente 80 - 90% hielo de agua y un 10% de hielo de CO (con cantidades menores de otros hielos) (Greenberg y Grim 1986, Huebner y col. 2006). Dentro de la parte refractaria, los componentes varían de acuerdo al cometa, según Greenberg y Li (1999) los silicatos pueden representar hasta un 26% de la masa total del cometa. También entran aquí las partículas carbonosas y los compuestos orgánicos, en menor proporción (Greenberg y Grim 1986).

### Modelos de formación

Cualquier modelo de formación cometaria que intente explicar las características que presentan actualmente deben contemplar, al menos, la siguiente información sobre la nube protoplanetaria: composición, temperatura, presión, fraccionamiento y turbulencias.



**Figura 1.8:** Modelos de núcleos cometarios: (a) Bola de nieve sucia (b) Rubble pile primordial (c) Agregados fractales (d) Modelo de capas. Imagen extraída de Weissman y Lowry 2008.

Inicialmente los modelos más populares fueron los de Whipple (1950) y Lyttleton (1972): Para el llamado "Dirty snowball" (bola de nieve sucia) Whipple (1950) propone un que la estructura del núcleo cometario es un conglomerado de partículas de hielo y polvo (Figura 1.8(a)). Este modelo ha sido útil explicando muchas de las propiedades fundamentales de los cometas, como su habilidad para soportar varios pasajes cercanos alrededor del Sol. Sin embargo, el modelo fracasa al contemplar un núcleo rocoso cubierto por hielo, lo que supondría que toda la superficie del cometa estaría activa al mismo tiempo y tampoco explica por qué los núcleos se fracturan. Posteriormente, Lyttleton (1972) propuso el "Sand bank" (banco de arena); visualizando la estructura del cometa como un enjambre de polvo débilmente ligado gravitacionalmente. Su argumentación fue que las colisiones entre partículas, especialmente las del centro del cometa, durante su aproximación al Sol, permiten su pulverización, suministrando material más fino, que bajo la influencia de la radiación solar queda forzado a desplazarse, formando la estructura de cola que caracteriza a estos objetos. Sin embargo, este modelo presenta muchas dificultades; por ejemplo, el aumento de resolución en las observaciones muestra que la región

nuclear es mucho menor que el tamaño de la coma, sugiriendo una estructura mucho más compacta que la propuesta por Littleton. Además,tampoco explica cómo puede mantenerse la cohesión entre partículas al pasar cerca del Sol

Luego los modelos evolucionaron tratando de ajustarse a los descubrimientos; siendo quizás los más representativos el modelo de pila de escombros promordial ("*primor-dial rubble pile*") y el de agregados fractales ("*Fractal aggregates*"). En el primero de ellos Weissman (1986) asume que los cometas son aglomerados de pequeños conglomerados de hielo y polvo débilmente ligados (Figura 1.8(b)) y con algunas superficies de contacto logradas por fundición local (colisiones) proveniente de los inicios de formación del Sistema Solar, diferenciándose de la idea de un núcleo de no-volátiles que había adquirido una corteza de hielo con el tiempo. Sin embargo, no es una idea innovadora, sino que complementa al de Whipple incorporando la consideración de cuerpos irregulares en lugar de esféricos. Mientras que el segundo Donn y Hughes (1986) modela capas superficiales para el modelo de agregado de fractales (Figura 1.8(c)). D. W. Hughes y Williams (2000) modelan características superficiales de un cometa "fresco" asumiendo polvo y partículas de nieve para una cierta relación de masas polvo-gas.

Los modelos más recientes tienen la ventaja de contar con gran cantidad de información proveniente de las observaciones y las misiones espaciales, pudiendo mejorar aspectos donde los modelos pasados fallan. Aquí podemos mencionar, por ejemplo, al "Modelo de capas": Belton y col. (2018) modelan el núcleo como agregados fractales que colisionan con un núcleo en crecimiento, deformando su estructura macro en capas pero manteniendo la micro granular (Figura 1.8(d)). Modifican el núcleo de Weissman 1986 como una "*rubble pile*" con las ideas de crecimiento fractal con interpenetración durante las etapas tempranas de acumulación. Las etapas tardías de acumulación en pilas serán capas superpuestas con un núcleo fractal.

También es interesante mencionar los modelos propuestos por Blum (Blum y col. 2017, Lorek y col. 2018) que conjugan varios efectos que pueden influir en el colapso gravitatorio de los guijarros; como por ejemplo inestabilidades de flujo en el disco protoplanetario.

### Mantos

Entendemos por manto al material refractario que recubre al núcleo del cometa. Este manto de escombros consiste en restos de partículas refractarias que quedan en la superficie cuando son demasiado pesadas para ser arrastradas por el gas. Hay imágenes que muestran que, en algunos cometas, solo una fracción de la superficie pierde material (0, 01 - 20%). Las propiedades físicas del manto están pobremente determinadas, y su importancia radica en que el manto controla o modula, en parte, lo que se observa de los cometas. Se puede proponer un modelo que estime el tamaño



**Figura 1.9:** Modelo que estima la relación entre el radio mínimo de las partículas del manto y la distancia heliocéntrica del cometa. Se marcan las lineas correspondientes para la Tierra, Saturno y Júpiter como referencia. Imagen extraída de Fernandez 2006.

mínimo de partícula que no se acopla al gas en el proceso de sublimación. Este valor depende de la tasa de sublimación, y por lo tanto de la distancia perihélica del cometa. Para distancias de 5-6 UA este tamaño mínimo esta tabulado en 0,1  $\mu$ m. Podemos ver en la Figura 1.9 el tamaño mínimo de partícula que no se acoplara al gas, en función de la distancia heliocéntrica.

A partir de este análisis simplificado podríamos estimar cual debe ser el grosor mínimo del manto para impedir la sublimación. Este grosor debe competir con la "profundidad de la piel térmica diurna" (medida de la capacidad del material para transportar calor por conducción). Las estimaciones actuales arrojan como grosor mínimo un valor de 0.06m. No necesita ser muy grueso para impedir la producción de gas (Fernandez 2006). Esta es una forma de estimar la profundidad de donde están siendo removidas las partículas de polvo.

## <u>Sublimación</u>

El proceso físico básico que ocurre en el núcleo del cometa es la sublimación de hielos. Las fuentes de energía de este proceso son: la radiación solar, transiciones de las fases de hielo y decaimiento radiativo. Para hielo de agua la sublimación es relevante a una distancia de 3UA (que es aproximadamente donde se encuentra la linea de hielo) y el balance con la energía de radiación se alcanza a 1UA. Sin embargo, el polvo que cubre al cometa forma una barrera a la radiación solar, produciendo que la sublimación no ocurra a la misma distancia que si fuese un bloque de hielo puro. La Figura 1.10 muestra un modelo de las capas superficiales de un núcleo cometario, esta estratificación ilustra la complejidad de modelado demandada. Se observa la existencia de muchas etapas intermedias: prístino en el interior, hielo de agua amorfo y capas de gas congelado, gas que llena la capa de hielo amorfo poroso, manto de gas y polvo en el exterior. Además, estudiar el núcleo



Figura 1.10: Modelo de las capas presentes en un núcleo cometario (Prialnik 1997).

es un proceso que aumenta en complejidad si anexamos los efectos de rotación del mismo, jets y procesos de fragmentación.

Los modelos del proceso de sublimación predicen las proporciones relativas de abundancia de moléculas parentales (derivadas de las moléculas originales por distintos procesos físico-químicos). Por lo que, comprender los procesos de sublimación permite interpretar las proporciones de abundancias medidas. Estos modelos nos dicen qué sucede en el núcleo, pero también infieren en lo que observaremos en la coma. Lo que diferencia a los modelos, básicamente es el tipo de hielo que predomina en el núcleo (si es hielo amorfo, cristalino o una mezcla de ambos). En los modelos que utilizan hielo cristalino, consideran la evolución del núcleo consistente en una mezcla de hielos cristalinos de diferentes especies moleculares donde el calor penetra en el núcleo y los volátiles sublimados escapan por los poros. Cada especie de hielo reacciona de forma diferente cuando varia la distancia heliocéntrica. El núcleo evoluciona a través de sucesivos pasajes, lo que produce una diferenciación química en capas, dejando la composición original solo en las capas más bajas. En estos modelos el hielo de agua en la superficie (que sublimará a 152K) está cubierto de polvo. La máxima profundidad para sublimar está estimada entre 5 y 100 metros para cometas LP y JF, por lo que el interior puede no ser alcanzado nunca por la energía solar. Sin embargo, algunos autores esperan la presencia de hielo amorfo en los cometas por su origen (Mekler y Podolak 1994, Beer y col. 2006). El hielo amorfo se forma por debajo de los 136K, siendo este un proceso exotérmico e irreversible.



Figura 1.11: Principales procesos para una coma de un cometa tipo Halley a una distancia perihelica de 1UA (Fernandez 2006).

Para estar presente hoy en los cometas, el núcleo nunca debería superar la temperatura de cristalización. Las propiedades del núcleo al considerar hielo amorfo pueden cambiar significativamente (por ejemplo, la conducción de calor del hielo amorfo es cuatro veces menor que la del cristalino). Actualmente no está claro si el hielo de agua de los cometas esta contenido en forma amorfa o cristalina o la relación que hay entre ambos.

## 1.6.3.2. Coma

El gas y el polvo liberados en el proceso de sublimación de hielo originan características en el cometa de dimensiones asombrosas. La coma es una nube aproximadamente esférica que rodea al núcleo, compuesta de gas y partículas de polvo. El tamaño de las comas puede oscilar entre  $10^5 - 10^6$  km. En esta estructura, las moléculas sublimadas desde el núcleo se aceleran por expansión adiabática. La mayor aceleración del gas se produce dentro de los primeros kilómetros sobre la superficie. La densidad de este gas disminuye con la expansión. La temperatura varia desde 200K en las zonas más activas, hasta 100 K a distancias de  $10^2 - 10^3$  km de la superficie (sin embargo, hay mecanismos que podrían llevar la temperatura hasta 20K).

En la Figura 1.11 se muestran curvas teóricas para los procesos ocurridos en la coma de un cometa tipo Halley, a una distancia perihélica aproximada de 1UA. Para describir el comportamiento de la coma se debe optar por una descripción matemática que adicione los comportamientos en cada una de las cuatro regiones propuestas para la coma: (1) Sobre la superficie (aproximación cinética de Boltzmann para el gas), (2) la región dominada por colisiones (ecuaciones hidrodinámicas para las componentes de gas y polvo),(3) la región de transición (flujo viscoso, gas cinético y/o hidrodinámico) y (4) la región exterior (flujo de gas libre, las moléculas y polvo se mueven en el campo gravitatorio solar con presión de radiación en trayectorias keplerianas).

Nuestro objetivo es poder estudiar el comportamiento de estos agregados de polvo que se desprenden del núcleo y que interaccionan en la región de la coma interna.

### 1.6.3.3. Cola

Los cometas presentan dos colas, una de polvo y una de plasma. La cola de plasma es larga y recta, en general, y muestra una fina estructura que cambia permanentemente. Tienen un ancho típico de  $10^5 - 10^6$  km y sus extremas longitudes en el óptico son de decenas de UA. Está compuesta por plasma ionizado, provenientes de la ionización de las moléculas neutras de la coma. Tienen mucha interacción con el viento solar, que es el causante de la ionización mediante colisiones con iones de H y He principalmente. La cola de polvo es una estructura curvada y más plana que la de plasma, y puede alcanzar longitudes increíbles de  $10^7$  km. Las partículas de polvo, una vez desacopladas de la coma de gas, son libres para orbitar alrededor del Sol. Sin embargo, su orbita real queda determinada por la suma de varios efectos como la gravedad solar, la presión de radiación, la presencia del núcleo cometario, etc. pudiendo incluso producir las lluvias de meteoros si dicha órbita se cruza con la tierra; como por ejemplo las Oriónidas y las Eta Acuáridas, ambas asociadas al cometa 1P/Halley.

Además de estas partes fundamentales, un cometa activo esta sumergido en una nube gaseosa que se extiende más allá de la coma, llamada corona (o nube) de Hidrógeno. Su composición de átomos de H proviene de la disociación de  $H_2O$  y OH. El radio promedio de esta estructura es de  $8 \times 10^6$  km.

## 1.6.4. Granos de Polvo en los Cometas

Las partículas de polvo son arrastradas desde el núcleo hacia la coma por los gases sublimados. Mientras que las moléculas gaseosas rápidamente se disocian y subliman fuera del núcleo, los granos de polvo permanecen estables bajo los efectos de la radiación solar. Incluso cuando son calentados a cientos de grados Kelvin, continúan siendo estables química y morfológicamente, por lo que preservan información sobre las condiciones en que fueron formados (medio interestelar o nebulosa planetaria). Por ello se cree que los cometas conservan partículas casi pristinas, proveyendo una muestra única de las propiedades de la nebulosa solar temprana. Las propiedades microscópicas de este polvo tienen un rol crucial para comprender la agregación de partículas durante la formación del sistema solar (Bentley y col. 2016). Como afirmación de estas hipótesis, COSIMA encontró una composición fuertemente condrítica (en concordancia con mediciones anteriores para Halley y Wild-2) para el 67P/C-G, presentando una relación C/Si (Carbono/Sílice) = 5.5 (+1.4,-1.2), cercana a la abundancia protosolar (7.19 ± 0.83). Mientras que otros candidatos que pueden guardar información sobre estas etapas tempranas de nuestro Sistema Solar, los meteoritos CI, tienen una relación C/Si = 0.76 ± 0.1 (A. C. Levasseur-Regourd y col. 2018).

Los granos de polvo también pueden ser vehículo para el transporte de cantidades significativas de elementos condensables provenientes desde vientos circumestelares de estrellas evolucionadas, novas, supernovas; hasta nubes de estrellas jóvenes y sistemas planetarios. Más aún, si alguna fracción de estos granos sobrevive intacta, el estudio de sus propiedades físicas y mineralógicas pueden arrojar luz en la nucleosíntesis y evolución estelar (A. Li y Greenberg 1998).

Veremos a continuación cómo los métodos de la sección 1.2, utilizados muchas veces en conjunto o con apoyo de los datos derivados de las misiones detalladas en la sección 1.6.2 permiten obtener información concreta sobre los agregados de polvo cometarios. Se intentará dividir a grandes rasgos la información pertinente a la estructura, a la composición y al tamaño/masa de este polvo cometario, aunque muchos estudios analizan de forma conjunta estas propiedades, y en tales casos no será posible tal separación.

### 1.6.4.1. Estructura y porosidad

Ya hace una década se ha demostrado que el polvo cometario se corresponde con agregados grandes compuestos de granos más pequeños (escala  $\mu$ m y sub- $\mu$ m), mediante experimentos en laboratorios que reproducen bien las curvas de fase polarimétricas (Lasue y col. 2009 y sus referencias allí). También en esa época Kolokolova y Kimura (2010) afirmaban que considerar al polvo cometario como agregados porosos compuestos por granos sub- $\mu$ m permite reproducir características observacionales exhibidas por todos los cometas: albedo geométrico bajo (~ 4 - 5 %); para amplio rango de  $\lambda$  la dependencia angular de la polarización lineal muestra: (i) una rama negativa de polarización para  $\alpha \leq 20^{\circ}$ , con un  $P_{min} \sim -2\%$ , (ii) una rama de polarización positiva con forma de campana con un máximo bajo de  $P_{max} \sim 15 - 25\%$ a un  $\alpha \sim 90 - 100^{\circ}$ , (iii) una pendiente  $h \simeq 0,2 - 0,4\%/^{\circ}$ ; generalmente un color rojo o neutro para un amplio rango de  $\lambda$  que no cambia con  $\alpha$ ; y una polarización que a un  $\alpha$  dado por encima de 30° usualmente aumenta con  $\lambda$  (color polarimétrico rojo). El mejor ajuste que obtienen estima un tamaño de granos individuales de  $\sim 0.2 \mu m$ , aunque remarcan que su modelo computacional debería contemplar agregados de miles de monómeros para que los valores obtenidos sean semejantes a los observados. Las posteriores misiones a cometas parecen confirmar esta idea. La misión Stardust aportó las únicas muestras de origen cometario certero disponibles actualmente en la Tierra. Capturó más de 10,000 partículas de polvo entre 1 y 100  $\mu m$  del cometa 81P/Wild-2. Aunque todas las partículas fueron alteradas por la captura, principalmente por el calentamiento a temperaturas superiores al punto de fusión de la sílice, las partículas mayores a  $1\mu$ m pudieron conservarse razonablemente bien debido a su mayor inercia térmica, mientras que los granos menores pudieron sobrevivir sólo si estaban protegidos por partículas más grandes (Güttler y col. 2019). Diferente morfología de los cráteres permite estimar dos posibles estructuras para los proyectiles: (a) agregados densos y de  $10 - 60\mu m$  de largo, de composición no necesariamente homogénea, siendo compatible con la propuesta de una partícula de silicato compacta de aproximadamente  $3000 \text{kg/m}^3$  acompañada de una mezcla de material de grano fino; y (b) aglomerados porosos con baja densidad, forma compleja y composición diversa. El modelo estima porosidades alrededor del 75% y densidades inferiores a 1000 kg/m<sup>3</sup>, con tamaños de agregados de hasta 100  $\mu$ m, cuyos componentes están en la escala del micrómetro y parecen consistir, de nuevo, en partículas aún más pequeñas (del orden de decenas de nanómetros).

Bentley y col. (2016) analizan la información aportada por MIDAS, de la misión Rosetta, que revela la estructura con resolución nanométrica de partículas de la superficie con tamaños de 1 a 50  $\mu$ m, concluyendo en que estas partículas pueden considerarse como un aglomerado que consiste en subunidades más pequeñas (de tamaños 0.58 - 2.57  $\mu$ m), que nuevamente podrían ser de estructura aglomerada, conteniendo partículas menores a 500nm. Las partículas más pequeñas detectadas estuvieron entre 1-10 $\mu$ m, fueron menos numerosas que las grandes y presentaron más resistencia a la fragmentación. Bentley y col. (2016) afirman que la aglomeración jerárquica (agregados de agregados menores) parece ser el proceso dominante de crecimiento en discos protoplanetarios y podría producir que los agregados se peguen mas fácilmente a mayores masas y velocidades que las partículas de polvo homogéneas. Este tipo de estructuras han sido detectadas también con otros instrumentos y en otros cometas, indicando que podría ser una clasificación general para los agregados de polvo cometario.

Recientemente Güttler y col. (2019) realizaron una síntesis actual de la morfología de los granos cometarios, utilizando resultados basados en observaciones *in-situ* para el cometa 67P/C-G. Propone 3 grupos morfológicos, cuyo esquema se exhibe en la Figura 1.12. El grupo sólido describe partículas con una porosidad < 10% que están consolidadas y exhiben una alta resistencia (similar a la roca). Identificamos dos estructuras que pertenecen a este grupo: por un lado, los granos irregulares y los monómeros esféricos (Utilizados en experimentos y simulaciones, en la natura-



**Figura 1.12:** Estructuras posibles de partículas y agregados de polvo cometario, divididas en tres grupos principales: grupo sólido, grupo esponjoso y grupo poroso. Los colores indican que la composición puede variar. Imagen extraída de Güttler y col. (2019).

leza no son perfectamente esféricos sino que tienen superficies rugosas); y por otro los agregados densos. La segunda clase, el grupo esponjoso (o "fluffy" en inglés), describe aglomerados que tienen una porosidad muy alta (> 95 %) y muestran una resistencia muy baja (rango de Pa). Este tipo de aglomerados son muy conocidos en la literatura, en particular en el contexto de la formación planetaria temprana (Blum 2006). Finalmente, el grupo poroso recoge el rango restante con agregados de porosidades entre 10 y 95 %. Estos se consideran aglomerados ligados libremente con una resistencia intermedia pero bastante baja, típicamente del orden de 1 Pa a 100 kPa. En la Figura 1.12 se distinguen dos tipos de grupos porosos: los aglomerados y los grupos de aglomerados con huecos en el medio; el componente más chico en ambos casos es un grano (o monómero). Sin embargo, Güttler y col. (2019) remarcan que esta clasificación no siempre es clara y pueden presentarse estructuras que combinen propiedades de más de un grupo.

Si nos focalizamos en la porosidad, es una cantidad que se ha intentado estimar hace décadas. Greenberg y Hage (1990) propusieron que los granos de polvo de las comas cometarias presentaban porosidades aún mayores que los agregados que componen al núcleo, pudiendo llegar a valores de hasta 0.975. Kolokolova y col. (2007) plantean que la porosidad de los agregados se relaciona con el tipo de cometa al que pertenecen, donde los cometas SP tienden a tener agregados con baja porosidad y los LP tienen agregados altamente porosos. Actualmente, los datos *in-situ* nos han permitido un análisis mucho más profundo de los agregados, aunque la porosidad de los agregados es variable y también depende fuertemente del modelo que se utilice. Hornung y col. (2016) analizaron los agregados de polvo recolectados por COSIMA. La Figura 1.13 exhibe algunos de ellos, donde podemos ver diferentes



**Figura 1.13:** Se muestran algunos ejemplos con respectivo conjunto de diámetro del agregado y tamaño de los componentes del polvo recolectado in-situ por COSIMA de la coma del cometa 67P: (7) 207  $\mu$ m, 15-40  $\mu$ m, (8) 179  $\mu$ m, 15-30  $\mu$ m, (9) 120 $\mu$ m, 20 $\mu$ m, (10) 214 $\mu$ m, 15-40  $\mu$ m. Imagen extraída de Hornung y col. (2016). Todas las barras de referencia tienen una longitud de 100  $\mu$ m.

estructuras y en particular, el agregado referido como (9) muestra claramente una estructura encadenada. Estas subestructuras de aglomerados no fragmentados presentaron porosidades en el rango de 40 - 60% (para agregados de tamaño 60-300 $\mu$ m). Langevin y col. (2017) también analizaron aglomerados recolectados por CO-SIMA, encontrando un factor de reflectancia sorprendentemente alto, en el rango de 3-22%, siendo que estos agregados estaban libres de hielo. Estiman que la porosidad está en el rango del 50 - 90%. Otra estimación de porosidad utilizando los datos obtenidos *in-situ* para el 67P/C-G, llevó a tabular este valor en 70% según Podolak y col. (2016) y en 90% según Flandes y col. (2018). Fulle y col. (2017) estudiaron las mediciones de GIADA y dedujeron que la porosidad del polvo es  $0,41 \pm 0,08$ . Sus tamaños abarcan todo el rango de detección de GIADA de aproximadamente 0.15 a 0.8 mm. Con esto, la mayoría del polvo detectado por GIADA se describe como aglomerados porosos (grupo poroso) de la Figura 1.12.

En conclusión, parece que hay consenso en la presencia de agregados jerárquicos (compuestos por agrupaciones de partículas menores) como estructura dominante en el polvo cometario. Los tamaños de las partículas que los conforman pertenecen a la escala  $\mu$ m, o incluso podrían ser menores. Si bien diferentes métodos obtienen diferentes valores de porosidades, e incluso para un mismo cometa se observan agregados con diferentes porosidades, podemos concluir en que la mayoría son muy porosos (rango 40-95%) y aparentemente cuanto mayores son los agregados menor es la porosidad que exhiben.

### 1.6.4.2. Composición

La composición y abundancia de elementos y minerales en los granos de polvo depende del cometa en estudio, aunque en la mayoría se han evidenciado silicatos, amoníaco, metano, hierro, magnesio y sodio. Exploraciones y análisis similares en varios cometas, como en el cometa Halley, han servido para verificar la presencia de poblaciones de granos compuestos de C, H, O y N (compuestos CHON) (Fomenkova y col. 1994).

Los silicatos comprenden una parte importante del material no volátil en los cometas (Hanner 1999). Una forma de medirlo a partir de observaciones terrestres ha sido relacionarlo con el albedo, ya que un albedo alto indica una alta abundancia de silicatos, sin embargo, un albedo promedio bajo no es confiable para estimar esta abundancia ya que puede indicar que los silicatos presentes están bien mezclados con el material absorbente, ya que sólo una pequeña fracción de material absorbente finamente dispersado alcanza para decrecer el albedo de las partículas de sílica considerablemente (Hanner 2003). Las partículas de silicato producen una característica espectral cerca de las  $10\mu$ m debido a las vibraciones de estiramiento en los enlaces Si-O. Las vibraciones adicionales del modo de flexión ocurren entre 16 y 35  $\mu$ m. Las longitudes de onda y las formas de estas características son diagnósticas de la composición mineral. La marca de  $10\mu$ m se encuentra dentro de la "ventana" atmosférica de 8-13 $\mu$ m que permite observaciones desde tierra, por lo tanto otra forma de detectar silicatos es buscar esta marca en los espectros cometarios. Este pico es más fuerte en los cometas activos.

Afortunadamente, otras observaciones y técnicas han contribuido a evidenciar la presencia de los silicatos. Mediciones con instrumentos analizadores de impactos de partículas a bordo de las misiones espaciales Giotto, Vega 1 y Vega 2, indicaron que la mayoría de los granos analizados eran una mezcla de silicatos y compuestos orgánicos (Mumma y col. 1993). En otro estudio, Hilchenbach y col. (2016) estimaron a partir de la misión Stardust para el 81P/Wild-2 las siguientes abundancias: 56%silicatos + sulfuros; 20 % silicatos Mg, Fe;  $\sim 13$  % tipo FeS,  $\sim 9$  % otros. De esta misma misión A. C. Levasseur-Regourd y col. (2018) concluyen que la mitad de silicatos del Wild-2 son cristalinos, aunque los silicatos interestelares se deducen desde las observaciones amorfos. Utilizando el espectrómetro de imágenes del telescopio espacial Spitzer, que caracterizó la eyecta del Tempel-1 producida por Deep Impact, el espectro mejor ajustado indica la siguiente composición: 18.2% forsterita, 10%silica amorfa, 18.8 % sulfatos-Mg-Fe, 8.2 % arcilla, 5.9 % ortoenstatita, 5 % favalita, 4.7 % compuestos carbonaceos, 4 % carbono amorfo, etc. También observaciones en IR del cometa Hale-Bopp indican que hay silicatos amorfos y cristalinos (Lasue y col. 2009 y sus referencias allí). Para el núcleo del 67P/C-G se estimó un  $22\pm 2\%$ de silicatos (A. C. Levasseur-Regourd y col. 2018 y sus referencias).



**Figura 1.14:** Polarización en el filtro rojo de banda estrecha (narrow-band red filter) en función del ángulo de fase para: (×) cometas con un  $P_{max}$  bajo; (+) cometas con  $P_{max}$  más alto; ( $\circ$ ) Cometa C/1995 O1 Hale-Bopp; ( $\bullet$ ) Cometa C/1999 S4 LINEAR en disrupción. Imagen extraída de Kolokolova y col. 2004.

Por último, Kolokolova y col. (2007) y Kolokolova y col. (2004) consideran al polvo cometario como agregados de partículas esféricas en escala sub- $\mu$ m, mediante simulaciones y análisis estadísticos, reuniendo polarimetría, emisión térmica y características orbitales, suponen que diferentes tamaños de agregados se ubican a diferentes distancias del núcleo (las partículas más compactas permanecen cerca del núcleo y las más porosas son arrastradas hacia la coma). Notan que, si bien la curva de fase de comas cometarias es suave y similar a la de otros cuerpos del Sistema Solar sin atmósfera, hay una dispersión significativa para  $\alpha > 30^{\circ} - 40^{\circ}$ . Una vez que los datos se separan en diferentes rangos de  $\lambda$ , la dispersión de la rama positiva se reduce, y las diferencias observadas en las curvas  $P_{\lambda}(\alpha)$  sugieren una división, como se muestra en la Figura 1.14, de donde se sugieren dos principales tipos de cometas: (1) Tipo 1: caracterizado por una alta relación gas/polvo, baja polarización (menor al 15%) y débil emisión  $10\mu m$  de silicatos. Los consideran cometas formados por agregados compactos y (2) Tipo 2: baja relación gas/polvo, alta polarización (mayor al 20%) y fuerte marca de silicatos en su espectro. Los consideran cometas formados por agregados porosos. También incluyen la curva para el cometa Hale-Bopp, cuya polarización parece ser notablemente mayor y para el cometa LINEAR durante su disrupción cuando pasó cerca de su perihelio, indicando que, si bien no se observan cambios en estas curvas cuando varía  $R_{\rm h}$ , eventos como explosiones, jets o disrupciones en los cometas sí pueden producir variaciones notables. Según este estudio la alta polarización de agregados porosos en cometas de baja relación gas polvo es un indicio de alta abundancia de partículas pequeñas compuestas de silicatos.

Podemos concluir que pese a la gran diversidad de compuestos que se evidencian en el polvo cometario, los silicatos son un grupo importante presente en todos los cometas que se han analizado.

### 1.6.4.3. Tamaños y masas

Se describirán brevemente las formas usuales de presentar las cuantificaciones de tamaño y masa del polvo dentro de las ciencias planetarias, para introducir la notación que se utilizará posteriormente. Luego se aplicará al polvo cometario. Debemos remarcar que muchos trabajos se consideran agregados compactos, y por lo tanto no se hace distinción entre las dependencias para masas o tamaños.

### Distribución de tamaños

Se define el número de agregados dN con radios entre R y (R + dR) mediante la distribución diferencial de tamaños que se encuentra habitualmente en la literatura:

$$dN = N(R)dR = C_R R^s dR, (1.6)$$

donde s es el exponente de la distribución diferencial de tamaños y  $C_R$  es una constante. La distribución acumulada de tamaños es el número de partículas con radios mayores o iguales al radio R, y se obtiene integrando la distribución diferencial (ecuación 1.6) entre R e infinito:

$$dN(>R) = CR^{(s+1)}, (1.7)$$

donde  $C = C_R / - (s + 1)$ . Notar que el numero de partículas siempre tiene que decrecer con el tamaño de las partículas. Si por ejemplo en la ecuación 1.6, s vale -3, el exponente de la distribución acumulada de tamaños vale -2. Algunos autores (Colwell y Esposito 1993) definen s con el signo positivo, por lo tanto en esos casos la distribución se expresa

$$dN = N(R)dR = C_R R^{-s} dR. aga{1.8}$$

En la ecuación 1.8 siguiendo el ejemplo anterior, si s vale 3, el exponente de la distribución acumulada de tamaños vale (s-1) = 2. Entonces la distribución acumulada se expresa en esos casos (Colwell y Esposito 1993):

$$dN(>R) = CR^{-(s-1)}, (1.9)$$

 $\operatorname{con} C = C_R / (s - 1).$ 

### Distribución de masas

La relación entre la distribución diferencial de tamaños y la correspondiente de masas con  $m = (4/3)\pi\rho R^3$  asumiendo  $\rho = \text{cte} = \text{densidad media de la partícula es:}$ 

$$N(R)dR = C_R R^s dR = N(m)dm = C_m m^q dm, (1.10)$$

$$C_R R^s dR = C_R ((3m/(4\pi\rho))^{1/3})^s \frac{dm}{4\pi\rho} (3m/(4\pi\rho))^{-2/3}, \qquad (1.11)$$

donde se obtiene  $C_m$  en términos de  $C_R$  y la relación q = (s - 2)/3. Si s vale -3, q vale (-5/3 = -1,66) y el exponente de la distribución acumulada de masa vale (q + 1) = -0,66.

Por otra parte, si se tiene un objeto con  $\phi$  constante formado de sílice (densidad 3 gr cm<sup>-3</sup>), entonces  $\rho = 3$  gr cm<sup>-3</sup>  $\phi$ .

### Aplicaciones al polvo cometario

Los diferentes procesos físicos que ocurren en el cometa se verán fuertemente afectados por la distribución de tamaños de los granos. Por ejemplo, si la población de partículas emitidas por el cometa está dominada por los granos más pequeños su movimiento será afectado por la presión de radiación, los granos se alejarán rápidamente del núcleo cometario siguiendo travectorias hiperbólicas y pasarán a integrar el medio interplanetario. En el caso de que la población esté dominada por partículas grandes, su movimiento no se verá tan afectado por la presión de radiación y permanecerán más tiempo en las inmediaciones del núcleo formando parte de la coma. Esta segregación por tamaños afecta la tasa de pérdida de masa del cometa (Sekanina y Schuster 1978) y modifica la posibilidad de que los granos más pequeños se carguen electrostáticamente e interactúen con el viento solar o incluso con la misma ionósfera del cometa (Vigren y col. 2015). De todos modos, algunos estudios recientes también indican que la distribución de tamaños podría ser responsable de las propiedades polarimétricas observadas en la coma interna de algunos cometas, independientemente de la estructura y composición de los granos (Zubko y col. 2013). Entonces poder estimar el tamaño que poseen los agregados de polvo (y sus granos componentes) es crucial.

Una forma de estimar el tamaño de los granos de polvo presentes en la coma es utilizar la emisión térmica. En la Figura 1.15 podemos ver como ejemplo el ajuste del cometa Hale-Bopp donde la distribución de energía espectral, por sus siglas en ingles SED, se ajusta por el cuerpo negro a 5800K y luego otra a 475K debida a la emisión térmica del granos pequeños (de Carbono en este caso). La emisión de silicatos centrada alrededor de  $10\mu$ m es notoria. En esta imagen, las siglas HIFOGS hacen



**Figura 1.15:** SED del cometa Hale-Bopp. El ajuste es la suma de la componente de cuerpo negro a 5800K debida a la radiación solar y la componte del cuerpo negro a 475K debido a la emisión térmica de pequeños granos de carbón. Imagen fueron extraída de Williams y col. 1997.

referencia al instrumento de observación de la NASA "High-efficiency Faint Object Grating Spectrometer". Cuando el Halle-Bopp se observó estaba a una distancia  $R_{\rm h} = 1, 1$  UA, por lo que  $T_{\rm BB} = 259$ K (según ecuación 1.2). Entonces, vemos en la Figura 1.15 que la temperatura de los granos (475K) es mayor que la temperatura de equilibrio de un cuerpo negro a la misma distancia heliocéntrica. Los granos presentes en la coma del Hale-Bopp deberían ser muy pequeños.

Gehrz y Ney (1992) grafican en la Figura 1.16 los valores de  $T_{\rm gr}$  (ver ecuación 1.4) para varios cometas observados, donde la linea representa a la ecuación 1.2. Así, para el cometa Halley, el grano "superheat" podría sugerir, por ejemplo, un radio pequeño de entre  $0, 5\mu$ m-1 $\mu$ m para los granos ópticamente importantes de la coma (a una temperatura de 475K solo partículas con radios mucho mayores a 12 $\mu$ m son eficientes en la emisión, según la ley de Wien). Por otro lado, los cometas KBM (Kobayashi-Berger-Milon, C/1975 N1) y Austin (C/1984 N1) tienen  $T_{\rm gr} \simeq T_{\rm BB}$ , sugiriendo que los granos que dominan el óptico tienen tamaños mayores a algunos micrones. Esta interpretación ha sido modificada por A. Li y Greenberg (1998), quienes argumentan que los agregados porosos tiene un coeficiente de absorción mucho mayor por unidad de masa que las partículas compactas. Más aún, interpretan el espectro del Halle-Bopp como el producido por agregados porosos con tamaños típicos de algunos micrones, compuestos por subunidades de mantos orgánicos fuertemente absortivas sobre núcleos de silicatos amorfos, justificando que se obtiene el mismo resultado que Gehrz y Ney (1992) con esta consideración.



Figura 1.16: T versus distancia heliocéntrica estimado para varios cometas. Imagen extraída de Gehrz y Ney 1992.

Güttler y col. 2019 y las referencias allí citadas analizan con la información obtenida de VIRTIS, la relación  $T_{\rm gr}/T_{\rm BB}$  de la ecuación 1.4, para el cometa 67P/C-G y deducen que los valores de  $T_{\rm gr}/T_{\rm BB}$  se deben a la presencia de partículas submicrométricas hechas de material absorbente o, alternativamente, a aglomerados formados por subaglomerados estructurados jerárquicamente con unidades submicrométricas. Las propiedades térmicas y de dispersión de la coma de 67P/C-G concuerdan aproximadamente con la media de los valores medidos para cometas moderadamente activos, lo que demuestra que el 67P/C-G no es atípico en sus propiedades de polvo. El tamaño de partícula que permite explicar el valor de  $T_{\rm gr}/T_{\rm BB}$  antes y durante la actividad del cometa es de  $0,1\mu$ m, y se cree que estas son partículas individuales. Debido a que las partículas de tamaño nanométrico no son usuales en general en la coma, Bockelée-Morvan y col. (2017) sugirieron que se producen por desintegración de aglomerados poco unidos. Estas partículas más pequeñas pertenecerían al grupo sólido de la Figura 1.12.

Lasue y col. (2009) aplican un modelo de dispersión de luz producido por agregados compuestos de sílica y material orgánico en proporción 40 - 67 % y 30 - 60 %respectivamente. Utilizando como base los datos de la Figura 1.17, que resumen la información obtenida por diferentes fuentes citadas en la misma. Propone una distribución de tamaño en leyes de potencia con exponente *s* (ecuación 1.6), radio mínimo y máximo del agregado  $R_{\min}$  y  $R_{\max}$  ( $a_{\min}$  y  $a_{\max}$  en la Figura 1.17), respectivamente. Concluye en los siguientes valores de ajuste según el cometa en estudio: (a) Cometa Hale-Bopp:  $R_{\min} = 0.3\mu m$ ,  $R_{\max} = 40\mu m$ , s = -3. (b) Cometa Halley  $R_{\min} = 0.26\mu m$ ,  $R_{\max} = 38\mu m$ , s = -2.8.

Bockelée-Morvan y col. (2017) modelan la emisión IR de 2–5  $\mu$ m de una colección de partículas porosas y fractales con las teorías de Mie y Rayleigh-Gan-Debye, para explicar el color, la emisión térmica y albedo medido en los espectros. El mejor ajuste para el coma inactivo se logró con un índice de la distribución diferencial

Comet	a <sub>min</sub>	a <sub>max</sub>	Bulk density (kg m <sup>-3</sup> )	S	Method used	Reference
IP/Halley	~0.06 μm ~1.2 μm	~1.2 μm ~12 μm	1000 1000	[-2.5; -1.5] -3.4	Impacts (VeGa)	Mazets et al. (1986)
IP/Halley		~2 µm ~2 mm	1000	$\sim -3$ [-4.5; -4]	Coma photometry	Fulle et al. (1988)
IP/Halley	~4 μm ~120 μm	$\sim$ 120 $\mu$ m $\sim$ 4 mm	[1000; 2500]	$-4.1 \pm 0.45$ $-2.65 \pm 0.6$	Impacts (Giotto)	McDonnell et al. (1991)
IP/Halley	~26 µm	$\sim 26 \text{ mm}$	[50; 500]	$-2.6 \pm 0.02$	Impacts and light scattering (Giotto)	Fulle et al. (2000)
C/1995 Ol Hale-Bopp	$\sim 2 \mu m$	$\sim 200 \ \mu m$	1000	$-3.6 \pm 0.1$	Coma photometry	Fulle et al. (1998)
C/1995 Ol Hale-Bopp	0.2 µm	[2; 200] µm	[2500; 3300]	[-3.7; -3.4]	Infrared spectra	Harker et al. (2002)
C/1995 Ol Hale-Bopp	[0.16; 0.30] µm	~20 µm		-3.15	Spectrophotometry	Kolokolova et al. (2003)
C/1995 Ol Hale-Bopp	~0.2 µm	~12 µm	[1850; 3270]	$-3.3 \pm 0.3$ at 3.9 AU $-3.4 \pm 0.3$ at 2.9 AU $-3.6 \pm 0.3$ at 2.8 AU	Infrared spectra (ISO)	Moreno et al. (2003)
C/1995 Ol Hale-Bopp	~0.02 µm	~200 µm		-3.48	Infrared spectra (ISO) polarimetry	Min et al. (2005)
C/1995 Ol Hale-Bopp	$\sim$ 0.06–0.4 $\mu m$	$\sim 40~\mu m$	[300; 3000]	$-3\pm0.1$	Multi-wavelength polarimetry	Lasue and Levasseur- Regourd (2006)
D/1993 F2 Shoemaker– Levy 9	20 µm	6 mm	1000	$-2.3\pm0.1$	Coma photometry	Hahn and Rettig (2000)
8 IP/Wild 2	15 µm	1 mm	[100; 3500]	-3.55[-4.3; -1.9]	Impacts (Stardust)	Green et al. (2004)
8 IP/Wild 2	$\sim$ 0.04 $\mu m$	$\sim 2 \ mm$	2400	[-1.76; -2.72]	Sample return analysis (Stardust)	Hörz et al. (2006) Burchell et al. (2008)
9P/Tempel 1	0.2 µm	200 µm	3780	$-3.1\pm0.3\ [2.8;3.3]$	Coma photometry	Jorda et al. (2007)

**Figura 1.17:** Características del polvo cometario deducida de observaciones *in-situ* y lejanas para diferentes cometas. Tabla extraída de Lasue y col. 2009.

de tamaños en el rango s = (-3; -2, 5), este índice es consistente con el índice de potencia determinado por otros instrumentos (Rotundi y col. 2015, Fulle y col. 2016).

Hanner (2003) encuentra que ciertas características observacionales pueden deberse a propiedades de composición o también al factor de tamaño  $(X = 2\pi r/\lambda)$  de agregados regulares no esféricos de tamaño promedio r. Comparando con observaciones del Hale-Bopp y del Halley, sugiere posibles conclusiones: (1) mayor P: granos más pequeños ( $X \leq 2$ ) y/o granos más absorbentes ( $R_{\text{grain}} \sim \lambda$ ); (2) Color polarimétrico más enrrojecido: granos más pequeños  $(X \leq 2)$  y/o granos de sílica  $(R_{\rm grain} \sim \lambda);$  (3) Mayor albedo: granos más pequeños,  $R_{\rm grain} \sim 0.2 \mu {\rm m}$  y/o silicatos más "limpios"; (4) Continuo más fuerte: granos más pequeños y/o silicatos más "limpios" y/o alta relación polvo/gas; (5) Marca de silicato más marcada: granos más pequeños,  $R_{\text{grain}} \leq 1 \mu \text{m y/o}$  alta relación silicatos/C y/o silicatos calientes; (6) Temperatura de color más alta: granos absorbentes más pequeños,  $R_{\text{grain}} \leq 1 \mu \text{m}$ ; (7) Flujo 3-5  $\mu$ m más alto: granos absorbentes más pequeños,  $R_{\rm grain} \leq 0.5 \mu$ m. Por lo tanto, composición y tamaño parecen propiedades interrelacionadas desde esta perspectiva. En esta misma línea Kolokolova y col. (2003) realiza un análisis sobre el color polarimétrico y lo aplica al cometa Hale-Bopp. Se concluye que el color de un agregado de partículas con una amplia distribución de tamaños no depende de la forma o de la estructura que posean las partículas, sino de la composición y distribución de tamaño de las mismas, dada en la forma  $n(r) \sim r^{-s} dr$  (ecuación 1.8), donde n es el número de agregados de cierto tamaño, r es el radio del agregado. Encuentran para el polvo a una distancia de 40000km del núcleo una distribución de tamaño con las siguientes características: radio mínimo  $R_{\min} = 0.085 - 0.18 \mu m;$ radio máximo  $R_{\text{max}} = 17 - 35$  cm; s = 3,15. Este exponente indica que el cometa Hale-Bopp contiene partículas más chicas en comparación con otros cometas, por

ejemplo, citan análisis previos realizados para otros cometas, donde utilizando la misma técnica encuentran s = 2,75 - 2,95 para el cometa C1996 Q1 P/Tabur y un chequeo *in-situ* para el Halley da s = 2,75. Posteriormente, Kolokolova y Kimura (2010) incluye en su modelo una distribución de tamaño en ley de potencia con un exponente s = 3, y granos de sílica y material orgánico. Con este modelo consigue explicar las características polarimétricas, de albedo y de color observadas.

Botet y col. (2020) realizan observaciones fotométricas desde telescopio Himalaya Chandra usando filtros Bessel R e I para estimar el color del 67P/C-G. Una disminución en el índice de color (ver sección 1.2.3) indica un aumento en las partículas chicas y no tiene relación con la porosidad. Concluyen que el enrojecimiento a lo largo de la coma se debe principalmente a diferentes distribuciones de tamaño locales, lo que lleva a proponer que no hay una única ley de potencias para todos los tamaños de agregados observados aquí.



**Figura 1.18:** Albedo vs. ángulo de dispersión para Hale-Bopp (•) y otros 11 cometas brillantes ( $\Box$ ). La curva resulta de experimentos en laboratorios para partículas no esféricas. Imagen extraída de Mason y col. 2001.

Para una masa total de granos establecida, los granos pequeños dispersan luz más eficientemente que los grandes y por ello tienen un valor de albedo mayor. Entonces un albedo alto puede estar relacionado con un tamaño de grano promedio chico (Hanner 2003). La Figura 1.18 muestra el albedo en función del ángulo de dispersión para el Hale-Bopp y otros cometas. El albedo inusualmente grande observado en Hale-Bopp puede atribuirse a varios factores posibles. Primero, una población del tamaño de grano dominada por partículas pequeñas podría producir el efecto observado. En segundo lugar, los granos podrían tener una baja porosidad. Finalmente, si los granos son partículas núcleo-manto podrían tener una baja relación orgánicos/sílica. El gran albedo se puede atribuir a cualquier combinación de estos parámetros. Pero además, se observa una alta temperatura de color del grano y un exceso de silicato (marca espectral en  $10\mu$ m). El único parámetro que influye en forma consistente para las tres características observadas es el tamaño de grano, por lo tanto la población de granos está dominada por partículas pequeñas (Mason y col. 2001). En otro trabajo realizan un análisis similar para el Halley (Fulle y col. 2000), estimando una densidad para el polvo de  $1000 \text{kg/m}^3$  y un albedo de 0.04 (con incertezas del 50%), por lo cual concluyen en que las partículas de polvo de este cometa son grandes.

	MIDAS	COSIMA	GIADA	OSIRIS	VIRTIS	Stardust
Porous group - Porosity 10–95% - Aggregate - Low strength	$1-50\mu{ m m}$	14–300 μm on target; up to mm range parents	0.1–0.8 mm	~100 µm-1 m, dominant scatterers	Dominating size distribution (diff. slope -2.5 to -3)	Particle creating track A with multiple terminals or track B 1–100 µm
Fluffy group - Porosity >95% - Likely fractal - Very low strength	fractal: $15-30 \ \mu m$ $D_{\rm f} = 1.7 \pm 0.1$ constituent particles: $< 1.5 \ \mu m$	No indication	$\begin{array}{l} 0.1{-}10 \text{ mm} \\ D_{\rm f} < 1.9, \\ \sim 23\% \text{ of GDS} \\ \text{detections} \end{array}$	Not dominant scatterers	Not excluded, consistent with moderate super- heating in normal activity	Particle creating bulbous tracks (B for coupled, A* or C for fluffy GIADA detections), aluminum foil clusters. Up to 100 µm
Solid group - Porosity <10% - Consolidated - High strength	50–500 nm fragments collected on tip	CAI candidate and specular reflection 5–15 µm	0.15-0.5  mm ~4000 kg m <sup>-3</sup>	No indication	Outburst: temperature requires 0.1 µm particles	Particle creating track A with single or multiple terminals, tens of nm, 1–100 $\mu$ m





**Figura 1.19:** Tamaño de los agregados (diámetro) mediante recolección in situ del polvo (a) Tabla de los diferentes agregados recolectados, con características según instrumento y clasificación en los grupos descritos anteriormente. (b) Gráfico indicando los rangos de tamaños abarcados por los instrumentos de (a) y la clasificación pertinente. Imágenes extraídas de Güttler y col. (2019).

Si nos focalizamos ahora en la información recolectada por las misiones espaciales a cometas, el análisis de los fragmentos resultantes de la recolección de polvo de COSIMA (Figura 1.13) permitió obtener información precisa sobre su tamaño. A cada fragmento se le asignó un nombre y se lo estudió en detalle. Estos fragmentos resultantes muestran una distribución de tamaño en leyes de potencia variable, cuyo exponente promedio es s = -3,1 (Hilchenbach y col. 2016). Markkanen y col. 2018 construyen un modelo de partículas que se adapta a las curvas de fase de la coma y del núcleo del cometa 67P/C-G, en las longitudes de onda visibles, medidas por la cámara OSIRIS. El modelo contempla granos orgánicos de tamaño sub-micrométricos y silicatos de tamaño micrométrico. Concluyen en que para reproducir la función de fase de OSIRIS el rango de tamaños debe ser de 5 a 100  $\mu$ m. Hilchenbach y col. (2016) proponen una distribución diferencial de tamaños  $N(d) \sim d^{-s}$  (s según ecuación 1.8), donde el diámetro d corresponde al diámetro de un círculo que cubre la misma área transversal de un agregado (d = 2R). El rango de d se ubicó en  $15 - 225 \mu m$  y s = 3,1. Este exponente es más empinado que el obtenido por GIADA para partículas mayores. Concluyen en que la pendiente es más empinada para partículas chicas que para partículas grandes. Bentley y col. (2016) mediante las mediciones de COSIMA, estiman un tamaño para los granos componentes de agregados de 0.58 a 2.57  $\mu$ m con un 90% menores a 1.7  $\mu$ m, y comparan con resultados de Stardust que, con mayor definición, arrojaron un 90% de granos menores a 2  $\mu$ m y algunos incluso menores a 500nm. Rotundi y col. (2015) recolectan información de GIADA, OSIRIS y ROSINA del 67P/ C-G. Proponen distribuciones de tamaño diferenciadas para el polvo, donde para agregados con tamaños mayores al mm el exponente es s = 4 y para menores al mm s = 2. Por último, la Figura 1.19 reúne los tamaños de agregados recolectados por misiones *in-situ* y los ubica dentro de los grupos propuestos en la sección 1.6.4.1.

También es importante conocer la masa de estos agregados, lo cual sería sencillo si se cuenta con información precisa de tamaño, porosidad y densidad (composición). Pero generalmente los modelos deben asumir algunos de estos valores, lo cual los torna imprecisos. Por ejemplo, A. C. Levasseur-Regourd y col. (2018) analizan polvo de los cometas Halley, 26P/G-S, Wild-2 y Tempel 1, obteniendo masas mayores a  $10^{-15}$ kg, de la cual deducen tamaños  $R > 0.7\mu$ m si la densidad promedio es  $\sim 800$ kg/m<sup>3</sup>. Fulle y col. (2000) analizan la distribución de flujo de masas acumulada muestreada por Giotto para el polvo de la coma del cometa 1P/Halley. El modelo (que asume como compactos a todos los agregados) arroja una distribución en un rango aproximado  $10^{-12}$ kg  $< m < 10^{-13}$ kg con  $q + 1 \simeq -0.53$ . Una consecuencia de esto es una gran contribución de partículas grandes. Esto no significa que no haya partículas pequeñas ( $< 10\mu$ m) en la coma, sino que la información obtenida puede ser muy bien explicada solo con la presencia de las grandes. Incluso resaltan que otras mediciones obtenidas indican que puede haber una composición significativa

(incluso dominante) de brillo proveniente de partículas pequeñas en esa región. Este modelo está sujeto a la suposición de una densidad constante para todos los agregados (misma composición homogénea) y la negación de una alta porosidad variable.

Las misiones *in-situ* han posibilitado recaudar más información al respecto. Hörz y col. (2006) detallan que los impactores de la misión Stardust fueron desde objetos densos como silicatos no porosos de  $3g/cm^3$  hasta agregados muy poco porosos de 0,3g/cm<sup>3</sup>. Analizando los datos de Stardust para el cometa Wild-2, se propone que la distribución acumulada de masa de los agregados en la coma interna sigue una ley de potencias con un índice a determinar. Hörz y col. (2006) obtienen un valor de q + 1 = -0.57 (ecuación 1.10), que no concuerda absolutamente con análisis previos como los de Tuzzolino y col. (2004), quienes obtuvieron el valor q + 1 =-0.75 para agregados con diámetro  $< 50 \mu m$ , aunque posteriormente encuentran variaciones según el rango de tamaño considerado, llevando este índice a un rango q+1 = [-0,3; -1,15], siendo de q+1 = -0,5 para diámetros mayores a 50  $\mu$ m. Para el Halley la distribución de masa varía con el tamaño de partícula y con la distancia al núcleo pero es más empinada (q+1 = -1) que la medida por Stardust, indicando que el Halley contiene partículas más pequeñas que el Wild-2. El índice estimado para el cometa 26P/G-S es q + 1 = -0.31 a diámetros > 100 $\mu$ m, lo que sugiere partículas incluso más pequeñas que las observadas por Stardust. Una medición *in-situ* con el instrumento DIM permitió estimar la densidad de los granos de polvo del 67P/C-G en 0.25g/cm<sup>3</sup> y la masa de los mismos en el rango  $10^{-6} - 10^{-5}$ kg (Podolak y col. 2016, Flandes y col. 2018).

Como conclusión vemos que según el método/instrumento utilizado, los resultados pueden ser muy variables. Sin embargo hay consenso en que tanto los tamaños como las masas del polvo planetario exhiben distribuciones que pueden ajustarse con leyes de potencia, cuyos exponentes s oscilan entre -2 y -4 para tamaños y entre -0.3 y -1.15 para el índice de masas acumuladas (q + 1). Los tamaños pertenecen a la escala micrón y las masas están en el orden de microgramos.

# Capítulo 2

# MÉTODO

# 2.1. Simulaciones numéricas

Históricamente las ciencias se caracterizaron por un dominio del campo experimental que debía dar origen a las diferentes teorías. Si bien en los últimos tiempos la teoría pura comenzó a liderar en algunas ramas de la ciencia, la interrelación con lo experimental siempre ha estado presente, donde un sistema sujeto a determinadas condiciones generará resultados cuantitativos que deben luego corresponderse con un modelo teórico (idealmente). En la teoría, primero se construye una hipótesis o modelo, y se valida cuando describe el comportamiento de cierto sistema bajo las condiciones previstas. Por lo tanto, si no existen experimentos que la avalen, la teoría no tiene valor científico.

Muchos modelos teóricos presentan altas complejidades a la hora de ser corroborados experimentalmente por diversas situaciones, como pueden ser: imposibilidad de recrear de manera exacta condiciones como vacío absoluto, gravedad cero, etc.; dificultades para mediciones de alta precisión en escalas espacio-temporales bajas/altas, realización de un gran número de cuentas analíticas para dar una estadística final certera, etc. En las últimas décadas, estos problemas se han minimizado con la aparición de equipos de cómputo de alto rendimiento, que permitieron adicionar un elemento entre la teoría y los experimentos: las simulaciones computacionales. En ellas, el modelo sigue siendo provisto por una teoría dada, pero los cálculos son llevados a cabo por una máquina que sigue instrucciones (algoritmo). De esta manera, se ha logrado introducir una mayor complejidad con sistemas más realistas y obteniendo una mayor comprensión de los experimentos y su nexo con las teorías vigentes (Ercolessi 1997). Las simulaciones computacionales han alterado significativamente la relación teórico - experimental aumentando la demanda de precisión de los modelos y recreando situaciones que pueden ser muy próximas a las condiciones experimentales, pudiendo en algunos casos ser comparadas de forma directa. Sin mencionar que permiten testear teorías para experimentos que en la actualidad aún son imposibles de realizarse en un laboratorio tradicional. Por lo tanto, son un pilar entre la teoría y la experimentación que actúan como nexo clave permitiendo resolver problemas que de otra forma seguirían siendo un interrogante.

# 2.1.1. Dinámica molecular

La dinámica molecular (MD por sus siglas en inglés "*Molecular Dynamics*") es una técnica utilizada para resolver las ecuaciones clásicas de la mecánica (ecuaciones de Newton-Euler) de un sistema de partículas (Allen y Tildesley 2017). MD integra numéricamente las ecuaciones acopladas de movimiento, y calcula la trayectoria del sistema de N partículas en el espacio de las fases, que incluye 3N posiciones, 3N momentos lineales, y 3N momentos angulares, partiendo de una configuración inicial específica dada. Esta trayectoria depende de las fuerzas y torques prescriptos para las interacciones entre partículas, que generalmente incluyen términos disipativos y por tanto no pueden asociarse a funciones potenciales, cuyo gradiente es proporcional a la fuerza. Es importante notar que el conteo de grados de libertad en sistemas granulares de alta densidad no es trivial, y puede reducirse respecto al valor 9N mencionado arriba (Baule y col. 2018). En la próxima sección se especificará el modelo utilizado para el cálculo de fuerzas y torques inter-granulares.

# 2.1.2. LAMMPS

LAMMPS ("Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator") es un código clásico de simulación MD enfocado en modelado de materiales (http://lammps. sandia.gov). Este código abierto permite simular eficientemente sistemas granulares teniendo una amplia variedad de potenciales y condiciones de borde, permitiendo el modelado de hasta billones de partículas. En general, LAMMPS integra las ecuaciones de movimiento de Newton-Euler para una colección de partículas interactuantes, que pueden ser átomos, moléculas, granos, etc. y utiliza listas de vecinos para seguir el recorrido de partículas cercanas. Para la integración de las ecuaciones, LAMMPS utiliza el algoritmo de velocity Verlet (Allen y Tildesley 2017). Como características relevantes podemos mencionar:

- Corre en un solo procesador o en paralelo.
- Descomposición espacial del dominio de simulación por paralelismo.
- Distribución de código abierta.

- Actualización continua.
- Acepta gran variedad de potenciales.
- CPU y GPU.

# 2.2. Medio granular

La materia granular puede definirse como una colección de granos macroscópicos rígidos y disipativos (Katsuragi 2016). Estos granos individuales que componen al medio granular suelen tener tamaños muy pequeños, en escala del micrón o incluso sub-micrón. Para poder entender el comportamiento de un medio granular a gran escala es necesario estudiar cómo interaccionan entre sí los granos que lo forman. A continuación se dará una breve síntesis sobre la interacción entre dos granos esféricos aislados.

# 2.2.1. Física del contacto entre dos granos

En esta sección resumiremos el modelo de Dominik y Tielens (1997), que será la base para las interacciones granulares de nuestros sistemas. Cuando dos granos se aproximan entre sí, perciben una atracción de largo alcance causada por la interacción de Van der Waals. También pueden experimentar otro tipo de fuerzas atractivas, como una interacción dipolo-dipolo, o fuerzas eléctricas. En este potencial atractivo, las partículas se aceleran y chocan con una energía de colisión que es la suma de la energía cinética (considerando la velocidad relativa) y la energía atractiva. Estas energías producen ondas elásticas, que interferirán constructivamente cerca del punto de contacto deformando elásticamente al grano y formando un área de contacto. Esta deformación aumentará la energía potencial elástica repulsiva entre los granos. El área de contacto se deformará hasta que la fuerza elástica de repulsión balancee a las fuerzas atractivas existentes. Este tipo de contacto es una extensión del trabajo teórico de Hertz (Hertz y Reine 1882). Una mejora del modelo es conocida como teoría JKR (Johnson 1985, Johnson y col. 1971), que asume que los granos sentirán atracción mutua sólo cuando realmente estén en contacto y sólo en el área donde está el contacto.

En la Figura 2.1 (Dominik y Tielens 1997) podemos ver la geometría de la situación donde, en ausencia de fuerzas externas, el radio del área de contacto está dado por:

$$a_0 = \frac{9\pi\gamma R^{*2}}{Y_m^*}.$$
 (2.1)



**Figura 2.1:** Geometría del contacto: los granos hacen contacto sobre un área circular finita de radio a. El tamaño de esta área esta determinado por la competencia entre las fuerzas atractivas y las repulsivas (Dominik y Tielens 1997).

Aquí  $R^*$  es el radio reducido:  $R^{*-1} = r_1^{-1} + r_2^{-1}$  ( $r_1$  y  $r_2$  son los radios de cada grano). Las fuerzas atractivas se describen por la energía superficial del material  $\gamma$ definida como la energía necesaria para romper los enlaces intermoleculares dando lugar a una superficie. También puede ser definida como el exceso de energía de la superficie de un material comparado con la que tendría si estuviera inmersa en la masa. Si los granos que interactúan son de diferentes materiales:  $\gamma = \gamma_1 + \gamma_2 - 2\gamma_{12}$ , donde  $\gamma_{12}$  es la energía de interfase. Si los granos son del mismo material entonces:  $\gamma_1 = \gamma_2$  y  $\gamma_{12} = 0$ .

Las fuerzas elásticas se incluyen mediante una constante del material  $Y_{\rm m}^*$ , dada por:  $(Y_{\rm m}^*)^{-1} = (1 - \nu_1^2)/Y_{{\rm m},1} + (1 - \nu_2^2)/Y_{{\rm m},2}$ . El módulo de Young,  $Y_{{\rm m},i}$  (con i=1,2 para cada partícula) es un parámetro que relaciona el esfuerzo que se hace para estirar (comprimir) un material con el aumento (disminución) de la longitud que experimenta el objeto al percibir esta fuerza. Informa el grado de deformación que sufre un cuerpo cuando se somete a una tensión en determinada dirección. El coeficiente de Poisson,  $\nu_i$  (con i=1,2 para cada partícula), es una constante elástica que proporciona una medida del estrechamiento de sección de un prisma de material elástico lineal e isótropo cuando se estira longitudinalmente y se adelgaza en las direcciones perpendiculares a la del estiramiento.

En este modelo, el contacto entre dos granos tiene en total seis grados de libertad, como se observa en la Figura 2.2: (a) Un grado de libertad vertical, (b) dos grados para el movimiento de rodadura, (c) dos grados para deslizamiento en el plano de contacto, y (d) uno para el movimiento de torsión de dos granos alrededor del eje que conecta sus centros (Dominik y Tielens 1997, Johnson 1989). Por lo tanto, cada movimiento relativo de granos puede ser descompuesto en 6 componentes. Cada



**Figura 2.2:** Los diferentes grados de libertad de un contacto entre dos partículas: (a) vertical, (b) tangencial de rodadura(rolling), (c) tangential de deslizamiento (sliding),(d) torsión(spinning). Imagen extraída de Dominik y Tielens 1997.

componente tiene energías y fuerzas o torques asociados. Sus ecuaciones pueden variar ligeramente dependiendo del modelo. En nuestro caso serán detalladas en la próxima sección.

# 2.3. Código Granular: Interacciones entre granos

Nuestro código permite crear agregados granulares y hacerlos colisionar entre sí, teniendo en cuenta los conceptos de la sección anterior. Cada agregado se compondrá de un número dado de partículas individuales del mismo material, pudiendo abarcar cientos de miles de granos. Analizar todas las interacciones posibles que puedan suceder entre los granos individuales de estos agregados en intervalos de tiempo muy cortos es complejo, por ello utilizaremos simulaciones numéricas, específicamente la técnica MD (sección 2.1.1) y trabajaremos con LAMMPS (sección 2.1.2). Los detalles del código han sido publicados (Ringl y Urbassek 2012) y utilizados en trabajos previos (Ringl, Bringa y Urbassek 2012, Ringl, Bringa, Bertoldi y col. 2012, Gunkelmann y col. 2016a). A continuación sintetizaremos las partes clave que involucran el modelo teórico utilizado, el proceso de formación de muestras y de la selección de parámetros.

Consideramos granos esféricos, cada uno de radio  $r_i$ . Sea  $x_i$  la posición del centro del grano i,  $v_i$  la velocidad de su centro de masa y  $\omega_i$  su velocidad angular. Estas tres cantidades especifican el estado mecánico del grano. Cuando colisionan dos granos,  $i \neq j$ , debe cuantificarse las variables características que de ella se desprenden. El vector unitario normal:

$$\hat{n} = \frac{\vec{x_i} - \vec{x_j}}{|\vec{x_i} - \vec{x_j}|},$$
(2.2)

especifica el eje de contacto. La velocidad relativa del centro de masa de los dos

granos es:  $\vec{v_i} - \vec{v_j}$ ; por lo que la velocidad relativa del punto de contacto es:

$$\vec{v_{\text{con}}} = \vec{v_i} - \vec{v_j} - (r_i \vec{\omega_i} + r_j \vec{\omega_j}) \times \hat{n}.$$
(2.3)

Su proyección en  $\hat{n}$ :  $\vec{v_n} = \vec{v_{con}} \cdot \hat{n}$  define la velocidad radial de colisión, mientras que la velocidad tangencial viene dada por:

$$\vec{v_{\text{tan}}} = \vec{v_{\text{con}}} - \vec{v_{\text{con}}} \cdot \hat{n}, \qquad (2.4)$$

que define una dirección tangencial única:  $\hat{t} = v_{\text{tan}} / |v_{\text{tan}}|$ . La velocidad angular relativa  $\omega_{\text{rel}} = \omega_i - \omega_j$  define la velocidad angular de torsión  $\omega_{\text{twist}} = (\omega_{\text{rel}}.\hat{n}).\hat{n}$ . Esta caracteriza la rotación relativa de los dos granos alrededor de su eje de contacto, donde la dirección esta dada por  $\omega_{\text{twist}} = \hat{n}$ . La parte remanente de la velocidad angular,  $\omega_{\text{roll}} = \omega_{\text{rel}} - \omega_{\text{twist}}$  define la velocidad angular de rodadura. Su dirección permanece en el plano de contacto.

## 2.3.1. Fuerzas normales

Las fuerzas que actúan en esta dirección pueden unir a los granos entre si o separarlos (Figura 2.2 (a)). El contacto será tratado como cuasi elástico (Chokshi y col. 1993). Para romper un contacto entre granos sólo tirando de ellos para separarlos, se debe aportar una cantidad de energía determinada. En su modelo, Dominik y Tielens (1997) consideran que, debido a la existencia de fuerzas atractivas en el área de contacto, las superficies pueden permanecer en contacto aún si la separación entre los centros es mayor que la suma de los radios. Esto ocurre porque se forma una especie de "cuello" entre las partículas. Entonces, en un proceso colisional, los granos chocan, aumenta su área de contacto hasta que que se alcanza el valor de equilibrio  $a_0$ , pero los granos continúan moviéndose por inercia. En este momento comienzan a actuar las fuerzas repulsivas que tienden a separar los granos. Sin embargo, los granos no se separarán la misma distancia a la cual hicieron el primer contacto por la formación del cuello. Los granos sólo se separarán cuando alcancen una separación crítica  $\delta_c$ . Romper el cuello requiere energía, entonces si la energía cinética inicial no es suficiente para romper este cuello, permanecerán unidos. Esta asimetría entre hacer un contacto y romper un contacto es la que hace posible que los granos permanezcan adheridos. Según Dominik y Tielens (1997), dos granos permanecerán unidos cuando la energía cinética de la colisión no exceda el valor crítico:

$$E_{\rm stick} = 0.4 F_c \delta_c \approx 9.6 \frac{\gamma^{5/3} R^{*4/3}}{Y_m^*}, \qquad (2.5)$$

donde  $F_c = 3\pi\gamma R^*$ .

Esta energía crítica se corresponde con una determinada velocidad inicial crítica de adhesión:  $v_{\text{stick}} = \sqrt{(2/m^*)E_{\text{stick}}}$  donde  $m^*$  es la masa reducida:  $m^* = m_1m_2/(m_1 + m_2)$ , siendo  $m_i$  la masa del grano i = 1, 2. Entonces la energía crítica aumenta cuando aumenta el tamaño del grano pero la velocidad crítica disminuye.

También estimaron la energía necesaria para romper un contacto existente como:

$$E_{\text{break}} = 1.8F_c \delta_c \approx 43 \frac{\gamma^{5/3} R^{*4/3}}{Y_m^*}.$$
 (2.6)

Comparando la ecuación 2.5 con la ecuación 2.6 vemos que la energía requerida para pegar dos granos es mucho menor que la necesaria para romper un contacto existente. Debemos remarcar que las ecuaciones 2.5 y 2.6 fueron obtenidas en base al modelo JKR (Johnson y col. 1971), mientras que el solapamiento utilizado por el modelo se basa en DMT(Derjaguin y col. 1975), lo cual modifica ligeramente los prefactores.

En nuestro modelo, los granos involucrados son elásticos. Consideraremos la interacción de dos granos del mismo material. Durante su movimiento, la distancia relativa entre los centros de masa  $|\vec{x_i} - \vec{x_j}|$  se convierte en menor que  $(r_i + r_j)$ , donde los granos ejercen una fuerza entre si. Se define la superposición de los dos granos como:

$$\sigma = r_i + r_j - |\vec{x_i} - \vec{x_j}|.$$
(2.7)

Sólo existirán fuerzas si  $\sigma > 0$ . Si no hay solapamiento de granos, no habrá fuerzas entre los mismos. Con esta notación el radio efectivo es:  $\frac{1}{R^*} = \frac{1}{r_i} + \frac{1}{r_j}$ . Cuando dos granos colisionan y se solapan, se genera un área de contacto que, para granos isotrópicos será circular; con radio de contacto *a*. Asumiendo la teoría hertziana (Hertz y Reine 1882, Johnson 1985) tenemos:

$$a = \sqrt{\sigma R^*}.$$
(2.8)

Estas fuerzas normales pueden ser atractivas o repulsivas.

### <u>Parte atractiva</u>

A la distancia de equilibrio, los dos granos experimentan una fuerza proporcional a la energía superficial  $\gamma$ , dada por (Derjaguin y col. 1975):

$$f_{\rm adh} = 4\pi\gamma R^*. \tag{2.9}$$

Esta fuerza es la necesaria para separar a dos granos unidos entre sí, y tiene verificación experimental (Heim y col. 1999). Observamos que durante un contacto dinámico, por ejemplo en una colisión, donde la superposición  $\sigma$  varía, también varía el radio de contacto. Como consecuencia, los modelos de contacto a menudo asumen que la fuerza adhesiva depende de  $\sigma$ . Además, puede ocurrir el llamado fenómeno de formación de cuello, es decir, la creación de un puente de materia en contacto con partículas incluso después de la separación para  $\sigma < 0$ . Uno de los rasgos característicos de nuestra implementación es la simplificación de la fuerza adhesiva al hacer  $f_{adh}$  independiente de  $\sigma$  siempre que haya una superposición entre los granos.

### Parte repulsiva

La ley de Hertz para la interacción elástica de dos esferas esta dada por:

$$f_{Hertz} = \frac{2}{3} \frac{Y_m^*}{(1-\nu)^2} \sqrt{R^*} \sigma^{3/2}.$$
 (2.10)

Para velocidades de colisión no muy altas, la deformación plástica es despreciable y la interacción puede considerarse totalmente elástica (Chokshi y col. 1993). La velocidad crítica para que no ocurra deformación plástica viene dada por:

$$v_{\rm pd} = \sqrt{\frac{108(R^*3J^5)}{\mu^*Y_m^{*4}}},$$
(2.11)

donde J es el esfuerzo de deformación plástica. Por ejemplo, para sílica, este límite es de  $v_{pd} = 580$ m/s, entonces hasta esta velocidad podemos asegurar que durante el proceso ninguna deformación plástica tendrá lugar en el material. Como producto de una colisión, tenemos disipación de energía, que estará cuantificada mediante una fuerza disipativa en la parte normal,  $f_{diss}$ , asociada a un modelo viscoelástico (Brilliantov y col. 1996):

$$f_{\rm diss} = \frac{2}{3} \frac{Y_m^*}{(1-\nu)^2} \sqrt{R^*} A \sqrt{\sigma} v_n, \qquad (2.12)$$

donde A es la constante de disipación que modela la ecuación. A se relaciona unívocamente con el coeficiente de restitución  $\epsilon$ . El coeficiente de restitución para una colisión central entre dos granos que chocan con velocidad inicial  $v_i$  y velocidad final  $v_f$  viene dado por:  $\epsilon = v_f/v_i$ , donde  $\epsilon$  describe la pérdida de energía durante la colisión y se obtiene experimentalmente para un material dado. El origen físico se asocia, de manera simplificada, a deformaciones viscosas. Cabe destacar que las simulaciones consideran que los granos se comportan de manera elástica, en el sentido de que no existe plasticidad en el volumen del grano, por ejemplo dada por bandas de corte, transformaciones de fase o fractura. Sin embargo, los contactos entre granos incluyen interacciones disipativas, más allá de la aproximación elástica de contacto. Para más detalle consultar Ringl y Urbassek (2012).

Cuando se obtengan valores negativos  $v_n < 0$  mientras los granos se separan luego de la colisión, se obtendrá una  $f_{\text{diss}} < 0$ . Para prevenir que la fuerza normal total se convierta en atractiva debido a la disipación, se mejora el modelo reemplazando la ecuación 2.12 por (Pöschel y Schwager 2005):

$$f_{\rm diss} = max\{0, \frac{2}{3} \frac{Y_m^*}{(1-\nu)^2} \sqrt{R^*} (\sigma^{3/2} + A\sqrt{\sigma}v_n)\}.$$
 (2.13)

Finalmente, la fuerza normal total será entonces  $f_{\text{diss}}$  (ecuación 2.13) menos  $f_{\text{adh}}$  (ecuación 2.9).

# 2.3.2. Fuerza tangencial

Esta fuerza se relaciona con los posibles movimientos descriptos en la Figura 2.2 (c)

### Fricción de deslizamiento

Si la ecuación 2.4 es distinta de cero, entonces hay una contribución tangencial y los dos granos experimentaran fricción de deslizamiento. El origen en esta escala se atribuye a rugosidades en la escala atomística. La magnitud de esta fuerza depende del módulo de corte del material, definido como:  $G = Y_m^*/[2(1 + \nu)]$ , y del radio del área de contacto a (ecuación 2.8):

$$f_{\rm slid} = \frac{\rm G}{2}a^2. \tag{2.14}$$

Esta fuerza desacelera a  $v_{tan}$ , ya que la dirección de  $f_{slid}$  es opuesta a  $v_{tan}$ . Como esta magnitud no depende de  $v_{tan}$ , puede suceder que tenga saltos abruptos si  $v_{tan}$  cambia de signo. Se adiciona una modificación para que la fuerza tangencial decrezca continuamente a cero si  $v_{tan}$  es pequeña (Haff y Werner 1986):

$$f_{\text{tan}} = -sgn(v_{\text{tan}})min\{\eta_{\text{tang}}v_{\text{tan}}, f_{\text{slid}}\}.$$
(2.15)

Donde  $\eta_{\text{tang}}$  es la constante de amortiguamiento y su valor se elige de modo tal que prevenga las oscilaciones previamente mencionadas.

# 2.3.3. Fricción rotacional

Además de la fricción anterior, la rotación relativa de las dos esferas también origina fuerzas de fricción que provocan el decaimiento del momento angular rotacional. Podemos separarlos en movimiento de torsión y de rotación.

### Fricción de torsión

En este caso, los dos granos rotan alrededor de su eje de contacto (Figura 2.2 (d)). Este movimiento puede interpretarse como una rotación de los planos de contacto de los dos granos y esta fricción puede ser modelada de forma similar a la fricción de deslizamiento (Dominik y Tielens 1996). La fricción que desacelera al torque es:

$$d_{\text{twist}} = \frac{1}{3} \frac{\text{G}}{\pi} a^3. \tag{2.16}$$

Al igual que en el caso anterior, este torque es independiente de la velocidad asociada, la velocidad angular de torsión  $\vec{\omega_{twist}}$ . Por lo tanto, de forma análoga, introducimos una constante de amortiguamiento  $\eta_{twist}$ :

$$\vec{D}_{\text{twist}} = -\min\{\eta_{\text{twist}} \mid \vec{\omega}_{\text{twist}} \mid, d_{\text{twist}}\}\hat{\omega}_{\text{twist}}.$$
(2.17)

### Fricción de rodamiento

Las partículas pequeñas que consideramos están formadas por átomos, por lo tanto no son perfectamente lisas en todas las escalas. Cuando un grano rueda sobre otro (Figura 2.2 (b)), se hacen nuevos contactos entre átomos y se van rompiendo los contactos que quedan atrás. Estos contactos pueden hacerse/romperse en pasos de al menos un átomo, pero el área de contacto será siempre simétrica alrededor del eje que conecta los centros. Entonces, ni bien un grano comienza a rodar sobre otro el área de contacto permanece fija. Esto provoca una distribución asimétrica de la presión que se expresa mediante un torque opuesto al movimiento de rotación, denominado fricción de rodadura. En nuestro modelo incluimos este efecto a través de un torque que desacelera,  $d_{\rm roll}$ . Según Dominik y Tielens (1996):

$$d_{\rm roll} = 2f_{\rm adh}\xi^{\rm yield},\tag{2.18}$$

donde  $\xi^{\text{yield}}$  denota la distancia crítica a la cual dos esferas pueden rodar una sobre otra sin romper ninguna ligadura. Asumimos  $\xi^{\text{yield}} = 1$  (Dominik y Tielens 1997). Nuevamente, dejaremos que el torque se desvanezca continuamente con la velocidad angular relativa, introduciendo una constante de amortiguamiento,  $\eta_{\text{roll}}$ :

$$D_{\rm roll} = -\min\{\eta_{\rm roll} \mid \vec{\omega}_{\rm roll} \mid, d_{\rm roll}\}\hat{\omega}_{\rm roll}.$$
(2.19)
Dominik y Tielens (1997) definen una cantidad importante, que es la energía necesaria para rodar una distancia  $\pi R$ :

$$E_{\rm roll} = 6\pi^2 \gamma R \xi^{\rm yield}. \tag{2.20}$$

Comparando con la ecuación 2.6, la energía para comenzar a rodar es siempre menor a la requerida para romper un contacto. Pero la energía para rodar una distancia visible es similar a la energía de ruptura (Dominik y Tielens 1997).

## 2.4. Construcción de las muestras

La construcción de agregados porosos tendrá tres parámetros interrelacionados: su tamaño, el número de partículas individuales que lo conforman y la porosidad que viene dada a través del factor de llenado  $\phi$  (donde  $\phi = 1$  - porosidad). Estas partículas individuales serán idénticas entre sí, es decir, tendrán los mismos parámetros de material y mismo tamaño. De forma general, se construye el agregado granular i con determinado volumen  $V_i$  y un factor de llenado deseado, lo cual determina el número de granos  $N_i$  que contendrá, de la siguiente manera:

- 1. Se coloca un grano en una posición arbitraria en el volumen.
- 2. Se calcula el factor de llenado local para cada grano contando la cantidad de granos cuyo centro esté dentro de una esfera de radio  $cR_{\text{grain}}$  centrada en este grano particular.  $R_{\text{grain}}$  es el radio de grano y c una constante. Para las muestras construidas y utilizadas en esta tesis c = 5 asegura variaciones suaves del factor de llenado dentro de los agregados.
- 3. Se determina el grano con el menor factor de llenado local
- 4. Se le adjunta un grano en dirección aleatoria, dentro de esa esfera de radio  $cR_{\text{grain}}$ . Para ello, toma al grano k como grano central, con  $(\mathbf{x}_k, \mathbf{y}_k, \mathbf{z}_k)$  las coordenadas de su centro. Busca dentro de una distribución uniforme coordenadas del grano a adjuntar, j, tales que cumplan que la distancias entre los centros de k y j sea la distancia de equilibrio. Corrobora que (dentro de una esfera de  $cR_{\text{grain}}$ ) ningún grano esté a una distancia de  $2R_{\text{grain}}$  o menor (es decir, que el grano a adjuntar no se vaya a solapar con ningún otro). Si después de N intentos (con N suficientemente grande) no puede adjuntarlo sin que haya otro solapamiento, descarta a este y busca otro grano dentro de la esfera de  $cR_{\text{grain}}$  (nuevo grano k que cumpla con no haber alcanzado el factor de llenado deseado aún) para repetir el proceso.
- 5. Si el número actual de granos es  $< N_i$ , se retorna desde el punto 2.

Cuando se adjunta un grano (paso 4), se lo coloca a la distancia de equilibrio, la cual se obtiene al igualar la fuerza adhesiva con la repulsiva (ecuaciones 2.9 y 2.10):

$$\delta_{\rm equ} = \left(\frac{9\pi^2 \gamma^2 R^*}{Y_m^*}\right)^{1/3}.$$
 (2.21)

En el caso de agregados cúbicos, se pueden aplicar condiciones de borde periódico que permiten un mejor cálculo del factor de llenado para los granos del borde de la muestra, dado que no existen superficies libres. Para el caso de agregados esféricos (que se utilizarán en el Capítulo 4), y con el fin de lograr la estructura de borde deseada, se ha modificado levemente el proceso de armado anterior. Para un agregado esférico de radio  $R_i$ , el armado será idéntico salvo por el paso (4), que en este caso será:

4 Se adjunta un grano en una dirección aleatoria. El nuevo grano podrá quedar:

- dentro de  $R_i$ : el grano será adjuntado a una distancia  $\delta_{eq}$ .
- fuera de  $R_i$ : lo nombraremos "grano fantasma" y lo dejaremos marcado. Estos granos serán tenidos en cuenta para el cálculo del factor de llenado local del borde del agregado, pero no serán tenidos en cuenta para el cálculo del factor de llenado global y serán removidos del agregado final.

Este algoritmo permite distribuir a los granos homogéneamente en el volumen esférico.

## 2.5. Selección de parámetros

Una vez que los agregados se han construido, se inicia el proceso de colisión, para lo cual se le asigna una velocidad inicial determinada, v, a todos los granos que componen a uno de los agregados (de ahora en adelante este será el proyectil), mientras el otro agregado permanece en reposo (será considerado el blanco de la colisión). Cada interacción entre pares de granos individuales será evaluada según el modelo descrito en la sección 2.3.

#### Paso temporal

Una variable crucial a tener en cuenta es el paso temporal que se eligirá para realizar la simulación. De acuerdo a Shäfer y col. (1996), el paso temporal debe ser lo suficientemente pequeño comparado con el tiempo de colisión,  $\tau_c$ . Para una colisión central de dos esferas de igual masa m que interactúan mediante fuerzas elásticas de Hertz, donde una colisiona con velocidad v contra la otra en reposo, tenemos (Duran 2000):

$$\tau_{\rm c} = 2,94 \left(\frac{m^2}{{\rm k}^2 v}\right)^{1/5},$$
(2.22)

donde:

$$\mathbf{k} = \frac{4\sqrt{2}}{15} \frac{Y_m^*}{1 - \nu^2} \sqrt{R_{\text{grain}}}.$$
 (2.23)

Consideraremos un paso temporal de  $\Delta t = \tau_c/50$ , suficientemente pequeño para resolver una colisión. Este dependerá de los parámetros del material.

#### Parámetros de entrada

Además de la información de los agregados que colisionarán (posición de todos los granos que constituyen a estos agregados), la velocidad v y el paso temporal, el código pide una serie de parámetros de entrada que dependen del material considerado. Estos parámetros son los que se tendrán en cuenta dentro del código para realizar los cálculos que se establecieron a través de las ecuaciones de sección 2.3 y son los siguientes:

- Modulo de Young  $(Y_m)$
- Coeficiente de Poisson  $(\nu)$
- Constante de disipación (A)
- Energía superficial  $(\gamma)$
- Constante de amortiguamiento tangencial ( $\eta_{\text{tang}}$ ): La elección depende de  $\Delta t$ .  $\eta_{\text{tang}}$  puede modelarse a partir de simulaciones de prueba, obteniéndose la relación:  $\eta_{\text{tang}} = 0.1 m / \Delta t$ .
- Constante de amortiguamiento de rodadura ( $\eta_{roll}$ ): También depende de  $\Delta t$  y puede modelarse como:  $\eta_{roll} = \eta_{twist} = 0.4r^2\eta_{tang}$

Este código permite armar agregados granulares con forma, tamaño y porosidad requeridos y luego hacerlos colisionar entre si, permitiendo evaluar la trayectoria y velocidad de cada partícula individual en espacios de tiempo muy reducidos. A su vez, mejora modelos anteriores incluyendo pérdidas energéticas asociadas a fricción, representando una mejora en el estudio de colisiones granulares y en la comprensión de fenómenos astrofísicos que no poseen explicación consensuada. Utilizaremos este modelo en los próximos capítulos para recrear colisiones entre agregados con diferentes propiedades.

## Capítulo 3

# COLISIÓN DE AGREGADOS SOBRE UN MEDIO GRANULAR

En este capítulo se utilizarán simulaciones computacionales para estudiar el proceso de craterización causado sobre un medio granular por el impacto de un proyectil granular. Podemos pensar este escenario como el mismo que se produce cuando impacta un proyectil pequeño contra un agregado mucho mayor. Pocos estudios han considerado proyectiles porosos compuestos de granos individuales; entre los primeros trabajos realizados con simulaciones de mecánica granular (en 2 dimensiones) dedicado a estudiar tales impactos podemos mencionar el trabajo de Tsimring y Volfson (2005). Posteriormente, Hurley y col. (2015) realizaron simulaciones tridimensionales estudiando impactos de baja velocidad en medios granulares con foco particular en el rol de las fuerzas de fricción. Recientemente, Y. Li y col. (2016) estudiaron la masa y velocidad de la eyecta.

Lo novedoso es poder contar con un proyectil granular, que puede desarmarse durante el impacto, asemejándose mucho más a lo que sucede en colisiones reales. Otro factor importante es que nuestros agregados tienen un valor de porosidad asignado (sección 2.4) que busca reproducir los escenarios descritos en el Capítulo 1. Por último, según lo visto en el Capítulo 2, nuestro sistema es disipativo, por lo cual modela de una forma más realista las interacciones que cada grano tendrá con sus vecinos durante el proceso colisional.

## 3.1. Configuración del Sistema

Ambos, proyectil y blanco, están compuestos de granos idénticos de sílica esféricos. Para un grano de radio  $R_{\text{grain}}$  la masa m queda establecida, siendo  $m = 2m^*$ , donde  $m^*$  está definida en la Sección 2.3.1. Los parámetros del material utilizado para los

Parámetro	Símbolo	Valor	Ref.
masa	m	$3{,}68\times10^{-15}\mathrm{kg}$	(1)
radio	$R_{\rm grain}$	(1)	
densidad	ρ	$2 \times 10^3 \mathrm{kg/m}^3$	(2)
Módulo de Young	$Y_m$	54GPa	(3)
Coeficiente de Poisson	ν	0,17	(3)
Energía superficial	$\gamma$	$0.05 Jm^{-2}$	(3)
Constante de disipación	A	$0.5 \times 10^{-9} \mathrm{s}$	(1, 4)
Coeficiente de restitución	$\epsilon$	0,69	(1, 4)
distancia crítica rodadura	$\xi^{ m yield}$	$1 \times 10^{-10} \mathrm{m}$	(5)
tiempo de colisión	$ au_c$	2,45ns	(1)
paso temporal	$\Delta t$	$50 \mathrm{ps}$	(1)
Energía de rotura	$E_{\rm break}$	$2.8\times10^{17}\mathrm{J}$	(6)
Energía de rodadura	$E_{\rm roll}$	$1 \times 10^{16} \mathrm{J}$	(6)

granos individuales de sílica se describen en la tabla 3.1.

Tabla 3.1: Parámetros del material para granos de sílica. Referencias: (1) Ringl y Urbassek (2012), (2) Blum y Schräpler (2004), (3) Chokshi y col. (1993), (4) Poppe y col. (2000), (5) Dominik y Tielens (1997), (6) Ringl, Bringa y Urbassek (2012).

Los blancos son cajas cúbicas con longitud de lado 70,7 $\mu$ m. Contienen aproximadamente 70,000 granos y un factor de llenado de  $\phi \simeq 36\%$ . Fueron construidos siguiendo el método descripto en la sección 2.4. El proyectil contiene un numero de granos  $N_p$  que varia entre 1 y 500. Este es cortado del blanco de forma aproximadamente esférica y posee el mismo  $\phi$ . Se corrieron 400,000 pasos temporales en cada simulación, dando un total de 20 $\mu$ s.

Inicialmente el proyectil se coloca sobre el blanco de forma que no interactúe con él, luego la simulación comienza dándole a cada grano del proyectil la misma velocidad inicial v, que varía entre 5 y 200 m/s. Estas velocidades están lejos del límite de deformación plástica (ecuación 2.11). La tapa y la base del blanco son libres; mientras que los lados tienen condiciones de contorno periódicas.

Luego de una colisión, dos granos se separarán si poseen una velocidad relativa que supere un cierto valor  $v_{\text{frag}}$ .  $E_{\text{break}}$  (tabla 3.1) puede relacionarse fácilmente con la velocidad mínima necesaria para separar dos granos:

$$v_{\rm frag} = \sqrt{\frac{4E_{\rm break}}{m}} = 0.17 \text{m/s.}$$
(3.1)

Para el análisis subsecuente consideraremos dos fuentes de error sistemático:

(1) Para algunos casos, como por ejemplo,  $N_p = 50$  y v = 150m/s continuamos la simulación por un período temporal mucho mayor (10<sup>6</sup> pasos temporales) para verificar que el cráter formado no sufriera modificaciones en el tiempo. Se observó un cambio en la extensión del cráter menor al 8 %, y en su volumen menor al 2 %, para el campo de eyección el error observado fue aproximadamente del 5 %.

(2) Comenzamos con diferentes lugares de impacto, desplazando levemente la posición horizontal del proyectil respecto del blanco, para que el impacto se originase en diferentes zonas. Los cambios observados en extensión fueron del  $\simeq 3\%$ , en el volumen del  $\simeq 4\%$  y en la eyecta del  $\simeq 15\%$ .

En nuestras simulaciones la fuerza gravitatoria no será tenida en cuenta por ser despreciable frente a otras fuerzas que entran en juego en el contacto entre granos. A modo comparativo, la fuerza gravitatoria entre dos granos individuales en contacto es:  $F_{\rm g} = ({\rm G}m^2)/((2R_{\rm grain})^2) = 3.9 \times 10^{-28}$ N, mientras que la fuerza adhesiva entre los dos mismos granos dada por el modelo DMT (ecuación 2.9) es:  $f_{\rm adh} = 4\pi\gamma R^* =$  $1.19 \times 10^{-7}$ N. Por otro lado, si bien nuestro modelo contempla granos eléctricamente neutros, los mismos pueden presentar una carga eléctrica inducida por diferentes fenómenos, incluso por el efecto de una colisión entre agregados inicialmente neutros (Yoshimatsu y col. 2017, Jungmann y col. 2018). Estudios recientes sugieren que tener en cuenta la carga eléctrica podría trasladar las barreras de fragmentación o rebote a velocidades de colisión mayores (Steinpilz y col. 2020). Según el contexto astrofísico en el cual se apliquen las colisiones granulares, este fenómeno podría ser relevante y debería considerarse en detalle el impacto que podría producir en el desenlace colisional.

## 3.2. Cráteres

#### 3.2.1. Análisis de un caso particular

En primera instancia procedemos al análisis de un caso particular,  $N_p = 50$  y v = 150m/s. La Figura 3.1 muestra la evolución temporal de este proceso colisional. Inicialmente el blanco permanece en reposo, y todas las partículas que conforman al proyectil reciben la misma velocidad vertical v, hacia abajo (Figura 3.1(a)). Se observa que el proyectil se fragmenta rápidamente (Figura 3.1(b)) mientras el cráter formado aumenta de tamaño, cuya culminación se alcanza a los  $\simeq 5\mu$ s (Figura 3.1(d)), a partir de allí no se observan cambios significativos en su morfología. Para corroborar esto, la Figura 3.1(e) nos muestra la estructura cuando ha transcurrido el doble del tiempo que en Figura 3.1(d), y no se evidencian cambio significativos ni en la forma, ni en el tamaño del cráter.



**Figura 3.1:** Evolución temporal de la formación de un cráter por el impacto de un proyectil con  $N_p = 50$  y v = 150m/s (a) antes del impacto; y a tiempos de: (b) 0.5, (c) 2, (d) 5 y (e) 10  $\mu$ s luego del impacto. Se muestra un corte central de espesor 10 $\mu$ m. Los colores indican si los granos pertenecen originalmente al proyectil o al blanco.

Durante la fase energética de formación del cráter se observa una abundante eyección de granos (Figura 3.1(c)). En este caso en particular se eyectaron 291 granos, la mayoría del blanco, provenientes de la zona de las paredes del cráter en formación y alrededores. Este proceso es similar a los estudios de mecánica continua para formación de cráteres en roca (Melosh 1989, Melosh 2011, Osinski y Pierazzo 2013).

En nuestro material granular es útil considerar los cambios inducidos por la colisión en el número de contactos de cada grano, que se calcula determinando el número de granos adyacentes con distancia  $\leq 2R_{\text{grain}}$ , ya que para mayores distancias la interacción inter-granular es cero (ver sección 2.3.1). Esto se conoce como coordinación del grano (C). Antes del impacto, la muestra tiene una coordinación promedio inicial ( $< C_0 >$ ) de 2.75. Como se observa en la Figura 3.2(a), pueden ocurrir fluctuaciones por la forma de armado de la muestra, que llevan a la aparición de algunos granos que presentan 4 contactos o más. Vale destacar que la escala de colores utilizada aquí, y de ahora en adelante muestra en sus límites los granos que cumplen o exceden estas condiciones; esto quiere decir que, por ejemplo, en la Figura 3.2 los granos azules tienen  $C \leq 2$  y los rojos  $C \geq 5$ . Luego del impacto, el número de contactos aumenta en la región radial que rodea al cráter en formación.



**Figura 3.2:** Vista de un corte transversal del blanco de espesor 10  $\mu$ m (a) antes; y a los (b) 2  $\mu$ s y (c) 10  $\mu$ s luego del impacto de un proyectil con  $N_p = 50$  a una velocidad de v = 150m/s. Los granos son coloreados de acuerdo a su número de coordinación.

Al principio,  $2\mu$ s luego del impacto, Figura 3.2(b), la zona es bastante localizada, pero se expande más allá de la forma que toma finalmente el cráter una vez que se estabiliza, Figura 3.2(c). Estas figuras demuestran cómo el impacto deja una zona de compactación localizada en el blanco, exhibiendo una red granular altamente interconectada.

Para cuantificar la compactación, graficamos la densidad relativa de un prisma con base cuadrada de 10µm de lado, centrado en la zona de impacto en función de la profundidad, tomando como profundidad 0 la posición original de la superficie (Figura 3.3(a)). Los datos han sido normalizados con la densidad inicial del blanco. A los 2µs el cráter alcanza una profundidad de 20µm y las zonas bajo el cráter presentan una compactación del 20%, que se extiende hasta una profundidad de  $10 - 15\mu$ m. Debajo de esta capa compactada no se observan cambios en el blanco respecto de su compactación original. La situación cambia a los 10µs del impacto, cuando la forma final del cráter es estable(Figura 3.1(e)). La densidad en las paredes del cráter se ha relajado a valores del  $\simeq 10\%$ . Sin embargo, ahora la zona afectada es mas profunda, llegando a  $60\mu$ m por debajo de la superficie. Esto probaría que después de la fase inicial de excavación, la forma final del cráter es alcanzada junto con un proceso de relajación en un entorno amplio del cráter.

La deformación del material luego del impacto puede estudiarse viendo el campo de los vectores desplazamiento (Figura 3.4). Estos vectores conectan las posiciones iniciales y finales de cada grano con una flecha marcando esta dirección. Alrededor del punto de impacto se observa un movimiento radial que puede asimilarse al "modelo Z" de formación de cráter basada en una expansión radial en 1D (Melosh 1989). Lejos del punto de impacto (fuera del cráter formado), se observa únicamente un movimiento de las partículas del objetivo hacia abajo. Esto parece ser característico del material granular poroso estudiado aquí. En simulaciones de proyectiles que



**Figura 3.3:** Densidad relativa, normalizada con la densidad promedio del blanco, luego de una colisión de un proyectil con  $N_p = 50$ , v = 150 m/s (Figura 3.1): (a) debajo de la zona impactada, en una columna de base cuadrada con 10 $\mu$ m de lado, centrada en el centro del impacto; (b) evaluada en cascarones esféricos de 5 $\mu$ m de espesor alrededor del punto de impacto.

impactan en sólidos atomísticos también se observa un movimiento colectivo, sin embargo, se dirige hacia abajo sólo debajo del impactador y hacia arriba alrededor de las paredes del cráter, formando una pared que sobresale por encima de la superficie (Colla y Urbassek 2000). Este movimiento es natural en sólidos de alta densidad y también ocurre en sólidos continuos (Melosh 1989), pero no es posible en materia porosa, por lo cual no observamos una cresta alrededor del cráter. Sin embargo, hay redeposición de granos en la superficie, aumentando la rugosidad de la misma. Otra opción es utilizar la simetría aproximadamente radial observada aquí para graficar la densidad relativa considerando cascarones esféricos de espesor  $5\mu$ m centrados en el punto de impacto, Figura 3.3(b). Debida a la gran cantidad de materia contenida en estos cascarones se reducen las fluctuaciones.



**Figura 3.4:** Campo vectorial de desplazamiento generado por el impacto de un proyectil con  $N_p = 50$  a v = 150m/s. Los vectores muestran el desplazamiento que tuvieron los granos desde sus posiciones iniciales hasta sus posiciones finales. Las posiciones finales están marcadas por puntos azules. El corte mostrado tiene un espesor de 10 $\mu$ m.

Se observa una compactación fuerte alrededor de las paredes del cráter a los  $2\mu$ s después del impacto; alcanzando valores de  $\simeq 25\%$  sobre los valores de densidad inicial. Esta densidad máxima viaja con una velocidad de 1 - 1,25m/s a medida que va perdiendo intensidad. La onda de compactación generada por el impacto es fuertemente subsónica. Características generales de tales ondas de compactación han sido estudiadas recientemente para el caso unidimensional por Gunkelmann y col. (2016b).

#### 3.2.2. Volumen del cráter

Calculamos el volumen de los cráteres generados de manera numérica, utilizando una rutina pre-construida en OVITO (Stukowski 2009), que aproxima la superficie del cráter con una superficie poligonal y calcula el volumen contenido por ella (Edelsbrunner y Mücke 1994, Stukowski 2014). El parámetro esencial del método es el radio de prueba (de la esfera que rueda para delimitar la superficie), que en nuestro caso se tomó de  $3\mu$ m.

La Figura 3.5(a) muestra el volumen del cráter vs. la energía inicial de impacto del proyectil  $E_{tot}$  (normalizada con  $E_{break}$ ). Observamos una correlación que puede modelarse como una ley de potencia:

$$V \propto E_{\rm tot}^{\theta},$$
 (3.2)

donde 0 <  $\theta$  < 1. Para proyectiles pequeños ( $N_p$  < 100) observamos  $\theta$  = 1/2 y para proyectiles grandes ( $N_p \ge 100$ )  $\theta$  = 2/3. Nuestros resultados excluyen la ley simple  $V \propto E$  ( $\theta$  = 1) que ha sido encontrada para impactos de agregados en sólidos atómicos (Anders y col. 2012). La naturaleza altamente disipativa contenida en nuestras simulaciones granulares consumen una gran fracción de la energía de impacto, que en un principio se hubiese utilizado para formar el cráter, y por ello resulta entonces en una dependencia menor a la lineal (0 <  $\theta$  < 1) del volumen del cráter con  $E_{\rm tot}$ .



**Figura 3.5:** Relación entre el volumen final del cráter, V, y (a) la energía total de impacto  $E_{\text{tot}}$ , (b) la velocidad del proyectil y (c) la masa del proyectil  $N_p$ . Las líneas son guías que siguen leyes de potencia con exponentes (a) 1/2 y 2/3, (b) 1, y (c) 2/3 y 1.

En la Figuras 3.5 (b), (c) se grafica la dependencia del volumen del cráter con la velocidad inicial del proyectil v y con el número de partículas en el proyectil  $N_p$ , respectivamente. Cuantitativamente, si:

$$V \propto v^{\alpha} N_{p}^{\beta}, \qquad (3.3)$$

 $\alpha$  aumenta de 1 a 4/3 a medida que el proyectil aumenta su masa. El exponente  $\beta$ no cambia con la velocidad, mostrando un valor constante  $\beta = 2/3$ . Sin embargo, para proyectiles grandes y velocidades bajas  $\beta \simeq 1$ , indicando un aumento de eficacia en el proceso de craterización. Dado que la energía de impacto del proyectil es  $E_{\rm tot} = 0.5N_pmv^2$  los exponentes  $\alpha$  y  $\beta$  de la ecuación 3.3 pueden ser relacionados con los valores de  $\theta$  de la ecuación 3.2. Para  $N_p$  chicos se obtuvo una dependencia del volumen V con un  $\theta = 1/2$ , es decir,  $E_{\rm tot}^{1/2} = (0.5mN_pv^2)^{1/2} = (0.5m)^{1/2}N_p^{1/2}v^1$ , coincidiendo con el valor  $\alpha = 1$  y también dentro del error esperado (menor al 15 %) con el valor  $\beta = 2/3$  obtenidos mediante el análisis de la ecuación 3.3. Para los valores  $N_p$  grandes,  $\theta = 2/3$  en la ecuación 3.2, lo que implica:  $E_{\rm tot}^{2/3} = (0.5mN_pv^2)^{2/3} =$  $(0.5m)^{2/3}N_p^{2/3}v^{4/3}$ , presentando acuerdo con los exponentes  $\alpha = 4/3$  y  $\beta = 2/3$ obtenidos en la ecuación 3.3.

Este tipo de dependencias del volumen V con la velocidad de impacto v, con la masa del impactador  $N_p$  y con las propiedades del blanco han sido discutidas utilizando leyes de escala (Schmidt y Housen 1987, Melosh 1989, Holsapple 1993). Los impactos se han solido clasificar en dos tipos de regímenes: "de esfuerzo" (strength) o "gravitacional", de acuerdo a si la razón entre el estrés gravitacional ( $\rho gR$ , donde g es la aceleración gravitacional) y la tensión de esfuerzo ("yield strength") S del blanco es mayor o menor que 1. Nuestras simulaciones pertenecen al régimen de esfuerzo, ya que la gravedad no esta presente.

En general, todos los impactos producidos por proyectiles pequeños en comparación al blanco, suelen pertenecer a este régimen. En este régimen, las consideraciones de escala predicen (para proyectiles y blancos que poseen iguales propiedades de material), la siguiente dependencia (Katsuragi 2016):

$$V \propto \frac{mN_p}{\rho} \left(\frac{\rho v^2}{S}\right)^{\kappa} \propto N_p v^{2\kappa}, \qquad (3.4)$$

donde  $mN_p$  es la masa del impactador y S la tensión de esfuerzo del material.

Valores de  $\kappa = 1(1/2)$  corresponden al ajuste de la relación energía(momento). En experimentos de impacto en arenas secas se han obtenido valores de  $\kappa = 0,62$ (Schmidt y Housen 1987, Holsapple 1993, Katsuragi 2016). Este valor es cercano al predicho por el régimen para el ajuste con el momento. Este hecho considera que la disipación de energía en materiales granulares imposibilita la conservación de la energía, pero el momento sí podría conservarse. También nuestros resultados (ecuación 3.3) son cercanos al régimen de ajuste con el momento, ya que nuestro  $\alpha = 2\kappa$  asume valores de 1 a 4/3. El exponente  $\beta = 1$  de la dependencia con  $N_p$ que podría corresponder a un ajuste con el momento según la ecuación 3.4 coincide solo para proyectiles grandes y lentos.

Concluimos que nuestros análisis para craterización por el impacto de agregados de polvo presentan algunas diferencias con las relaciones propuestas dentro de la escala tradicionalmente llamada "*strength*" a las cuales pertenecen nuestras simulaciones, ya que para algunos valores de tamaño de proyectiles y velocidades de impacto, nuestros resultados se alejan levemente de las propuestas en el régimen mencionado.

#### 3.2.3. Morfología del cráter

La forma del cráter queda determinada por dos cantidades: su profundidad, d y su radio  $r_c$ . Para poder realizar un análisis cuantitativo de la morfología del cráter se realizaron mediciones de la profundidad (distancia del grano más profundo en la cavidad del cráter a la superficie original) y del radio (midiendo en la parte superior del cráter el diámetro en dos direcciones ortogonales entre sí y perpendiculares a la superficie, tomando su promedio). Estas cantidades muestran una fuerte dependencia con  $N_p$  y con v.

En las Figuras 3.6 (a), (b) se muestra la dependencia de la profundidad del cráter con  $v \neq N_p$ , respectivamente, que se pueden aproximar por la siguiente ley de potencias:

$$d \propto v^{\alpha'} N_p^{\beta'},\tag{3.5}$$

El exponente  $\alpha'$  aumenta lentamente desde 1/3 para  $N_p < 100$  hasta 4/9 para  $N_p \geq 100$  y  $\beta'$  permanece constante con un valor de 1/3. Estos valores son cercanos a la escala de momento vista en la ecuación 3.4. Sin embargo, notamos que el ajuste no es  $V \propto d^3$ : mientras que la dependencia con la velocidad  $\alpha' = 3\alpha, \beta' \neq 3\beta$ . Esto sucede porque el tamaño del proyectil  $N_p$  influencia de forma diferente al radio del cráter que a su profundidad.

De hecho, el radio del cráter,  $r_c$  exhibe un comportamiento un tanto diferente. En la Figura 3.6 (c) se gráfica el aspecto morfológico del cráter  $(d/r_c)$  vs. v para diferentes  $N_p$ . Mientras que para proyectiles pequeños el cráter formado a velocidades bajas es semiesférico  $(d < r_c)$ , se observa una tendencia a aumentar la profundidad del cráter  $(d > r_c)$  a medida que el proyectil es más grande y más rápido. En nuestras simulaciones el mayor valor obtenido para  $d/r_c$  fue de  $\simeq$  1,6. Si bien la Figura 3.6 (c) muestra esta relación para proyectiles pequeños y medianos, también lo estudiamos



**Figura 3.6:** Dependencia de la profundidad del cráter con: (a) la velocidad inicial del proyectil, y (b) el tamaño del proyectil. (c) muestra la evolución de la razón  $d/r_c$  con la velocidad del proyectil. Las líneas indican leyes de potencia con exponentes 1/3 en (a) y (b).

para proyectiles mayores,  $100 < N_p < 500$ , y la relación no parece modificarse para proyectiles más grandes, manteniéndose en un valor de  $d/r_c \simeq 0.8$  para v = 10m/s y  $d/r_c \simeq 1.6$  para v = 25m/s.

También destacamos que los volúmenes obtenidos mediante este algoritmo polinómico (Stukowski 2009) concuerdan con la aproximación elipsoidal  $V = (2\pi/3)r_c^2 d$ , con excepción de pequeños cráteres que pueden ser bastante irregulares. La Figura 3.7 muestra un ejemplo de un cráter semiesférico producido por un proyectil con  $N_p = 10$  que impactó a v = 25m/s. Aquí podemos visualizar también la compactación producida en la zona adyacente a las paredes del cráter, que se expande a una distancia de  $r_c$  o incluso un poco más. Estudios experimentales de formación de cráteres en medios granulares se han estudiado utilizando bolas como proyectiles (granos esféricos de gran tamaño e indestructibles). Los resultados han sido resumidos por Katsuragi (2016). Un estudio previo (Walsh y col. 2003) reporta una dependencia con  $E_{\rm tot}^{0,25}$  para ambos, profundidad y radio del cráter; mientras que en otro, Uehara y col. (2003) encuentran relaciones diferentes para  $r_c$ y d:  $r_c \propto E_{\rm tot}^{0,25}$  y  $d \propto E_{\rm tot}^{0,33}$ . En un estudio posterior, Simon y De Bruyn (2007) encuentran  $r_c \propto E_{\rm tot}^{0,23}$  y  $d \propto E_{\rm tot}^{0,21}$  en acuerdo con Walsh y col. (2003).

Es menos frecuente el estudio de impactos de proyectiles granulares contra medios granulares. Una notable excepción es Pacheco-Vázquez y Ruiz-Suárez (2011) quienes emplean velocidades lo suficientemente altas para romper al proyectil durante el impacto. Ellos reportan que una dependencia de  $r_{\rm c} \propto E_{\rm tot}^{0,25}$  para un proyectil monolítico (Uehara y col. 2003, Walsh y col. 2003) debe suplementarse con una constante que tenga en cuenta la transferencia de energía horizontal durante el rompimiento del proyectil. En contraste, la profundidad del cráter permanece constante una vez que el proyectil se rompe. Este comportamiento está en contradicción con nuestros resultados, donde los ajustes con la energía de impacto (ecuación 3.2 y ecuación 3.5) implican que ambos, d y  $r_{\rm c}$ , se incrementan  $\propto E_{\rm tot}^k$  con k < 0.25, y la profundidad del cráter continua aumentando con  $E_{\rm tot}$  a pesar de la fragmentación del proyectil. Sin embargo, vemos que para energías pequeñas,  $r_{\rm c}$  converge a un valor finito igual a unos pocos  $R_{\rm grain}$ .



**Figura 3.7:** Estado final (20µs luego del impacto) para un cráter formado por el impacto de un proyectil con  $N_p = 10$  a v = 25m/s. Los granos están coloreados según su número de coordinación. El corte mostrado tiene un espesor de  $10\mu$ m.

Remarcamos que estos estudios anteriores usan impactadores macroscópicos y la gravedad tiene un rol importante durante el impacto, influenciando la escala (Melosh 1989, Holsapple 1993, Katsuragi 2016) por lo que estos resultados experimentales no son inmediatamente comprables con los nuestros. Concluimos en que la disponibilidad de simples leyes de potencia que relacionen medidas del cráter con  $E_{\rm tot}$ ,  $N_p$  y v es una característica común de todo estudio de craterización, aunque los exponentes varíen según el caso estudiado. En nuestras simulaciones observamos cráteres profundos, cuya naturaleza atribuimos al sólido granular estudiado aquí, cuya compactación no es posible en materiales compactos.

En un estudio previo, Ringl, Bringa y Urbassek (2012) analizaron el cráter formado por el impacto de un sólo grano (de radio  $3R_{\rm grain}$ ) contra un medio granular similar al nuestro compuesto de granos de radio  $R_{\rm grain}$ , donde la porosidad era variable. Los cráteres formados eran más irregulares y con una estructura más cónica, similar a un tubo, en particular para los casos con porosidad más alta, que se asemejan a los cráteres hallados durante la misión STARDUST (Iida y col. 2010), cuyo rango de tamaños analizados incluyó la escala micrón. Para blancos granulares, con porosidades mayores a las utilizadas en este capítulo, los cráteres presentaban  $d/r_c \simeq 1,2$ para v = 10 - 30m/s. Estos valores coinciden con los nuestros para proyectiles pequeños (Figura 3.6 (c)).

## 3.3. Eyecta

#### 3.3.1. Campo de eyección

Durante la formación del cráter, la mayor parte del material es presionado contra sus paredes, compactando al material circundante, pero también una parte del volumen del cráter es emitida al vacío. Determinamos el campo de eyección Y (número de granos eyectados por el impacto), contando a todos los granos que se hallan al menos a  $3,5\mu$ m por encima de la superficie original. Esta altura arbitraria se toma para garantizar que la eyecta que la haya alcanzado no colisionara con otros granos o con el borde del cráter, lo que posibilitaría un rebote que la conduzca nuevamente a depositarse en la superficie.

En su trabajo experimental Deboeuf y col. (2009) asumen que el volumen del cráter está dado directamente por el volumen correspondiente de las partículas eyectadas. Este no siempre es el caso, por ejemplo, en la escala nano (Bringa y col. 2002); y podría no ser el caso en materiales granulares. Para relacionar el campo de eyección con el volumen excavado del cráter, dividimos el volumen calculado del cráter V por el volumen promedio de granos en el blanco (obtenido de dividir el volumen del blanco por el número de granos), siendo este valor  $\Omega = 5,11\mu m^3$ . Esto nos da el número efectivo de granos que han sido desplazados del volumen del cráter.



**Figura 3.8:** (a)Correlación entre el número efectivo de partículas eyectadas Y con el número de granos del volumen del cráter,  $V/\Omega$ . Las líneas indican una relación: Y =  $0,05V/\Omega$ . (b) Mismos datos presentados como Y  $* N_p^{1/3}$  versus  $V/\Omega$ ; la línea indica una relación lineal: Y  $* N_p^{1/3} = V/\Omega$ .

La Figura 3.8 (a) muestra Y vs  $V/\Omega$ . Para todos los casos Y es menor al 10% de los granos removidos del cráter y esta fracción máxima es alcanzada sólo por proyectiles pequeños ( $N_p \leq 10$ ). Para proyectiles mayores el proceso es aun menos eficiente, donde solo < 1% de los granos removidos forman la eyecta. En la Figura 3.8 (a) se observa que cuando V aumenta, Y aumenta. También notamos que la eyecta se constituye principalmente por material del blanco, en particular cuando los proyectiles son grandes. Por ejemplo, para v = 100m/s y  $N_p \geq 20$  la eyección es Y > 100, pero sólo hay un grano en esta eyecta que proviene del proyectil. Para proyectiles pequeños la situación es levemente diferente: por ejemplo, hay 3 granos que pertenecen al proyectil en la eyecta total (Y = 69) para  $N_p = 5$  y cuando el proyectil es un solo grano ( $N_p = 1$ ), este rebota y es el único que conforma Y.

En general, encontramos que la eyecta esta compuesta principalmente de monómeros, pocos dímeros y sólo algunos grupos mayores de granos. La Tabla 3.2 muestra ejemplos representativos para un proyectil pequeño y rápido, y para otro grande y lento. En ambos casos las estructuras más grandes emitidas son grupos de 4 granos, con una única excepción de un grupo de 7 partículas. La eyección de grupos de partículas mayores es impedida por las pequeñas  $f_{adh}$  existentes entre los granos.

La Figura 3.9 muestra la dependencia de Y con (a) v y con (b)  $N_p$ . Usamos una ley de potencia para describir:

$$Y \propto v^{\psi} N_p^{\zeta}. \tag{3.6}$$

Proyectil	n=1	n=2	n=3	n=4	n=5	n=6	n=7
$N_p = 30, v = 100 \text{m/s}$	121	7	-	2	-	-	1
$N_p = 500, v = 25 \text{m/s}$	76	11	1	2	-	-	-

**Tabla 3.2:** Número de agregados conteniendo *n* granos, emitidos en 2 impactos representativos.

Nuestros resultados son bien descriptos por la ecuación 3.6 con  $\psi = 1$  y  $\zeta = 1/3$ . Sin embargo, la relación lineal  $Y \propto v$  ha sido encontrada previamente para impactos de un solo grano (grande, sólido e indivisible) contra medios granulares (Ringl, Bringa y Urbassek 2012). En la Figura 3.9 (b) se observa que los casos donde la velocidad de impacto fue menor que  $\simeq 25$ m/s favorecieron el crecimiento del blanco en lugar de producir eyección, debido a la adhesión del proyectil para un tamaño  $N_p \geq 10$ .

El ajuste de la ecuación 3.6 difiere un poco de la de volumen (ecuación 3.3). Mientras que la dependencia con la velocidad es similar ( $\alpha \simeq \psi = 1$ ), con el tamaño del proyectil es diferente ( $\beta = 2/3, \zeta = 1/3$ ). Esta diferencia resulta en la dispersión de Y(v), cuya correlación se observa en la Figura 3.8 (a). Podemos reducir esta dispersión eliminando la dependencia con la velocidad de: ecuación 3.3 y ecuación 3.6, asumiendo  $\alpha = 1$ . Entonces:

$$Y \propto N_n^{-1/3} V. \tag{3.7}$$



**Figura 3.9:** Eyecta Y en función de (a) la velocidad inicial del proyectil y (b) del tamaño del proyectil. Las líneas negras indican leyes de potencia:  $Y \propto v$  en (a)  $y Y \propto N_p^{1/3}$  en (b). La línea delgada azul en (b) marca el límite entre los regímenes de erosión / crecimiento del blanco,  $Y = N_p$ .

La Figura 3.8 (b) muestra que esta relación está justificada para cráteres grandes  $(V > 2000\Omega)$ , donde la constante de proporcionalidad en la ecuación 3.7 es 0.2. Se observan desviaciones para las velocidades de impacto pequeñas, donde se producen sólo cráteres pequeños, y son más pronunciadas para proyectiles mayores, ya que el proyectil forma una especie de escudo que complica la evección de partículas. Esto contrasta con los impactos macroscópicos estudiados por Deboeuf y col. (2009), donde se concluye que el tamaño del impactor no afecta a la escala de evección. Tampoco se observa en los campos de eyección inducidos por agregados atómicos en blancos atómicos, donde Y es proporcional a  $E_{tot}$ , sobre una energía límite, como fue reportado primero para ligaduras de Lennard-Jones (Anders y col. 2004), y luego para blancos metálicos (Anders y col. 2009, Anders y Urbassek 2013) y materiales orgánicos (Seah 2013, Seah y col. 2014). La imagen física detrás de esta simple dependencia es que la energía del proyectil es depositada cerca de la superficie del blanco y entonces está disponible para provocar la eyección de partículas. Esto es diferente en el bombardeo a blancos granulares, ya que aquí la disipación es muy fuerte y no toda la energía del impacto (o al menos no una fracción constante e independiente de v y  $N_p$ ) está disponible para producir eyección. Esto se estudiará con más detalle en la sección 3.4.

#### 3.3.2. Distribuciones de energía

En las Figuras 3.10 (a) y (b) se grafica la distribución de energía de las partículas eyectadas para algunos casos representativos, en escala lineal (a) y en escala log-log (b). La estadística se obtuvo realizando 5 impactos para cada conjunto  $(v, N_p)$ . Las distribuciones llegan a un máximo de energía,  $E_{Y,max}$ , en un rango de  $1-10 \times 10^{-15}$  J.

Una característica impactante de esta distribución es su lenta caída a altas velocidades, que siguen una ley de potencias  $\propto E_{\rm Y}^{-2}$  con la energía de eyección  $(E_{\rm Y})$ . Esta distribución en ley de potencia es bien conocida en el campo de eyección de sólidos por impactos de partículas energéticas, y son marcas de las cascadas de colisiones lineales (Sigmund 1981). En estas cascadas, los proyectiles comparten su energía con los átomos del blanco, el cual consecuentemente recolisiona con otras partículas y así sucesivamente, formando una cascada de colisiones. Esta energía "compartida" durante la cascada sigue una distribución proporcional a  $1/E_{\rm Y}^2$  de las partículas recolisionadoras (Thompson 1968, Sigmund 1981). Cuando las partículas son emitidas desde la superficie, pierden energía superficial de ligadura, U, y la distribución de energía de los átomos eyectados esta dada por:

$$f(E_{\rm Y}) \propto \frac{E_{\rm Y}}{(E_{\rm Y}+U)^3},\tag{3.8}$$

con un máximo en  $E_{\rm Y,max} = U/2$ .



**Figura 3.10:** Distribución de la energía de las partículas eyectadas para algunos casos de  $N_p$  y v en escala lineal (a) y log-log (b). (c) Profundidad inicial de las partículas eyectadas. Las líneas indican ajustes, ver texto (ecuación 3.8).

Incorporamos la ecuación 3.8 en las Figuras 3.10 (a) y (b), observando un excelente ajuste. La interpretación de esta relación es que en el proceso colisional de agregados granulares se generan cascadas de colisiones entre los granos del blanco que distribuyen la energía incidente a los granos vecinos. Los granos cercanos a la superficie que reciben un momento direccionado hacia el exterior son eyectados.

Los valores de U obtenidos en este proceso de ajuste fueron  $\simeq 1.4 \times 10^{-15}$ J (v = 25m/s,  $N_p = 50$ ) y  $2 \times 10^{-15}$ J (v = 25m/s,  $N_p = 150$ ) para impactos de baja v, y  $8 \times 10^{-15}$ J para impactos de alta velocidad (v = 150m/s,  $N_p = 50$ ). Tal dependencia de las condiciones de impacto no se observan en el sputtering de sólidos atómicos, donde U es constante, depende solo del material del blanco pero no del

tipo del proyectil ni de su energía. Para nuestro material granular, una primera aproximación puede ser asumir que la energía de ligadura superficial sea igual a la  $E_{\text{break}}$  multiplicada por la coordinación promedio en el material < C > :

$$U = < C > E_{\text{break}}.$$
(3.9)

Como inicialmente  $\langle C_0 \rangle = 2,75$  y  $E_{\text{break}} = 2,8 \times 10^{-17}$  J (tabla 3.1), la ecuación 3.9 predice  $U = 7,7 \times 10^{-17}$  J, que es 1-2 ordenes de magnitud mas pequeño. Una estimación similar utilizando  $E_{\text{roll}}$  (tabla 3.1) nos da  $U = 2x10^{-16}$ , que sigue siendo pequeño. Esto demuestra que, en contraste con sólidos atómicos, la energía perdida por la eyección de granos no ocurre sólo en el último paso donde se erosiona la superficie, sino que se conecta con la disipación de energía durante toda la cadena de colisiones a la cual el grano eyectado esta sujeto antes de ser emitido. De hecho, se ha mostrado previamente, con simulaciones de Monte Carlo y mediante teoría de transporte (Urbassek y col. 1995), que la distribución de energía en la cascada de colisiones atómicas cambia si las partículas re-colisionadoras pierden energía dentro del material.

Una idea inicial es considerar que el incremento aparente en los valores de U se deba al incremento en la profundidad de origen de la eyecta. Para corroborar esto proseguimos analizando la profundidad que tenían originalmente los granos que conformaron la eyecta de los casos estudiados en esta sección. En la Figura 3.10 (c) se muestra un histograma del número de partículas que poseen determinada profundidad inicial, para los casos  $N_p = 50$  con v = 25m/s y 150m/s. La profundidad promedio aumenta de  $1,1 \pm 0,07\mu$ m para una velocidad baja (v = 25m/s), a  $1,53 \pm 0,05\mu$ m para una velocidad alta (v = 150m/s). Este incremento genera que deban romperse un mayor número de contactos para que finalmente la partícula sea eyectada y justifica el valor aparente de U.

En la Figura 3.11 se ilustran las trayectorias de los granos eyectados del blanco durante la colisión de un proyectil con  $N_p = 50$  y v = 150m/s. Estas figuras incluyen a los granos que efectivamente fueron eyectados (los demás granos fueron removidos para obtener claridad en la imagen). Los puntos son las posiciones originales que tenían estos granos al inicio y las líneas indican las trayectorias, donde un cambio en la misma indica una colisión con otra partícula del entorno. La Figura 3.11 (a) es una vista superior, y la Figura 3.11 (b) es una vista lateral para el mismo caso. La eyecta se origina en una región anular que rodea al punto de impacto. La mayoría de estas partículas eyectadas sufren más colisiones luego del primer impacto, durante las cuales pueden perder una parte importante de su energía cinética inicial.



**Figura 3.11:** Trayectoria de los granos eyectados del blanco luego del impacto de un proyectil con  $N_p = 50$  a v = 150m/s. (a) Vista superior, (b) Vista lateral. Las posiciones iniciales están representadas por puntos.

Los resultados obtenidos aquí sobre el proceso de eyección generalizan hallazgos previos (Ringl, Bringa y Urbassek 2012) del impacto de un proyectil único e indivisible de v = 30m/s sobre un colchón granular. También aquí se obtuvieron distribuciones de energía como leyes de potencia para la Y con un valor aparente de  $U = 1.4 \times 10^{-15}$ J, cercanos a nuestros valores para proyectiles pequeños. Nuestros resultados demuestran que U aumenta con v y con  $N_p$ .

Experimentos sobre las propiedades que posee la eyecta producida durante impactos en blancos granulares son raros (Katsuragi 2016). Una excepción es el trabajo de Deboeuf y col. (2009), quienes dispararon esferas de acero en colchones formados por granos de vidrio y determinaron la energía promedio de la eyecta,  $E_{\text{ave}}$  a partir del movimiento de las partículas eyectadas. Encontraron una relación  $E_{\rm ave} \propto E_{\rm tot}^{0.37}$ . En otro experimento similar (Marston y col. 2012) se observó un exponente diferente en esta relación, para lo cual Katsuragi (2016) concluye en que la situación experimental es confusa. Notemos, sin embargo, que experimentalmente se observa un aumento de  $E_{\text{ave}}$  con  $E_{\text{tot}}$  en concordancia con nuestros resultados sobre que el máximo en la distribución de energía,  $E_{\rm max} = U/2$ , aumenta con v y con  $N_p$ . Nuestras simulaciones muestran fracciones de energía en la eyecta mucho menores. Por ejemplo, para el caso de la Figura 3.1 ( $N_p = 50, v = 150 \text{m/s}$ ), la fracción de la energía que posee la eyecta sobre la energía de impacto es solo del 0.3%. Esta reducción podría deberse a la ruptura del proyectil y a la fricción que hay entre los granos de tamaño micrométrico respecto de los granos macroscópicos. Esto se debatirá en la próxima sección.

## 3.4. Disipación de energía y frenado del proyectil

#### 3.4.1. Análisis de un caso particular

Para esta sección y la próxima se rehicieron algunas simulaciones con información cada pocos pasos temporales con el objetivo de realizar un análisis energético detallado, donde se requieren muchos puntos de salida para ajustar a curvas continuas y poder estimar la derivada de la función de ajuste.



**Figura 3.12:** Serie temporal mostrando el frenado de un proyectil con  $N_p = 200$  que impacta con v = 50m/s en un colchón granular plano. Los cortes mostrados (espesor  $6\mu$ m) corresponden a los tiempos (de izquierda a derecha): 0.325, 0.65, 1.5, 3.75, y 5  $\mu$ s. Los granos son coloreados de acuerdo a: (a) origen (celeste: partículas del proyectil, rosa: partículas del blanco); (b) velocidad vertical  $v_z$ ; (c) energía cinética  $E_{kin}$  en fJ.

En la Figura 3.12 se muestra un caso particular:  $N_p = 200$ , v = 50m/s. En la Figura 3.12 (a) se observa que inmediatamente luego del impacto el proyectil se deforma, tomando una forma achatada sobre la base del cráter en formación a los  $0,65\mu$ s. Luego de  $1,5\mu$ s se observa que el proyectil ya esta fragmentado y se ubica como una capa no continua sobre el fondo del cráter en formación. No se observan mayores cambios en la morfología del cráter formado entre las imágenes mostradas para los últimos dos tiempos considerados, por lo que podemos verificar que el tiempo de simulación es adecuado para mostrar el proceso completo.

En la Figura 3.12 (b) se muestra la velocidad vertical  $v_z$  que posee cada partícula individual. Se observa una transmisión de momento en dirección paralela a la dirección del impacto, que se extiende alrededor de un  $r_c$  más allá del cráter. Se observa que inicialmente sólo partículas superficiales son afectadas por la colisión, pero a partir de los 1,5 $\mu$ s la onda alcanza a las partículas que están debajo del cráter, incluso más allá de su extensión final. Esto sugiere una gran compactación del material circundante. A su vez, a medida que aumenta el radio de partículas alcanzadas, el momento disminuye en magnitud, a causa de la fricción sufrida entre partículas en cada colisión individual.

En la Figura 3.12 (c) vemos como la energía es transferida de las partículas del proyectil a las del blanco durante el proceso de frenado. Luego de  $1,5\mu$ s, cuando el volumen del cráter alcanza su máximo, la disipación por fuerzas de fricción reducen la energía, primero en las paredes laterales del cráter y luego en el fondo, hasta que el movimiento se detiene por completo. Podemos observar que durante la formación del cráter, la diferencia de energía entre los granos aún no colisionados y los que están en movimiento es drástica, y luego de que el volumen final es alcanzado, el gradiente de energía se suaviza. Las Figuras 3.12 (b) y 3.12 (c) se complementan para darnos una mejor compresión de cómo la muestra es afectada durante esta colisión.



Figura 3.13: Serie temporal mostrando el frenado de un proyectil con  $N_p = 200$  que impacta con v = 50m/s en un colchón granular plano. Los cortes mostrados (de espesor  $6\mu$ m) corresponden a los mismos tiempos que la Figura 3.12. Los granos son coloreados de acuerdo a: (a) coordinación respecto a la posición; (b) coordinación; (c) Son los histogramas de coordinación total asociados a cada tiempo.

Para estudiar el proceso de compactación graficamos en la Figura 3.13 un análisis más detallado. La Figura 3.13(a) muestra para el mismo caso de la Figura 3.12 el número de coordinación de cada grano C, y las posiciones en z (vertical) y x(horizontal). Las mismas se realizaron en los ejes (y,z) obteniendo imágenes prácticamente idénticas, demostrando alta simetría en este proceso. Este tipo de figuras nos permite obtener una visión de la coordinación aproximada y las posiciones donde esta variable tiene grandes cambios.

La Figura 3.13 (b) nos da una imagen más nítida del número de coordinación pero sin las guías de posición. Esta figura complementa el análisis de la Figura 3.2 y ambas exhiben en conjunto como es el proceso de compactación durante la colisión. Mientras el cráter se forma (hasta los  $1,5\mu$ s) no hay un aumento en C ni siquiera en su parte inferior, situada aproximadamente en  $z \simeq 50\mu$ m, por el contrario, se observa una aparición y posterior aumento de partículas con número de coordinación C = 0, es decir, partículas aisladas que no tienen contacto con ninguna otra. A partir de ese momento, el cráter deja de aumentar su tamaño, y las partículas que lo rodean aumentan drásticamente su C. La explicación es que al recibir el primer impacto los granos se disocian de sus vecinos (aunque sea una distancia mínima, si no hay solapamiento, C será nulo, según lo visto en la sección 2.3.1), mientras se movilizan hasta encontrarse con otros granos que le prohíben el paso, entonces se adhieren y aumenta su C. La gran porosidad de los agregados es la que posibilita este suceso.

La Figura 3.13 (c) muestra un histograma del número de coordinación de la muestra completa (para las  $N_{tot} = N_p + N_t$  partículas, donde  $N_t$  es el número de partículas inicialmente contenidas en el blanco) para cada uno de los tiempos considerados. Inicialmente el promedio de este histograma nos da un valor de  $C \simeq 2$ . Al impactar el proyectil, algunos pocos granos presentan coordinación cero, pero la mayoría sigue teniendo un sólo contacto y menos de la mitad tienen 2 contactos. En las etapas de formación del cráter hay un aumento de C = 0 y C = 1, en concordancia con lo observado en las figuras anteriores. Luego, una vez que el cráter está alcanzando su forma final, se observa la etapa de gran compactación, donde C = 0 y C = 1 disminuyen y aumenta la cantidad de granos con  $C \ge 2$ . Todo esto nos lleva a concluir que inmediatamente luego de la colisión el proyectil se desarma mientras se frena en el blanco, produciendo un cráter y una compactación subsecuente en las paredes e inmediaciones del cráter ya formado. Los casos con proyectiles pequeños  $(N_p < 20)$  se han excluido de este análisis, ya que estos no fueron suficientes para producir un cráter en el blanco.

#### 3.4.2. Frenado del proyectil

En la Figura 3.14 se muestra el decaimiento de la energía cinética del proyectil E (calculada como la suma de la energía cinética de cada una de las partículas

que componen al proyectil), normalizada con su valor inicial  $E_0$  ( $E_{tot}$  en la sección anterior), en función de la profundidad alcanzada z (calculada como la coordenada z de la posición del centro de masa del proyectil). Por simplicidad en la figura se muestran algunos casos representativos de  $N_p$  y v. Las curvas no comienzan cuando la energía cinética del proyectil tiene su valor inicial  $E = E_0$ , porque cuando el centro de masa del proyectil entra en el blanco (z = 0) la mitad del proyectil ya ha penetrado en el mismo, por lo cual el proceso de frenado ya está comenzado. Podemos observar un decaimiento exponencial en la primera parte de todas las trayectorias, que tiene mayor prolongación si la velocidad considerada es mayor. Luego de esta fase, la energía cae rápidamente a cero para todos los casos estudiados, este hecho se correlaciona con la fragmentación del proyectil que ocurre al final de su trayectoria. La longitud de este decaimiento depende del tamaño del proyectil,  $N_p$ . Podría asumirse que la transición entre el régimen exponencial y el régimen final abrupto del frenado ocurre a un valor de energía determinado, digamos  $E_{\min}$ , independiente de  $E_0$ . Sin embargo, hemos chequeado esta hipótesis cuidadosamente y nuestros resultados prueban que esto no sucede.

Además, se observa que la tasa de decaimiento de la energía durante la fase exponencial (la pendiente de las curvas de la Figura 3.14) es independiente de la velocidad y solo depende del tamaño del proyectil considerado. Si denotamos la longitud del decaimiento de la energía del proyectil con  $\lambda$ , tenemos:  $\lambda = \lambda(N_p)$ .

Podemos cuantificar los resultados de la Figura 3.14 mediante:

$$E = E_0 e^{-z/\lambda}. (3.10)$$



**Figura 3.14:** Disminución de la energía cinética normalizada del proyectil,  $E/E_0$ , como función de la profundidad de penetración, z para proyectiles de diferente tamaño  $N_p$  que impactan con diferente v.

Un resultado principal de nuestro análisis es que  $\lambda$  depende solamente del tamaño del proyectil, no de su energía o velocidad inicial.

La ecuación 3.10 corresponde a un frenado del proyectil proporcional a la energía (llamado usualmente "stopping force" (Sigmund 2000)). En mecánica granular, también es conocido como "drag force". Esta "fuerza de frenado", dE/dz, se define generalmente como la energía que se pierde dE mientras se atraviesa una pequeña longitud dz, y es igual a la fuerza necesaria para desacelerar al proyectil, utilizando la segunda ley de Newton, con la masa del proyectil  $M = mN_p$ :

$$\frac{dE}{dz} = Mv\frac{dv}{dz} = M\frac{dv}{dt} = F.$$
(3.11)

Si estamos en un régimen donde la energía es proporcional al frenado:

$$\frac{dE}{dz} = -\frac{E}{\lambda}.\tag{3.12}$$

Hemos observado que el decrecimiento de E con z sigue la ecuación 3.10. Tal ley es conocida como Ley de Poncelet (usada en el estudio de frenado de objetos rígidos en material granular) o "*inertial drag*" (arrastre inercial) (Katsuragi 2016, Katsuragi y Durian 2007, Omidvar y col. 2014). Podemos extraer el valor de  $\lambda$  (pendientes de las curvas de la Figura 3.14) y su dependencia con el tamaño del proyectil. Por claridad en la imagen mostraremos resultados para dos velocidades: 25m/s y 50m/s.

La Figura 3.15 demuestra que  $\lambda$  es efectivamente independiente de la velocidad de impacto y depende solo del tamaño del impactor siguiendo la relación:

$$\lambda = \lambda_1 N_p^{\rm h},\tag{3.13}$$

donde h  $\simeq 1/3$ . La longitud  $\lambda_1$  cuantifica el frenado de un monómero, que es aproximadamente 0,78µm. El hecho de que la longitud del decaimiento aumenta (y la fuerza de frenado decrece) con el tamaño del proyectil es un resultado relevante de este estudio. Este resultado es análogo al encontrado en impactos de agregados atomísticos (Anders y Urbassek 2007, Anders y col. 2011). Aquí, para distintos sistemas de impactos de proyectiles de cobre/argón en blancos de cobre/argón, e incluso proyectiles de oro impactado en blancos de argón condensado, se observó mediante simulaciones de dinámica molecular una fuerza de frenado proporcional a la energía con un prefactor que depende del tamaño del proyectil en forma de ley de potencia, cuyo exponente es  $\simeq 1/3$ . El mismo exponente también fue encontrado en experimentos y simulaciones de impactos de plata en grafito (Carroll y col. 2000, Pratontep y col. 2003).



**Figura 3.15:** Variación de  $\lambda$  con el tamaño del proyectil,  $N_p$  para velocidades de impacto v = 25 m/s y 50 m/s.

El hecho de encontrar aproximadamente la misma dependencia con el tamaño del impactador apunta a un origen físico común de esta dependencia. Esta idea del aumento de  $\lambda$  en ley de potencia (ecuación 3.13, con h = 1/3) puede expresarse como sigue: Un coeficiente  $\lambda$  independiente del tamaño en la fuerza de frenado (ecuación 3.10) significaría que cada grano en el agregado experimenta el mismo frenado, y que éste es independiente de los otros granos que lo rodean.

Si denotamos con  $E_{\rm g}$  la energía de un grano en el proyectil,  $E_{\rm g} = E/N_p$ , podemos reescribir:

$$\frac{dE}{dz} = -N_p \frac{E_g}{\lambda_1}.$$
(3.14)

La ecuación 3.14 indica que el frenado de granos con igual velocidad se incrementa de manera proporcional con  $N_p$ . Sin embargo, la relación que encontramos en nuestras simulaciones es:

$$\frac{dE}{dz} = -N_p^{2/3} \frac{E_g}{\lambda_1},\tag{3.15}$$

indicando que el frenado es proporcional al área transversal, más que al volumen. La ecuación 3.15 concuerda con la ecuación 3.12 y con la ecuación 3.13 tomando h = 1/3 (Carroll y col. 2000, Anders y Urbassek 2005). Esta idea de que la "fuerza de frenado" de proyectiles con igual velocidad disminuye al aumentar el tamaño del proyectil fue conocida primero bajo el termino "*clearing-the-way effec*" (Sigmund 1989, Shulga y col. 1989), donde se pone énfasis en que los primeros granos del proyectil que chocan son los que sufren el mayor impacto, mientras los granos que siguen se encuentran con un camino libre porque o bien los granos ya fueron removidos previamente o la velocidad relativa del impacto ya esta notablemente reducida; entonces efectivamente disminuye la fuerza de frenado de los mismos.

Finalmente remarcamos que un término de arrastre inercial proporcional a  $v^2$  y al área de sección transversal del proyectil puede ser calculado con hidrodinámica macroscópica cuando los efectos viscosos se tornan pequeños (detalles en Katsuragi (2016) capítulo 2.6.2).

#### 3.4.3. Profundidad alcanzada por los granos del proyectil

En esta sección se estudiará la posición final alcanzada por los granos del proyectil,  $Z_{\rm fin}$ , más allá de la fase exponencial estudiada en las secciones anteriores. Por lo tanto, los datos son extraídos cuando las partículas están detenidas (velocidad cero), en el último paso temporal de la simulación.

Representación de la profundidad del proyectil



**Figura 3.16:** Profundidad en función del tiempo del centro de masa del proyectil  $Z_{ave}$  (línea negra) y de la partícula del proyectil que más penetró  $Z_{min}$  (línea roja). La profundidad del cráter se indica con el punto verde.

Para escoger un valor representativo de  $Z_{\rm fin}$ , en primer lugar analizamos los resultados considerando la mayor penetración alcanzada por alguna partícula del proyectil  $(Z_{\rm min})$ . Consideramos que este valor no es representativo del entorno, ya que el frenado del mismo no se corresponde con el comportamiento de una partícula individual. Por lo tanto, en segunda instancia rehicimos el análisis considerando la profundidad alcanzada por todas las partículas del proyectil usando la posición del centro de masa de las mismas (removiendo previamente las partículas eyectadas durante la colisión, ya que ninguna de estas lograron penetrar la muestra). Tomamos la coordenada z de la misma, denominada  $Z_{\rm ave}$ . Comparamos para varios casos ambas consideraciones, graficando la evolución temporal de  $Z_{\min}$  y  $Z_{ave}$ , donde se muestra un ejemplo en la Figura 3.16. Luego ubicamos la profundidad del cráter (calculada previamente en la sección 3.2.3) y graficamos este punto, donde de la Figura 3.16 podemos ver que optar por  $Z_{ave}$  es una opción mucho más representativa que  $Z_{\min}$ , y por ello fue elegida para realizar este trabajo.

#### Profundidad en función de la masa del proyectil y de su velocidad inicial

Bajo el régimen de fuerza de frenado del proyectil proporcional a la energía (ecuación 3.12), el proyectil nunca se detiene mientras su energía decrece exponencialmente con la distancia a la superficie (ver ecuación 3.10 y Figura 3.12). De hecho, denotando al rango del proyectil como Z(e), que es la profundidad a la cual la energía del proyectil ha disminuido a una fracción e de su energía inicial, tenemos:

$$Z(e) = \lambda ln \frac{1}{e}, \qquad (3.16)$$

en el régimen de frenado proporcional a la energía, expresando el rango infinito formalmente como  $e \to 0$ .



**Figura 3.17:** Profundidad máxima alcanzada por los granos del proyectil en función de la masa del proyectil  $N_p$ , para varias velocidades de impacto.

Pero, como hemos remarcado anteriormente, la fuerza de frenado se vuelve más intensa cuando el proyectil comienza a fragmentarse (Figura 3.14), dejando un valor finito para el rango real  $Z_{\rm fin}$ . Las Figuras 3.17 y 3.18 muestras la dependencia de la profundidad máxima de penetración (en micrones),  $Z_{\rm fin}$ , con la masa inicial del proyectil y con su velocidad, respectivamente. A velocidades altas, si al final de la simulación el blanco granular tiene comprometida su zona de borde, entonces el análisis de esa simulación se elimina, ya que el resultado puede estar afectado

justamente porque el proceso llegó al límite del blanco cúbico, en cuyo caso no estaría siendo el blanco semi-infinito que se intentó representar. Las relaciones lineales mostradas son únicamente guías cualitativas.



**Figura 3.18:** Profundidad máxima alcanzada por los granos del proyectil en función de la velocidad v para varias masas de proyectil.

Vemos que los datos se aproximan bien a la relación predicha en las secciones anteriores, donde  $Z_{\rm fin}$  es proporcional a  $N_p^{1/3}$ , aun siendo que los puntos ahora se refieren al frenado total del proyectil, más allá del régimen exponencial antes analizado. Esto concuerda con la dependencia observada para impactos atomísticos de diferentes materiales (Popok y col. 2011). Como observación, se vislumbra que podría haber alguna leve diferencia para los proyectiles mayores o menores que  $N_p = 100$ , donde las rectas que ajustan estos segmentos de puntos sugieren exponentes 1/4 y 2/5.

Sin embargo, para la dependencia con la velocidad que se observa en la Figura 3.18,  $Z_{\rm fin}$  difiere fuertemente de lo que se espera a partir de la ecuación 3.16 que predice que Z(e) debe ser independiente de v. Por el contrario, encontramos que tiene una alta dependencia con la velocidad de impacto que sigue una ley de potencia:  $Z_{\rm fin} \propto v^q$  con q = 0.4 - 0.6. De hecho, el exponente parece incrementarse ligeramente a medida que aumenta  $N_p$ . El origen de esta dependencia con v de  $Z_{\rm fin}$  (en contraste con Z(e)) es fácil de comprender: el régimen exponencial de frenado termina antes para las partículas más lentas en comparación con las partículas más rápidas (ver Figura 3.14). Como el proyectil se frena por completo rápidamente al dejar el régimen exponencial, la longitud que tenga este régimen introduce una fuerte dependencia en el rango final,  $Z_{\rm fin}$ .

Estudios sobre penetración de proyectiles rígidos (Ambroso y col. 2005) y sobre los tamaños de los cráteres resultantes (Melosh 1989, Holsapple 1993, Katsuragi 2016) nos permiten debatir sobre el valor encontrado para q. En ellos una proporcionalidad con  $E_0^{1/3}$  (correspondiente con un valor q = 0,67) se interpreta como un comportamiento dominado por el esfuerzo ("strength"), donde la energía es disipada por el desplazamiento de todas las partículas que ocupaban el volumen del cráter. Mientras que una dependencia más leve,  $E_0^{1/4}$  (correspondiente con un valor q = 0,5) se describe como un régimen dominado por la gravedad, donde aquí el trabajo realizado en contra del campo gravitacional también cuesta energía. Nuestros resultados permanecen dentro de los límites inferiores o incluso son menores a los de estos modelos, indicando que además del costo energético del régimen de esfuerzo, otros canales de disipación energética, como fricción inter-granular, están operativos y son relevantes.

#### Variación de las coordenadas laterales del centro de masa del proyectil

También se calcularon las posiciones del centro de masa en  $x \in y$  en función de las diferentes velocidades y para los diferentes tamaños de proyectil. Estos datos fueron extraídos del estado final, donde el cráter ya estaba completamente formado.

Podemos ver en la Figura 3.19, que hay una distribución lateral homogénea respecto al centro del cráter, de las partículas que conformaban al proyectil.



**Figura 3.19:** Variación de las coordenadas laterales de la posición del centro de masa en función de la velocidad inicial del proyectil, para los distintos tamaños analizados. (a) coordenada x del centro de masa  $X_{\rm cm}$  (b) coordenada y del centro de masa  $Y_{\rm cm}$ .

En la Figura 3.19 (a) se muestra la coordenada x de la posición del centro de masa  $(X_{\rm cm})$  y en la Figura 3.19 (b) la coordenada y de la misma  $(Y_{\rm cm})$  expresadas en micrones para los diferentes parámetros iniciales simulados. Como referencia, el centro del cráter se encuentra en la posición  $(x, y) = ((36 \pm 3)\mu m, (36 \pm 3)\mu m)$ .

Esto concuerda con nuestros resultados de la sección 3.2.3, el diámetro del cráter tiene simetría, siendo aproximadamente una circunferencia, mientras que la coordenada z varía con  $N_p$  y v, elongando la forma tridimensional final del cráter, como se ha demostrado en las secciones anteriores.

#### 3.4.4. Tiempo de frenado

En esta sección discutiremos sobre el tiempo que le lleva al proyectil transitar este proceso de frenado, y las dependencias del mismo con las variables de estudio. Usando la segunda ley de Newton, (ecuación 3.11) y el frenado proporcional a la energía (ecuación 3.12), tenemos:

$$M\frac{dv}{dt} = -\frac{M}{2}\frac{1}{\lambda}v^2. \tag{3.17}$$

Esta ecuación se puede integrar fácilmente para encontrar el tiempo  $t_{\text{stop}}$ , al cual la velocidad del proyectil haya disminuido de su valor inicial v a una fracción  $\sqrt{ev}$ .

$$t_{\rm stop} = \frac{2\lambda}{v} \left[ \frac{1}{\sqrt{e}} - 1 \right]. \tag{3.18}$$

Aquí,  $t_{\rm stop} \simeq \lambda/v$  hasta un factor de orden unitario. Nuevamente, para  $e \to 0$  el tiempo de frenado formalmente diverge. Tomando e = 0,1, graficamos el tiempo que le lleva al proyectil frenarse hasta tener una energía del 10% de su energía inicial,  $t_{\rm stop}$  en función del tamaño del proyectil  $N_p$ , para dos valores de velocidad inicial, v = 25m/s y v = 50m/s en la Figura 3.20.



Figura 3.20: Tiempo de frenado,  $t_{stop}$ , en función del tamaño del proyectil,  $N_p$ .

Esta figura muestra un buen ajuste con la dependencia prevista de  $t_{\rm stop}$  proporcional a 1/v (el proyectil con v = 50m/s necesita sólo la mitad de tiempo para frenarse comparado con el que posee v = 25m/s) y también la dependencia de  $t_{\rm stop}$  con  $N_p^{1/3}$ , derivada de su relación con  $\lambda$ .

### 3.5. Conclusiones del capítulo

En este capítulo se abordó la física de colisiones entre un agregado granular compuesto por un número de  $N_p$  granos contra un agregado mucho mayor, simulando una superficie plana. Ambos con un factor de llenado  $\phi = 0,36$  y compuestos de granos individuales de sílica de igual tamaño  $R_{\rm grain}$ .

Respecto a la formación y morfología del cráter resultante por el impacto de un proyectil granular sobre un blanco granular encontramos que:

1. Para valores de v y  $N_p$  pequeños, la forma de los cráteres es semi esférica. A medida que v y  $N_p$  aumentan, su profundidad también lo hace respecto a su ancho, dando como resultado una forma más semi elipsoidal.

2. El volumen total del cráter tiene una dependencia menor que la lineal con la energía de impacto, en fuerte contraste con impactos atomísticos.

3. Hay fuerte compactación en las paredes del cráter y, consecuentemente, un aumento en el número de contactos de los granos. No se forma cresta alrededor del cráter.

Para la eyección producida por los impactos concluimos en que:

1. La eyecta  $Y \text{ es} \leq 10\%$  de los granos escavados del cráter (ya que la mayor parte de ellos se compacta sobre las paredes). Y aumenta con v y con  $N_p$ .

2. Y tiene una dependencia menor a la lineal con la energía de impacto, en fuerte contraste con lo observado en agregados atomísticos.

3. La eyecta tiene una distribución de energía caracterizada por una ley de potencia  $E_Y^2$  para altas energías de eyección  $E_Y$ .

4. La profundidad original de los granos eyectados y el número de colisiones que sufren antes de ser emitidos aumentan con v y  $N_p$ .

5. Las velocidades de impacto por debajo de 25m/s permiten el crecimiento del blanco (poco material eyectado), debido a la acreción del proyectil, para  $N_p > 10$ .

Respecto al frenado del proyectil en el blanco

1. Identificamos un régimen para detener los agregados granulares en el cual la energía cinética del proyectil disminuye exponencialmente con la profundidad de penetración. Este régimen termina cuando el proyectil es fuertemente fragmentado y los granos individuales se detienen en el objetivo.

2. Incluso en este régimen de unión débil, el frenado del proyectil se puede describir usando la ley de Poncelet, que fue diseñada inicialmente para la detención de objetos compactos en medios granulares (Katsuragi y Durian 2007), donde la fuerza de frenado es proporcional a la energía del proyectil.

3. La fuerza de frenado de un agregado que contiene  $N_p$  granos es proporcional a  $N_p^{2/3}$  en lugar de  $N_p$ ; es decir, aumenta con el área transversal en lugar de con el volumen del proyectil.

Nuestros resultados presentan fuerte contraste con la caracterización de impactos en escala macro y también con la escala atomística. Las principales contribuciones a estas diferencias son la naturaleza disipativa de nuestras colisiones y la naturaleza porosa del blanco. Los resultados de este capítulo aportarán al modelo de evolución colisional (Capítulos 6 y 7) dando información sobre qué sucede cuando un agregado poroso colisiona con otro de igual porosidad y cuyo tamaño es mucho mayor.
# Capítulo 4

# COLISIONES ENTRE AGREGADOS GRANULARES POROSOS

En las últimas décadas ha crecido mucho el interés por entender el comportamiento de las colisiones entre agregados de polvo. Güttler y col. (2010) presentan un excelente resumen de los trabajos experimentales que se han realizado donde se concentran los resultados de colisiones entre agregados del polvo que abarcan un amplio rango de masas  $(10^{-1}-10^{-12}\text{g})$  y de velocidades de impacto  $(10^{-2}-10^4\text{cm/s})$ . A nivel experimental, aún hay ciertos parámetros que son difíciles de establecer con exactitud, como la porosidad de los agregados (aunque recientemente se han podido mejorar los medios de medición (Kothe y col. 2013)). También condiciones astrofísicas, como vacío y ausencia de gravedad terrestre, son obstáculos a la hora de realizar experimentos en laboratorios. Por último, puede ser difícil tener muestras de sílica pura, sin ninguna impureza como moléculas de agua adheridas a las superficies de los granos que modifiquen valores como la energía superficial de los mismos. Por todo esto, las simulaciones numéricas se han utilizado con énfasis creciente en las últimas décadas para acompañar este tipo de investigaciones.

En este capítulo exploraremos el resultado de colisiones entre agregados esféricos de polvo asimétricos (agregados con diferente tamaño). El objetivo es encontrar dependencias del resultado de las colisiones con la porosidad de los agregados, su relación de masa y la velocidad de impacto.

## 4.1. Colisiones entre agregados esféricos de igual tamaño

Se define relación de masa entre los agregados,  $\mu$ , como:  $\mu = m_t/m_p$ , donde  $m_t$  es la masa del blanco y  $m_p$  la masa del proyectil, siendo  $m_t \ge m_p$ . Numerosos estudios sobre colisiones de agregados de igual masa ( $\mu = 1$ ) han sido llevados a cabo. El código descripto en la sección 2.3 se empleó anteriormente para analizar este caso (Ringl, Bringa, Bertoldi y col. 2012, Gunkelmann y col. 2016b).

A continuación se hará un pequeño resumen de los resultados obtenidos y luego estudiaremos que sucede a medida que  $\mu$  aumenta.

Ringl, Bringa, Bertoldi y col. (2012) estudiaron colisiones simétricas ( $\mu = 1$ ) entre agregados aproximadamente esféricos de sílica, donde cada agregado tiene una porosidad fija ( $\phi = 0,205$ ) y está compuesto por un número  $N_p$  de partículas. Estos agregados chocan a una velocidad v, con un parámetro de impacto b. Determinan la dependencia del resultado de la colisión con  $N_p$ , v y b. La Figura 4.1 (a) muestra el resultado para un caso particular analizado en este trabajo.

Gunkelmann y col. (2016b) estudiaron colisiones simétricas centrales (b = 0) entre agregados muy porosos de sílica donde la porosidad de los dos agregados era la misma pero podía variar en 0,081 <  $\phi$  < 0,211. Buscaron la dependencia del resultado de la colisión respecto de  $N_p$ ,  $v y \phi$ . La Figura 4.1 (b) muestra el resultado para una de las simulaciones realizadas por estos autores. Para obtener el resultado de la colisión y poder relacionarlo con las variables en estudio utilizaron una cuantificación del grado de destrucción del agregado propuesta por Kalweit y Drikakis (2006):

$$N_{\rm s} = 1 - \frac{N_1 + N_2}{N_{tot}},\tag{4.1}$$

donde  $N_1$  y  $N_2$  denota el número de partículas en los dos fragmentos más grandes encontrados luego de la colisión y  $N_{tot} = N_p + N_t$ , donde nuevamente  $N_t$  es el número de partículas en el blanco y  $N_p$  el número de partículas en el proyectil. Luego, utilizando  $N_s$  y los criterios de Kalweit y Drikakis (2006), clasifican la colisión como adhesión o fragmentación.

La Figura 4.2 muestra el resultado de ambos trabajos donde la escala de color representa los valores obtenidos a través de la ecuación 4.1.  $v_{\rm frag}$  representa la velocidad inicial asociada a la energía mínima necesaria para separar 2 granos y tiene un valor de  $v_{\rm frag} = 0.17 {\rm m/s}$  (ecuación 3.1).



(a) Serie temporal de una colisión entre agregados, cada cuadro muestra al sistema cada 5  $\mu$ s. Parámetros iniciales: v = 5m/s,  $b = 0.8R_{grain}$  (Ringl, Bringa, Bertoldi y col. 2012).

(b) Serie temporal de una colisión entre agregados que se mueven verticalmente. La colisión entre ellos es frontal. Parámetros iniciales: v = 30m/s,  $\phi = 0.08$  (Gunkelmann y col. 2016b).

**Figura 4.1:** Resultados de simulaciones con  $\mu = 1$ . Los granos son coloreados según su agregado de origen. El trabajo (a) estudia dependencias con b, mientras que el (b) con  $\phi$ , para valores bajos de  $\phi$ 

En ambos trabajos se analizaron la compactación de los agregados resultantes y la distribución de tamaños final observada luego de la colisión (en ley de potencias). Las principales conclusiones de estos trabajos sobre colisiones simétricas entre agregados porosos compuestos por granos de sílica son:

 Comparaciones con modelos analíticos previos, como con Dominik y Tielens (1997) muestran diferencias de más de un orden de magnitud en las dependencias con la velocidad de impacto v. Esto se debe a la incorporación de fricción, que introduce disipaciones energéticas.





(a) Color: Fragmentación cuantificada por  $N_{\rm s}(\%)$ . Las líneas corresponden a resultados encontrados en estudios previos (Ringl, Bringa, Bertoldi y col. 2012).

(b) Color: Fragmentación de agregados con diferente  $\phi$ , cuantificada por  $N_{\rm s}$  (barra de color lateral). La línea negra marca el valor  $N_s = 0,4$  (Gunkelmann y col. 2016b).



- La velocidad a la cual ocurre la máxima compresión aumenta a medida que los agregados son más grandes. También aumenta el valor de compresión alcanzado.
- La compactación inducida por la colisión en el régimen de adhesión es altamente inhomogénea. Los centros de los agregados son fuertemente compactados, mientras que las capas externas muestran poca alteración. A medida que la velocidad de impacto aumenta, la compactación primero alcanza un máximo y luego decrece. Esto se debe a que los grupos aglomerados ceden lateralmente a la presión de colisión acumulada en el centro. Esta capa porosa puede amortiguar los impactos futuros y proporcionar una importante área de superficie para la astroquímica.
- La distribución de tamaños diferencial (ecuación 1.8) muestra un comportamiento en ley de potencia para los fragmentos que están compuestos por hasta 100 partículas. El exponente es ≃ 2, pero aumenta cuando v aumenta y b disminuye. Para los fragmentos grandes, la distribución es relativamente plana, en oposición al pico observado en Ormel y col. (2009).
- Los aglomerados se adhieren a bajas velocidades y se fracturan a altas velocidades. Se encuentra que la velocidad crítica para fragmentar decrece cuando disminuye el  $\phi$  (para  $\phi < 0.15$ ).

- La mayor compactación se observa a bajas velocidades (cerca de v = 5m/s para los casos más porosos). Velocidades más altas provocan el comienzo de ruptura de los agregados. La velocidad a la que ocurre esta compactación máxima no depende fuertemente de  $\phi$ , al menos para los valores de  $\phi$  estudiados.
- Para los agregados con 0,12 < φ < 0,21 la velocidad crítica para fracturar a los agregados es de ~ 31m/s. Para φ menores disminuye siendo de v ~ 20m/s para φ = 0,08.</li>

### 4.2. Colisiones asimétricas: Importancia de la porosidad

Para comenzar se explorará el impacto de la porosidad p en colisiones asimétricas con una relación de masa alta entre agregados ( $\mu = 60$ ), que colisionan frontalmente (b = 0) con velocidad v = 100m/s. Ambos agregados tienen el mismo factor de llenado ( $\phi = 1 - p$ ), que variará entre 0,12 <  $\phi$  < 0,40, tratando de cubrir un amplio rango, de acuerdo a los rangos de porosidades observados para distintos agregados en el Capítulo 1, secciones 1.4- 1.6. Como ambos agregados poseen el mismo  $\phi$ ,  $\mu = m_t/m_p = N_t/N_p$ . Los radios del proyectil y del blanco están fijos:  $R_p = 24R_{\text{grain}} = 18,235 \mu \text{m y } R_t = 4R_p = 72,5 \mu \text{m}$ , de modo que se mantiene la relación  $\mu = 60$ , sin embargo, debido a fluctuaciones en la densidad de empaquetado provocadas por la misma naturaleza estadística de la forma de empaquetamiento que poseen, la relación de masa puede variar alrededor de  $60 \pm 6$ . Para más detalles ver la tabla 4.1. Al comienzo de todas las simulaciones el blanco permanece en reposo mientras que todas las partículas del proyectil inician con una velocidad v, que tomaremos como vertical ( $v_z$ ), e impactan centralmente contra él.

Para el armado de estas muestras se utilizó el código descripto en la sección 2.3 para agregados esféricos. Se verificó que las partículas dentro de los agregados tuviesen el  $\phi$  requerido, obteniendo una gaussiana centrada efectivamente en el valor requerido, con una dispersión pequeña. También se verificó localmente esta condición calculando el  $\phi$  en cascarones esféricos concéntricos de igual espesor (desviación máxima hallada respecto al valor requerido 18 %, encontrada en el cascarón más externo de un agregado de  $\phi = 0.15$ ; en el resto de los cascarones esta dispersión es de alrededor del 1 %). Esta condición de esfericidad es más difícil de ser cumplida a medida que el agregado es más poroso. Para verificar el impacto de esta situación, se realizaron (para cada uno de los siguientes valores  $\phi = 0.15; 0.25; 0.40$ ) 9 simulaciones de prueba rotando proyectil y blanco (3 rotaciones de proyectil y 3 de blanco de 0, 120 y 240 grados). El mayor error está asociado al caso  $\phi = 0.15$ , como se esperaba, donde la eyecta presenta un error del 15 % y la distribución de tamaños obtenida un 10 %. Para  $\phi = 0.40$  los errores son menores al 4%.

$\phi$	$N_p$	$\phi_p$	$N_t$	$\phi_t$	$\mu$
0.12	1842	0.13	99 206	0.114	53.86
0.15	2248	0.16	133 834	0.154	59.53
0.18	2535	0.183	157 951	0.182	62.31
0.20	2777	0.201	180 893	0.208	65.14
0.22	3246	0.235	199 311	0.229	61.40
0.25	3551	0.257	$224 \ 478$	0.2585	63.22
0.30	4094	0.296	$267 \ 687$	0.308	65.39
0.35	5093	0.36	309 379	0.356	60.75
0.40	5667	0.403	$347 \ 175$	0.399	61.26

**Tabla 4.1:** Características del proyectil y blanco construídos con valores requeridos de factor de llenado  $\phi$  para un valor requerido  $\mu = 60$ .  $N_p$  y  $\phi_p$  son el número de partículas que componen al proyectil y el factor de llenado real obtenido para el proyectil, respectivamente.  $N_t$  y  $\phi_t$  análogo para el blanco.

### 4.2.1. Análisis de valores extremos de factor de llenado

En primer lugar se comparan las colisiones en dos casos extremos:  $\phi = 0.15$  y  $\phi = 0.40$  con el objetivo de obtener información de los procesos relevantes cualitativamente. Luego se presentará información completa con todos los valores de  $\phi$  analizados.

La Figura 4.3 muestra el estado inicial y el resultado de una colisión con v = 100m/s entre dos agregados que poseen  $\phi = 0.15$  y  $\mu = 60$ . Como resultado de la colisión, el proyectil penetra completamente al blanco, lo traspasa arrastrando parte de su material, y continua moviéndose hacia abajo fuera del blanco. Se observa una estructura similar a un cilindro hueco como remanente del blanco, que en este caso contiene un 78,5 % de  $N_{tot}$  ( $N_{tot} = N_p + N_t$ ). También se pude ver que se han fragmentado grandes pedazos del blanco: los seis más grandes concentran el 16,7 % de  $N_{tot}$ . El 4,8 % restante forma parte de la eyecta que se observa en la Figura 4.3, que son en su mayoría monómeros (granos individuales).

La Figura 4.4 muestra el estado inicial y el resultado de una colisión también a v = 100m/s entre dos agregados con  $\mu = 60$  pero que poseen un factor de llenado mayor,  $\phi = 0,40$ . Se observa un cambio drástico en el resultado de la colisión, respecto al caso de factor de llenado bajo. Ahora el proyectil se funde con el blanco. En la terminología de Güttler y col. (2010), esta colisión sería clasificada como "*Sticking by penetration*" (adhesión por penetración). No se eyectan grandes fragmentos y el número de partículas eyectadas total representa un 3,6 % de  $N_{tot}$ . El estado final exhibe un cráter con un borde que evoluciona hacia una estructura de borde florecido, o bien, una estructura de pétalos. Estructuras similares se han observado en impactos de hipervelocidad en blancos compactos (Valerio-Flores y col. 2004,



**Figura 4.3:** Estado inicial (izquierda) y final (derecha) de una colisión con v = 100m/s para agregados con  $\phi = 0.15$ . Los granos se colorean de acuerdo a su posición vertical.



Figura 4.4: Análogo a la Figura 4.4 pero para agregados con  $\phi = 0,40$ .

Marchi y col. 2019), y se ha discutido como su posible origen un flujo sólido. Notamos que nuestros resultados son diferentes de las estructuras transitorias, que aparecen debido a la fluidización de un objetivo granular impactado, que conduce a un efecto "*splash*" (de salpicaduras) (Caballero-Robledo y col. 2012).

### 4.2.2. Diferencias visibles en las primeras etapas de la colisión

La Figura 4.5 está enfocada en los bordes de la región de choque, donde los granos se han coloreado según su velocidad lateral  $v_{xy}$  (componente de la velocidad perpendicular a la velocidad de impacto). Este criterio nos permite separar con bastante claridad el límite entre los granos no colisionados del objetivo y la zona afectada por la colisión.

Para valores de  $\phi$  bajos, (Figura 4.5 (a)), el proyectil permanece reconocible mientras penetra en el agregado. De hecho, la zona de colisión no parece mucho mayor que las extensiones originales del proyectil. También se observa que la zona de colisión no penetra nuevamente en el proyectil, en contraste con el caso de un factor de llenado mayor,  $\phi = 0.40$  (Figura 4.5 (b)), donde se observa un crecimiento esférico de la zona colisionada. Hay una transmisión de la colisión hacia los lados afuera del proyectil, y una rápida propagación de la velocidad lateral en el blanco.



**Figura 4.5:** Evolución temporal de la colisión entre dos agregados de (a)  $\phi = 0.15$ , (b)  $\phi = 0.40$  a una velocidad de v = 100 m/s. Los granos están colorados de acuerdo a su velocidad lateral  $v_{xy}$ . Se muestra un rebanada central de espesor  $10\mu$ m. Los tiempos de izquierda a derecha son: 0.175, 0.25, 0.375, y 0.5  $\mu$ s.

### 4.2.3. Efecto pistón vs. estructura de pétalos

En la Figura 4.6 y la Figura 4.7 se muestra el desenlace temporal para (a)  $\phi = 0.15$ , y (b)  $\phi = 0.40$ . Los granos individuales están coloreados según su velocidad lateral  $v_{xy}$  en la Figura 4.6 y según su velocidad vertical (en dirección de la velocidad de colisión),  $v_z$  en la Figura 4.7.



**Figura 4.6:** Continuación de la Figura 4.5, (a)  $\phi = 0,15$ , (b)  $\phi = 0,40$ , para tiempos posteriores. De izquierda a derecha: 1.5, 3.0, 4.5, 7.5, y 15  $\mu$ s. Los granos son coloreados por su velocidad lateral  $v_{xy}$ .



**Figura 4.7:** Continuación de la Figura 4.5, (a)  $\phi = 0,15$ , (b)  $\phi = 0,40$ , para tiempos posteriores. De izquierda a derecha: 1.5, 3.0, 4.5, 7.5, y 15  $\mu$ s. Los granos son coloreados por su velocidad vertical  $v_z$ .

Estas imágenes corresponden a tiempos posteriores que las mostradas en la Figura 4.5 y muestran como emerge la estructura final de los agregados colisionados. Mientras que para el factor de llenado bajo  $\phi = 0.15$  (Figura 4.6(a)), los granos chocan entre sí al abrirse camino, generando que los granos en el contorno ganen velocidad lateral, para el factor de llenado alto  $\phi = 0.40$  (Figura 4.6(b)), la alta densidad de granos en el material provoca un comportamiento totalmente diferente: todos los granos del blanco son afectados por esta trasmisión lateral, excepto aquellos que están debajo de la zona del impacto, donde este efecto es rápidamente disipado. La Figura 4.7 muestra las velocidades verticales que poseen las partículas para los dos factores de llenado elegidos. Para tener una mejor visualización, si bien las velocida-

des de los granos en dirección vertical son inicialmente 100 m/s, hemos aproximado a la velocidad del centro de masa del sistema  $(100/61 \simeq 1.6 \text{m/s})$  para una relación de masa 60:1). Como estamos interesados en las etapas finales donde el movimiento se ralentiza, la figura se focaliza en velocidades en el rango 0-5 m/s. La Figura 4.7 demuestra como, a medida que el tiempo avanza, la colisión genera el movimiento de una gran cantidad de partículas en el interior del objetivo. Sin embargo, la región colisionada crece en las tres dimensiones de forma aproximadamente esférica para valores altos de factores de llenado y en una sola dirección (la dirección inicial de la colisión) para factores de llenado chicos.

De las imágenes instantáneas mostradas calculamos la velocidad promedio a la cual se expande la zona de colisión, diferenciando la velocidad de la expansión lateral  $v_{\rm l}$  de la velocidad de expansión vertical  $v_{\rm v}$ . Como estas no son velocidades de los granos individuales, no son provistas por el código en sí, sino que se obtienen evaluando la distancia que cubre el frente de expansión en un intervalo de tiempo. De forma análoga, se determina la velocidad de expansión del cráter (velocidad de las partículas del proyectil que penetran en la muestra), denotada como velocidad pistón,  $v_{\rm p}$ . Todas estas velocidades dependen del tiempo transcurrido luego del impacto, su evolución temporal se muestra en la Figura 4.8. Para los agregados más densos  $\phi = 0.40$ , las velocidades de expansión lateral y vertical aproximadamente coinciden entre sí, lo que concuerda con la expansión aproximadamente esférica en la zona de colisión observada en la Figura 4.6 b y en la Figura 4.7 b. Para ser más precisos, la velocidad vertical es ligeramente (pero sistemáticamente) más rápida que la lateral, que es entendible ya que la fuerza de deriva de la expansión, el



**Figura 4.8:** Dependencia temporal de las velocidades de expansión en la zona colisionada: dirección lateral  $v_1$  y dirección vertical  $v_v$ , comparadas con la velocidad del proyectil (pistón),  $v_p$ . Los puntos pertenecen al caso de una colisión entre dos agregados con  $\phi = 0.15$  y  $\phi = 0.40$  que chocan a 100m/s.

momento del proyectil, está direccionado a lo largo de la dirección vertical. Ambas velocidades de expansión también son mayores que la velocidad del proyectil en esos tiempos, es decir, la respuesta del blanco siempre viaja por delante del proyectil.

Para blancos más porosos ( $\phi = 0.15$ ), la velocidad de expansión vertical coincide bastante con la velocidad del proyectil de ese instante, teniendo incluso valores un poco más altos comparados con los del blanco más denso. Esto se debe a que las fuerzas de resistencia que desaceleran al proyectil en el agregado más poroso son menores que en el agregado más denso. Sin embargo, la mayor diferencia que se presenta para agregados porosos respecto de los más densos está en la velocidad lateral, que para los porosos está considerablemente por debajo de la velocidad de expansión vertical en un factor de alrededor de 5. Esto corresponde a la expansión fuertemente asimétrica de la zona de colisión mostrada en la Figura 4.6 a y en la Figura 4.7 a. El fenómeno en el cual un provectil viaja en línea recta a través de un medio sin perder una cantidad de energía considerable es denominado "Efecto pistón". El efecto pistón describe, por ejemplo, colisiones contra un blanco de aerogel (Niimi y col. 2011). También ha sido observado en experimentos como los llevados a cabo por Paraskov y col. (2007), quienes estudiaron impactos en blancos altamente porosos (80%) en escala de mm. Estas colisiones mostraron, en general, un comportamiento destructivo para velocidades de impacto de algunas decenas de m/s, resultando en la formación de cráter y en una erosión extensa de toda la superficie del blanco y de capas más profundas del mismo. Sin embargo, para impactos a velocidades más altas, se detecta evección del otro lado del blanco plano, similar al comportamiento observado aquí para blancos esféricos.

La situación es muy diferente para el estado final de los sistemas con un mayor factor de llenado, donde hemos mencionado la formación de estructuras con forma de pétalos. Estos pétalos se originan desde el borde que rodea al cráter formado durante el impacto, dicho borde o cresta se forma generalmente durante la formación de cráteres (Melosh 1989, Katsuragi 2016). En impactos sobre colchones granulares, el borde usualmente tiene una forma bastante asimétrica pero aquí, este borde se rasga durante la formación y entonces forma la estructura de pétalos (en la Figura 4.4 pueden observarse 8 pétalos formados de esta manera).

La Figura 4.9 muestra más ejemplos de esta estructura de borde para los valores  $\phi = 0,20, 0,25, 0,30$ . En estas imágenes los granos están coloreados de acuerdo a su velocidad lateral  $v_{xy}$ , y se observa una expansión transversal a la abertura del cráter. Como los gradientes de velocidad son muy pequeños, podemos decir que estas estructuras de pétalos pertenecen al estado final de la colisión (ya que la velocidad de fragmentación entre dos granos posee un valor 0.17m/s en este modelo, según ecuación 3.1). Se observa que a medida que el factor de llenado aumenta, comienza la creación de estructura de pétalos. Dos efectos son responsables de esto: (i) a

pequeños  $\phi$ , el borde se va rompiendo durante su expansión después del impacto, ya que la cohesión entre los granos no es fuerte debido al bajo factor de llenado, en estos casos el gradiente de velocidad lateral es tan bajo que el borde mantiene una continuidad; (ii) a mayores  $\phi$  se observa la emisión de pequeños fragmentos que se desprenden de la cresta, dejando agujeros que posibilitan el paso de una cresta continua a una estructura de ensamble de pétalos.



**Figura 4.9:** Para una velocidad de impacto de 100m/s: estructura final  $(t = 100 \ \mu s)$  de la cresta del cráter dejando paso a los pétalos a medida que aumenta el factor de llenado: (a)  $\phi = 0,20$ , (b)  $\phi = 0,25$ , y (c)  $\phi = 0,30$ . Los granos están coloreados de acuerdo a su velocidad lateral  $v_{xy}$ 

La Figura 4.10 muestra la evolución temporal para un factor de llenado intermedio  $(\phi = 0.25)$ , con los granos coloreados según  $v_{xy}$ , donde la estructura de pétalos intenta tener lugar, como se ve a través del gradiente de velocidad entre los estados (b) y (c). Sin embargo, este gradiente se va dispersando en los tiempos posteriores (estados (d)-(f)) hasta quedar lo suficientemente suavizado como para que el desprendimiento de fragmentos del borde pueda producirse. Parecería entonces que la estructura final depende de la competencia entre dos efectos presentes: el efecto pistón y el de pétalos, pero cuyo resultado queda definido en las primeras etapas de la colisión. Notar también que para  $\phi = 0.20$ , (Figura 4.9(a)), la acción del pistón es visible en la parte inferior del blanco, que está casi fragmentado, aunque no constatamos su separación y dado el gradiente de  $v_z$  tampoco esperamos que haya una separación completa posterior.

Finalmente comparamos estos resultados ( $\mu = 60$ ) con colisiones de proyectiles granulares esféricos contra un colchón granular plano ( $\mu \rightarrow \infty$ ), resultados del Capítulo 3. Los resultados son diferentes, antes no observamos fragmentación ya que asumimos que el blanco es un medio plano semi-infinito que no le permite al proyectil o al blanco colisionado continuar su movimiento. Más allá de esto, el proyectil es eficientemente frenado por la superficie, resultando fusionado con el blanco y a su vez se observa una pequeña producción de eyecta. Concluimos que aún estas colisiones con una gran relación de masa,  $\mu = 60$ , se comportan bastante diferente a los impactos sobre un vasto colchón granular.



**Figura 4.10:** Serie temporal de una colisión a v = 100m/s, entre dos agregados con  $\phi = 0.25$ . Los tiempos de izquierda a derecha son: (a) 12.5, (b) 25, (c) 50, (d) 75, (e) 87.5, y (f) 100  $\mu$ s. Los granos están coloreados de acuerdo a su velocidad lateral  $v_{xy}$ 

### 4.2.4. Compactación

La compactación de un agregado puede ser analizada a través del número de coordinación C, que es el número de contactos que cada grano tiene. Nuestras muestras, luego de la colisión, presentan numerosos fragmentos, en su mayoría muy irregulares. Además existen fragmentos incrustados en las paredes de la caja de simulación, lo cual no los hace factibles para el cálculo del  $\phi$  generalizado, y por eso no son tenidos en cuenta para el análisis de coordinación promedio del sistema. Hemos utilizado celdas de Voronoi y también el método de SurfaceMesh en OVITO, para intentar evaluar  $\phi$  local y global de nuestras muestras. Para asegurar la efectividad de estos métodos, se realizaron pruebas en fragmentos esféricos, de volumen total bien determinado. Sin embargo, debido a la baja densidad de las muestras que lleva a numerosas superficies internas, las pruebas arrojaron resultados poco satisfactorios. Se han intentado otros métodos para calcular  $\phi$  local. Ringl, Bringa, Bertoldi y col. (2012), utilizando un código propio, estima el factor de llenado local promediando dentro de esferas de radio  $5R_{\text{grain}}$ , lo cual lleva a errores grandes para fragmentos muy irregulares o aplanados. Gunkelmann y col. (2016a) ha utilizado



**Figura 4.11:** Serie temporal de una colisión a v = 100 m/s, entre dos agregados con (a)  $\phi = 0.15$ , (b)  $\phi = 0.40$ . Los cortes mostrados son centrales con un espesor de 10  $\mu$ m. Los tiempos de izquierda a derecha son: 1.5, 3.0, 4.5, 7.5 y 15  $\mu$ s. Los granos están coloreados de acuerdo a su número de coordinación,  $n_c$ 

VOLMAP en VMD. En nuestro caso, utilizamos C en lugar de  $\phi$ , ya que se puede calcular de manera simple y confiable, y porque realizamos pruebas con fragmentos donde  $\phi$  podía estimarse con precisión razonable, y encontramos que existía una fuerte correlación entre C y  $\phi$ . Sin embargo, un análisis más detallado sería valioso y está planeado para un futuro cercano.

La Figura 4.11 muestra la evolución temporal para  $\phi = 0,15$  (Figura 4.11 (a)) y para  $\phi = 0,40$  (Figura 4.11(b)), donde los granos son coloreados por su número de coordinación individual. Debajo del proyectil hay una onda de compactación (Ringl y col. 2015, Gunkelmann y col. 2016b). Para  $\phi = 0,15$ , inicialmente hay una fuerte onda reflejada que permite que exista una delgada capa de granos con coordinación cero; esto significa que esos granos han perdido todos los contactos con el agregado. Este efecto es mucho más débil para  $\phi = 0,40$ .

La Figura 4.12 muestra el número de coordinación promediado sobre todos los granos,  $\langle C_N \rangle$ , al final de la colisión, como función de  $\phi$ ; también muestra el número de coordinación promedio sólo de las partículas que pertenecen al mayor fragmento luego de la colisión,  $\langle C_{LC} \rangle$  (en nuestro caso es el remanente del blanco). Antes de la colisión el número de coordinación promedio es igual a 2 para todos los valores de  $\phi$ . Esto es natural por la forma en que los agregados han sido construidos aquí, y es una característica común de los agregados ensamblados que se generan por agregación balística (Wada y col. 2011). Se observa que la compactación aumenta fuertemente debido a la colisión, para todos valores de  $\phi$  iniciales considerados. Este incremento no es lineal con  $\phi$  y naturalmente es algo mayor en el blanco colisionado ( $\langle C_{LC} \rangle$ ) que en el promedio sobre todos los granos del sistema ( $\langle C_N \rangle$ ), ya que este último tiene en cuanta la eyecta donde prevalece la baja coordinación. Esta diferencia entre compactación en el mayor fragmento y en todo el sistema es más pronunciada para

los factores de llenado bajos, donde la eyección es alta (ver sección próxima). Güttler y col. (2010) asumen que luego de una colisión,  $\phi$  se incrementa un 50 %. Nosotros estamos de acuerdo sólo cuando los agregados poseen un bajo  $\phi$ , pero hay un cambio en la dependencia para agregados menos porosos, como por ejemplo aquellos con  $\phi = 0,40$ , donde la coordinación promedio es el doble.



**Figura 4.12:** Número de coordinación, C, al final de la simulación  $(t = 100\mu s)$ , en función de  $\phi$ . Se muestra la coordinación promedio para todos los granos  $\langle C_N \rangle$  y sólo para el agregado más grande  $\langle C_{LC} \rangle$ .

### 4.2.5. Eyecta

Finalmente, para concluir esta sección, analizamos el número de granos eyectados, Y, y su dependencia con  $\phi$ . Para este cálculo, se tendrán en cuenta todos los granos que hayan perdido contacto con el remanente del blanco. Para los agregados más porosos esto incluye al fragmento grande que se desprende por debajo como consecuencia del efecto pistón, mientras que para los menos porosos la eyecta se compone principalmente de monómeros.

La Figura 4.13 muestra un cambio abrupto en  $\phi \simeq 0,2$ . Para agregados con valores  $\phi < 0,2$ , encontramos una relación lineal entre el número de eyecta normalizado,  $Y/N_{tot}$  y  $\phi$ , pero para valores mayores esta dependencia cambia dramáticamente. Esto sucede debido al hecho de que a medida que  $\phi$  aumenta, el proyectil se fragmenta pero los fragmentos no logran desprenderse del blanco. Entonces la eyección decrece mientras que el blanco es deformado, observándose una estructura final ovalada. Cuando el factor de llenado sigue aumentando, ( $\phi \leq 0,3$ ), hay una transición hacia el crecimiento de la cresta y su ruptura. La cresta del cráter comienza a crecer, formando la estructura en pétalos mencionada anteriormente, a la cual se le asocia poca eyección de granos. A valores mayores ( $\phi > 0,3$ ), comienzan a desprenderse



**Figura 4.13:** Número total de granos eyectados, Y, normalizados con el número total de granos  $N_{tot}$ , en función del factor de llenado  $\phi$ . La línea indica la separación del régimen de ganancia de masa (debajo de la línea) del régimen de pérdida de masa (sobre la línea).

fragmentos de los pétalos causando que Y aumente nuevamente. En la Figura 4.13 se ha incluido una importante línea:  $Y/N_{tot} = 0,016$ , que separa al régimen de ganancia de masa del régimen de pérdida de masa. Hemos definido ganancia de masa si  $Y < N_p$ , y como tenemos  $\mu = 60$ ,  $Y/N_{tot} < 1/61 = 0,016$  es la condición para ganancia de masa en el blanco.

Desde el punto de vista de ganancia/pérdida de masa, en el caso de  $\phi = 0,15$ , una fracción del 79,8% de la masa inicial permanece en el remanente del blanco, indicando una gran pérdida de masa por la colisión. En el otro extremo, para  $\phi =$ 0,40, el blanco conserva el 96,4% de su masa inicial, por lo que la pérdida de masa es mucho menor. Para los valores intermedios de  $\phi$ , se observa que (sorpresiva mente), algunos estarían sobre la línea que separa los regímenes, sugiriendo poca o ninguna pérdida de masa en esta colisión a hipervelocidad. Estudios previos han encontrado crecimiento en condiciones similares, Meisner y col. (2013) estudiaron impactos entre agregados de  $SiO_2$  de tamaño sub-mm con un factor de llenado inicial de  $\phi = 0,32$ a altas velocidades (hasta 71m/s). Ellos observaron experimentalmente crecimiento como resultado de estas colisiones, con una eficiencia dependiente de la velocidad de impacto. Por otro lado, Teiser y Wurm (2009) encontraron en experimentos que una colisión de proyectiles de  $SiO_2$  sub-cm contra un blanco compacto de  $SiO_2$  a una velocidad alta (algunas decenas de m/s) podría resultar en la adición de masa del proyectil al blanco.

Sin embargo, algunos experimentos predicen un número bajo de eyecta. Güttler y col. (2010) (en su ecuación (39) para materiales porosos y (41) para materiales compactos) predicen para nuestro sistema de colisión el siguiente número de granos eyectados: Y = 23 para  $\phi = 0,15$  y Y = 2 para  $\phi = 0,40$ . Estas predicciones son considerablemente menores que nuestros resultados. También diferimos de los resultados presentados en la figura 11 de Güttler y col. (2010), donde para un proyectil de masa similar, la colisión entre un proyectil poroso y un blanco poroso debería producir fragmentación para velocidades de impacto por encima de 5m/s; y sólo si ambos son compactos (definido por ellos como  $\phi \ge 0,40$ ) esta barrera aumenta a 25m/s. En este trabajo, para una velocidad de impacto varias veces mayor, encontramos fragmentación en el caso poroso pero sólo una fuerte erosión para el caso compacto, en lugar de una fragmentación total.

# 4.3. Colisiones asimétricas con variaciones de velocidad y porosidad: ¿Aglomeración o fractura?

A raíz de los novedosos resultados obtenidos en la sección anterior para  $\mu = 60$ , publicados recientemente (Planes y col. 2020), exploraremos en esta sección colisiones entre agregados porosos de sílica pero ahora tomando otro valor adicional de  $\mu$  y variando la velocidad de colisión 1m/s < v < 200m/s. Mantenemos las variaciones en porosidad igual que en la sección anterior. Entonces la idea es ver cuáles de los parámetros variables en este estudio ( $\mu$ ,  $\phi$ , v) impactan en el resultado final de la colisión y cuales son las dependencias con los mismos. Este objetivo es de crucial importancia para poder desarrollar un modelo completo que permita entender bajo qué condiciones los agregados de polvo permiten la formación de estructuras mayores a través de un proceso colisional, o bien, qué condiciones llevan a la ruptura de los mismos, luego del mismo proceso, dejando como resultado un polvo muy fino.

Como vimos en el Capítulo 1.4.2, sería muy importante poder obtener un modelo que nos oriente y numerosos experimentos se han realizado con tal fin. Un resumen preciso se incluye en Güttler y col. (2010). Por supuesto que es muy difícil recorrer todo el espacio de parámetros (experimental o numéricamente), por lo cual los modelos se construyen considerando ciertos valores umbrales. En esta sección investigaremos cuales son estos valores para nuestro espacio de parámetros. Para ello analizaremos el siguiente conjunto de valores:

- velocidad de impacto (v): 1-200m/s.
- relación de masas ( $\mu$ ): 10, 60.
- factor de llenado ( $\phi$ ): 0.12, 0.15, 0.17, 0.20, 0.25, 0.30, 0.35 y 0.40. (Recordar que en cada simulación los dos agregados poseen el mismo valor de  $\phi$ )

Una observación importante es que todas las colisiones son centrales (es decir, el parámetro de impacto en todas nuestras simulaciones es cero). Al igual que antes,

el blanco está inicialmente en reposo, y el proyectil lo impacta con una velocidad v, siendo esta dirección de impacto denominada vertical por simplicidad.

En todos los casos el blanco tiene el mismo tamaño (cuya masa y número de partículas  $N_t$  depende del valor  $\phi$  elegido), y para variar el valor de  $\mu$ , lo que cambia es el tamaño del proyectil (cuya masa y número de partículas  $N_p$  también dependerá del valor escogido de  $\phi$ ). En esta sección el blanco tendrá un radio fijo de  $R_t = 72.5\mu$ m, y los dos valores de radio del proyectil son: (a)  $R_p = 18\mu m$  y (b)  $R_p = 32.5\mu$ m. Las relaciones de masa ( $\mu = N_t/N_p$ ) esperadas son (a) 60 y (b) 10. La tabla 4.2 complementa la tabla 4.1 con los datos de  $N_t$ ,  $N_p$ ,  $N_{tot} = N_p + N_t$  y el valor exacto de  $\mu$  para sistemas con  $\mu = 10$ .

$\phi$	$N_p$	$N_t$	$N_{tot}$	$\mu_{\rm real}$
0.15	133835	12842	146677	10.42
0.25	224478	21643	246121	10.37
0.40	347175	33246	380421	10.44

**Tabla 4.2:** Características del proyectil y blanco construidos con valores requeridos de factor de llenado  $\phi$  para un valor requerido  $\mu = 10$ .

### 4.3.1. Adhesión vs. fractura

Las Figuras 4.14 y 4.15 muestran el resultado de colisiones entre agregados  $\mu = 60$ , donde cada grano individual es coloreado por su velocidad vertical (en dirección de la velocidad de impacto),  $v_z$ . Con el objetivo de poder contrastar el comportamiento para diferentes  $\phi$  elegimos dos casos extremos: uno con agregados muy porosos ( $\phi = 0,15$ ) y otro con agregados menos porosos ( $\phi = 0,40$ ).

La Figura 4.14 muestra el resultado de una colisión entre dos agregados con  $\phi = 0,40$ a diferentes velocidades de impacto v. Para velocidades  $v \leq 75$ m/s se muestra un corte central de espesor  $20\mu$ m en las Figuras 4.14 (a)-(d). En estos casos el proyectil se funde con el blanco. Se puede observar que las diferencias en  $v_z$  entre las partículas del agregado resultante está en el orden  $10^{-2}$ m/s o menor ( $<< v_{\rm frag} = 0,17$ m/s según ecuación 3.1), por lo que concluimos en que no habrá fragmentación en estos casos. La Figura 4.14 (a) muestra que el proyectil se frena cerca de la superficie del blanco, por lo cual hay un proceso de compactación ya que el volumen del agregado final, que sigue siendo aproximadamente esférico, es muy similar al volumen inicial del blanco, pero ahora en este mismo volumen hay  $5 \times 10^3$  partículas más. A medida que v aumenta, se comienza a percibir un cráter en el blanco cuyo volumen también aumenta con v. Para  $v \simeq 100$ m/s, el blanco comienza a desarmarse, por lo cual para  $v \ge 100$ m/s las Figuras 4.14(e)-(h) muestran una vista global focalizada en el remanente del blanco y en los fragmentos resultantes. Aquí, a medida que aumenta v, el borde del cráter comienza a evolucionar hacia la formación de pétalos discutida en la sección 4.2.3, y un número creciente de partículas son eyectadas. Para las v más altas estudiadas, las partículas en estos pétalos adquieren la suficiente  $v_z$  para desprenderse, causando la total fractura del agregado en varios grupos grandes de granos, además de la gran eyecta de monómeros/dímeros. Por ejemplo, para el caso con v = 200m/s, los primeros 5 fragmentos poseen el 14,6, 8,6, 8,3, 7,5, y 7% de la masa total, respectivamente; mientras que los monómeros representan el 7,2% y los dímeros el 1% de la masa total.



**Figura 4.14:** Estado final de la colisión entre dos agregados con  $\mu = 60$ ,  $\phi = 0,40$  y diferentes velocidades de impacto v(m/s): (a) 10, (b) 25, (c) 50, (d) 75, (e) 100, (f) 125, (g) 150 y (h)200. (a)-(d) son cortes centrales con espesor  $20\mu m$ , (e)-(h) muestran una vista global. Los granos son coloreados por su velocidad vertical.



**Figura 4.15:** Estado final de la colisión entre dos agregados con  $\mu = 60$ ,  $\phi = 0.15$  y diferentes velocidades de impacto v(m/s): (a) 5, (b) 10, (c) 25, (d) 50, (e) 60, (f) 100 y (g)200. (a)-(d) son cortes centrales con espesor  $20\mu m$ , (e)-(g) muestran una vista global. Los granos son coloreados por su velocidad vertical.

La Figura 4.15 muestra los resultados de la colisión entre dos agregados con factor de llenado  $\phi = 0.15$  a diferentes velocidades de impacto v. Para las velocidades más bajas (v < 50 m/s) se muestra un corte central de espesor  $20 \mu \text{m}$  en las Figuras 4.15 (a)-(d). Nuevamente, el proyectil impacta, penetra y genera un cráter en el blanco. Para estos casos la diferencia en la velocidad vertical entre granos en el agregado resultante,  $v_z$ , es del orden  $10^{-3}$ - $10^{-4}$ m/s ( $<< v_{\rm frag}$ , ecuación 3.1), por lo que concluimos en que no se producirá una fractura. De todas formas, estas imágenes exhiben una forma diferente de cráter en comparación con los de las Figuras 4.14 (a)-(d). Como en este caso los agregados son muy porosos ( $\phi = 0.15$ ), se observa el efecto pistón descripto en la sección 4.2.3. En la Figuras 4.14 (d) la estructura se mantiene unida por un filamento delgado, pero la separación no ocurrirá (nuevamente el gradiente de velocidad es mucho menor que la  $v_{\rm frag}$  necesaria para separar dos granos). Las Figuras 4.14 (e)-(g) muestran una visión global de lo que sucede cuando v aumenta hasta provocar la fractura de los agregados. Sin embargo, podemos diferenciar aquí entre dos tipos de fractura dependiendo de v. Para  $60 \text{m/s} \le v \le 100 \text{m/s}$ , la evolución de la colisión está aún gobernada por

el efecto pistón, provocando que el proyectil penetre y arrase con el material a su paso, desprendiéndose por la parte inferior, y provocando compactación en las paredes del remanente del blanco (estructura similar a un cilindro hueco) durante el proceso, como resultado final se observan dos agregados grandes (el remanente del blanco y el agregado compuesto por la mayoría de las partículas del proyectil más las que este arrastró del blanco) y eyecta (monomeros en su mayoría). Cuando v es mayor tiene lugar la destrucción total del agregado, dejando como resultado muchos fragmentos pequeños. Algunos granos son eyectados lateralmente y desde la parte superior del agregado, esto sucede porque el impacto del proyectil acelera al blanco a la velocidad del centro de masa:  $v_{\rm cm} = (m_p/(m_t + m_p))v \simeq 0.02v$ , y algunos granos cercanos a la superficie pierden contacto con el agregado durante esta aceleración. Como se observa en la Figuras 4.15, son granos aislados más que pequeños grupos.

Concluimos en que el resultado de la colisión entre agregados porosos depende de  $\mu$ ,  $\phi$  y v. Un parámetro no incluido en este estudio es el parámetro de impacto, b. Algunos trabajos previos han estudiado como impacta este parámetro en las colisiones granulares (Ringl, Bringa, Bertoldi y col. 2012) y concluyen en que a medida que b aumenta la velocidad necesaria para romper los agregados decrece. En este contexto, en esta sección sólo se analizarán colisiones centrales (b = 0), por lo que se enfocará en obtener la máxima velocidad a la cual la aglomeración entre agregados porosos es posible.

#### 4.3.2. Velocidad de fractura: Posibles desenlaces

En esta sección clasificaremos nuestros resultados según el desenlace observado al final de la colisión. Siguiendo la Figura 1.4, denominamos SP (por sus siglas en inglés "Sticking by Penetration", adhesión por penetración), cuando el proyectil colisiona y penetra en el blanco. En algunos de nuestros casos, al penetrar se produce una perturbación sólo de la superficie y alrededores del blanco, asi que formalmente nuestra clase SP incluye los resultados S2 y S3 de la Figura 1.4. El concepto de fragmentación total (o ruptura) puede variar entre diferentes autores. En la Figura 1.4 este desenlace corresponde a F1 o F3 y cuantitativamente ocurre cuando  $N_{\rm large}/N_{tot} \leq 0.5$  (donde  $N_{\rm large}$  es el número de partículas del mayor fragmento resultante), según Wada y col. (2008). Tomando este criterio denominamos a este desenlee TD (por sus siglas en inglés "Total Destruction", destrucción total). Otro criterio propuesto por Dominik y Tielens (1997) es considerar que TD tiene lugar cuando más de la mitad de los contactos entre granos individuales se pierden a causa de la colisión. El número de contactos total de la muestra,  $n_{\rm c}$ , se relaciona con el número de coordinación visto anteriormente:  $n_{\rm c} = \sum_i C_i/2$ . El problema con esta definición es que se observa una gran compactación cuando los agregados son muy porosos y entonces hay una probabilidad de que el número final de contactos  $(n_{c,f})$  sea mayor que el inicial  $(n_{c,0})$  aún cuando se produzca una fractura total.



(a) Colisión con  $\mu = 10$  y  $\phi = 0,15$ . (b) Muestra el estado inicial. (b.1) Evolución temporal de una colisión con v = 10m/s. No se observa fractura (b.2) Evolución temporal de una colisión con v = 15m/s. Se observan dos fragmentos grandes luego de la colisión.



(b) Colisión con  $\mu = 10$  y  $\phi = 0,40$ . (a) Muestra el estado inicial. (a.1) Evolución temporal de una colisión con v = 30m/s. Se observa un desarmado del blanco (a.2) Evolución temporal de una colisión con v = 40m/s. Se observa una destrucción total de los agregados.

**Figura 4.16:** Vista global de colisiones entre agregados con  $\mu = 10$  con v cercanas al límite de fractura.

Bajo estos criterios mencionados, estudiamos la estructura final de cada colisión realizada para poder categorizarlas. La Figura 4.16 (b) muestra una colisión entre dos agregados que poseen  $\phi = 0.40$  y  $\mu = 10$ . Exploramos las velocidades de impacto cercanas a la velocidad crítica que separe adhesión del proyectil de fractura total de la muestra. La Figura 4.16 (b.1) muestra la evolución temporal cuando v = 30 m/s, aquí el proyectil penetra en el blanco y este no resulta fracturado: se añade una escala de color para mostrar que los granos poseen un gradiente de velocidad vertical del orden  $10^{-2}$ m/s ( $< v_{\rm frag}$ ). Este resultado pertenece a la clasificación SP. En este caso podemos observar la formación de la estructura en pétalos (sección 4.2.3). La Figura 4.16 (b.2) muestra la evolución temporal cuando v = 40 m/s yse observa que esta velocidad es suficiente para romper la muestra completamente. En este caso se registra un gran fragmento (~  $0.5N_{tot}$ ) y 9 fragmentos mayores que en conjunto contienen ~  $0.42N_{tot}$ . A medida que v aumenta, se observa que los fragmentos resultantes poseen menor tamaño. Por ejemplo, para iguales  $\phi$  y  $\mu$ pero v = 200 m/s, el resultado también es TD pero los mayores 5 fragmentos contienen 3,4; 3,3; 2,6; 2,5 y 2,1 % de  $N_{tot}$ , respectivamente. La imagen final es bastante similar a la Figuras 4.14 (g). Estos desenlaces son clasificados como TD.

La Figura 4.16 (a) muestra una colisión entre dos agregados más porosos ( $\phi$  = (0,15) y mismo  $\mu = 10$ . Nuevamente intentamos encontrar velocidades cercanas a la necesaria para fracturar. La Figura 4.16 (a.1) muestra la evolución temporal de la colisión entre los agregados cuando la velocidad inicial es v = 10 m/s, para un tiempo muy largo (1075 $\mu$ s), con los granos individuales coloreados según  $v_z$ . Observamos un pequeño gradiente en  $v_z$  del orden  $10^{-3}$ , por lo cual concluimos con certeza en que los granos permanecerán juntos como resultado de esta colisión. Aquí el proyectil penetra en el blanco generando un cráter (como se observó en las Figuras 4.15 (a)-(d)), correspondiendo al desenlace SP. En este tipo de desenlaces, si el proyectil se fusiona completamente con el blanco la colisión es equivalente a un choque plástico con restitución cero y la velocidad final del conjunto debería ser  $v/(\mu + 1)$ . En las simulaciones realizadas no se ha observado este caso, ya que siempre se han eyectado partículas. Sin embargo, en el caso de la Figura 4.16 (a), donde  $N_{tot} = 146677$ , las partículas eyectadas fueron sólo 750 (0,5 % de  $N_{tot}$ ). Para este caso:  $v/(\mu+1) = 0.909$  m/s y en la figura se observa que hay velocidades un poco por debajo pero muy cercanas a este valor (0.87 - 0.88 m/s). La poca pero existente eyección justifica que la velocidad global sea levemente menor a la obtenida por la relación propuesta.

La Figura 4.16 (a.2) muestra una colisión con las mismas características, salvo que ahora la velocidad de impacto es v = 15m/s y está claro que esta velocidad es suficiente para romper al agregado. Pero este resultado es bastante diferente comparado con el caso de agregados más compactos (Figura 4.16 (b.2)): distinguimos dos fragmentos principales obedeciendo al efecto pistón detallado anteriormente

(sección 4.2.3) y es similar a lo observado en la Figuras 4.15. En este caso el criterio de Wada y col. (2008) para TD no se cumple: el fragmento más grande tiene más del 50% de  $N_{tot}$ . Tampoco es similar a ninguno de los resultados de la figura de Guttler. Diferenciamos este nuevo desenlace denominándolo "TF" (por sus siglas en inglés, "*Two fragments*"). Volviendo a Dominik y Tielens (1997), calculamos el número de contactos inicial y final para los casos mostrados en la Figura 4.16. Para colisiones de la figura Figura 4.16 (a) ( $\phi = 0.15$ ), el número inicial de contactos es  $n_{c,0} = 146899$ , mientras que el final es  $n_{c,f} = 260181$  para v = 10m/s (Figura 4.16 (a.1)) y  $n_{c,f} = 272477$  para v = 15m/s (Figura 4.16 (a.2)). Para los casos en la Figura 4.16 (b) ( $\phi = 0.4$ ), donde  $n_{c,0} = 382972$ , el número final de contactos es  $n_{c,f} = 761063$  para v = 30m/s (Figura 4.16 (b.1)) y  $n_{c,f} = 712583$  para v = 40m/s (Figura 4.16 (b.2)). Por lo tanto, concluimos en que no podemos tomar los criterios de trabajos previos y las razones principales son las compactación resultante del proceso colisional (ver detalles en próxima sección) y el efecto pistón observado.

Además de los desenlaces definidos aquí, es importante saber si al final de la colisión el agregado de mayor tamaño (blanco en nuestro caso), logra un crecimiento o no, es decir, si pertenece a un régimen de ganancia de masa o de pérdida de masa. Notemos que no hay una correspondencia unívoca entre los desenlaces definidos y los regímenes resultantes (por ejemplo, un desenlace "SP" podría resultar en ganancia de masa por adhesión del proyectil al blanco o en disminución de la masa del blanco por eyección de material del mismo). Por lo tanto nos referiremos a ambos, desenlaces y regímenes resultantes, en los análisis siguientes.

#### 4.3.3. Compactación

La compactación puede ser cuantificada a través del número de coordinación promedio  $\langle C \rangle$ , que representa el número de contactos que cada grano tiene, promediado sobre todos los granos. Todos nuestros agregados poseen al inicio  $\langle C_0 \rangle \sim 2$ . Estamos interesados en obtener la compactación que poseen los granos al final, por lo que calculamos la coordinación promedio final  $\langle C_f \rangle$  de los agregados que resultan del proceso colisional: tomamos el agregado mayor en el caso SP, los dos mayores fragmentos en el TF y los 25 fragmentos más grandes en TD (despreciando el resto de las partículas eyectadas en todos los casos, porque la mayoría de ellas son monómeros o dímeros).

La Figura 4.17 exhibe los valores de  $\langle C_f \rangle$  para colisiones entre agregados con diferentes valores de  $\phi$  y  $\mu$  en función de la velocidad de impacto v. En todos los casos observamos un máximo en las curvas. Los resultados para colisiones entre agregado con  $\mu = 10$  están representados en la Figura 4.17 (a) . En todos los casos analizados se observa un máximo en las curvas, si bien la velocidad a la que se alcanzan aumenta con  $\phi$ , este máximo en todos los casos es  $\langle C_f \rangle \sim 4$ . Ringl, Bringa, Bertoldi y col. (2012), usando el mismo método, encuentran que el máximo en la compresión para agregados con  $\mu = 1$  y  $\phi = 0,205$  ocurre a  $v \sim 4,5$ m/s, en contraste con Dominik y Tielens (1997) quienes predicen que esto ocurrirá cuando  $E_{\rm imp} = n_c E_{\rm roll}$ , que equivaldría en este caso a una  $v \sim 0,5$ m/s (tabla 3.1). En nuestro caso esta estimación arroja un valor de  $v \sim 1,2$ m/s, pero de la Figura 4.17 (a) observamos que esto ocurre para  $v \sim 18$ m/s cuando  $\phi = 0,15;0,25$  y a  $v \sim 29$ m/s cuando  $\phi = 0,4$ . La diferencia de un orden de magnitud se mantiene. Nuestros resultados están en acuerdo con Ringl, Bringa, Bertoldi y col. (2012) para valores bajos de  $\mu$ .



(a) Colisiones entre agregados con relación de masa  $\mu = 10.$ 

(b) Colisiones entre agregados con relación de masa  $\mu = 60$  (Ver ajustes en texto).

**Figura 4.17:** Coordinación promedio final en función de la velocidad de impacto para diferentes  $\mu$ . Los colores corresponden a diferentes valores de factor de llenado.

Gunkelmann y col. (2016b) analizaron la variación en  $\phi$  con v, para agregados muy porosos de igual masa ( $\phi \leq 0,21$ ). Encuentran que la compresión máxima ocurre a  $v \sim 5$ m/s para todos los  $\phi$  analizados. Sin embargo, encuentran que los agregados inicialmente más porosos ( $\phi = 0,08$ ) presentan al final un valor 250 % mayor ( $\phi_{\text{final}} = 0,2$ ), mientras que agregados levemente más compactos ( $\phi = 0,21$ ) tenían un incremento menor, de un 170 % ( $\phi_{\text{final}} = 0,35$ ). Por lo tanto  $\phi$  afecta al grado de compactación que sufre el agregado, a mayor factor de llenado inicial, menor es la compactación del mismo. Este comportamiento para la compactación de un target poroso fue también obtenido por Beitz y col. (2013): a mayor  $\phi$  inicial menor es la compactación final, en desacuerdo con algunos modelos que estiman  $\phi_{\text{final}} = 1,5\phi$ para todas las colisiones, independientemente del valor de  $\phi$  y  $\mu$  (Güttler y col. 2010).

Ahora analizaremos si  $\mu$  tiene un rol importante en la compactación. Para ello realizamos el mismo análisis pero ahora para agregados con una relación de masa  $\mu = 60$  (Figura 4.17 (b)), y se observa un escenario muy diferente. No se evidencia

un pico máximo,  $\langle C_f \rangle$  aumenta exponencialmente con v, aunque los valores finales se estabilizan en  $3.5 \leq \langle C_f \rangle \leq 4$  cuando el outcome es TF/TD.

Meisner y col. (2013) encuentran la siguiente relación (su ecuación 7):

$$\phi_{\text{final}}(v) = \frac{a}{b + e^{-cv}},\tag{4.2}$$

(con a = 0.19, b = 0.49, c = 0.39 s/m) en sus estudios sobre crecimiento/erosión cuando múltiples micro-agregados (tamaño 45µm) impactan en un blanco mucho mayor (gran valor de µ). Asumen  $\phi = 0,3$  a falta de poder cuantificar este valor con mayor precisión, y las velocidades de colisión toman valores de hasta  $v \leq 50$ m/s; presentando estos resultados en su figura 14, la cual incluye también resultados previos de Teiser y col. (2011). Incorporamos esta relación a la Figura 4.17 (b) (línea sólida) con a = 3, b = 0.8, y c = 0.25 s/m, observando un ajuste relativamente bueno cuando  $v \leq 50$ m/s. Sin embargo, para velocidades mayores este ajuste parece subestimar los resultados. Para  $\phi = 0,15$  encontramos un buen ajuste con los valores a = 3.8, b = 0.98, c = 0.1 s/m para 0m/s < v < 100m/s (línea punteada).

Si bien se ha analizado  $\langle C \rangle$  en lugar de  $\phi$  (que es otra manera de estudiar la compactación), la ecuación 4.2 funciona sorpresivamente bien, lo cual puede sugerir que en nuestras colisiones cuando el material es compactado, el incremento en  $\phi$  tiene una relación aproximadamente lineal con el aumento en el número de contactos promedio que posee cada grano individual.

En todos nuestros resultados que presentan fractura, encontramos que los fragmentos resultantes tienen una compactación cercana al doble respecto de su valor inicial, esto está en contraste con algunos trabajos previos que asumen una compactación inferior (Langkowski y col. 2008). Para colisiones entre agregados de hielo de igual tamaño,  $\mu = 1$ , Wada y col. (2009) encuentran que las colisiones frontales (b = 0) poseen grandes valores de  $\langle C_f \rangle$  a medida que la energía de impacto aumenta, pero no pueden exceder  $\langle C_f \rangle = 4$ , sugiriendo que el agregado se romperá antes de cruzar este valor. Concluyen en que la razón de este valor no es claro, pero consideran que una partícula con  $C_f = 4$  formaría una estructura aproximadamente tetraédrica, la cual es lo suficientemente estable para minimizar el número de partículas en 3 dimensiones, y que por esta razón será muy difícil para los agregados sobrepasar este valor de  $C_f$ . Nuestros resultados muestran concordancia con los de Wada y col. (2009). En este punto sería interesante analizar si este valor observado tiene relación con el que corresponde al límite isoestático en el cual el número de fuerzas de contacto equilibra el número de condiciones de equilibrio (de rotación y traslación) para que el sistema esté en equilibrio mecánico. Existen numerosos estudios (Edwards 1998, Guyon y col. 1990, Makse y col. 2000) explorando el número de contactos para empaquetados isostáticos, con fuerzas y torques en equilibrio. En

general se considera el número de contactos "mecánicos", Z, donde existe una fuerza de contacto, en vez del número de contactos geométricos, z, donde  $z \ge Z$ . Para esferas sin fricción se espera Z = 2d+1, y para esferas con fricción, Z = d+1, donde d es la dimensionalidad del empaquetamiento (Edwards 1998, Song y col. 2008). En nuestro caso, sería Z = 4. Simulaciones numéricas muestran que estos cálculos se cumplen aproximadamente (Silbert y col. 2002, Song y col. 2008). Nuestro empaquetamiento previo a la colisión se genera con la condición Z = 0, y resulta en z =2. Luego de la colisión,  $z \sim 4$ , pero queda para estudios futuros el cálculo de Z en la configuración final de nuestros sistemas granulares.

### 4.3.4. Análisis energético

Es importante relacionar la energía de impacto necesaria para alcanzar los diferentes desenlaces establecidos como también establecer la energía inicial mínima que se requiere para que al final de la colisión el blanco sufra pérdida de masa.

Dominik y Tielens (1997), en su tabla 3, relacionaron las energías de impacto requeridas para los diferentes desenlaces que definen: adhesión/ rebote/ compresión máxima/ ruptura catastrófica, con  $E_{\text{break}}$  y  $E_{\text{roll}}$ . Si la energía cinética de impacto es menor que  $5E_{\text{roll}} \simeq 5.6 \times 10^{-16}$ J ( $E_{\text{roll}}$  según tabla 3.1), entonces observan adhesión o rebote del proyectil respecto al blanco, sin reestructuración visible de los agregados. En nuestro trabajo todas las colisiones tienen una energía de impacto ( $E_0 = 1/2m_pv^2 = 1/2N_pm_{\text{grain}}v^2$ ) órdenes de magnitud por encima de este valor, por lo que no se espera evidenciar este desenlace. A diferencia de Dominik y Tielens (1997), nuestro sistema es altamente disipativo, y por esta razón esperamos que sea necesaria una mayor  $E_0$  para alcanzar el resto de los regímenes propuestos por ellos.

De acuerdo a la tabla 3 de Dominik y Tielens (1997), el número de contactos en los agregados juega un papel crucial para los regímenes desde pérdidas de monómeros hasta ruptura catastrófica. Por esta razón, hemos graficado en la Figura 4.18 los valores de  $E_0$  para colisiones con diferentes v,  $\mu$  y  $\phi$  en función del número total de contactos iniciales,  $n_{c,0}$ . Los colores diferencian los desenlaces resultantes observados en el estado final de cada simulación, según nuestras definiciones de la sección 4.3.2. Ahora, de acuerdo a Dominik y Tielens (1997), la ruptura catastrófica (si los agregados que colisionan se disuelven en monómeros y fragmentos pequeños) sucede si  $E_0 > 10n_{c,0}E_{\text{break}}$ . Si asumimos que nuestro sistema disipa 99,9% de la  $E_0$  (de acuerdo a la Figura 3.14), tenemos:  $E_0 > (10n_{c,0}E_{\text{break}})/0,001 = (2,66 \times 10^{-13}\text{J})n_{c,0}$  (utilizando  $E_{\text{break}}$  de tabla 3.1), que es la línea punteada de la Figura 4.18, donde se observa que los desenlaces SP y TF están aproximadamente bien separados del desenlace TD. En este punto, coincidimos con el criterio provisto por Dominik y Tielens (1997). Aquí TF pertenece al régimen de fractura observado, pero



**Figura 4.18:** Energía de impacto en función del número de contactos inicial. Los colores diferencian los desenlaces observados en el estado final. Los símbolos diferencian la relación de masas entre los agregados. La línea es la relación: $E_0 = (2,66 \times 10^{-13} \text{J})n_{c,0}$ .

tación (como se describió en la sección anterior). Por ejemplo, para el caso con  $\mu = 60, \phi = 0.15, v = 60 \text{m/s}$  (Figura 4.15(e)), inicialmente  $n_{c,0} = 136293$  y finalmente cuando se evidencian los dos fragmentos  $n_{c,f} = 242825$  (en la eyección hay sólo 1469 monómeros). Atribuimos la discrepancia con el desenlace TF (que queda por debajo de la línea en la Figura 4.18, ocurriendo a bajas energías) al bajo número de contactos que se rompen durante la colisión (la mayoría correspondientes a las paredes del cilindro relacionadas al efecto pistón), y al proceso de compactación, que en conjunto pueden resultar en un aumento del  $n_c$ .

Si el objetivo es ser capaz de distinguir los regímenes de ganancia/pérdida de masa, más allá de los desenlaces, la Figura 4.19 muestra este resultado para cada colisión con diferentes colores. En este caso hemos utilizado el valor de  $\phi$  en el eje de la abscisas para clarificar la relación con este parámetro (que puede relacionarse con experimentos actuales). La línea aquí es:

$$E_0 = (3 \times 10^{-7})\phi. \tag{4.3}$$

Este ajuste funciona bien salvo dos excepciones: en primer lugar, se observa pérdida de masa cuando se espera aglomeración para altas porosidades ( $\phi = 0,15$ ). Esto puede indicar que la ecuación 4.3 no es correcta para describir colisiones de agregados muy porosos, donde los granos se ubican en estructuras dentríticas que son más fáciles de fracturar. En segundo lugar, hay una ventana  $0,2 < \phi \leq 0,3$  donde este



**Figura 4.19:** Energía de impacto en función del factor de llenado. Los colores indican ganancia(G)/pérdida(L) de masa al final de la colisión. Los símbolos diferencian la relación de masas entre los agregados. La línea indica la relación:  $E_0 = (3 \times 10^{-7} J)\phi$ 

modelo subestima la energía necesaria para producir pérdida de masa, por lo que observamos que aquí el crecimiento podría ser posible para una  $E_0$  levemente mayor que las predichas para estos valores intermedios de  $\phi$ . Analizaremos este punto en detalle en las próximas secciones.

#### 4.3.5. Eficiencias de erosión y acreción

Una cantidad generalmente usada para establecer un límite entre crecimiento/decrecimiento de un agregado es el parámetro llamado eficiencia de erosión,  $\epsilon$ , el cual se define de acuerdo a Seizinger y Kley (2013):

$$\epsilon = \frac{N_t^0 - N_t^{\rm f}}{N_p},\tag{4.4}$$

donde  $N_t^0(N_t^f)$  denota el número inicial (final) de granos en el blanco y  $N_p$  es el número de granos en el proyectil. Entonces, ocurre erosión si  $\epsilon > 0$ , es decir, donde la ecuación 4.4 tiene un dominio positivo entre 0 y  $\mu = N_t^0/N_p$ . Esta eficiencia de erosión tiene relevancia cuando no ocurre un proceso de fractura pero el blanco pierde masa de todas formas. En el contexto de formación protoplanetaria, por ejemplo, la erosión ha demostrado ser un proceso relevante como justificación de la fuente de partículas de polvo de tamaño micrón existentes en este entorno (Schräpler y Blum 2011).

Sin embargo, si  $\epsilon < 0$ , entonces parte del proyectil se ha adherido al blanco, y un valor negativo de  $\epsilon$  representa formalmente crecimiento del blanco y no erosión. En tal caso, es importante entender cuáles son las condiciones iniciales que permiten el crecimiento del polvo, posibilitando la formación de cuerpos mayores como resultado del proceso colisional. Algunos autores introducen la eficiencia de acreción,  $\alpha$ , para referirse a este régimen. Por ejemplo, Meisner y col. (2013) definen  $\alpha$  como la relación  $m_{\rm stick}/m_p$ , donde  $m_{\rm stick}$  es la masa que se adhirió al blanco y  $m_p$  es la masa que impactó inicialmente. Como nuestros agregados se componen de granos de igual masa, podemos utilizar el número de granos en lugar de la masa en esta relación. Considerando la ecuación 4.4, se tiene acreción sólo si  $\epsilon < 0$  y los valores posibles de acreción están entre 0 y 1 (ya que el máximo número de granos que pueden adherirse al blanco es  $N_p$ ). En general, esta eficiencia de acreción se multiplica por un factor 100 para mostrar la masa acretada porcentual (Meisner y col. 2013):

$$\alpha = 100 \frac{N_t^{\rm f} - N_t^0}{N_p} = 100(-\epsilon). \tag{4.5}$$

La Figura 4.20 muestra  $\epsilon$  y  $\alpha$  como función de la velocidad de colisión v para varios factores de llenado  $\phi$  (denotados por colores) y dos relaciones de masa  $\mu$  ( $\mu = 10$  es representada por triángulos y  $\mu = 60$  por círculos). A partir de esta figura se puede estimar la velocidad  $v_{ae}$  a la cual termina el régimen de erosión (y comienza la acreción) para los distintos conjuntos de parámetros.

Primero nos enfocaremos en la erosión, Figura 4.20 (a). Para  $\mu = 10$ ,  $\epsilon$  depende del  $\phi$  hasta v < 50m/s desde donde se observa que para velocidades mayores esta dependencia desaparece. Se observa un valor máximo alcanzado de  $\epsilon \sim 8 - 10$ . Sin



**Figura 4.20:** Para todas nuestras simulaciones se muestra la: (a) eficiencia de erosión y (b) la eficiencia de acreción (porcentual); en función de la velocidad de impacto, para diferentes  $\phi$  y  $\mu$ .

embargo, en este rango de velocidades donde se alcanza el máximo, los agregados se han fracturado (desenlace DT). Cuando no ocurre fractura,  $v_{ae}$  aumenta con  $\phi$ . Los casos con  $\mu = 60$  muestran un comportamiento diferente. Mientras que  $v_{ae}$ también aumenta con  $\phi$ , ahora el valor máximo de  $\epsilon$  también depende de v y  $\phi$ , siendo mayor para factores de llenado bajos ( $\phi = 0.15 - 0.18$ ) y para el más alto analizado ( $\phi = 0.40$ ) y presentando su menor valor para los factores de llenado intermedios ( $\phi = 0.20 - 0.35$ ). Seizinger y col. (2013) estudiaron la variación de  $\epsilon$ con v cuando un blanco largo es golpeado por múltiples proyectiles ( $1 \le N_p \le 256$ ). Usando agregados porosos ( $\phi \simeq 0.19$ ), con  $\langle C_0 \rangle \simeq 2$  encontraron que, en general, la eficiencia de erosión es menor para agregados compactos. Si bien coincidimos con estos resultados si sólo consideramos los valores extremos de  $\phi$  estudiados aquí, remarcamos que algunos valores intermedios de  $\phi$  muestran tener un valor de  $\epsilon$ incluso menor.

Observamos que, en general  $v_{ae}$  se incrementa con  $\phi$  y  $\mu$ . A modo de clarificar, si consideramos nuestros valores de  $\mu$ : (a)  $\mu = 60$  y (b)  $\mu = 10$  y dos valores extremos de  $\phi$ : (1)  $\phi = 0.40$  y (2)  $\phi = 0.15$ , podemos combinarlos para obtener 4 casos con los siguientes valores de  $v_{ae}$ : (a1) 80 m/s, (a2) 55 m/s, (b1) 40 m/s, y (b2) 15 m/s. Esta combinación de parámetros corresponden a las Figuras 4.14 - 4.16.

Seizinger y Kley (2013) encuentran que  $v_{ae}$  se incrementa con  $N_p$ , independientemente de  $\phi$ . Para la Figura 4.16, en el caso (a1) el proyectil contiene  $N_p = 5667$  y en el caso (b2)  $N_p = 12842$ , pero  $v_{ae}$  para el caso (a1) es ~ 5 veces menor que en el caso (b2). Por lo que nuestros resultados exhiben un comportamiento diferente.

Schräpler y Blum (2011) realizaron experimentos y simulaciones donde impactaban partículas esféricas de  $SiO_2$  (diámetro  $1,5\mu$ m, masa  $3,5 \times 10^{-15}$  kg) en un blanco poroso ( $\phi = 0,15$ ) con velocidades v = 15, 30, 44, 59 m/s. En su figura 5 presentan el siguiente ajuste para blancos con  $\langle C_0 \rangle \simeq 2$ :

$$\epsilon = \sqrt{(av) - c},\tag{4.6}$$

con a = 1,25s/m y c = 7,5 para  $v \ge 15$  m/s. Esta relación está representada con la línea gris punteada en la Figura 4.20 (a) y para  $\mu = 10$  ajusta perfecto a nuestros resultados.

La eficiencia de acreción,  $\alpha$ , es analizada en la Figura 4.20 (b). Si bien no se observa diferencia en la dependencia con v para los diferentes  $\mu$  analizados, los valores correspondientes a  $\mu = 60$  cubren un rango más amplio que los que poseen  $\mu = 10$ , los cuales terminan cuando v = 40m/s. Esto implica que las colisiones entre agregados con una gran relación de masa tienen una mayor probabilidad de crecimiento a velocidades altas. Wada y col. (2013) realizaron simulaciones entre agregados de tamaño micrón con valores similares de  $\mu$  (1,16,64), pero con agregados compuestos de granos de hielo. Concluyen en que la región de  $\alpha$  positiva aumenta a medida que aumenta  $\mu$  y la eficiencia de crecimiento (promediada sobre el parámetro de impacto) es significativamente beneficiada para relaciones de masa altas. Nuestros resultados coinciden con su conclusión. Sin embargo, ellos estiman una velocidad mínima para lograr ruptura de ~ 8m/s para agregados porosos de sílica, mientras que los resultados obtenidos en este trabajo indican un valor bastante mayor. De todas maneras, Wada y col. (2013) remarcan que las colisiones frontales (b = 0) tienden a incrementar la eficiencia de erosión y aquí todas nuestras simulaciones pertenecen a este caso. Por lo cual más información variando este parámetro sería necesaria.

También observamos una dependencia de  $\alpha$  con  $\phi$  cuando  $v \geq 50$ m/s. Meisner y col. (2013) estudiaron las variaciones de  $\alpha$  cuando agregados con masa de 0,27 $\mu$ g colisionaban con blancos grandes ( $\phi$ =0.30), encontrando la relación:

$$\alpha = c_1 - c_2 v, \tag{4.7}$$

con  $c_1$  y  $c_2$  constantes de ajuste. Por lo tanto, la eficiencia de acreción lógicamente decrece cuando v aumenta. Incluimos la ecuación 4.7 con  $c_1 = 100$  y  $c_2 = 0.85$ s/m en la Figura 4.20 (b) con una línea punteada gris, que ajusta muy bien a nuestros resultados. Sin embargo, este ajuste es sobreestimado para los valores más bajos y más altos analizados de  $\phi$  y subestima para los valores intermedios ( $0.20 \le \phi \le$ 0.35). Por ejemplo, para v = 75m/s el ajuste predice  $\alpha = 0.36$ , pero  $\alpha = 0.48$ cuando  $\phi = 0.25$  y  $\alpha = 0.09$  cuando  $\phi = 0.40$ .

Esto indica, nuevamente, que los valores intermedios analizados de  $\phi$  exhiben una mejor tendencia al crecimiento. Esto puede entenderse mejor si observamos que estos valores intermedios están en la transición entre el efecto pistón y la formación de estructura de pétalos, donde el proyectil tiene suficiente energía para penetrar en el blanco (desenlace SP) pero no la suficiente para producir el desprendimiento de estos pétalos que se forman el la zona de las paredes del cráter (sección 4.2.3). La dependencia de  $\alpha$  con  $\phi$  ha sido estudiada experimentalmente, pero bajo gravedad, donde la re-acreción luego de la colisión no puede ser excluida: Beitz y col. (2011) encontraron que  $\alpha$  depende de  $\phi$  cuando colisionan agregados de igual tamaño cmdm con  $v \leq 2m/s$  y  $\phi < 0.13$ . Deckers y Teiser (2014) estudiaron colisiones entre agregados de tamaño cm-cm o dm-dm construidos por granos de cuarzo irregulares de tamaño micrón con  $\phi = 0.45$ . Encuentran que la eficiencia de acreción no sólo depende de la energía de colisión, sino también del factor de llenado. Concluimos en que ambos, eficiencia de erosión y de acreción, muestran dependencias simples con los parámetros estudiados por nosotros, de las cuales, la más fuerte es con la velocidad v cuando v < 100 m/s.

### 4.3.6. Distribución de masa de los agregados luego de la colisión

Hemos observado uno(dos) fragmento(s) y una emisión de eyecta para los desenlaces SP(TF), respectivamente; y algunos fragmentos grandes además de la emisión de eyecta para el desenlace TD. En esta sección haremos foco en la distribución de masa de los fragmentos pequeños que han sido erosionados de los blancos.



Figura 4.21: Distribuciones de masa para los fragmentos, normalizadas con  $N_{tot}$  para algunos casos. Las líneas indican relaciones en leyes de potencias con exponente -2.8.

La Figura 4.21 muestra la distribución de masa de los fragmentos pequeños (donde n, el número de granos que hay en cada agregado, es menor a  $10^3$ ), normalizada con el número total de partículas,  $N_{tot}$ . Por claridad se exhiben sólo 8 casos diferentes del total analizado variando  $\mu$ ,  $\phi$  y v. La parte de los fragmentos más pequeños puede ser ajustada a una distribución en ley de potencia:

$$F_n/N = kn^{-\tau},\tag{4.8}$$

donde k es una constante. Las líneas de la Figura 4.21 representan estos ajustes a leyes de potencia, todas con el mismo exponente  $\tau = 2,8$ . Un ajuste más preciso de cada caso presenta una variación en el valor de  $\tau$  menor al 15%. Concluimos en que, sorprendentemente,  $\tau$  podría ser aproximadamente independiente de los parámetros estudiados aquí.

Este ajuste dado por la ecuación 4.8 y este valor para  $\tau$  son comunes en modelos de distribución de masa para granos eyectados durante una colisión. Ormel y col.

(2009) encuentran valores de  $\tau = 3,7$  cuando la destrucción entre agregados es muy fuerte y  $\tau = 2$  cuando domina la erosión. Ringl, Bringa, Bertoldi y col. (2012) estudian estas distribuciones para agregados de igual masa ( $\phi = 20,5$ ), variando v. Entre 10m/s < v < 85m/s, encuentran  $2 < \tau < 3,8$ , o bien,  $\tau = 2,9 \pm 30$ %. Luego, nuestros resultados en general, están en acuerdo con estos estudios previos.

Finalmente, notamos que pueden aparecer discrepancias notables en escalas mayores. Por ejemplo, Wurm y col. (2005) estudiaron la distribución de masa para fragmentos resultantes de colisiones entre proyectiles tamaño mm contra blancos grandes, considerando  $\phi \simeq 0.35$  y  $v \simeq 20$ m/s; encontrando que, para los fragmentos pequeños, la distribución de masa es chata y puede describirse por una constante.

### 4.3.7. Crecimiento/Fractura

Finalmente, presentamos algunos límites en  $v, \phi$  y  $\mu$  hasta donde es permitido el crecimiento de agregados porosos como resultado de una colisión.

La Figura 4.22 muestra el número de partículas eyectado normalizado con el número de partículas total para cada colisión,  $Y/N_{tot}$  en función de  $\phi$ , donde los colores diferencian las velocidades iniciales v. Y incluye a todas la partículas que se han desprendido del mayor remanente al final de la colisión.

La Figura 4.22 (a) presenta los casos con  $\mu = 10$ . La línea que separa los regímenes de ganancia/pérdida de masa se obtiene considerando que hay ganancia de masa si  $Y < N_p$ , y como aquí tenemos  $N_t/N_p = 10$  entonces  $Y/N_{tot} < 1/11 \simeq 0,091$  representa ganancia de masa en el blanco. Definimos la velocidad crítica  $v_c$  como la velocidad límite a partir de la cual las colisiones provocan pérdida de masa del



(a) Casos para colisiones entre agregados con  $\mu = 10$ .

(b) Casos para colisiones entre agregados con  $\mu = 60$ .

**Figura 4.22:** Partículas eyectadas normalizadas con  $N_{tot}$  en función de  $\phi$ . Los colores denotan las diferentes v. La línea punteada separa los regímenes de ganancia/pérdida de masa.

blanco. Se observa que el blanco tiene posibilidades de crecer sólo si v < 40 m/s, y esta velocidad crítica  $v_{\rm c}$  decrece con el  $\phi$ . Para  $\phi = 0.15$ ,  $v_{\rm c}$  es menor que 15m/s, cuando  $\phi = 0.25$ ,  $v_{\rm c} \simeq 30 \text{m/s}$ , y para  $\phi = 0.40$  debe ser  $v_{\rm c} \sim 35 \text{m/s}$ .

La Figura 4.22 (b) representa colisiones cuando  $\mu = 60$ . Aquí  $Y/N_{tot} < 1/61 \simeq 0,016$  define la ganancia de masa en el blanco. Esta figura complementa el análisis realizado en la Figura 4.13, donde ahora también se analiza la dependencia con la velocidad de impacto v, diferenciadas por colores. Aquí se observa que el blanco podría crecer incluso a velocidades de impacto tan altas como  $v_c \sim 100$ m/s cuando  $0,22 \leq \phi \leq 0,30$ . Nuevamente, se observa una mayor posibilidad de crecimiento para los factores de llenado intermedios, mostrando acuerdo con lo desarrollado en las secciones anteriores. Esta ventana en  $\phi$  aumenta cuando v disminuye: para  $v \leq 50$ m/s observamos esta probabilidad de crecimiento para todos los valores de  $\phi$  analizados.

En general, estudios previos también encuentran crecimiento para agregados que colisionan a altas velocidades: Teiser y Wurm (2009) realizaron experimentos en escala mm y encuentran crecimiento a velocidades de hasta 50m/s y Meisner y col. (2013) encuentran crecimiento hasta v = 70m/s. En esta sección, intentamos conectar esta velocidad crítica  $v_c$  con variaciones en  $\mu$  y  $\phi$ .

El comportamiento observado en las Figuras 4.22 es bastante diferente a la eyección observada cuando un proyectil granular colisiona contra un colchón granular. Como vimos en la sección 3.3 cuando  $\phi = 0,36$  y 5m/s < v < 200m/s no se observó fragmentación, ya que en estos casos el blanco plano semi-infinito imposibilita que el proyectil, o el blanco colisionado, continúen su movimiento. Aquí la relación de masas tenía un valor 140  $\leq \mu \leq 1400$ . Cómo se vio en detalle en esa sección, el proyectil penetra y es eficientemente frenado por el blanco, resultando en un agregado fusionado donde se forma un cráter y hay una pequeña eyección de partículas, que en todos los casos es  $\leq 10$ % de los granos excavados del cráter: la mayoría de los granos son compactados en las paredes del mismo. En las nuevas simulaciones de este capítulo este porcentaje es notablemente superior si los agregados que colisionan poseen  $\mu = 10,60$  cuando los desenlaces son TF o TD. Concluimos entonces que colisiones entre agregados granulares con diferentes relaciones de masas exhiben un comportamiento muy diferente.

Sin embargo, no hay un consenso claro en la literatura en este punto: algunos autores han concluido que  $\mu$  no afecta al valor de  $v_c$ , otros han intentado separar  $v_c$ según algunos valores umbrales de  $\mu$  y otros han intentado arribar a una relación entre  $v_c$  y  $\mu$ . Wada y col. (2013) encuentran que una relación de masas alta no afecta significativamente a  $v_c$ . Obtienen la relación:  $v_c = 8(R_{\text{grain}}/0.1\mu\text{m})^{5/6}$  para silicatos, que en nuestro caso equivale a 1.5m/s, casi independiente del tamaño o de la relación de masas, en contraste con nuestros resultados. Whizin y col. (2017) colisionan agregados de polvo de tamaño mm-cm y proponen la siguiente relación:  $v_{\rm c} = 1.01 \mu^{1.54} {\rm cm/s}$ . Si  $\mu = 10$  esta ecuación da  $0.35 {\rm m/s}$  y si  $\mu = 60, 5.53 {\rm m/s}$ . Estos valores son muy bajos comparados con nuestros resultados, pero son situaciones y escalas diferentes; y sí coincidimos en que la velocidad de impacto necesaria para fracturar al agregado aumenta a medida que  $\mu$  es mayor. Estos modelos no incluyen ningún efecto que pueda producir  $\phi$ .

Según Güttler y col. (2010), si  $\phi \ge 0.40$  el agregado es considerado compacto, y para  $\mu \ne 1$  encuentran una velocidad crítica  $v_c = 25$ m/s. Si comparamos nuestros resultados de las Figuras 4.22 con la figura 11 de Güttler y col. (2010), vemos que nuestros valores para  $\mu = 10$  son un poco más altos, pero para  $\mu = 60$  encontramos valores de  $v_c$  cercanos al doble. Esto sugiere que tal vez  $\mu = 1/\mu \ne 1$  no es una división suficiente para establecer un régimen. Otro factor importante aquí es que sólo tenemos nuestro valor de  $\phi = 0.40$  para comparar y como la porosidad juega un papel crucial, tal vez para mayores valores de  $\phi$  estas diferencias desaparezcan.

Ahora comparamos nuestros resultados cuando  $\phi < 0,40$  con Güttler y col. (2010), quien encuentra un valor de  $v_c = 3,5$ m/s para  $\mu \neq 1$ . En nuestro estudio encontramos una  $v_c$  que es varias veces mayor a este valor, y que aumenta con ambos:  $\mu$  y  $\phi$ . Por lo tanto, nuevamente concluimos en que los factores de llenado intermedios ( $0,20 < \phi \le 0,30$ ) exhiben una mayor tendencia al crecimiento del blanco a causa del proceso colisional, efecto no observado anteriormente. Además, las dependencias de  $v_c$  analizadas en esta sección muestran que la velocidad crítica para ganar masa depende de la relación de masas y de la porosidad de los agregados.

### 4.4. Conclusiones del capítulo

En este capítulo se estudió la interacción de agregados de polvo aproximadamente esféricos compuestos por cientos de miles de granos individuales de sílica, con tamaño y porosidad determinados, mediante simulaciones numéricas. Hemos visto que incluso para relaciones de masa tan altas como  $\mu = 60$ , las colisiones entre agregados granulares presentan enormes diferencias con aquellos que colisionan sobre un vasto colchón granular, que fueron estudiados en el capítulo anterior. Estos agregados son importantes en muchos escenarios astrofísicos, tales como discos de escombros, impactos en regolito, polvo interplanetario, discos protoplanetarios, etc.

En la sección sección 4.2 se analizó en detalle cómo la porosidad afecta el resultado colisional para el caso de una relación de masa alta  $\mu = 60$  cuando los agregados colisionan a una determinada velocidad de colisión v = 100m/s. La porosidad de los agregados de polvo no suele incluirse en los modelos que simulan la evolución colisional de este tipo de estructuras, porque es un parámetro difícil de determinar con precisión, sumado al hecho de que las propiedades de dispersión de agregados
porosos grandes parecen ser muy similares a aquellas de granos compactos pequeños de igual masa y composición (Graham y col. 2007, Shen y col. 2009, A. M. Hughes y col. 2018). Sin embargo, nuestro trabajo muestra el considerable impacto que la porosidad podría tener en los modelos colisionales. Las conclusiones más relevantes son:

1) Para factores de llenado altos ( $\phi \ge 0.2$ ) se forma un cráter en el blanco, cuya profundidad difiere de las predicciones realizadas en el capítulo anterior. Esto sucede porque los efectos de tamaño finito afectan la penetración del proyectil. También se observa la formación de "pétalos" que son fracturas en la cresta del cráter. Pero para factores de llenado bajos, el proyectil simplemente atraviesa al blanco dejando un gran cilindro hueco a su paso, proceso denominado "efecto pistón". La separación entre estos dos regímenes ocurre en  $\phi \sim 0.2$ 

2) La zona de colisión tiene una expansión que puede descomponerse en dos direcciones: vertical y lateral. Esta zona se expande de manera aproximadamente esférica en blancos densos, pudiendo llegar a todos los granos del blanco. Sin embargo, en materiales altamente porosos predomina la transmisión vertical, siendo la consecuencia el efecto pistón observado.

3) Hay una ventana en factores de llenado  $(0,20 < \phi < 0,35)$  donde se observa que el blanco crece por deposición de masa del proyectil. A  $\phi$  mayores aumenta el número de partículas eyectadas, provocando una pérdida de masa neta y a  $\phi$  menores el efecto pistón provoca el desprendimiento de un gran fragmento.

4) En cualquier evento donde se observó la formación de un cráter, el material debajo y a los costados del mismo presentaron una fuerte compactación: el número de contactos promedio al menos duplicó su valor original. También se observó un comportamiento similar en las paredes del cilindro hueco producido en aquellos casos donde el efecto pistón tuvo lugar.

5) Los resultados de esta sección muestran que en casos de colisiones asimétricas en masa, incluso a altas velocidades (v = 100m/s), los agregados pueden no ser fragmentados significativamente, e incluso mostrar crecimiento. Este resultado puede ser particularmente importante en procesos colisionales de discos de escombros donde las altas velocidades de colisión son comunes (Gáspár y col. 2013, Krivov 2010). Mientras que las colisiones destructivas dominan en estos discos de escombros, nosotros encontramos una ventana en porosidad donde el crecimiento es posible, aún a estas altas velocidades de colisión. También fijan un alto umbral en velocidades para el crecimiento de agregados es discos protoplanetarios.

Luego, en la sección 4.3 se utilizaron diferentes velocidades de impacto, porosidades y relaciones de masa entre agregados para determinar valores umbrales que separen la aglomeración de la fragmentación del blanco. También se estudiaron las eficiencias

de erosión y acreción y la energía mínima de impacto requerida para fracturar la muestra. La distribución de masa de los fragmentos producidos luego de la colisión también se analizó. En resumen, encontramos los siguientes resultados:

1) Podemos clasificar los resultados de nuestras simulaciones en 3 posibles desenlaces: SP (Adhesión por penetración), TD (Destrucción total) – ambos observados previamente por otros autores- y TF (Dos fragmentos) relacionados con el efecto pistón explicado en este capítulo y no observado previamente.

2) Se observa una gran compactación en los agregados como resultado del proceso colisional. Aunque el número de contactos promedio como función de la velocidad de impacto muestra un comportamiento bastante diferente para las dos relaciones de masa analizadas:  $\mu = 10$  y  $\mu = 60$ , el máximo valor alcanzado en ambos casos es similar al doble del valor inicial.

3) La fricción que nuestro modelo incorpora permite aglomeración a energías mayores. Encontramos que la relación  $E_0(J) = (2 \times 10^{-7})\phi$  divide bastante bien los regímenes de ganancia/pérdida de masa.

4) La distribución de masa de los fragmentos pequeños producidos por la colisión siguen la relación:  $F(n) \propto n^{-\tau}$ , con el mismo exponente  $\tau = 2,8$  para todos los casos (error menor al 15%). Por lo tanto,  $\tau$  es aproximadamente independiente de todos los parámetros estudiados en este capítulo.

5) La velocidad mínima necesaria para romper al blanco depende de  $\phi$  y  $\mu$ , contrariamente a algunos estudios previos que lo asumen independiente de estos parámetros.

6) La relación propuesta por Schräpler y Blum (2011):  $\epsilon = \sqrt{av - c}$  ajusta muy bien nuestros resultados de erosión. Más aun: cuando ocurre fractura para  $\mu = 10$ , la eficiencia de erosión es independiente de  $\phi$ , alcanzando un valor máximo de ~ 10.

7) No observamos diferencias notorias en la eficiencia de acreción para  $\mu$  diferentes. Sin embargo, los valores de  $\mu = 60$  cubren un rango mayor de v, comparados con los valores cuando  $\mu = 10$ . Observamos una mayor probabilidad de crecimiento si las colisiones a altas velocidades ocurren entre agregados con mayor relación de masa.

8) Para relaciones de masa altas ( $\mu = 60$ ), nuestros resultados muestran una mayor tendencia al crecimiento para agregados con porosidad entre 65 y 80 % (0,20 <  $\phi < 0,35$ ), donde se puede evidenciar crecimiento del blanco a velocidades de hasta 100m/s, ofreciendo un escenario mucho más positivo para la formación de cuerpos mayores por procesos colisionales. Esta ventana en  $\phi$  aumenta a medida que vdisminuye. Para  $v \leq 50$ m/s, esta posibilidad de crecimiento es observada para todos los  $\phi$  analizados. Sin embargo, para una relación de masa menor ( $\mu = 10$ ), el blanco puede crecer sólo si  $v \leq 40$ m/s para  $\phi = 0,40$  y esta velocidad crítica disminuye con  $\phi$ . Concluimos en que obtener un modelo completo de crecimiento/fractura no es una tarea sencilla, y parece que un sólo valor de corte en la relación de masa o en la porosidad de los agregados no es suficiente para definir umbrales límites que separen a estos regímenes.

# Capítulo 5

# COLISIONES ENTRE AGREGADOS DE HIELO

Los agregados de hielo de agua son comunes en las regiones frías del Universo, debido al hecho de que el hidrógeno y el oxígeno son los dos elementos más abundantes para formar un sólido. Por lo tanto, se acepta comúnmente que un componente esencial de las partículas de polvo y los planetesimales en los discos protoplanetarios es el hielo de agua más allá de la llamada línea de nieve, a la cual la temperatura del gas es lo suficientemente baja como para que el vapor de agua se condense en hielos (Kimura y col. 2020). También los agregados de hielo de agua son un componente fundamental de los cometas (ver sección 1.6). Por último, puede producirse la acumulación reactiva de hielo de agua a partir de átomos de hidrógeno y oxígeno en la superficie de las partículas de polvo en distintos ambientes donde ambos materiales están presentes. En estos casos es interesante estudiar como interactúan las superficies de hielo de los agregados durante la interacción de los mismos.

A nivel experimental, hay una larga historia en estudios de laboratorio sobre la coagulación de agregados de hielo de agua fuera de la astronomía, ya que este suceso se observa en la vida cotidiana y es una propuesta para la formación de copos de nieve (fenómeno propuesto inicialmente por Faraday en 1860). Recientemente han crecido los trabajos experimentales que analizan estas interacciones entre agregados de hielo de agua enfocados en un ámbito de ciencias planetarias, con principal foco en formación planetaria y actividad cometaria (Gundlach y Blum 2015, Wang y col. 2005). En estos experimentos se utilizan cámaras de vacío con el fin de recrear ambientes similares a los del espacio. Sin embargo, estos experimentos son muy sensibles a las condiciones de presión y temperatura, donde si estos no son ajustados de manera precisa pueden llevar a la formación de capas de espesor imperceptible de agua líquida sobre los agregados de hielo, lo que modifica completamente la evolución colisional.

En el ámbito de simulaciones numéricas, el modelo JKR (Johnson y col. 1971) se implementó exitosamente con agregados de hielo de agua hace algunas décadas (Chokshi y col. 1993). Utilizando este marco teórico para agregados submicrométricos, se encontró que éstos continúan con el crecimiento por coagulación incluso a una velocidad de colisión de 50m/s (Wada y col. 2009, Wada y col. 2013), estas velocidades eran mucho mayores a las encontradas para las mismas colisiones entre agregados de sílica. Esto inició un debate sobre la cohesión entre agregados de hielo, o bien, compuestos por una mezcla de hielo y polvo que hasta la fecha no ha llegado a un consenso. Algunos autores han considerado al hielo un material mucho más adhesivo que la sílica, como el reciente modelo de formación de planetesimales propuesto por Drążkowska y Alibert (2017). Otros autores argumentan que el hielo no es más "pegajoso" que la sílica o la materia orgánica compleja (Musiolik y Wurm 2019), aunque en un trabajo posterior Musiolik 2021 muestra mediante simulaciones numéricas a escala cm, que tener un agregado recubierto por un cascarón de hielo de espesor  $1\mu$ m favorece el crecimiento por procesos colisionales, sugiriendo que esto podría mejorar el proceso de formación planetaria en discos protoplanetarios. En modelos de formación planetaria actual, como por ejemplo los modelos de formación planetaria por acreción de pebbles recientemente desarrollados por Guilera y col. 2020 y Venturini y col. 2020, entender las diferencias del resultado colisional entre agregados de sílica y de hielo (o de mezcla de ambos) es esencial para poder reproducir resultados que ajusten a las observaciones astronómicas. Muchos de estos modelos requieren conocer los parámetros que influencian el resultado colisional cuando el hielo es un material predominante. La clave central en este punto es la falta de determinación del parámetro  $\gamma$  (energía superficial) del hielo de agua de manera precisa. Analizando la literatura contemporánea hemos encontrado que en esto tampoco hay un consenso en la comunidad ya que se utilizan muchos valores diferentes para este parámetro.

En este capítulo presentaremos algunos resultados preliminares de nuestro actual estudio sobre colisiones entre agregados de hielo, donde nuestro interés inicial es ver si el resultado de las colisiones tiene una dependencia fuerte con  $\gamma$  (dentro del rango de los valores más utilizados), o si los cambios pueden despreciarse.

# 5.1. Parámetros del hielo

Los agregados de hielo de agua también se construyeron siguiendo el modelo descripto en la sección 2.4, y las interacciones estarán dadas por nuestro modelo granular (sección 2.2.1) con los parámetros detallados en la tabla 5.1.

Parámetro	Símbolo	Valor	Referencia
masa	m	$1,84 \times 10^{-15} \text{kg}$	
radio	$R_{grain}$	$0,76\mu\mathrm{m}$	
densidad	ρ	$1 \times 10^3 \mathrm{g/m}^3$	(1)
Módulo de Young	$Y_m$	7GP	(1)
Coeficiente de Poisson	ν	$\nu = 0.25$	(1)
Constante de disipación	A	$0.5 \times 10^{-9} \mathrm{m}$	(2)
Coeficiente de restitución	$\epsilon$	0,69	(2)
distancia crítica rodadura	$\xi^{yield}$	$1 \times 10^{-10} s$	(2)
tiempo de colisión	$ au_c$	2,5ns	(2)
paso temporal	$\Delta t$	$50 \mathrm{ps}$	(2)
Energía de ruptura	$E_{\rm break}$		ec. 2.6
Energía de rodadura	$E_{\rm roll}$		ec. 2.20

**Tabla 5.1:** Parámetros del material para granos de hielo. Referencias: (1) Dominik y Tielens 1997, (2) Ringl y Urbassek 2012.

Sin embargo, hay una gran divergencia en la comunidad científica sobre el valor de energía superficial ( $\gamma$ ) para el hielo de  $H_20$ . Dominik y Tielens (1997) en su tabla proponen el valor  $0.37 \text{J/m}^2$ , que ha sido acuñado por otros autores (Aumatell y Wurm 2014, Hirashita y Li 2013). Sin embargo, algunos trabajos posteriores teóricos (Pan y col. 2008) y experimentales (Gundlach y col. 2011) sitúan a este valor cercano a  $0.19 \text{J/m}^2$ , el cual ha sido tenido en cuenta en varios trabajos sobre colisiones entre agregados de hielo y en modelos de formación cometaria (Gundlach y Blum 2015, Blum y col. 2014). Israelachvili (1992) estima el valor de esta energía superficial para hielo de agua cerca del punto de fusión en  $0.1 \text{J/m}^2$ , valor que también ha sido ampliamente usado en simulaciones de colisiones entre agregados de hielo para estudiar formación planetaria, anillos planetarios y cometas (Wada y col. 2007, Wada y col. 2013, Kataoka y col. 2013, Sirono 1999, Sirono y Ueno 2017, Suvama y col. 2008). También se ha estimado un valor levemente más bajo para esta cantidad,  $0.07 \text{J/m}^2$  (Ketcham y Hobbs 1969), que también ha sido utilizado en la literatura (Petrenko y Whitworth 2002, Sirono 2011). La clave es verificar si los resultados de una colisión cambian o no según el valor de  $\gamma$  que se adopte y, si es así, poder analizar estos cambios cualitativa y cuantitativamente.

Por último, existen numerosos efectos que pueden modificar la adhesión entre granos de hielo, incluyendo efectos de envejecimiento, como los observados en sílice a alta temperatura (Lane 2015, Kerrache y col. 2003), interacción con partículas energéticas como rayos cósmicos, viento solar y partículas aceleradas por magnetósferas, etc. Las variaciones de gamma de hielo con la temperatura global han sido estudiadas, pero para condiciones de laboratorios que pueden diferir significativamente respecto a las del espacio (Gundlach y Blum 2015). Sería interesante más adelante indagar en detalle sobre algunos de estos fenómenos, pero en este capítulo nos focalizamos en cómo varían los resultados si se toman dos valores de  $\gamma$  usados indistintamente en el área por diferentes autores, para remarcar que uno debería realizar un análisis más profundo antes de optar por alguno de estos valores, según el sistema que quiera representar.

# 5.2. Comparación de resultados variando la energía superficial

Por lo visto en la sección anterior, elegiremos dos valores de energía superficial correspondientes a los valores que parecerían estar en los límites del intervalo utilizado, y que a su vez, son los más utilizados en la literatura:  $\gamma_1 = 0.1 \text{J/m}^2 \text{ y } \gamma_2 = 0.37 \text{J/m}^2$ y realizaremos simulaciones a fin de estudiar si es realmente relevante en la evolución colisional un cambio de esta magnitud en este parámetro.



**Figura 5.1:** Resultado de colisiones entre agregados de hielo con  $\mu = 60$  considerando  $\gamma_1 = 0.1 \text{J/m}^2$  a diferentes v (indicadas en cada fila). Los paneles son para las diferentes porosidades ( $\phi = 0.15$  primer panel,  $\phi = 0.40$  segundo panel). En cada panel se muestra la vista global (izquierda) y un corte central de espesor  $20\mu\text{m}$  (derecha).

Según la ecuación 2.21 la energía superficial se toma en cuenta para calcular la distancia de equilibrio entre granos, por lo cual para cada valor elegido debe realizarse la construcción de agregados nuevamente y verificar esfericidad y homogeneidad. También se verificaron los errores derivados de rotar objetivo/proyectil antes de la colisión. Se han obtenido en este caso errores del mismo orden que para el caso de sílica. Para esta comparación se tomarán dos agregados cuya relación de masa es  $\mu = 60$  y se analizarán dos valores de factores de llenado:  $\phi = 0.15$  y 0.40. Las velocidades de colisión simuladas fueron: v = 10, 25, 50, 75, y 100 m/s.

La Figura 5.1 nos muestra el estado final de una colisión entre agregados de hielo que poseen  $\mu = 60$  y donde la energía superficial entre granos se ha tomado como  $\gamma_1 = 0.1 \text{J/m}^2$ . El primer panel (izquierdo) corresponde a un factor de llenado  $\phi =$ 0,15 y el segundo (derecho) a  $\phi = 0.40$ . Se muestra para cada caso tres velocidades de impacto: v = 10, 50, 100 m/s. En ambos paneles se muestra primero una visión global del sistema, levemente inclinado con el fin de visualizar el cráter -si éste se produce-; y un corte central de espesor  $20\mu m$  a fin de visualizar la estructura interna. En primer lugar observamos que el resultado es altamente dependiente de la porosidad de la muestra (al igual que sucedía con simulaciones de sílica). Mientras que para todas las velocidades estudiadas, el proyectil penetra y genera un cráter profundo en el blanco cuando el material posee  $\phi = 0.15$ , cuando la porosidad es mayor ( $\phi = 0.40$ ) al proyectil le cuesta penetrar totalmente en el agregado, lo cual se observa sólo para las v más altas analizadas (v > 50 m/s). Sin embargo, aún para la velocidad más alta aquí estudiada (v = 100 m/s), el cráter resultante es bastante diferente para estos valores extremos de  $\phi$ : En el panel izquierdo ( $\phi = 0.15$ ) se observa que el proyectil ha penetrado mucho más que  $R_t$ (radio del blanco), provocando un alargamiento del blanco durante el proceso y un cráter ovalado donde  $d_{\rm c} > r_{\rm c}$ , siendo  $d_{\rm c}$  y  $r_{\rm c}$  la profundidad y el radio del cráter, respectivamente. El material debajo de este cráter está compactado. Este proceso puede encuadrar dentro del efecto pistón estudiado anteriormente (sección 4.2.3). No se observa formación de borde en la abertura del cráter. Para el panel derecho  $(\phi = 0.40)$  el proyectil penetra (pero una distancia menor que  $R_t$ ), y también produce un cráter, pero en este caso el mismo presenta una estructura más simétrica  $(d_{\rm c} \sim r_{\rm c})$ . A su vez hay una pequeña cresta que se forma en el borde del mismo, que recuerda a las primeras etapas de formación de estructuras de pétalos, aunque aquí la velocidad evidentemente no es lo suficientemente alta como para que el proceso de formación y fragmentación de los mismos sea completo. En ambos casos se observa una evecta que aumenta con v, pero que se compone principalmente de monómeros y grupos muy pequeños, no observándose en ningún caso la fractura de un fragmento de tamaño considerable.

La Figura 5.2 nos muestra el estado final de una colisión entre agregados de hielo con los mismos valores que en la imagen anterior, salvo que ahora consideramos que la energía superficial entre granos es  $\gamma_2 = 0.37 \text{J/m}^2$ . Si bien se observan diferencias análogas en cuanto a la dependencia con la porosidad y la velocidad observadas en el caso anterior, también podemos ver que los resultados obtenidos no son iguales



**Figura 5.2:** Resultado de colisiones entre agregados de hielo con  $\mu = 60$  considerando  $\gamma_2 = 0.37 \text{J/m}^2$  a diferentes v (indicadas en cada fila). Los paneles son para las diferentes porosidades ( $\phi = 0.15$  primer panel,  $\phi = 0.40$  segundo panel). En cada panel se muestra la vista global (izquierda) y un corte central de espesor  $20\mu\text{m}$  (derecha).

cuando  $\gamma$  toma un valor casi 4 veces mayor. En el caso de  $\phi = 0.40$  (panel derecho) ahora la velocidad inicial necesaria para craterizar al blanco es cercana a  $v \sim 100 \text{m/s}$ , e incluso a esta velocidad el cráter que se observa es mucho menor, chato y con una cresta muy sutil en el borde del mismo. El proyectil no llega a desarmarse ni a aplanarse en el fondo del cráter como sucedía con  $\gamma_1$ . Observamos que para  $v \leq 50 \text{m/s}$  cuando  $\phi = 0.40$  el proyectil se adhiere pero no sufre casi modificaciones, manteniendo una estructura elipsoidal levemente achatada en la zona de contacto. Para agregados más porosos ( $\phi = 0.15$ , panel izquierdo), si bien a toda v analizada el proyectil logra penetrar, el cambio cualitativo producido al variar  $\gamma$  es aún más drástico: a diferencia de los profundos cráteres abiertos observados para esta situación cuando teníamos  $\gamma_1$  (panel izquierdo de la Figura 5.1), aquí el material parece cerrarse luego del paso del proyectil, envolviéndolo, y para  $v \geq 50 \text{m/s}$  pudiéndolo hacer invisible desde el exterior. A partir de esta velocidad también se comienza a observar una cavidad hueca sobre el proyectil enterrado, cuyo volumen aumenta con v. Este resultado inesperado requiere una atención especial (ver sección 5.4).

Entonces utilizar un valor u otro de energía superficial cambia fuertemente los resultados que se observan al final de las simulaciones. Concluimos que se debe tener cuidado a la hora de elegir este parámetro y tener conciencia del impacto que esta elección conlleva.

# 5.3. Comparación de resultados variando la relación de masa



**Figura 5.3:** Vista global y corte central de espesor  $20\mu m$  del resultado de colisiones entre agregados de hielo con  $\mu = 10$  de diferentes porosidades ( $\phi = 0,15$  primera columna,  $\phi = 0,40$  segunda columna) a diferentes v indicadas en cada fila. El valor de energía superficial entre granos aquí es  $\gamma = 0,37 \text{J/m}^2$ 

Con el fin de poder observar si la dependencia en el resultado con la relación de masas es similar a la observada en el capítulo anterior para otro material, realizamos simulaciones con un valor de energía superficial  $\gamma_2 = 0.37 \text{J/m}^2$  pero considerando el caso  $\mu = 10$ , como se muestra en la Figura 5.3. Para ello construimos los nuevos proyectiles (los blancos son iguales que en el caso  $\mu = 60$ ), y se realizaron las verificaciones correspondientes, como se ha mencionado anteriormente. En concordancia con lo debatido en el capítulo anterior, para la misma velocidad de impacto, a medida que la relación de masas entre los agregados es menor, al proyectil le cuesta más penetrar en el blanco.

Para los casos con  $\phi = 0.40$  (panel derecho de la Figura 5.3) el proyectil no se desarma, sino que a medida que la v aumenta se deforma hacia una estructura más elipsoidal, en analogía a lo que sucedia cuando  $\mu = 60$  (Figura 5.2). Sin embargo, para v = 50 m/s por ejemplo, el centro de masa del proyectil queda situado muy por encima de la superficie del blanco mientras que en el caso anterior ( $\mu = 60$ ), quedan aproximadamente en la misma posición, confirmando que, al ser más masivo, el proyectil tiene una penetración menor debido al alto frenado que sufre por la interacción intergranular de un mayor número de partículas. Cuando v = 100 m/stenemos una estructura similar para  $\mu = 10$  y  $\mu = 60$ : un proyectil que penetra, modificando su forma original a una levemente achatada y cuyo borde superior tiene una concavidad similar a la curvatura inicial del blanco, en ambos casos se observa una cresta en el borde del cráter, luego de la depresión en la superficie que delimita al proyectil. Sin embargo, cuando  $\mu = 10$  pueden observarse fisuras más marcadas en esta cresta, debido a una mayor transmisión del momento lateral provocada por el aumento de masa (ver sección 4.2.3), indicando que una velocidad levemente mayor podría originar la estructura de pétalos observada para sílica. Para  $\phi = 0.15$ (panel izquierdo de la Figura 5.3) la diferencia producida por el aumento de  $\mu$  es más evidente: el cierre del material por encima del proyectil ha perdido eficiencia. De hecho, solo puede vislumbrarse un intento del mismo para v = 50m/s. Esto se atribuye, nuevamente, a que hay un mayor momento lineal producto del aumento de la masa del proyectil, cuya consecuencia es un efecto pistón similar al observado para la sílica (donde la transmisión es principalmente en dirección vertical). El estado final del blanco no presenta una forma tan alargada como en el caso anterior, y el proyectil es visible desde una vista superior. Se sugiere una mayor compactación del material, verificaremos esta suposición más adelante.

## 5.4. Recubrimiento de proyectiles

En esta sección nos detendremos en la novedad que presentó la Figura 5.2, intentando explicar este fenómeno. Para ello se analizó la evolución temporal de esta simulación con  $\mu = 60$ ,  $\phi = 0.15$ ,  $\gamma_2 = 0.37 \text{J/m}^2$  y v = 100 m/s en detalle. La Figura 5.4 muestra algunos estados intermedios del proceso colisional. Desde que inicia la colisión hasta los ~  $15\mu$ s se observa un proceso de formación similar al del efecto pistón (sección 4.2.3), donde el proyectil impacta y arrastra el material poroso que tiene debajo, compactándolo a medida que disipa energía. Sin embargo, a partir de ese momento se observa que el material del blanco que hubiese estado situado en las paredes de la cavidad aproximadamente cilíndrica de un perfecto efecto pistón comienzan a cerrarse nuevamente sobre el área barrida por el proyectil. Cerca de los  $25\mu$ s estos granos comienzan a entrelazarse, dejando una cavidad hueca por encima del proyectil enterrado y por debajo del cráter visible de la superficie y a los ~  $50\mu$ s,



**Figura 5.4:** Cortes centrales de  $20\mu m$  de espesor mostrando la evolución temporal de la colisión entre dos agregados de hielo con  $\mu = 60$ ,  $\phi = 0.15 \gamma_2 = 0.37 \text{J/m}^2$  y v = 100 m/s. Los granos están coloreados según el agregado de origen: celeste para partículas del proyectil, rosa para partículas del blanco.

este proceso culmina. Los estados finales presentados previamente corresponden al último paso de nuestras simulaciones ( $100\mu$ s), pero no se observan diferencias en estos últimos  $50\mu$ s transcurridos, mostrando que el sistema permanece estable en este estado desde entonces.

El proceso puede comprenderse analizando la evolución del sistema en los primeros instantes de la colisión. La Figura 5.5 muestra para 3 tiempos  $(2,5, 5 \text{ y } 10 \mu \text{s})$  a los granos de la muestra coloreados en 3 filas según: (1) su velocidad vertical  $v_z$ , (2) su velocidad lateral  $v_y$  en la dirección y indicada, y (3) su número de coordinación, C. A los  $2.5\mu$ s se evidencia el inicio del efecto pistón, el momento presenta una fuerte transmisión en su dirección original (vertical) donde la región alcanzada por la colisión presenta una fuerte compactación (esto se observa en el fuerte aumento del número de contactos que poseen los granos en la zona debajo del impacto). Ya en este tiempo inicial surge un nuevo escenario que se vislumbra analizando la velocidad vertical  $v_z$ . Por un lado, justo debajo de la zona que ya está afectada por la colisión a los  $2.5\mu$ s, las partículas que están siendo empujadas desde arriba se abren paso transmitiendo ese momento a las zonas de menor compactación: hacia abajo y hacia los costados (similar al escenario de las colisiones análogas de sílica); pero ahora hay un aumento en la fuerza adhesiva intergranular (que tiene una dependencia lineal con  $\gamma$ , ecuación 2.9), lo que provoca que una vez que el proyectil penetra, la materia granular que queda conectada no se desprenda fácilmente y continúe el



**Figura 5.5:** Cortes centrales de  $20\mu m$  de espesor mostrando la evolución temporal de la colisión entre dos agregados de hielo con  $\mu = 60$ ,  $\phi = 0.15 \gamma_2 = 0.37 \text{J/m}^2 \text{ y } v = 100 \text{m/s}$ . En cada fila los granos están coloreados según: (1) velocidad vertical  $v_z$ , (2) velocidad lateral  $v_y$ , y (3) número de coordinación C. Se muestran los tiempos: (a) 2.5  $\mu$ s, (b) 5 $\mu$ s, y (c) 10 $\mu$ s.

movimiento global: en este caso se observa que en las paredes superiores del cráter el movimiento de las partículas de la pared derecha es hacia la izquierda y viceversa. Estas partículas poseen un alto C, por lo cual están conectadas fuertemente con 4 o más partículas, lo que justifica este movimiento en masa. A los 5 $\mu$ s mientras aumenta la zona del blanco alcanzada por la colisión en dirección vertical, estas zonas de las paredes laterales comenzaron su movimiento (hacia el centro y hacia abajo) compactando su zona periférica aún más (al tener mayor velocidad golpean a sus vecinas y se van frenando, por ello las zonas previamente amplias rojas y azules de  $v_y$  en este tiempo comienzan a ser amarillas y celestes, respectivamente, indicando una disminución de esta velocidad). Finalmente, a los 10 $\mu$ s, la onda de choque ha alcanzado a todo el blanco en profundidad, y el efecto pistón se observa como un corte muy marcado en  $v_z$ , sin embargo,  $v_y$  también sigue propagándose, alcanzando a más partículas horizontalmente (todas interconectadas), empujándolas hacia el centro. Estas partículas conectadas se van uniendo al movimiento vertical a medida que (a causa de este movimiento lateral) ingresan en la zona afectada por el efecto pistón, por lo tanto comienzan a desplazarse también hacia abajo desde la abertura del cráter. En este tiempo, se observa que todas las partículas afectadas presentan una gran coordinación, justificando este movimiento colectivo.

Por último, para ver el desenlace de este proceso, la Figura 5.6, muestra un gráfico análogo al anterior pero para los tiempos posteriores: (d) 15  $\mu$ s, (e) 20 $\mu$ s, (f) 25 $\mu$ s, y (g) 37.5  $\mu$ s. Observando la primera fila ( $v_z$ ), las partículas alcanzadas por la onda de choque, al ir siendo compactadas se van frenando ya que pierden energía por fricción en la interacción con sus vecinas (que cada vez son más), sin embargo, las partículas de la zona superior que siguen conectadas y reciben un impulso hacia abajo, tienen el camino libre, por lo cual no sufren un desaceleramiento drástico, por ello a los 20 $\mu$ s poseen mayor velocidad vertical hacia abajo que las partículas de la base del blanco. Si bien se ha realizado un corte para visualizar la zona de craterización, el recorrido es similar para las partículas sobre las paredes del cráter en toda su extensión, por lo tanto, a medida que estas partículas van llegando al centro empiezan a interaccionar entre sí, compactándose y perdiendo energía, haciendo que a los ~ 37,5 $\mu$ s hayan perdido la suficiente velocidad vertical que equilibra a la muestra: en este tiempo la mayoría de las partículas del agregado resultante



**Figura 5.6:** Análoga a la Figura 5.5 para los tiempos posteriores: (d) 15  $\mu$ s, (e) 20 $\mu$ s, (f) 25 $\mu$ s, y (g) 37.5  $\mu$ s.

descienden con la misma velocidad  $v_z$ . Si ahora observamos la segunda fila  $(v_y)$ , podemos ver que este momento lineal también se propaga en dirección horizontal pero va perdiendo eficiencia. Esto sucede porque mientras que las partículas cercanas a la pared interna del cráter tienen el camino libre hacia el centro, a medida que este impulso llega a los bordes, las partículas que son dirigidas hacia el centro tienen mucha materia granular que les impide el paso y que provoca pérdidas energéticas por fricción en cada contacto. Esto se refuerza con la última fila, donde se observa que para el hielo (asumiendo  $\gamma_2 = 0.37 \text{J/m}^2$ ) la coordinación aumenta para todas las partículas (tanto del proyectil como del blanco) pero a diferencia de la sílica donde esto se producía por el movimiento de las partículas hacia afuera del cilindro dejado por el paso del proyectil (Figura 4.13) aquí se produce porque las partículas se mueven hacia el centro de este cilindro (por el aumento de las fuerzas adhesivas explicado anteriormente). Como la energía disminuve a medida que el proyectil penetra en el blanco, el momento lateral transmitido decrece, y no es suficiente para provocar que las partículas puedan reunirse sobre la parte superior del proyectil enterrado, dejando una cavidad vacía, de estructura similar a una semi-esfera entre el cerramiento superior y este proyectil enterrado en el blanco. Como a partir de este tiempo la mayoría de las partículas presentan el mismo valor de  $v_z$  y  $v_y = 0$  (y la minoría que no lo cumple posee valores muy cercanos a estos), esta cavidad no se cerrará con el tiempo ya que el sistema es estable y se mueve como un todo con una velocidad  $\sim 2m/s$  en la dirección de la velocidad inicial de colisión.

### 5.5. Resultados de todos los casos analizados

En esta sección analizaremos para todas las simulaciones de hielo realizadas la compactación sufrida en el material, la profundidad alcanzada por el proyectil y el crecimiento de estos agregados respecto de las variables analizadas.

#### 5.5.1. Compactación

La Figura 5.7 muestra la coordinación promedio final  $\langle C_f \rangle$  en función de la velocidad de impacto  $v. \langle C_f \rangle$  no incluye a partículas eyectadas, y considera a todas las que pertenecen a la estructura principal. Si alguna partícula se encuentra aislada dentro de una cavidad, sin contacto con otras, entra en el promedio con coordinación cero. Los colores diferencian las porosidades de los agregados: rojo para  $\phi = 0,40$  y negro para  $\phi = 0,15$ .

En la Figura 5.7 (a) se grafican colisiones con  $\mu = 10$  donde se consideró  $\gamma_2 = 0.37 \text{J/m}^2$ . Este gráfico indica que, salvo para la menor v analizada (v = 10 m/s), no parece haber diferencia entre el número de contactos final promedio de las partículas respecto de la porosidad inicial del material.  $\langle C_f \rangle$  aumenta con v, llegando



(a) Colisiones entre agregados con relación de masa  $\mu = 10$ , donde entre los granos el valor de energía superficial es  $\gamma_2 = 0.37 J/m^2$ . Los colores diferencian los valores de  $\phi$  simulados.

(b) Colisiones entre agregados con relación de masa  $\mu = 60$ . Los símbolos representan los diferentes valores de energía superficial  $\gamma$  y los colores diferencian los valores de  $\phi$  simulados.

Figura 5.7: Coordinación promedio final  $\langle C_f \rangle$  en función de la velocidad inicial v para colisiones entre agregados de hielo.

a un máximo de  $< C_f > \sim 4,5$  cuando v = 100m/s. Este valor es más alto que el mayor alcazado para sílica (que fue de  $\sim 4$ , ver sección 4.3.3). En la Figura 5.7 (b) se grafican las colisiones con  $\mu = 60$  y los dos valores de  $\gamma$  estudiados. Nuevamente, las diferencias para las distintas porosidades parecen acotarse a medida que v aumenta, aunque ahora difieren hasta velocidades un poco mayores ( $\sim 25 \text{m/s}$ ). Algo similar sucede para la dependencia con  $\gamma$ : a partir de  $v \simeq 50 \text{m/s}$  no se observan grandes diferencias, y por debajo de este valor se observa una leve mayor compactación para el material con  $\gamma_1$ . Esto sugiere que se ha alcanzado el grado de compactación máximo del material para este sistema a tales v. Para este  $\mu = 60$ el valor máximo alcanzado fue de  $< C_f > \sim 3.9$  para v = 100 m/s. Para todas las velocidades analizadas,  $\langle C_f \rangle$  muestra un leve aumento cuando  $\mu$  disminuye. Este efecto se observo para sílica pero aun con variaciones más leves (Figura 4.17). Esto podría deberse a que al tener un proyectil mayor en el caso de  $\mu = 10$ , inicialmente el área transversal de contacto es mayor, iniciando el proceso de compactación con una transmisión de momento fuerte, en contraste con casos con  $\mu = 60$ , donde si bien todas las partículas sufren un aumento de C, la mayoría lo hace al colisionar con partículas que ya han colisionado previamente, disminuyendo la cantidad de movimiento que las empuja. Sin embargo, se requiere un análisis más profundo para comprender esta dependencia en hielo que es levemente mayor a lo que sucedía para sílica.

#### 5.5.2. Profundidad del proyectil

La Figura 5.8 muestra la profundidad final del proyectil (coordenada z de la posición del centro de masa de las partículas que conforman el proyectil) en función de la velocidad para dos valores de  $\phi$ . La posición z=0 corresponde a la base del blanco. La Figura 5.8 (a) es sólo para casos con  $\mu = 10$  y  $\gamma_2$ . Se observa que la profundidad aumenta con v de manera casi lineal, siendo un ~ 50 % mayor para  $\phi = 0,15$  que para  $\phi = 0,40$  para toda v. La Figura 5.8 (b) es sólo para casos con  $\mu = 60$ , y los dos valores,  $\gamma_1$  y  $\gamma_2$ . Se evidencia que la profundidad también aumenta con v pero aquí hay una leve curvatura más marcada. La diferencia del 50 % entre los  $\phi$  se mantiene. Se observa una mayor profundidad alcanzada para los casos con  $\gamma_1$ , que aumenta con v, si bien para v = 10m/s es ~ 0, para v = 100m/s la profundidad alcanzada es 18 % mayor comparada con el caso donde se utilizó  $\gamma_2$ .

Concluimos que la profundidad alcanzada por el centro de masa del proyectil muestra una dependencia mayor respecto de la porosidad ( $\phi$ ) y de la velocidad v que respecto de  $\mu$  o  $\gamma$ . Esto indica que tiene una alta dependencia con el momento lineal inicial del proyectil.



(a) Colisiones entre agregados con relación de masa  $\mu = 10$ , donde entre los granos el valor de energía superficial es  $\gamma_2 = 0.37 \text{J/m}^2$ . Los colores diferencian los valores de  $\phi$  simulados.



(b) Colisiones entre agregados con relación de masa  $\mu = 60$ . Los símbolos representan los diferentes valores de energía superficial  $\gamma y$  los colores diferencian los valores de  $\phi$  simulados.

**Figura 5.8:** Profundidad alcanzada por el proyectil (en m) en función de la velocidad inicial v para colisiones entre agregados de hielo.

#### 5.5.3. Entierro del proyectil en el blanco

Podemos comparar la profundidad alcanzada por el proyectil con la profundidad del cráter, en los casos donde éste es producido. Aquí no puede tomarse un marco de referencia fijo, ya que todo el sistema está desplazándose hacia abajo continuamente, y el blanco se deforma a medida que el proyectil penetra en él. Para realizar un análisis cuantitativo, en todo momento se tomó como z = 0 a la posición de la base

del sistema, y desde allí se calcularon la profundidad del proyectil (coordenada z de la posición del centro de masa de las partículas que conforman al proyectil) y la profundidad del cráter (medida como en la sección 3.2.3). La Figura 5.9 es un esquema representativo de estas cantidades.



**Figura 5.9:** Esquema representativo de referencia de las longitudes tomadas de profundidad del proyectil y de profundidad del cráter.

La Figura 5.10 muestra la profundidad alcanzada por el proyectil en función de la velocidad inicial v para colisiones entre agregados de hielo con relación de masa  $\mu = 60$ . Las imágenes (a) y (b) representan simulaciones con  $\gamma_2$  y las (c) y (d) para  $\gamma_1$ . A su vez (a) y (c) tienen  $\phi = 0,15$ ; (b) y (d)  $\phi = 0,40$ . En cada una de estas imágenes se indica con línea punteada la profundidad del cráter en aquellos casos donde el mismo es producido. En el caso de la Figura 5.10 (b) no se observó cráter en ninguno de los casos y por ello no hay ningún segmento lineal incluido. Para la Figura 5.10 (d) sólo para las velocidades más altas pudo concretarse la formación del cráter y sólo fue posible tener esta línea para estos valores. En los casos más porosos ( $\phi = 0,15$ ) siempre fue evidenciado un cráter y se cuenta con este dato para todos los valores de v estudiados.

Para los agregados compactos el proyectil no logra penetrar en el blanco, o lo hace parcialmente, o bien su superficie superior queda a la altura de la superficie del blanco. En todo caso, como tanto proyectil como blanco están conformados por el mismo material, no es posible vislumbrar un cráter salvo por el leve zurco aproximadamente esférico que se produce en la zona delimitada por el proyectil una vez que este se frenó completamente. Para los casos con  $\phi = 0,15$  si se evidencia un cráter. La profundidad del proyectil fue analizada previamente, ahora el enfoque es analizar la relación entre ésta y la profundidad del cráter para estos casos. Para el caso (c) cuando  $v \ge 50$ m/s el cráter tiene aproximadamente la misma profundidad que el proyectil, pero para v menores el cráter formado esta levemente por encima, siendo un sólo valor (v = 25m/s) el que presenta una situación bastante diferente donde el proyectil es enterrado casi al doble de profundidad que la base del cráter.





(a) Colisiones entre agregados con  $\phi = 0.15$  donde entre los granos el valor de energía superficial es  $\gamma = 0.37 J/m^2$ .

(b) Colisiones entre agregados con  $\phi = 0,40$  donde entre los granos el valor de energía superficial es  $\gamma = 0,37 J/m^2$ .





(c) Colisiones entre agregados con  $\phi = 0.15$  donde entre los granos el valor de energía superficial es  $\gamma = 0.1J/m^2$ .

(d) Colisiones entre agregados con  $\phi = 0.40$  donde entre los granos el valor de energía superficial es  $\gamma = 0.1J/m^2$ .

**Figura 5.10:** Profundidad alcanzada por el proyectil (en m) en función de la velocidad inicial v para colisiones entre agregados de hielo con relación de masa  $\mu = 60$ . Se indica con línea punteada la profundidad del cráter en aquellos casos donde el mismo es producido.

Para el caso (d) tenemos la situación más novedosa, donde el proyectil es enterrado por debajo del cráter. Este caso fue analizado en la sección 5.4, donde el material que queda por encima del proyectil se cierra a su paso a medida que este penetra en la muestra, explicando la causa de este fenómeno. En esta nueva figura se evidencia que esta diferencia entre la profundidad del proyectil y la del cráter además aumenta drásticamente con v. Esto indica que al aumentar la velocidad inicial, aumenta el momento transmitido hacia los laterales, pero a diferencia del caso (c), ahora el aumento en  $\gamma$  produce que que estas partículas alcanzadas no puedan disociarse fácilmente y se muevan hacia el centro y abajo, dejando la cavidad vacía y una estructura de materia de gran extensión vertical entre ésta y el cráter que se observa desde afuera (debido a que más partículas conectadas participan del proceso).

#### 5.5.4. Crecimiento de agregados de hielo

La Figura 5.11 muestra el número de partículas eyectadas normalizado con el número de partículas total para cada colisión,  $Y/N_{tot}$  en función de v, donde los colores diferencian cada set de parámetros ( $\gamma$ ,  $\mu$ ,  $\phi$ ). Y incluye a todas la partículas que se han desprendido del mayor remanente al final de la colisión. Esta figura es análoga a la realizada para sílica (Figura 4.22), donde se vio que los límites de  $Y/N_{tot}$  para ganancia de masa están: para  $\mu = 10$  por debajo de 0,0091 y para  $\mu = 60$  por debajo de 0,016. Por lo tanto, para las simulaciones de hielo realizadas en este capítulo observamos ganancia de masa en todos los casos.

Analizando la dependencia relevante del parámetro  $\gamma$ , se observa que los agregados con un valor mayor de energía superficial ( $\gamma_2$ ) presentan una eficiencia para el crecimiento mucho mayor, como era de esperarse, ya que esto implica un aumento de las fuerzas adhesivas como se vio previamente. Para el mismo conjunto de parámetros ( $\mu = 60, \phi = 0.15, v = 100 \text{m/s}$ ), tomar un valor de  $\gamma$  casi 4 veces mayor provocó que se eyectaran 30 veces menos partículas, indicando que este parámetro es importante en la erosión del material.



**Figura 5.11:** Número de partículas eyectadas normalizadas con el  $N_{tot}$  de cada caso, en función de la velocidad inicial, para diferentes valores de  $\gamma, \mu, \phi$ .

### 5.6. Conclusiones del capítulo

En este capítulo se ha presentado un avance sobre la nueva línea de trabajo en colisiones de agregados de hielo de agua. Se ha trabajado con 2 valores de porosidad:  $\phi = 0,15 \text{ y } 0,40$ ; dos relaciones de masa:  $\mu = 10 \text{ y } \mu = 60$ ; y 5 velocidades de impacto: v = 10, 25, 50, 75, y 100 m/s. El objetivo principal fue determinar si una pequeña variación en el valor adquirido para la energía superficial,  $\gamma$ , afectaba el resultado de estas colisiones.

Hemos encontrado grandes cambios cualitativos y cuantitativos al tomar dos valores de  $\gamma$  muy empleados en la literatura actual y que a su vez son los extremos el intervalo de valores que suelen utilizarse. Por lo tanto concluimos en que no puede tomarse arbitrariamente cualquier valor de  $\gamma$  dentro de este intervalo, y si se escoge un cierto valor, éste debe estar fundamentado y además debe aclararse que la ambigüedad en la determinación precisa de este valor puede introducir errores que no son despreciables.

Algunas conclusiones secundarias que podemos esbozar son:

1) Comparando con los resultados obtenidos en el capítulo 4, a priori estas nuevas simulaciones replican el efecto pistón y de pétalos, aunque las velocidades necesarias para completar ambos son mayores que para el caso de la sílica.

2) En los casos particulares con gran energía superficial  $\gamma = 0.37 \text{J/m}^2$ , gran relación de masa  $\mu = 60$  y agregados muy porosos  $\phi = 0.15$ , para  $v \ge 50 \text{m/s}$  se observó que el blanco se cierra luego del paso del proyectil, cubriéndolo y dejando una cavidad hueca entre éste y el material que se une por encima. Se observa un cráter conformado exclusivamente por el material del blanco, siendo el proyectil no visible desde el exterior. Este resultado es relevante para astroquímica: proporciona superficies adicionales para reacciones químicas, y también para evolución granular con múltiples colisiones, ya que este proyectil con un hueco podría fracturarse con mayor facilidad en colisiones posteriores.

3) En cuanto a la dependencia con la porosidad y con la relación de masas, se ven dependencias similares a las encontradas para los casos con sílica.

4) La coordinación promedio final para v > 25m/s muestra poca dependencia con  $\phi$ . Éste aumenta con v, llegando a un máximo en v = 100m/s de ~ 4,5 cuando  $\mu = 10$ y de ~ 3,9 cuando  $\mu = 60$ . Para todas las velocidades analizadas, la coordinación muestra un leve aumento cuando  $\mu$  disminuye.

5) La profundidad alcanzada por el centro de masa del proyectil muestra una dependencia mayor respecto a la porosidad y a la velocidad de impacto, que respecto a la relación de masas o al valor elegido para la energía superficial.

6) Todas las simulaciones realizadas en este capítulo resultaron en crecimiento de los granos, mostrando que aún tomando diferentes valores de energía superficial, el hielo presenta mayor tendencia al crecimiento que la sílica. Esto coincide con conclusiones obtenidas en experimentos similares: Gundlach y Blum (2015) realizaron experimentos con hielo de agua y observaron que variando el tamaño de las partículas, se obtienen diferencias en la velocidad límite hasta la cual se observa adhesión para colisiones de un monómero contra un agregado mayor (diferencia de masas  $\mu = 5$ ) conformado por las mismas partículas: 150m/s cuando el radio de las partículas era  $0.1\mu m$  y 2m/s cuando valía  $10\mu m$ . En todo caso, concluyen en que la velocidad umbral para adherirse es unas diez veces mayor que la de las partículas esféricas de sílica con tamaño comparable, y la justificación la basan en la diferencia del valor de gamma entre sílica y agua.

A futuro se planifica seguir analizando colisiones con este material y recorrer un espacio de parámetros más completo. Cabe destacar que recientemente se han publicado resultados de simulaciones similares a las descriptas en este capitulo, a cargo del grupo de Wada (Hasegawa y col. 2021 y referencias en este trabajo). Estos resultados se focalizan en la variación de v y  $1 < \mu < 100$ , para agregados constituidos por partículas de radio  $0,1\mu$ m (formados mediante colisiones secuenciales) y un sólo valor de energía superficial  $\gamma = 100 \text{mJ/m}^2$ , por lo tanto no existe gran solapamiento con nuestros resultados.

# Capítulo 6

# EVOLUCIÓN COLISIONAL DE AGREGADOS POROSOS

En este capítulo se desarrollará un código de Monte Carlo para simular cadenas de colisiones en un medio formado por agregados de polvo de sílica, con diferentes tamaños, masas y porosidades. El resultado de cada colisión individual proviene de los resultados de los Capítulos 3 y 4. Por lo tanto, el objetivo final de esta tesis es el desarrollo e implementación de este código que reúne resultados novedosos teniendo en cuenta parámetros que hasta el momento habían sido ignorados y su posterior comparación de los resultados con observaciones astronómicas.

# 6.1. Introducción

El método de Monte Carlo (MC) es un método numérico de resolución de problemas matemáticos a través de la simulación con variables aleatorias (Sobol 1994). Es un algoritmo de computación de estructura simple configurado para seguir un camino aleatorio, que puede repetirse N veces, siendo cada uno de esos N caminos recorridos independiente del resto, y luego se promedian los N resultados. El error del método es inversamente proporcional a  $\sqrt{N}$ , por lo tanto, cuantas más veces se recorra de manera independiente el camino, más certero será el resultado; pero siempre habrá un margen de error asociado a este proceso. En nuestro contexto se pretende, partiendo de una distribución inicial de agregados granulares, utilizar este método para simular una cadena colisional aleatoria entre los mismos. Se entiende por cadena de colisiones al proceso sucesivo de colisiones de a pares que sufrirán los agregados dentro de la población. Luego, se promediará un número suficientemente grande de cadenas independientes para obtener la distribución final de agregados resultantes. Cómo será el resultado de cada colisión individual que se produzca entre dos agregados dependerá de los resultados obtenidos en los Capítulos 3 y 4, donde se obtuvieron tamaño, masa y porosidad de los agregados resultantes, según sus condiciones iniciales.

# 6.2. Construcción de la población

### 6.2.1. Parámetros de entrada

El código recibirá como entrada un conjunto de parámetro iniciales, que pueden dividirse en 3 grupos:

- (1) Parámetros relacionados a la población inicial de agregados:
  - Número inicial de agregados (N<sub>agg,0</sub>): Este parámetro indicará cuántos agregados son requeridos al inicio de la simulación.
  - Tamaño  $(F(R)_0)$ : Se introducirá la distribución deseada de tamaños a partir de los radios, R, que tendrán los  $N_{\text{agg},0}$  agregados iniciales, entre un valor mínimo  $R_{\text{min}}$  y un valor máximo  $R_{\text{max}}$ .
  - Factor de llenado  $(F(\phi)_0)$ : Se introducirá la distribución deseada de porosidades,  $\phi$ , que tendrán los  $N_{\text{agg},0}$  agregados iniciales, entre un valor mínimo  $\phi_{\min}$  y un valor máximo  $\phi_{\max}$ .
- (2) Parámetros relacionados con las colisiones individuales que se producirán:
  - velocidad de colisión (v): velocidad inicial de todos los granos individuales que conforman al proyectil (agregado más pequeño del par de agregados a colisionar).
  - **parámetro de impacto** (b): el parámetro de impacto es la distancia entre la dirección de la velocidad del proyectil y el centro de masa del blanco.
- (3) Parámetros relacionados con el proceso colisional:
  - Cantidad de colisiones (N<sub>col</sub>): Este parámetro indica cuantas colisiones se producirán en una cadena colisional.
  - Corte de convergencia  $(C_{conv})$ : Indica el error estadístico esperado, cuando se alcanza la simulación termina. Se explicará en detalle más adelante.
  - Número máximo de cadenas  $(N_{\text{maxchain}})$ : Indica cuantas cadenas serán ejecutadas como máximo. Si no se alcanza la convergencia  $C_{\text{conv}}$  el código correrá hasta  $N_{\text{maxchain}}$ . Esto evita que el código esté corriendo por tiempo indefinido.

#### Parámetros de entrada usados en esta tesis

Comenzamos todas nuestras simulaciones con  $N_{\text{agg},0} = 10^5$  agregados. Para  $F(R)_0$ y  $F(\phi)_0$  usamos distribuciones cuyas características se muestran en la tabla 6.1:

Parámetro	Distribución	Mínimo	Máximo	Intervalo
$F(R)_0$	uniforme	$1 \mu { m m}$	$100 \mu { m m}$	$0,5\mu\mathrm{m}$
$F(\phi)_0$	uniforme	0,075	0,525	0,025

Tabla 6.1: Distribuciones de entrada del código MC usadas en esta tesis

La evolución colisional de la población requiere alguna distribución de velocidades, de donde el código obtendrá la velocidad de impacto de cada colisión que se producirá. Esta distribución, en general, no es conocida y puede variar con el tiempo. Por ejemplo, en algunos ambientes astrofísicos, el gas que transporta al polvo será turbulento, incluyendo aceleraciones que varían temporal y espacialmente. Algunos trabajos previos han intentado determinar las velocidades relativas de colisión en esos casos (Ormel y Cuzzi 2007). En algunos escenarios se ha utilizado una distribución de Maxwell-Boltzmann (Windmark y col. 2012, Drążkowska y col. 2014), mientras que en varios casos se ha sugerido una distribución con una caída más predominante que una Maxwell-Boltzmann (Windmark y col. 2012 y referencias allí citadas), como por ejemplo una distribución Levy (Garaud y col. 2013).

El rol de la distribución de velocidades elegida debe evaluarse cuidadosamente para cada escenario astrofísico donde el código sea aplicado. En este capítulo y en el próximo se utilizará una distribución de velocidades Gamma con parámetro de forma k = 0.7 y parámetro de escala  $\theta$  = 15 (https://en.wikipedia.org/wiki/Gamma\_ distribution), mostrada en la Figura 6.1, que cumple con tener alta probabilidad de velocidades de colisión bajas pero también permite que ocurran eventos (con menor probabilidad) a velocidades de impacto hasta 150m/s. En el futuro cercano se planea que el código incorpore la distribución de Maxwell-Boltzmann y Levy. A modo de ejemplo en la Figura 6.1 se muestran las 3 distribuciones de velocidad mencionadas, tanto Levy como Gamma poseen una velocidad media de 10m/s y éste es el valor también para la  $v_{rms}$  de la distribución Maxwell-Boltzmann.

En esta tesis no se ha analizado la influencia del parámetro de impacto, ya que todas las colisiones realizadas por nosotros han sido centrales. Por lo tanto, este parámetro no será tenido en cuenta en este capítulo. Los parámetros de entrada del punto (3) serán variables. La convergencia será discutida más adelante según los resultados que se obtendrán variando  $N_{\rm col}$ .



**Figura 6.1:** Se muestran 3 distribuciones de velocidades: Maxwell-Boltzmann, Gamma y Levy. Ver texto para más detalles.

#### 6.2.2. Armado de agregados iniciales

En esta sección se construyen los  $N_{\rm agg,0}$  agregados que formaran la distribución inicial de la siguiente forma:

1. Se elige al azar un tamaño  $R_i$  de la distribución  $F(R)_0$ .

2. Se elige al azar un valor de factor de llenado  $\phi_i$  de la distribución  $F(\phi)_0$ .

3. Se calcula el número de granos en el agregado i  $(n_i)$ , asumiendo una forma esférica, como el entero:

$$n_i = \operatorname{int}\left[\frac{4\pi\phi_i R_i^3}{3V_{\text{grain}}}\right],\tag{6.1}$$

donde  $V_{\text{grain}}$  es el volumen de un grano ( $V_{\text{grain}} = 1,8388 \times 10^{-18} \text{m}^3$  para granos de sílica).

4. Guarda este agregado y se procede de la misma forma hasta tener $N_{\rm agg,0}$  agregados.

5. Calcula el número total de granos individuales que hay en los  $N_{\rm agg,0}$  agregados,  $n_{\rm tot}.$ 

# 6.3. Selección de agregados a colisionar

En esta sección se detallará cómo se seleccionan, de la población de agregados totales, los 2 agregados que colisionarán entre sí . Es importante notar que a medida que transcurran las  $N_{\rm col}$  colisiones, el número de agregados presentes  $(N_{\rm agg,j})$  puede

variar luego de la j-ésima colisión (dónde  $j = 1, 2, ..., N_{col}$ ), pero por conservación de masa, el número total de partículas  $n_{tot} = \sum_{j=1}^{N_{agg,j}} n_j$ , debe ser constante en todo momento. En primer lugar se debe tener en cuenta que la probabilidad de colisión se relaciona con el área transversal de los agregados de la población. Por lo tanto la probabilidad de que dos granos de la población colisionen entre sí debe estar pesada por su tamaño. El área transversal de cada agregado está dada por  $\pi R_i^2$ . Esto se incluye en el código de la siguiente manera:

1. La probabilidad de escoger a un agregado de la población  $N_{\text{agg},j}$  (inicialmente j = 0) es proporcional a su sección eficaz, dada por el cuadrado de su radio multiplicado por  $\pi$ . Se elige el primer agregado A<sub>1</sub> del cual se guarda el radio  $R_1$ , factor de llenado  $\phi_1$  y número de granos que lo componen  $n_1$ .

2. Se elige el segundo agregado,  $A_2$ , procediendo de igual forma, pero se tienen en cuenta las siguientes condiciones: (a) Debe tener el mismo factor de llenado que el  $A_1$  ( $\phi_1$ ), (b) Debe ser un agregado distinto al  $A_1$ . Si luego de  $N_{\text{int}}$  intentos (donde  $N_{\text{int}}$  es suficientemente grande para que no se busque indefinidamente a este segundo agregado) no encuentra un agregado que cumpla con las condiciones dadas se retoma desde el punto 1. Una vez elegido  $A_2$  se guarda: su radio  $R_2$ , factor de llenado  $\phi_2 = \phi_1 = \phi$  y número de granos que lo componen  $n_2$ .

3. Los dos agregados  $A_1$  y  $A_2$  son removidos de la distribución  $N_{\text{agg},j}$ .

4. Se calcula la relación de masas  $\mu$  entre  $A_1$  y  $A_2$ . Como todos los granos individuales poseen la misma masa m, se puede calcular  $\mu$  a partir del número de granos individuales  $n_i$  que componen a cada agregado  $A_i$ :

5.1. Si  $n_1 \ge n_2 \to \mu = n_1/n_2$ 5.2. Si  $n_2 > n_1 \to \mu = n_2/n_1$ 

5. Se elige una velocidad v al azar de la distribución dada de velocidades. Esta será la velocidad inicial (o velocidad de impacto) entre  $A_1$  y  $A_2$ .

6. De acuerdo a  $\phi$ ,  $\mu$  y v se determinará el resultado de la colisión (ver próxima sección). Los agregados resultantes serán incorporados a la distribución, que se guarda como  $N_{\text{agg},j+1}$ .

7. Se verifica que  $n_{\text{tot}}$  en  $N_{\text{agg},j}$  sea igual a  $n_{\text{tot}}$  en  $N_{\text{agg},j+1}$ .

8. Se repite desde el paso 1 con j = j + 1, hasta que  $j = N_{col}$ .

Por lo tanto cada colisión individual tendrá los siguientes parámetros:

-Agregado  $A_1$ :  $R_1$ ,  $\phi$ ,  $n_1$ 

-Agregado  $A_2$ :  $R_2$ ,  $\phi$ ,  $n_2$ 

<sup>-</sup>Relación de masa $\mu$ 

<sup>-</sup>Velocidad inicial v

# 6.4. Resultado de las colisiones individuales

Numéricamente es inviable recorrer cada uno de los posibles caminos en  $\mu, \phi$  y v para obtener el resultado exacto de agregados resultantes en cada simulación. Por lo tanto, utilizando nuestros resultados anteriores y los de nuestros colaboradores en Alemania que han utilizado el mismo método para colisiones granulares (Gunkelmann y col. 2016b, Ringl, Bringa, Bertoldi y col. 2012, basados en Ringl y Urbassek 2012), hemos dividido nuestro espacio de parámetros según valores de corte. Se detallará a continuación cómo se implementa dentro de nuestro código.

#### 6.4.1. Clasificación de una colisión individual

Primera selección: relación de masa entre los agregados

Primero, realizamos una división considerando el parámetro  $\mu$ . Como el factor de llenado  $\phi$  es el mismo para ambos agregados, esto es equivalente a una relación entre los volúmenes de ambos agregados. En el Capítulo 3 tenemos resultados para colisiones de un proyectil contra un blanco mucho mayor y en el Capítulo 4 cuando  $\mu = 1, 10, 60$ . Encontramos que un sólo valor de corte en  $\mu$  parece no ser suficiente y como una primera mejora (y aproximación) dividimos los resultados de acuerdo a 4 posibles intervalos de  $\mu$ :

1 Para  $\mu = 1$  usaremos los resultados de (a) Gunkelmann y col. (2016a) que estudiaron colisiones cuando  $\phi < 0.2$ , diferentes tamaños de agregados y diferentes v, (b) Ringl, Bringa, Bertoldi y col. (2012) utilizan un valor de  $\phi$  (0.205) y diferentes v.

2 En el Capítulo 4 se simularon colisiones entre agregados con  $\mu = 10$ , distintos valores de  $\phi$  (0.15, 0.25 y 0.40), y diferentes v. Usaremos estos resultados para el rango  $1 < \mu \leq 20$ .

3 En el Capítulo 4 tenemos simulaciones de colisiones entre agregados con  $\mu = 60$ ,  $\phi = 0.12, 0.15, 0.18, 0.20, 0.22, 0.25, 0.30, 0.35 y 0.40$  a varios valores de v. Usaremos estos resultados para el rango  $20 < \mu \leq 100$ .

4 Para  $\mu > 100$  usaremos nuestros resultados del Capítulo 3, donde un proyectil esférico con un número  $N_p$  de partículas ( $1 < N_p < 500$ ) impacta sobre un blanco cúbico mucho mayor ( $N_t = 70000$  partículas), cubriendo el rango  $140 < \mu < 70000$ . Se utilizó el valor  $\phi = 0.36$  y varios valores de v.

#### Segunda selección: factor de llenado

Los desenlaces para las diferentes colisiones se han separado entre agregados muy porosos ( $\phi < 0,20$ ) y agregados porosos ( $\phi > 0,20$ ), de acuerdo al comportamiento observado en las simulaciones. En algunos casos, fue necesario agregar un intervalo intermedio que presentaba un comportamiento diferente ( $0,20 \le \phi \le 0,30$ ).

#### Tercera Selección: velocidad de impacto

El último parámetro a tener en cuenta para separar los regímenes, pero no menos importante, es la velocidad de impacto v. En algunos casos hemos logrado definir de forma bastante precisa la velocidad que separa el desenlace SP ("*Sticking by penetration*": el proyectil se adhiere al blanco) del TF ("*Two Fragments*": dos fragmentos principales resultantes) o TD ("*Total Destruction*": Fragmentación total de la muestra) (ver sección 4.3.2), pero en algunos casos tenemos sólo estimaciones (por ejemplo, tenemos un caso con igual  $\mu$  y  $\phi$  que a v = 100m/s resulta en SP y a v = 200m/s resulta en TD, sin tener el valor exacto donde se pasa de un régimen a otro). Recordar que el tiempo de simulación y análisis hace imposible poder simular cientos de casos para poder hallar este valor con precisión. En estos casos hemos realizado una estimación de esta velocidad de corte que denominaremos  $v_{crit}$ .

La Figura 6.2 muestra un esquema para una interpretación visual sencilla de lo discutido anteriormente y se muestran los rangos de cada parámetro donde los resultados se clasifican como desenlace SP, TF o TD. Las correspondientes referencias pueden consultarse en la tabla 6.2.

#### 6.4.2. Fragmentos resultantes de una colisión individual

Hasta ahora el código elige "al azar" dos agregados (la única imposición forzosa es que posean el mismo factor de llenado) y una velocidad de colisión, y clasifica el resultado de la colisión como SP, TF o TD. En esta sección describiremos qué implicancias tiene cada uno de estos desenlaces. Recordemos que de cada colisión queremos obtener el número total de fragmentos resultantes y para cada uno de esos fragmentos: el número de granos que lo componen y su porosidad final (también su tamaño pero su radio puede calcularse fácilmente con la ecuación 6.1).

Después de una colisión, pueden sobrevivir uno o algunos fragmentos grandes, el resto será parte de la eyecta (fragmentos muy pequeños). Para la distribución de fragmentos resultantes tendremos en cuenta los siguientes parámetros:

- $\mathbf{N}_{tot}$  = número total de partículas en ambos agregados, proyectil y blanco  $(N_{tot} = N_p + N_t).$
- $\mathbf{Y}_{s} = n$ úmero de partículas eyectadas en grupos pequeños.
- $\mathbf{Y}_{\mathrm{L}} = \mathrm{n}\mathrm{u}\mathrm{m}\mathrm{e}\mathrm{r}\mathrm{o}$  de partículas eyectadas en fragmentos grandes.

Por ejemplo,  $Y_{\rm s}$  no incluye al mayor agregado resultante en SP, o los dos mayores resultados en TF. Para TD la situación es diferente: cuando v es lo suficientemente alta, toda la eyecta se reduce a fragmentos muy pequeños con una alta presencia de monómeros, pero cuando v es cercana a  $v_{\rm crit}$ , observamos un número de fragmentos grandes (entre 1 y 30), y el resto son agregados muy pequeños. Este detalle se



**Figura 6.2:** Resultados posibles de una colisión individual según la velocidad de impacto v, el factor de llenado de sus agregados  $\phi$  y la relación de masa entre ellos  $\mu$ .

tendrá en cuenta luego. Entonces se precisa saber el número de partículas de  $N_{tot}$  que formarán parte de la eyecta luego de la colisión, y cómo se distribuye la masa de la misma, tanto para fragmentos grandes como pequeños.

Asumimos, basados en nuestros resultados (ver secciones 3.3, 4.2.5 y 4.3.6), que una relación en leyes de potencia representa la distribución diferencial de masas de partículas eyectadas en fragmentos pequeños:

$$F(n) = constante \ n^{-\tau}, \tag{6.2}$$

donde n es el número de partículas pertenecientes a cada fragmento. Entonces, se necesita saber simplemente el valor de  $Y_{\rm s}$  (cuántos de los granos totales serán parte de la eyecta luego de la colisión) y el valor del exponente  $\tau$  ( $-\tau$  es equivalente al exponente q de la ecuación 1.10).

$\mu$	$\phi$	$v  \mathrm{[m/s]}$	Desenlace	$Y_{\rm s}$	au	Ref.
1	< 0,2	< 30	SP	-	-	[1]
		$\geq 30$	TD	-	-	
	> 0.2	< 17	SP	0.014	2	[2]
	_ 0,2	$\geq 17$	TD	-	2-3.8	[~]
(1;20]	< 0,2	< 12,5	SP	0.004	2.8	-
		12,5 - 35	TF	0.02	2	
		$\geq 35$	TD	0.9	2.8	[3]
	0,2-0,3	< 35	SP	0.01	2.8	. [~]
		$\geq 35$	TD	0.9	2.8	
		< 35	SP	0.02	2.8	
	,	$\geq 35$	TD	0.8	2.8	
(20;100]	< 0,2	< 60	SP	0.003	2.8	
		60 - 150	TF	0.2	2.8	
		$\geq 150$	TD	0.2-0.99	2.8	[4]
	0,2-0,3	< 140	SP	0.01	2.8	[-]
		$\geq 140$	TD	0.2-0.95	2.8	
	$\geq 0,3$	< 110	SP	0.01	2.8	
		$\geq 110$	TD	0.3-0.96	2.8	
> 100	Todos los casos		SP	100 monómeros eyectados		[5]

**Tabla 6.2:** Resumen de desenlaces de una colisión individual para rangos de  $\mu$ ,  $\phi$  y v; y valores de  $\tau$  y Y<sub>s</sub> correspondientes a cada rango, según estudios previos. [1] Gunkelmann y col. (2016b) [2] Ringl, Bringa, Bertoldi y col. (2012) [3] Planes y col. (2021) [4] Planes y col. (2020) [5] Planes y col. (2017)

En la tabla 6.2 presentamos los resultados obtenidos y sus correspondientes referencias (si no está detallado, significa que esa cantidad no fue cuantificada). Tomando esto en cuenta, se le han asignado las características que se describirán a continuación a cada desenlace SP, TF o TD, con el afán de mantener el equilibrio entre un modelo simple que pueda ser eficientemente ejecutado por nuestro código y que al mismo tiempo represente de forma precisa los resultados obtenidos previamente por nosotros. Cualquiera de estos valores podrán ser cambiados por el usuario si se considera otro criterio. Para cada desenlace de una colisión individual nuestro código adopta los siguientes valores de  $Y_{\rm s}, Y_{\rm L}$  y  $\tau$ :

#### 1. 1. SP: Adhesión por penetración

 $Y_{\rm L} = N_{tot} - 0.01 N_{tot}$  (un sólo fragmento mayor)

 $Y_{\rm s} = 0.01 N_{tot} \ {\rm con} \ \tau = 2.8$ 

Única excepción:  $\mu > 100$  donde  $Y_{\rm s} = 100$  y son todos monómeros. (Ver sección 3.3)

#### 2. TF: Dos fragmentos

• Para  $1 < \mu \leq 20$ 

 $Y_{\rm L} = 0.98 N_{tot}$  (Fragmento 1:  $0.49 N_{tot}$ ; Fragmento 2:  $0.49 N_{tot}$ )

$$Y_{\rm s} = 0.02 N_{tot} \ {\rm con} \ \tau = 2.8$$

• Para  $20 < \mu \le 100$ 

 $Y_{\rm L}=0.98N_{tot}$  (Fragmento 1:  $0.84N_{tot}$  ; Fragmento 2:  $0.14N_{tot})$ 

 $Y_{\rm s} = 0.02 N_{tot} \ {\rm con} \ \tau = 2.8$ 

Notamos que  $Y_{\rm L}$  tiene una fuerte dependencia con v (ver tabla 6.2), hemos tomado sólo 2 posibilidades en orden de mantener un modelo simplificado.

#### 3. TD: Destrucción total

 $Y_{\rm L} = 0.7 N_{tot}$  (5 fragmentos de igual tamaño)

 $Y_{\rm s} = 0.3 N_{tot} \ {\rm con} \ \tau = 2.8$ 

Si inicialmente hay  $N_{tot} \leq 5$  partículas, luego de la colisión serán todos monómeros.

En el desenlace TD también  $Y_L$  depende fuertemente de v, variando entre  $0.4N_{tot}$  (para v cercana a  $v_{crit}$ ) y  $0.99N_{tot}$  (para las velocidades v más altas analizadas en esta tesis).

En este momento debemos realizar dos aclaraciones: (1) En los desenlaces TF y DT se han preferido establecer valores de  $Y_{\rm s}$  y  $Y_{\rm L}$  observados cuando la velocidad de impacto v es cercana a  $v_{\rm crit}$ . Esto se debe a que la distribución de v del código es una distribución gamma con media en 10m/s. Luego, si una colisión resulta en TD, por ejemplo el caso  $\mu = 10, \phi = 0.15$  en la Figura 6.2, será más probable que haya ocurrido a una  $v \simeq 35 \text{m/s}$  que a v >> 35 m/s. (b) El código redondea los números al aproximar los cálculos. Si, por alguna razón el número final de partículas luego de una colisión excede el valor  $N_{tot}$ , los granos sobrantes se sustraen de los monómeros.

Si es menor que  $N_{tot}$ , los granos faltantes se agregan como monómeros. Si en algún momento esta diferencia supera  $0.02N_{tot}$ , el código imprime una advertencia.

#### Porosidades luego de una colisión individual

Existe información limitada sobre los cambios en la compactación luego de que una colisión ocurre entre agregados porosos, aunque algunos autores han explorado este comportamiento de forma experimental (Beitz y col. 2013). Muchos utilizan un valor constante a falta de mayor información, por ejemplo, Güttler y col. (2010) asumen un factor de compactación de 1.5 cuando los granos se adhieren entre sí, independientemente de las propiedades de la colisión. Sin embargo, nosotros hemos encontrado que depende de  $\mu$  (sección 4.3.3): Si consideramos  $v \simeq 10m/s$  (valor medio de la distribución gamma de velocidades iniciales), para todos los valores  $\phi$ analizados, cuando  $\mu = 10$  observamos un aumento en la coordinación promedio final  $\langle C_f \rangle$  del 75 – 100 % y cuando  $\mu = 60$ , del 50 – 75 %. Gunkelmann y col. (2016b) encuentran para  $\mu = 1$  (0,08 <  $\phi$  < 0,201) un incremento en el factor de llenado  $\phi$  del 100%. Por lo tanto, cuando  $\mu$  aumenta, la compactación final promedio disminuye. De la Figura 4.17 y de la Fig.7 en Gunkelmann y col. (2016b) podemos ver que un incremento del 100 % parece ser aproximadamente el máximo alcanzado. Nuestro análisis en  $\langle C_f \rangle$  concuerda con los análisis en  $\phi$  para casos semejantes, aunque la relación -aparentemente lineal- que observamos en nuestros resultados entre  $\langle C_f \rangle$  y  $\phi$ (final) debería ser estudiada con más cuidado. Bajo estos fundamentos, asignamos dos regímenes de compactación diferentes: entre (1.5 - 1.75) si  $\mu > 20$  y entre (1.75 - 2) si  $\mu \leq 20$ . Según el valor de  $\mu$  el código seleccionará al azar un factor de compactación dentro del rango correspondiente. Por supuesto que esta es una aproximación gruesa, ya que la compactación depende de otros factores, como por ejemplo en la Fig.5.a de Ringl, Bringa, Bertoldi y col. (2012) se evidencia que las colisiones centrales (como nuestras simulaciones) presentan un máximo en el factor de compactación, y éste entonces depende del parámetro de impacto b. Pero en ausencia de más información en este tema, nuestra propuesta es una gran mejora comparada con considerar un sólo factor de compactación para todas las colisiones, y esto puede ser fácilmente modificado en el código cuando hayan más simulaciones que ayuden a dar un soporte más completo al respecto.

El valor de  $\phi$  final tendrá un máximo fijado en  $\phi = 0.74$ , que es el máximo empaquetamiento posible para esferas del mismo tamaño ( $\pi/\sqrt{18} = 0.7404$ , considerando una estructura FCC (Bargiel y Tory 1993)). Aunque algunos autores sugieren que este valor no se alcanzará mediante colisiones que provocan una compactación desordenada, sugiriendo valores máximos  $\phi \sim 0.58 - 0.65$  (Torquato y col. 2000, Weidling y col. 2009, Teiser y col. 2011). Remarcamos que nuestro objetivo es evaluar la compactación global de estos agregados, por lo tanto, preferimos abarcar el mayor factor de llenado teóricamente posible, que luego puede ser acotado en el post-análisis. También aquí remarcamos que no contamos con ningún estudio sobre el resultado de colisiones donde los agregados a colisionar tengan diferente porosidad entre sí y por esto, este tipo de colisiones no están permitidas en el mismo.

Hay dos excepciones importantes:

1. Monómeros: Los agregados que posean una sola partícula (n = 1), tendrán un factor de llenado asignado de  $\phi = 1$ .

2. Dímeros: Los agregados compuestos por n = 2 partículas tendrán un factor de llenado asignado de  $\phi = 0.25$  (2 esferas de radio  $R_{\text{grain}}$  en contacto, encerradas por una esfera de radio  $2R_{\text{grain}}$ ), aunque el código les asigna un valor distinto, de  $\phi = 0.9125$ , con el fin de poder distinguirlos de aquellos agregados que poseen  $\phi = 0.25$  y tienen  $n \neq 2$ , y luego el valor deseado se modificará en el post-análisis.

Dentro de estas aclaraciones, remarcamos que para agregados con n < 10 no tiene mucha relevancia asignar un factor de llenado, aunque por defecto el código asignará el valor correspondiente del mismo a todos los agregados existentes. Estas consideraciones permitirán tomar un valor de corte en  $\phi \sim 0.75$  para observar las porosidades de agregados con  $n \ge 2$ , ya que hablar de la porosidad de agregados de pocas partículas carece de sentido.

## 6.5. Distribuciones Finales

#### 6.5.1. Distribuciones resultantes luego de $N_{col}$ colisiones

En este punto, el código ejecuta  $j = N_{\rm col}$  colisiones, siguiendo el procedimiento descrito en la sección 6.3 y usando el criterio para evaluar cada colisión individual como se explicó en la sección anterior. Ahora queremos conseguir: las distribuciones de masa (F(n)), tamaño (F(R)), y porosidad  $(F(\phi))$  de la población final de agregados (luego de las  $j = N_{\rm col}$  colisiones). Aun más, también estamos interesados en obtener una matriz  $(F(n, \phi, R))$  que interrelacione la información de porosidad, masa y tamaño de todos los agregados. Entonces, una vez que se ejecutan el número de colisiones dado como parámetro de entrada, el código calculará cada distribución normalizada con el número total de agregados que existan al final  $N_{\rm agg}$ :

• Distribución de masa (F(n)): Número de agregados compuestos por n granos. Como la masa de todos los granos es idéntica, se puede considerar una distribución de masa normalizada con  $m_{\text{grain}}$ . Se observa un fuerte decaimiento en F(n) a medida que n aumenta, por lo tanto el código realiza una agrupación de agregados en intervalos logarítmicos de n.
- Distribución de tamaño (F(R)): Muestra el radio de todos los agregados finales, agrupados en intervalos de ancho  $1\mu$ m (este ancho duplica al inicial para suavizar la curva).
- Distribución de porosidad  $(F(\phi))$ : Se presenta mediante la distribución de  $\phi$  agrupados en intervalos de longitud 0,05 (este ancho duplica al inicial para suavizar la curva). Recordar que, por defecto, el código asigna un valor de  $\phi = 1$  a monómeros y  $\phi = 0,9125$  a dímeros.
- Matriz masa-tamaño-porosidad: Permite interrelacionar los datos y desde aquí podemos obtener:
  - Distribución de masa-porosidad $(F(n, \phi))$ : detalla la frecuencia de los agregados con cierta masa y porosidad, permitiendo evaluar qué sucede con los agregados más porosos o más compactos.
  - Distribución de tamaño-porosidad $(F(R, \phi))$ : que permite el mismo análisis pero entre tamaño de los agregados y su porosidad.

Esta matriz aumenta considerablemente el tiempo de cómputo del código, y es elección del usuario pedir que esté incluida en la salida del mismo o no.

### 6.5.2. Distribuciones resultantes luego de $N_{\text{chain}}$ cadenas

Hasta ahora hemos detallado el resultado luego de que ocurren las  $N_{\rm col}$  colisiones en una cadena. Ahora se debe repetir el proceso comenzando desde la misma población inicial de  $N_{\rm agg,0}$  agregados, pero eligiendo nuevos valores al azar y repitiendo el proceso detallado en la secciones 6.3, 6.4 y 6.5,  $N_{\rm chain}$  veces, donde este número debe ser lo suficientemente grande para garantizar la convergencia de nuestros resultados. A continuación vamos a detallar cómo se encuentra el valor de  $N_{\rm chain}$  a partir del error que se introduce como aceptable en la entrada del código, y el cálculo de las distribuciones finales (que se presentarán ya promediadas sobre las  $N_{\rm chain}$  cadenas). También el código estima la desviación estándar de cada frecuencia de cada una de las distribuciones.

En primer lugar, distinguimos dos tipos de errores: (a) error del intervalo: es el cálculo de la desviación estándar de cada frecuencia de cada distribución, y el (b) error global: es el error general admisible en el código. Para explicar el procedimiento, definimos las siguientes cantidades:

- $\mathbf{n}_{chain} = n$ úmero actual de cadena
- C<sub>conv</sub>: parámetro o corte de convergencia, indica el error global que el usuario acepta, una vez que se alcanza, la ejecución termina.
- $\mathbf{N}_{\text{maxchain}} = \mathbf{N}$ úmero máximo de cadenas a simular

•  $\mathbf{N}_{\text{chain}} = \text{N}$ úmero de cadenas que el código efectivamente recorre antes de terminar (por alcanzar  $C_{\text{conv}}$  o  $N_{\text{maxchain}}$ ).

Para cada distribución i el procedimiento es el mismo:

- 1. Se almacena el valor de cada intervalo de F(i) de la primera cadena recorrida, sea  $F(i)^{\text{avg},0}$ .
- 2. Se simula la próxima cadena, y se guarda el valor de cada intervalo de F(i).
- 3. Se calcula el promedio de cada intervalo F(i) entre ambas cadenas:  $F(i)^{\text{avg},1}$ . Para este cálculo se utiliza la distribución actual  $(F(i)^k, \text{ de la iteración k}), \text{ mas}$  el promedio,  $F(i)^{\text{avg},k-1}$  de la distribución en la iteración anterior. En iteración k guarda  $F(i)^k$ , promedia con  $F(i)^{\text{avg},k-1}$ , para generar  $F(i)^{\text{avg},k}$  y simula la próxima cadena. El cálculo detallado se basa en https://en.wikipedia.org/ wiki/Standard\_deviation#Rapid\_calculation\_methods.
- 4. Calcula el error  $|F(i)^{\text{avg},1} F(i)^{\text{avg},0}|$  para cada intervalo de la distribución i (error de intervalo) y luego calcula la raíz cuadrada de la suma de los cuadrados de los errores de intervalo para determinar el error global.
- 5. Sólo una de las distribuciones i es utilizada para calcular la convergencia de la simulación (es decir,  $i = n, R \circ \phi$ ): Si durante  $1000/N_{col}$  cadenas (donde  $\mathbf{N}_{chain}$  es la última) el error global de la distribución i elegida es menor que  $\mathbf{C}_{conv}$ , calcula cada una de las distribuciones promedio finales hasta la cadena  $\mathbf{N}_{chain}$ :  $F(i)^{\text{avg,n}_{chain}}$ , guarda éstas en el disco y termina la simulación.

Si bien cualquier distribución puede utilizarse para calcular el error global, hemos elegido trabajar con F(R) en esta tesis, ya que simultáneamente obedece ser poco agrupada (en comparación con la agrupación logarítmica de n) y cuyos valores no han sido modificados (como en el caso de  $\phi$ , para los monómeros, dímeros y la imposición de un valor máximo).

Una vez que el proceso de convergencia finaliza, cada distribución F(i) se normaliza el área a 1 a fin de poder realizar comparaciones (esta última normalización dependerá de la longitud de los intervalos tomados en cada distribución).

### 6.5.3. Salida del código

Es importante destacar que el código obtiene las distribuciones finales estacionarias, de acuerdo al criterio de convergencia elegido pero que, por supuesto, obtiene la evolución "temporal" desde la distribución inicial a la distribución final. De manera práctica, dado el procesamiento y normalización de las distribuciones, esto se puede lograr con corridas consecutivas incrementando  $N_{\rm col}$ . No es sencillo asociar un tiempo dado con la ejecución del código, pero se puede obtener un tiempo estimativo de la siguiente manera. En una distribución de agregados, el tiempo de colisión esta dado aproximadamente por l/v, donde v es la velocidad entre agregados, y  $l \sim \rho^{-1}$  es el camino libre medio de colisión, siendo  $\rho$  la densidad de agregados. Si tengo  $N_{\rm col}$  colisiones, cada una de ellas suma un tiempo  $t_{N_{\rm col}}$ , que debe ser promediado en las  $N_{\rm chain}$  cadenas de colisiones. La inclusión de esta estimación de tiempos de evolución en la salida del código todavía esta pendiente.

El código imprime al final de su ejecución cada una de las tres distribuciones (masa, tamaño y radio), con sus valores (y desviación estándar de cada valor); además de la matriz de interrelación, todas normalizadas con el número de cadenas recorridas y a área 1.

Además, en la carpeta de salida se podrán encontrar los siguientes archivos, si el usuario lo desea (son opcionales):

- 1. Un archivo con la información de todos los agregados de la distribución inicial (número de partículas, radio, porosidad, volumen).
- 2. Un archivo con el valor calculado de error global para cada cadena recorrida.
- 3. Las distribuciones iniciales  $F(n)_0$ ,  $F(R)_0$  y  $F(\phi)_0$ , agrupadas y normalizadas con los criterios de las distribuciones finales.
- 4. Un archivo de error, donde se imprimirán (en caso de existir) las advertencias correspondientes, ya que existen controles dentro del código, como por ejemplo, controles para verificar que  $n_{tot}$  permanezca constante.
- 5. Esbozos de las distribuciones resultantes en formato .png.
- 6. Un archivo con todas las colisiones que han sucedido en cada cadena, indicando las propiedades de los agregados que colisionaron (número de identificación, radio, número de partículas, volumen), la velocidad de colisión elegida al azar y el valor exacto de μ correspondiente. Si bien la impresión de este archivo genera una demora considerable en el código, permite un monitoreo detallado de todo lo que sucede, y sirve para controlar el proceso.

Por último comentamos que este código fue testeado variando la *semilla*, es decir, generando desde cero una nueva población de  $N_{\text{agg},0}$  agregados y repitiendo todo el proceso colisional desde cero. No se observaron cambios cuantitativos ni en la población inicial generada (de 10.000 agregados) ni en las distribuciones finales F(i), por lo tanto concluimos en que no es necesario modificar la *semilla* en nuestras simulaciones. Nuevamente, esto se dejó como parámetro de entrada para que el usuario pueda activar esta opción si lo desea. La Figura 6.3 muestra el diagrama de flujo del código CPA.



Figura 6.3: Diagrama de flujo del código Monte Carlo

# 6.6. Posibilidades futuras

Este código de Monte Carlo fue desarrollado para estudiar el proceso colisional que ocurre de a pares entre agregados de sílica pertenecientes a una población de polvo en vacío, que no sufren efectos gravitacionales. En el próximo capítulo se detallarán los resultados aplicados a diferentes escenarios astrofísicos, aunque su aplicación puede ser en cualquier fenómeno donde estas condiciones se cumplan. Si bien este código incorpora avances notables respecto a códigos similares desarrollados previamente, buscando una mejor aproximación a la realidad (con agregados asimétricos en masa, incorporación de fricción inter-granular, dependencias en porosidades, etc) aun queda mucho por perfeccionar. Remarcamos que toda mejora conlleva un aumento de tiempo computacional (tanto de tiempo de simulación del código en sí, como de estudios/simulaciones previas que avalen los nuevos resultados a incorporar) pero creemos que con los avances tecnológicos exponenciales de los tiempos actuales, las propuestas que dejamos a continuación serían posibles de concretar en un futuro cercano:

- Agregados de diferentes materiales: además de sílica, sería interesante poder contar con simulaciones de base que aporten información sobre colisiones entre agregados de otros materiales, como por ejemplo hielo (de particular interés en esta tesis) y materia orgánica. El punto culmine sería poder incorporar agregados cuya composición sea una mezcla de diferentes materiales.
- Porosidades: Aquí hay dos puntos fuertes por mejorar, en primer lugar realizar simulaciones entre agregados con diferente porosidad, ya que este tipo de colisiones no han sido estudiadas ampliamente y por lo tanto no están incorporadas en nuestro código. En segundo lugar, no existe actualmente un consenso sobre cómo varía la porosidad final en función de la velocidad de impacto y la relación de masas. Si bien iniciamos este estudio, y analizamos la compactación como función de estos parámetros, lo hicimos a través del número de coordinación, que guarda relación con el factor de llenado. Pero consideramos que estudios más precisos con foco en la evolución del  $\phi$  son necesarios para cumplir con este objetivo.
- Parámetro de impacto: Si bien el parámetro de impacto b está como variable en nuestro código no contamos con información sobre la influencia de este factor por lo tanto, no está contemplado. Sin embargo, basados en algunos estudios previos sabemos que al ser todas nuestras colisiones centrales, se favorece el crecimiento por sobre la erosión de los mismos. Sería interesante poder tener la dependencia del resultado también como función de b.

- Dependencia de la distribución de tamaños finales con la velocidad de impacto: A modo de simplificación y de falta de simulaciones se eligieron cortes en v que pueden no ser muy precisos. Nuevas simulaciones barriendo más valores de vpara cada conjunto ( $\phi, \mu$ ) se requieren para poder perfeccionar estos valores de corte. Por otro lado, el número de fragmentos grandes resultantes y la masa de los mismos muestra una fuerte dependencia con v, siendo muy complejo y extenso de considerar. Sin embargo, creemos que es posible mejorar de a poco este punto, a medida que se tengan resultados más certeros al respecto con las simulaciones propuestas en este ítem.
- Factor de forma: Todos nuestros agregados se consideran esféricos, y de allí surge nuestra relación entre el radio R y el número de partículas que posee, n. Si bien no es sencillo considerar cuerpos geométricos irregulares, somos conscientes de que este sería un caso mucho más realista para representar agregados de polvo.
- Radio de grano: Los resultados podrían variar al considerar un radio de grano diferente. Una propuesta sería evaluar colisiones donde el radio de los granos que componen a los agregados sea diferente, y aún más: que los granos individuales tengan distribución de tamaños dada.

# 6.7. Conclusiones del capítulo

En este capítulo se explicó el desarrollo de un código de Monte Carlo que permite, partiendo de una población inicial de agregados, evaluar el estado final de la misma una vez que han ocurrido un número impuesto de colisiones al azar entre ellos. Este código, programado en C, es libre y puede encontrarse en: https://sites.google.com/site/simafweb/software.

El usuario puede ingresar la distribución inicial de tamaño y porosidades deseadas (por defecto ambas son uniformes), y el número de agregados que quiera que se construyan tomando radios y porosidades al azar dentro de estas distribuciones. Las velocidades de colisión también pueden darse como entrada. Luego se debe indicar cuántas colisiones se desean y el error tolerado, teniendo en cuenta que un menor error conlleva más tiempo de simulación. Los resultados de las colisiones individuales, en cuanto a número, tamaño y porosidad de agregados resultantes, se basan en nuestros resultados detallados en los Capítulos 3 y 4.

Este código, diseñado para correr en una computadora de escritorio o notebook estándar, brinda como resultado las distribuciones de porosidad, tamaño y masa ya normalizadas. Además, opcionalmente puede obtenerse si el usuario lo desea, una matriz que interrelaciona los datos, con un costo computacional un poco mayor. Este código es el primero que evalúa la evolución colisional de una población de agregados (de polvo) incorporando resultados para las colisiones individuales que dependen de la velocidad de impacto, de la diferencia de masas y de la porosidad de los agregados. Nuestros trabajos anteriores indican que un sólo corte en velocidad (cómo es usual) no es suficiente para abarcar todo el escenario posible de interacciones granulares; además no es usual que los agregados de una población tengan todos el mismo tamaño y porosidad. Por ello nuestro código presenta una mejora considerable al tener en cuenta todas estas variables, y además se basa en un modelo granular donde se evalúa la interacción que sufre cada par de granos individuales del conjunto, incorporando las pérdidas energéticas a causa de la fricción. Las aplicaciones del código son diversas, pero fue pensado para analizar entornos de polvo astrofísicos donde las colisiones cumplen un papel importante, uno de los cuales será desarrollado en el próximo capítulo y es el objetivo final de esta tesis.

# Capítulo 7

# COLISIONES DE POLVO EN COMAS COMETARIAS

# 7.1. Introducción

Como se detalló en la sección 1.6.4, la coma interna de los cometas se compone de los gases, producto de la sublimación de hielos a medida que el cuerpo se acerca a su perihelio, y de una población de polvo que es arrastrada desde el núcleo por estos gases durante el proceso de sublimación, siendo la sílica un componente prevalente (ver sección1.6.4.2). La densidad de polvo presente en la coma depende de cada cometa y suele expresarse en relación a la cantidad de gas presente en la misma (llamada relación polvo/gas).

El estudio teórico sobre la dinámica del polvo alrededor de un núcleo cometario activo, del movimiento de los granos individuales y de la distribución resultante del polvo en las proximidades del núcleo se ha iniciado hace varias décadas. Sin embargo, hasta hace muy poco estos modelos realizaban consideraciones y simplificaciones tan extremas, que hacían desconfiar de los resultados obtenidos ya que no lograban una buena reproducción de las observaciones que había en ese momento. Mucho menos confiables se volvieron en la actualidad, donde las misiones (sección 1.6.2) han podido obtener imágenes e información detallada de estos aspectos del polvo cometario. El primer trabajo que puede encontrarse al respecto es el de Crifo y col. (2005), quienes remarcan las falencias de los trabajos previos, dividiéndolos en dos grupos:

1) El primer grupo de estudios fue iniciado por Banaszkiewicz y col. (1990), quienes presentaron una descripción muy breve de los cálculos mediante los cuales granos decimétricos esféricos eran expulsados de un núcleo homogéneo elipsoidal o esférico de tamaño Halley cerca de 1UA, experimentando movimientos oscilatorios durante

varios días antes de ser finalmente expulsados. Según Crifo y col. (2005) los supuestos físicos y el modelado matemático eran bastante rudimentarios, lo que hace que la validez de los resultados sea bastante dudosa. Richter y Keller (1995) estudiaron la estabilidad de las órbitas esféricas de granos de polvo alrededor de un gran núcleo esférico activo. No calcularon trayectorias precisas, pero asumieron que tales trayectorias existían, afirmando que los "cálculos del modelo muestran que la divergencia (del gas) puede ser lo suficientemente fuerte como para invectar granos grandes en órbitas alrededor de un núcleo". Crifo y col. (2005) señalan que los trabajos que citan en apoyo a esta afirmación no contienen ningún cálculo de trayectoria de grano de este tipo. Fulle (1997) utilizando el mismo modelo que Richter y Keller (1995) complementado por un modelo de interacción gas-polvo simple, pero físicamente razonable, integra los movimientos de grandes granos esféricos a lo largo del movimiento orbital del núcleo, comenzando tan pronto como el gas sea capaz de levantar los granos. En conclusión, digamos que este problema de la inyección de granos de polvo esférico en órbitas temporales es de interés, pero el problema más fundamental: "¿Cómo se mueve el polvo real en las proximidades de un núcleo real?" parece que nunca se había estudiado sistemáticamente. Obviamente, esto no solo requiere considerar los núcleos asféricos, sino que, además, Crifo y Rodionov (1999) han demostrado que el movimiento de los granos asféricos difiere radicalmente del de los granos esféricos.

2) El segundo grupo de estudios consiste en los llamados cálculos dinámicos de gas de "polvos multifluidos" (DMF) de la expansión de la mezcla de gas y polvo. Según Crifo y col. (2005) aquí no hay posibilidad de tratar los casos en los que se producen "retrocesos" de los granos y el método solo puede tratar de manera muy aproximada situaciones en las que ocurren cruces mutuos de trayectorias de polvo y por tal motivo el método DMF directamente ignora las colisiones mutuas de polvo. Crifo y col. (2005) agregan que esto a menudo se justifica (en la aplicación a núcleos cometarios), pero nunca se había investigado hasta que punto esta asunción era correcta. Finalmente, todos los resultados presentados hasta ahora contienen simplificaciones: por ejemplo, la fuerza de inercia asociada con la rotación del núcleo, o las desviaciones de la simetría esférica del campo gravitacional no se consideran, y sólo se derivaron soluciones de estado estacionario, es decir, solo válidas para tiempos de tránsito de polvo mucho más pequeños que el período de rotación del núcleo.

Entonces, el comportamiento del polvo desde que se desprende del núcleo hasta que llega a la cola de polvo es una situación difícil de modelar por la cantidad de efectos físicos que entran en juego. Actualmente los modelos han sido mejorados pero no existe alguno que pueda reunir todos estos efectos, sino que la mayoría debe implementar varias simplificaciones. Una de las más utilizadas es la negación de las colisiones entre las partículas de polvo en la coma, aunque algunos modelos si han logrado incorporar las complejas interacciones entre partículas de gas o gaspolvo (Combi 2002, Tenishev y col. 2008). Otros trabajos, como el de Rubin y col. (2011), incorporan polvo pero solo ven tamaño y velocidad a medida que choca con gas. Modelan partículas de polvo que alcanzan una velocidad terminal típicamente dentro de tres radios de cometa, y muestran las velocidades modeladas de 30 grupos de polvo esférico de diferente tamaño, concordando con la fluencia del polvo medida por el sistema de detección de impacto de polvo a bordo de la nave espacial Giotto. Sin embargo, el modelo no reproduce el exceso medido de grandes granos de polvo que se cree que es el resultado de la presión de la radiación solar y la gravedad solar, así como la actividad no isotrópica del cometa combinada con la rotación del núcleo y la variación temporal en la tasa de producción total.

El objetivo de este capítulo es, en primer lugar analizar la probabilidad real de que los granos de polvo interactúen entre sí en las comas cometarias, y en segundo lugar la implementación del código de Monte Carlo desarrollado en el Capítulo 6 para analizar el impacto que podrían tener estas colisiones en cuanto a la distribución final de masas, tamaños y porosidades del polvo.

# 7.2. ¿Los agregados de polvo colisionan en las comas cometarias?

### 7.2.1. Antecedentes

El primer trabajo que encontramos al respecto, Crifo y col. (2005), es relativamente reciente. Este trabajo muestra las siguientes conclusiones: (i) Las colisiones mutuas son insignificantes en una coma donde los granos tienen todos un solo tamaño, no sólo en las condiciones estudiadas, sino también a tasas de producción de varios órdenes de magnitud mayores. Sin embargo, esta conclusión carece de sustento, ya que las comas reales no son compuestas por agregados de un solo tamaño. (ii) Se superponen las soluciones de tamaño único para generar una solución de tamaño disperso. Comentan que su análisis de ocurrencia de colisiones se vuelve bastante complicado, y no pueden realizar un análisis a fondo con muchos tamaños, para cubrir un espectro de masas realista. Por lo que realizan sólo algunas estimaciones simples. Concluyen que las colisiones de cualquier tamaño de grano con los tamaños más grandes no afectarán la distribución numérica calculada del primero; por el contrario, la tasa de bombardeo de los más pequeños es alta. Afirman que algunos de estos impactos pueden ser destructivos, sin embargo, ignorando este efecto evalúan la distancia necesaria para un cambio significativo del momento de la partícula objetivo y concluyen en que la distribución de las partículas (si sobreviven al bombardeo) no se verá afectada por las colisiones de las más pequeñas.

Su conclusión final es la siguiente: "Hemos demostrado que las colisiones polvopolvo son numerosas (es decir, colisiones entre granos de diferentes masas), pero sin un efecto esperado sobre la distribución espacial". Este trabajo pionero soporta las colisiones entre agregados de polvo, pero no puede evaluar de forma certera el efecto que tendrían en una población real, donde se abarcarían muchos tamaños de agregados diferentes.

### 7.2.2. Estimación Teórica

Para realizar una estimación teórica sobre el número de colisiones entre granos de polvo que pueden ocurrir en la coma de un cometa, podemos comenzar calculando el camino libre medio de estas partículas.

Lo primero que debemos conocer es el número de partículas por unidad de volumen que existen en la coma. Este número,  $n_{\rm PC}({\rm m}^{-3})$  depende de los siguientes factores: (a) Cometa: tipo de cometa y cantidad de órbitas transitadas.

(b) Distancia heliocéntrica del cometa, h.

(c) Distancia cometocéntrica de las partículas,  $r_{\rm PC}$ .

(d) Tamaño y composición de estos agregados de polvo.

Las estimaciones de los valores de  $n_{\rm PC}$  son obtenidos, lógicamente, mediante modelos que asumen que no existen colisiones entre agregados de polvo. Sin una mejor estimación al respecto tomamos de referencia el trabajo de Tenishev y col. (2011), donde el valor  $n_{\rm PC}$  disminuye al aumentar h y  $r_{\rm PC}$ . Como nuestro objetivo es analizar el caso donde estas colisiones serían posibles, seleccionamos el mayor valor de  $n_{\rm PC}$ estimado, que corresponde en el trabajo de Tenishev y col. (2011) a  $r_{\rm PC} \leq 20$ km y h = 1,29UA:  $n_{\rm PC} = 1,5 \times 10^6 \text{m}^{-3}$ . El polvo se mueve mucho más lento que el gas, y la velocidad del mismo,  $v_{\rm PC}$ , aumenta con  $r_{\rm PC}$  de 0 a 300m/s (Tenishev y col. 2011). Para poder realizar una estimación asumimos un valor promedio para la velocidad relativa de colisión dentro de este rango, tomando  $v_{\rm PC} = 150$ m/s.

Ahora podemos calcular el camino libre medio, cuya fórmula viene dada por:

$$l = \frac{1}{\sigma n_{\rm PC}},\tag{7.1}$$

donde  $\sigma = \pi r^2$ , siendo r el radio del agregado. Teniendo l, se puede obtener el tiempo de colisión:

$$t_{\rm PC} = \frac{l}{v_{\rm PC}}.\tag{7.2}$$

Tomaremos varios valores de r del trabajo de Lasue y col. (2009) (Figura 1.17), que se han obtenido para diferentes cometas utilizando diferentes métodos (sección 1.2) y/o a través de diferentes misiones (sección 1.6.2). La tabla 7.1 resume la información resultante al aplicar las ecuaciones 7.1 y 7.2, para distintos cometas, tomando la densidad de agregados propuesta por Tenishev y col. (2011). Por supuesto que lo ideal sería tener una medición certera de  $n_{\rm PC}$  junto con los tamaños de los agregados para el cometa en estudio; pero ante la falta de datos concretos la utilización de los valores aquí citados pueden servir para darnos una orientación sobre la posibilidad de colisiones en este entorno cercano al núcleo cometario.

Si analizamos la dinámica de la parte interna de la coma, considerando al polvo presente hasta una distancia cometocéntrica de  $\sim 50$ km, podemos estimar el tiempo en el que el polvo atravesaría y saldría de esta región si tuviese una trayectoria lineal en dirección perpendicular a la superficie y si no sufriera ningún proceso que desvíe su curso (caso ideal para calcular el mínimo tiempo de permanencia del polvo en esta sección). Para ello necesitamos conocer la velocidad del polvo en esta zona, que según Tenishev y col. (2011) depende de la distancia heliocéntrica del cometa y de la inclinación del ángulo subsolar: en su figura 7 estiman con un modelo esta velocidad promedio de los agregados en función de la distancia cometocéntrica. Vemos que para 5km  $\leq r_{\rm PC} \leq$  50km esta velocidad varía entre 1m/s  $\leq v_{\rm PC} \leq$  300m/s. Por lo tanto, recorrer unos 50km llevaría un tiempo mínimo de 167s y máximo de 50000s. Comparando con los datos de la tabla 7.1 vemos que el  $t_{\rm PC}$  es abarcado por esta estimación para partículas con  $r > 1 \mu m$ . Para un tamaño promedio de ~ 50  $\mu m$ , se podría estimar una colisión cada 0,6 segundos en el caso más idealista posible, por lo tanto el número de colisiones podría llegar a ser tan alto como  $8 \times 10^4$ . Ahora, si tomamos  $n_{\rm PC}$  según el mínimo valor de Tenishev y col. (2011) en su figura 13 (donde suponen  $r = 10^{-4}$ m), el tiempo de colisión es  $t_{\rm PC} = 242645$ s, y en este caso no podría producirse ninguna colisión entre granos de polvo en la coma interna del cometa.

Como conclusión, el número de colisiones probable depende de la naturaleza del cometa: tipo, cantidad de periodos realizados, composición, relación polvo/gas, etc; de la distancia heliocéntrica del cometa al momento de realizar esta evaluación y de las características de los agregados en la coma: tamaño, velocidad, trayectoria, densidad total del polvo en esta región. Según los valores de referencia que se tomen, teóricamente podemos obtener resultados que nos digan que no existe posibilidad de que los agregados choquen alguna vez, o que sí suceden y de hecho colisionan muchísimas veces antes de abandonar la coma interna.

Cometa	Misión/ Mé-	$r_{\min}$	$\sigma_{ m min}$	$l_{\min}$	$t_{ m PC,min}$
	todo	$r_{\rm max}$	$\sigma_{ m max}$	$l_{ m max}$	$t_{\rm PC,max}$
			$[m^2]$	[m]	[S]
Halley	Vega	$0,06\mu\mathrm{m}$	$1,13 \times 10^{-14}$	58976173.62	393174.5
		$12 \mu \mathrm{m}$	$4,52 \times 10^{-10}$	1474.4	9.83
Halley	Fotometría	$1.2\mu m$	$4,52 \times 10^{-12}$	147440.43	982.94
		$2\mathrm{mm}$	$1,26 \times 10^{-5}$	0.053	0.00035
Halley	Giotto	$26\mu m$	$2,12 \times 10^{-9}$	314.07	2.09
		$26 \mathrm{mm}$	$2,12 \times 10^{-5}$	0.03	0.00021
Hale-Bopp	Fotometría	$2\mu \mathrm{m}$	$1,25 \times 10^{-11}$	53078.56	353.85
	+ IR	$200 \mu { m m}$	$1,25 \times 10^{-7}$	5.31	0.035
Hale-Bopp	espectros-	$0.3 \mu \mathrm{m}$	$2,83 \times 10^{-13}$	2359046.95	15726.98
	copía	$20 \mu { m m}$	$1,\!256\times10^{-9}$	530.78	3.54
Hale-Bopp	ISO	$0.2\mu \mathrm{m}$	$1,26 \times 10^{-13}$	5307855.63	35385.7
		$12 \mu { m m}$	$4,52 \times 10^{-10}$	1474.4	9.83
Wild2	Stardust	$15\mu m$	$7,06 \times 10^{10}$	943.62	6.3
		1mm	$3,14 \times 10^{-6}$	0.21	0.0014
Wild2	Stardust re-	$0.04 \mu m$	$5,02 \times 10^{-15}$	132696390.66	884642.6
	turn analysis	$2\mathrm{mm}$	$1{,}256\times10^{-5}$	0.053	0.00035
Tempel1	fotometría	$0.2 \mu \mathrm{m}$	$1,26 \times 10^{-13}$	5307855.63	35385.7
		$200 \mu { m m}$	$1,256 \times 10^{-7}$	5.3	0.0354

**Tabla 7.1:** Valores de camino libre medio y tiempo de colisión para diferentes cometas, cuyos tamaños, r, han sido obtenidos de Lasue y col. 2009, asumiendo un valore de  $n_{PC} = 1.5 \times 10^6 m^{-3}$  según Tenishev y col. 2011

### 7.2.3. Aportes de la misión Rosetta

Recientemente la misión Rosetta ha permitido obtener valiosas imágenes del cometa 67P/C-G mediante varios dispositivos (sección 1.6.2). Algunos fenómenos observados muestran cómo se produce la eyección del material del núcleo en realidad, y cómo son sus trayectorias dentro de la coma interna. Esto muestra lo difícil que es cuantificar las cantidades para que las estimaciones de la sección anterior sean precisas, pero además confirma que el núcleo es altamente inhomogéneo, las trayectorias del polvo se cruzan y muchas veces se observan fenómenos que aportan una turbulencia considerable en las regiones cercanas al núcleo cometario. A continuación mostraremos algunas de estas imágenes y trabajos recientes al respecto como soporte evidente de la existencia de colisiones entre agregados de polvo en las comas cometarias. Mencionaremos tres efectos de los cometas reales que están muy relacionados entre sí: los núcleos irregulares, la eyección de material en jets y outbursts, y la redeposición de material en la superficie.

#### 7.2.3.1. Núcleos irregulares

La Figura 7.1 muestra una serie de imágenes tomadas en las fechas indicadas en el epígrafe de la misma por la NavCam de la misión Rosetta (extraídas de la galería de navcam de https://sci.esa.int/web/rosetta/).



(a)





Figura 7.1: Imágenes del cometa 67P/C-G tomadas por "Rosetta's navigation camera" (NavCam) en las fechas (a) 06/03/2015, (b) 14/03/2015, (c) 22/03/2015, y (d) 26/04/2015

En todas estas imágenes se visualiza la eyección de material en torno a un núcleo que está lejos de la forma esférica tomada como aproximación en la mayoría de los trabajos publicados. Este cometa en particular presenta dos lóbulos (uno mayor que el otro) unidos por un cuello, y su superficie exhibe valles/terrazas, cráteres, y relieves diversos en toda su extensión. El material eyectado del cometa sigue trayectorias: (a) que lo expulsan del núcleo (donde algunas claramente se cruzan); (b) tales que su dirección de eyección lo lleva a chocar con otras secciones del cometa, donde la interacción entre material granular es evidente. El-Maarry y col. (2019) realizan un mapa topográfico de alta calidad, nombrando a todos los valles y mesetas identificados en el 67P/C-G, y afirman que muestra diversas morfologías que van desde terrenos accidentados y acantilados altos hasta terrenos lisos y planos, con evidencia de muchos procesos geológicos activos. Proponen que los cometas pueden estar evolucionando de la misma manera que lo haría cualquier cuerpo planetario activo: eventos de desgasificación y de erosión, entre otros, actúan haciendo rugosa la superficie, mientras que la erosión activa (incluida la meteorización y el transporte) la suaviza progresivamente, y es la intensidad de estos procesos lo que controla la diversidad de la superficie. El aplanamiento del hemisferio sur del 67P/C-G, donde se están produciendo tasas más altas de erosión (Keller y col. 2017), y los análisis estadísticos de la altura de los acantilados del cometa (Vincent y col. 2017) son consistentes con esta visión evolutiva para el 67P/C-G, y probablemente todos los cometas activos en general estén en la misma situación.



**Figura 7.2:** Figura 2 de Penasa y col. (2017): Visualización de las terrazas identificadas en cometa 67P/C-G. Para cada terraza se estimó un punto en el espacio y el plano normal de mejor ajuste correspondiente. Azul: referidas al lóbulo grande, Rojo: al lóbulo pequeño.

En la Figura 7.2, extraída del trabajo de Penasa y col. (2017) se puede ver una representación de algunas direcciones normales (direcciones de eyección del polvo) sobre la superficie del 67P/C-G, que se modela sobre una base elipsoidal, donde las discontinuidades modeladas deben ser de extensión local (al menos varios cientos de metros) o posiblemente global (miles de metros) para justificar los acantilados y

terrazas extendidos. Si bien este modelo es una gran aproximación comparado con las imágenes reales de la Figura 7.1, es un gran avance en contraste con considerar una esfera perfecta, y nuevamente podemos ver que algunas de las trayectorias sugeridas por este modelo también se cruzaran con otras, o simplemente con otra sección del objeto. Estos autores también concluyen en que la estructura derivada del núcleo del cometa representa un objeto geométrico que ha evolucionado desde la configuración inicial en la que se crearon las discontinuidades observadas hasta el objeto complejo que fue observado por OSIRIS, con una posible historia complicada de remoción altamente localizada de grandes volúmenes de material.

### 7.2.3.2. Jets y Outburst

Asumir que la eyección es continua y predecible en el tiempo también dista mucho de lo que en realidad sucede. Vincent, Farnham y col. (2019) clasifican las manifestaciones locales de actividad cometaria (definida por ellos como "el escape de moléculas de gas mediante la sublimación del hielo y de los granos de polvo de tamaño sub- $\mu$ m - dm desde el núcleo") en dos clases principales: corrientes colimadas tipo jet (chorros intensos de materia), a los cuales los considera como eventos duraderos y predecibles y plumas transitorias, que son eventos de duración más corta y esporádicos. Mientras que el polvo en los chorros perennes parece salir de la superficie con una velocidad casi nula, el material expulsado en eventos transitorios escapa mucho más rápido y la trayectoria puede ser controlada por el impulso inicial. Según Vincent, Farnham y col. (2019), cuando la relación de volumen de polvo a hielo es 1, los granos de polvo no se tocan entre sí y no pueden formar una estructura cohesiva, se escapan de forma natural con el gas sublimante. Sin embargo, afirman que según las observaciones, este es un escenario poco probable ya que el polvo parece ser el componente principal de los cometas.

Muchos trabajos recientes se han centrado en estudiar las explosiones de material observadas por Rosetta, centrados en entender su origen pero también su estructura e influencia en la actividad cometaria global. Hasselmann y col. (2019) mencionan que las eyecciones de masa y los cambios morfológicos observados mayormente en la zona Sur, reflejan la variedad de mecanismos a grandes rasgos que desencadenan explosiones en la superficie del cometa. En particular, estimaron que el sector Khonsu del 67P/C-G es responsable de  $1, 7 \times 10^8$ kg de masa liberada estimada a partir de cambios morfológicos, representando el 1, 5 - 4, 2% de la pérdida de masa total experimentada por el cometa. Esto indica que la pérdida de masa total podría justificarse con sólo 25 zonas activas similares, presentando un gran contraste con la idea de eyección uniforme y homogénea desde el núcleo. Gicquel y col. (2017) recrearon las explosiones de material observadas por Rosetta empleando un código de Monte Carlo, siendo el primer trabajo en utilizar este tipo de modelado para outburst. Concluyeron en que no fue hasta que el campo de polvo se integró en el modelo de gas que pudieron simular imágenes que se aproximan a la forma y el ángulo del estallido. Para reproducir los datos, necesitaron un número de partículas de polvo de 7,83 × 10<sup>11</sup> a 6,90 × 10<sup>15</sup> (radio 1,97 – 185 $\mu$ m), que corresponden a una masa de polvo 220 × 10<sup>3</sup>kg, mostrando el papel potencial tanto del gas como del polvo en la formación de un estallido observado.

Agarwal y col. (2017) estudiaron un outburst en particular del 67P/C-G y encuentran que alteró un área de 10m de radio de la superficie, expulsando material que comprendía granos de hielo de agua de tamaño submicrométrico y polvo refractario de varios cientos de micrones de tamaño. La masa de polvo expulsado fue de 6500 - 118000 kg, siendo la tasa de producción de polvo  $(18, 4 \pm 10, 6)$ kg/s. Para una distancia de 3.32 UA, esto habría correspondido a una relación polvo/gas de  $1600 \pm 800$ , lo cual es inconsistente con las velocidades del polvo observadas. Por lo tanto, concluyen que la sublimación de hielo de agua por sí sola no puede explicar la producción de polvo observada y que la liberación de energía almacenada



**Figura 7.3:** Figura 3 de Shi y col. (2018): Influencia de la topografía y el flujo de desgasificación en la estructura de coma cercana al núcleo. (a) vista ampliada que muestra jets de polvo prominentes. Las flechas rojas indican la dirección normal de la superficie local. Las líneas discontinuas verdes delimitan un jet prominente cerca del borde de la región de Hapi. La línea azul sólida con puntas de flecha indica la ubicación de un pequeño acantilado. (b) y (c) Patrones de campo de gas y trayectorias de partículas de polvo modelados con desgasificación constante. (d) y (e) Patrones de campo de gas y trayectorias de partículas de polvo modelado con desgasificación no uniforme impulsada por insolación instantánea. Las escalas de color en los paneles indican la densidad de la columna de gas.

en el subsuelo debe haber apoyado la aceleración del polvo. Si bien esta área tiene muchos debates por delante, queda claro que estos eventos explosivos liberan una cantidad de masa que se escapa de las predicciones actuales, y que dejan la relación polvo/gas=1 muy pequeña. De hecho, para el 67P/C-G, Fulle y col. (2016) encuentran una relación polvo/gas en la superficie del núcleo cercana a 6 durante toda la órbita entrante desde 3.6 UA hasta el perihelio, siendo este valor también característico del interior del núcleo.

Shi y col. (2018) presentan un análisis basado en imágenes obtenidas por OSIRIS: La Figura 7.3 muestra como la topología mencionada en la sección 7.2.3.1 influye en las trayectorias del material eyectado. También grafican las direcciones normales a la superficie (Figura 7.3 a), donde se observa con claridad que muchas se intersectarán entre sí. En esa misma figura pueden evidenciarse diferentes jets. En las Figuras 7.3 b-e modelan las trayectorias asumiendo desgasificación constante primero y no uniforme luego. En ambos casos obtienen trayectorias cruzadas, que provoca en esas zonas un aumento de la densidad del polvo. Shi y col. (2018) concluyen en que la coma de polvo muestra características de estructura tipo jets, que pueden atribuirse tanto a una desgasificación local y/o emisión de polvo, como también a la convergencia final de una actividad uniforme sobre la concavidad topográfica.



(a) Emisiones de gas y polvo observadas y sintéticas. (a) y (b) observaciones de OSIRIS el 22 de agosto de 2014 y el 14 de marzo de 2015, características similares a jets en la coma de polvo en la región de Hapi cuando el cometa estaba a distancias heliocéntricas de 3.5 y 2.1 UA, respectivamente. (c) y (d) Imágenes sintéticas que muestran un campo de gas de agua local modelado desarrollado a partir de una franja de escarcha matutina. La escala de grises indica la densidad de columna modelada de moléculas de agua. (e) y (f) Trayectorias de partículas de polvo emitidas, moviéndose en el campo de gas modelado que se muestra en (c) y (d).



(b) Coma de polvo en la región del cuello a la misma hora local pero observada desde diferentes perspectivas. (a) y (b) Imagen de coma de polvo de cara al cuello valle y a lo largo del valle del cuello, respectivamente. (c) y (d) trayectorias simuladas de las partícula de polvo para (a) y (b), respectivamente, teniendo en cuenta el campo de gas de toda la región de Hapi.

**Figura 7.4:** (a) Figura 1 y (b) Figura 4 de Shi y col. (2018), analizando la coma interna del cometa 67P/C-G.

Consideran un trabajo muy complejo vincular la morfología observada de la coma a la distribución de la actividad en el núcleo. En su Figura 7.4 muestran imágenes del 67P/C-G tomadas por OSIRIS y el resultado de sus trayectorias simuladas para diferentes perspectivas de visión, donde las trayectorias de las partículas de polvo se calculan respecto a un marco de coordenadas fijo en el núcleo. Suponen que el polvo y el gas están desacoplados al comienzo de la trayectoria, lo que significa que las partículas de polvo no afectan el movimiento de las moléculas de gas, y utilizan fórmulas de Runge-Kutta para la integración de dichas trayectorias. Nuevamente se observa, tanto en las imágenes reales como en las trayectorias calculadas por Shi y col. (2018), que hay material expulsado que choca con el lóbulo del núcleo que tiene enfrente y que también hay muchas trayectorias que se entrecruzan. La Figura 7.4 muestra que la interacción entre el material granular cometario es evidente.

### 7.2.3.3. Re-deposición

Por último, y en conexión con la sección anterior, hay muchos trabajos que recientemente han comenzado a estudiar el transporte de material dentro de la coma interna y del núcleo del cometa. Hasselmann y col. (2019) menciona que la erosión de los acantilados, causada por el retroceso de las fracturas causadas por el calentamiento diurno y estacional que conduce al debilitamiento de la pared y a su colapso final, se ha propuesto para explicar algunas partes del vínculo entre los estallidos y la morfología de la superficie del cometa. Lai y col. (2019) asegura que el origen de los jets es aún desconocido, pero debate la propuesta de que las características del chorro observadas podrían tener diferentes mecanismos de formación debido a la topografía irregular (es decir, acantilados y pozos), cambio temporal complejo en el efecto de aislamiento y heterogeneidad química del material de la superficie (o del subsuelo). Vincent y col. (2015) propone un mecanismo específico de eyección basado en cambios estructurales del material granular cercano a la superficie: los pozos activos, ilustrados en la Figura 7.5. Aquí, el hielo debajo de la superficie se abre lugar a medida que sublima, formando una cavidad. Esto debilita el grosor superficial hasta que la superficie por encima de la cavidad cede, originando un pozo profundo, donde el material de las paredes ahora queda expuesto y sublima. Entender el comportamiento de la materia granular es primordial para postular este tipo de procesos.

Keller y col. (2017) proponen que cada hemisferio del 67P/C-G puede modelarse de manera diferente, a partir de encontrar erosión más débil en el Norte que en el Sur, durante el paso del perihelio. La superficie norte no solo fue erosionada sino que también se encontraron depósitos de material. La interpretación de la pérdida de masa debido a la actividad y la deposición por retroceso es difícil de desentrañar porque los procesos son dinámicos y varían con la topografía. Ellos estiman que alrededor del 20% del material erosionado en el sur se transfiere a las regiones del



Figura 7.5: Pozos activos del Cometa 67P/C-G. Imagen tomada de la ESA, con base en el trabajo de Vincent y col. (2015).

norte. Keller y col. (2017) afirman que es difícil evaluar la fracción de material que aterriza en el núcleo en lugar de perderse en la cola y el rastro de polvo pero que es lo suficientemente grande como para llenar valles con metros de material y cubrir la mayor parte de las áreas horizontales orientadas al norte. También remarcan que se observaron claros indicios de transferencia de masa en la superficie de un núcleo cometario durante el sobrevuelo EPOXI del cometa 103P/Hartley2, por lo tanto parece ser más un patrón general que un evento único observado en el 67P/C-G.

En este entorno, Vincent, Birch y col. (2019) afirman que las rocas depositadas sobre la superficie son omnipresentes en el cometa 67P. La mayoría se encuentran en taludes y probablemente se crean por eventos de caída de rocas desde acantilados cercanos; a veces se detectan rocas aisladas en terrenos lisos, parcialmente incrustados. Rosetta observó muchos cambios en la superficie en relación con estos guijarros: entierro (parcial o total); descubrimiento (parcial o total); desplazamiento en una distancia corta (deslizar, rodar); transporte a gran distancia (salto, caída); fragmentación. Vincent, Birch y col. (2019) propone (ver Figura 7.6) que un objeto de unos 10m de diámetro cayó de un acantilado cercano y rebotó varias veces en el regolito sin romperse. Ellos utilizan esta observación, y otros eventos similares, para derivar la cohesión y la resistencia a la compresión tanto del material consolidado (roca) como del material suelto (regolito) en varias regiones del núcleo. Puede concluirse que el material sufre desplazamientos por la superficie del cometa, siendo evidente en la escala de m, y más difícil de detectar en la escala de  $\mu$ m. Entonces la materia granular de la superficie y cercanías se modifica, interacciona, abandona el núcleo y lo vuelve a re-impactar.



**Figura 7.6:** Rebote de material rocoso observado en la superficie del Cometa 67P/C-G. Imagen tomada de la ESA, con base en el trabajo de Vincent, Birch y col. (2019)

### 7.2.4. Conclusiones y motivación

Hemos observado que un núcleo cometario real no es uniforme, estacionario, esférico ni homogéneo. Por lo tanto su actividad tampoco es homogénea, continua ni predecible durante toda su trayectoria. Esto implica que en la superficie y en la coma interna las interacciones entre material granular existen. Por todo lo mencionado hasta aquí, parece extraño que como regla general se considere que los agregados de polvo no interaccionan en un cometa. Pese a que las estimaciones teóricas son ambiguas, los resultados observacionales de Rosetta (y trabajos posteriores basados en las mismas) parecen ser una evidencia concreta sobre las colisiones del polvo presentes en este entorno. La pregunta que debemos hacernos ahora es si un número reducido de estos eventos azarosos pueden modificar significativamente las distribuciones observadas para el polvo en la coma de los cometas.

# 7.3. Aplicación del código MC a las colisiones de polvo en comas cometarias

Nuestro código explicado en el Capítulo 6 puede ser aplicado con la finalidad de poder concluir si una población de agregados, inicialmente con una distribución uniforme de porosidad y tamaño, presenta modificaciones en estas distribuciones como respuesta a un proceso donde  $N_{\rm col}$  colisiones han ocurrido, y de ser esta afirmación positiva, si los resultados obtenidos están de acuerdo con las observaciones realizadas, o si los cambios debido a colisiones pueden ser despreciables. Esta es

una mejora notable respecto al trabajo pionero de Crifo y col. (2005), quien partía con granos todos del mismo tamaño en sus simulaciones ( $\mu = 1$ ) y no incorporaba el análisis de la porosidad. El objetivo es entonces evaluar si un número (pequeño) de colisiones es suficiente para generar un cambio observable en los agregados de polvo de la coma interna cometaria. Como hemos debatido, este número es difícil de precisar y además varía según el cometa que se analice. Para probar el código, consideramos escenarios diferentes: una cadena de sólo 5 o 10 colisiones, representativas de una nube de polvo muy diluida, o para el caso de evolución temprana, y otro caso, con una cadena de 100 colisiones, lo que representaría una nube mucho más densa, o tiempos de evolución más largos, o eventos de turbulencia/jets/outbusrts que eleven la densidad del polvo. Estos son ejemplos representativos, pero el código MC puede adaptarse a diferentes escenarios, según sea necesario.

### 7.3.1. Fundamentos

Nuestro modelo es aplicable a diversos escenarios astrofísicos donde las colisiones entre agregados porosos son relevantes, como discos protoplanetarios (sección 1.4), discos de escombros (sección 1.5), y polvo emitido por núcleos cometarios (sección 1.6.4), entre otros. En esta sección nos ocuparemos del último entorno mencionado: analizaremos si una cascada de colisiones entre los agregados de polvo deprendidos del núcleo cometario, tienen relación con las propiedades del polvo observadas en la coma interna de los mismos. Nuestros agregados granulares porosos se han construido cuidadosamente para corresponder con la estructura (tamaño, masa y estructura, ver tablas 3.1, 4.1 y 4.2) del polvo observada en los cometas, que fue detallada en la sección 1.6.4.1, y son similares a los catalogados como "Grupo poroso 1" por Güttler y col. (2019), quienes se basaron en observaciones in-situ del cometa 67P/C-G. El material de nuestros agregados, la sílica, es un componente prevalente en todos los cometas para los cuales su composición fue analizada (sección1.6.4.2). La porosidad también abarca un rango establecido por estudios de núcleos cometarios, donde GIADA confirma que la mayoría de los agregados pertenecen al "Grupo poroso 1" con porosidades en el rango 40% - 95% (sección 1.6.4.1) y de material protoplanetario, formador de los objetos que estamos estudiando (para más detalles ver sección 1.4).

El código de Monte Carlo (recordamos que es un código libre, https://sites.google. com/site/simafweb/software) comienza con una distribución uniforme de tamaños y porosidades, dentro de los rangos analizados en las secciones mencionadas previamente (ver tabla 6.1) y nos presenta los resultados luego de que  $N_{\rm col}$  colisiones ocurrieran entre los agregados de polvo. Para cada colisión se debe asignar una velocidad. Según Cordiner y col. (2017) la falta de un mapeo de observaciones en longitudes de onda mm y sub-mm hace que la distribución de velocidades de los

$N_{\rm col}$	$N_{\rm chain}$	tiempo (hh:mm:ss)
5	287929	00:22:41
10	143516	00:11:57
100	11382	00:01:47

**Tabla 7.2:** Cadenas recorridas y tiempo de cómputo para un número  $N_{\rm col}$  de colisiones dado, para una convergencia  $C_{\rm conv} = 10^{-6}$ .

granos en comas cometarias (relativa al centro de masa del núcleo) no esté bien establecida, pudiendo ser de 30m/s hasta 200m/s, e incluso hay autores que dan un rango más amplio como se detalló previamente en este capítulo, por ejemplo, para Tenishev v col. 2011 estas velocidades están entre 0 v 300m/s. Cordiner v col. (2017) concluyen en que las observaciones probablemente no puedan explicarse solo con un flujo de salida uniforme y que los cálculos simples, al suponer flujo continuo, no tienen en cuenta la asimetría observada. También en nuestra sección 7.2.2 sintetizamos otros trabajos que estudian la velocidad del polvo relativa al núcleo cometario. Pero si a la incerteza en estas mediciones le agregamos el debate de la sección 7.2.3, se torna muy complejo establecer una regla general para las velocidades de colisión de estos eventos azarosos. Teniendo en cuenta los parámetros mencionados anteriormente, sobre todo los valores máximos y mínimos que podrían tener las velocidades de impacto (relativas entre los compañeros de colisión), nuestro código selecciona para cada colisión una velocidad aleatoria dentro de una distribución gamma, con 0 m/s < v < 150 m/s y media en v = 10 m/s. Recordemos que estos parámetros de entrada pueden fácilmente modificarse si el usuario cuenta con información más precisa al respecto. A continuación mostraremos los resultados de la población de polvo luego del proceso colisional.

### 7.3.2. Parámetros y convergencia

En la tabla 7.2 se muestra para cada  $N_{\rm col}$  elegida, el número de cadenas que fue necesario correr el código para obtener la convergencia deseada (se mostrarán los resultados con una convergencia de  $N_{\rm col} = 10^{-6}$ , y en la sección 7.3.7 se debatirá en detalle el tema de la convergencia). El resto de los parámetros de entrada utilizados se han detallado en el Capítulo 6, el corte de control (para que el código no corra de forma indefinida) se puso en todos los casos en  $N_{\rm maxchain} = 5$  millones, que como vemos en la tabla no fue alcanzado, por lo tanto todas las simulaciones aquí mostradas llegaron a la convergencia deseada.

### 7.3.3. Distribución final de masa

La Figura 7.7 muestra la distribución de masa a área 1, F(n), (ver sección 6.5) para los diferentes casos analizados  $N_{col} = 5, 10, 100$  y también se incluye la distribu-



Figura 7.7: Distribución normalizada de masas con diferentes colores para  $N_{col} = 5, 10, 100$  y para la población inicial. Se indican los exponentes de los ajustes.

ción inicial a modo de comparación. Recordar que este histograma tiene intervalos logarítmicos a fin de agrupar la gran cantidad de diversos valores de n que los agregados pueden tener luego de sufrir  $N_{\rm col}$  colisiones durante un número de cadenas recorridas,  $N_{\rm chain}$  (sección 6.5).

Vemos que la población tiene una distribución de masas que sigue una dependencia aproximada en ley de potencias  $F(n) \propto n^{\alpha}$ , donde para la población inicial  $\alpha = -0.66$  ( $\alpha = -q$  de la ecuación 1.10). Luego de que  $N_{\rm col}$  han transcurrido, esta dependencia permanece sólo a partir de cierto  $n_{\rm crit}$ , que es mayor a medida que  $N_{\rm col}$ crece: por ejemplo, para  $N_{\rm col} = 5$  se observa un  $n_{\rm crit} \sim 20$  mientras que el cambio de pendiente cuando  $N_{\rm col} = 100$  ocurre en  $n_{\rm crit} \sim 100$ . Para los  $n < n_{\rm crit}$  se observa una valor para  $\alpha$  de -2.8, lo cual coincide con el exponente  $\tau$  de la ley de potencias de los fragmentos resultantes luego de una colisión (ver sección 6.4.2). A medida que más colisiones tienen lugar, habrán más fragmentos resultantes obedeciendo la ley de potencias con exponente  $\tau$ , y por esta razón  $n_{\rm crit}$  aumenta con  $N_{\rm col}$ .

### 7.3.4. Distribución final de tamaño

La Figura 7.8 muestra la distribución del radio de los agregados (tamaño) normalizada a área 1, F(R), (ver sección 6.5) para los diferentes casos analizados  $N_{\rm col} = 5, 10, 100$  y también se incluye la distribución inicial a modo de comparación. Los intervalos de este histograma tienen una longitud de 1µm. Vemos que la distribución inicial es aproximadamente uniforme, y que, nuevamente en acuerdo con la sección anterior, esto se mantiene para todos los casos a partir de cierto  $R_{crit}$ , que también aumenta con  $N_{\rm col}$ , estando en  $R_{\rm crit} \sim 4\mu$ m para  $N_{\rm col} = 5$  y en



**Figura 7.8:** Distribución normalizada de tamaños (radio en  $\mu$ m) con diferentes colores para  $N_{col} = 5, 10, 100$  y para la población inicial. Se indican los exponentes de los ajustes.

 $R_{\rm crit} \sim 9\mu$ m para  $N_{\rm col} = 100$ . Para todos los  $N_{\rm col}$  analizados, se observa una dependencia diferente para  $R < R_{\rm crit}$ :  $F(R) \propto R^{\beta}$  con  $\beta = -6$  (donde  $\beta = s$  en la ecuación 1.8). En la sección 1.6.4.3, para un valor de  $\phi$  constante se tiene la relación q = (s-2)/3. Para q = -2,8 esta relación predice s = -6,4, donde este s equivale al  $\beta$ . Ahora si  $s = \beta = 0$  (correspondiente a la distribución inicial de Radio), entonces  $-q = \alpha = -2/3$ . Nuestros resultados están en concordancia entonces con los valores predichos por esta relación teórica.

La distribución inicial llega hasta agregados con  $R = 100 \mu \text{m}$ . La Figura 7.8 muestra que, por el proceso colisional pueden aparecer agregados de tamaño mayor, además de una gran generación de agregados pequeños ( $R < 10 \mu \text{m}$ ). Sin embargo, la frecuencia de aparición de agregados demasiados grandes ( $R > 150 \mu \text{m}$ ) es tan baja (varios órdenes de magnitud menores) que son eventos que pueden ser despreciados.

### 7.3.5. Distribución final de porosidad

La Figura 7.9 muestra la distribución de factores de llenado los agregados normalizada a área 1,  $F(\phi)$ , (ver sección 6.5) para los diferentes casos analizados  $N_{\rm col} = 5, 10, 100$  y también se incluye la distribución inicial a modo de comparación. En la Figura 7.9 (a) se observa la distribución completa de  $\phi$ , que coincide con las anteriores al mostrarnos un gran número de monómeros y dímeros generados, cuyos  $\phi$  fueron fijados en 1 y en 0.925, respectivamente (ver últimos párrafos de la sección 6.4.2). Si bien ayuda a mostrar la coherencia de nuestros resultados, este gráfico, por una cuestión de escala, no permite visualizar que sucede con los  $\phi$ de interés. Por tal motivo suprimimos los valores  $\phi > 0,75$  y la distribución inicial y



**Figura 7.9:** Distribución normalizada de factores de llenado con diferentes colores para  $N_{col} = 5, 10, 100$  y para la población inicial: (a) general, y (b) teniendo en cuenta sólo agregados con n > 2.

mostramos los resultados seleccionados en la Figura 7.9 (b). Como la producción de monómeros (y dímeros) aumenta con  $N_{\rm col}$ , las frecuencias de los valores de  $\phi \leq 0.75$ aumentan globalmente a medida que  $N_{\rm col}$  disminuye. Sin embargo podemos notar dos hechos interesantes: El valor  $\phi = 0.75$  fue elegido como valor de saturación en compactación. A medida que  $N_{\rm col}$  aumenta, mayor es el número de agregados que saturan, es decir, que sufren una gran compactación por causa de una o más colisiones sucesivas (aunque es poco probable que un mismo agregado sea colisionado varias veces cuando  $N_{\rm col}$  es muy pequeño); por otro lado, para el caso con  $N_{\rm col} = 100$  observamos una estructura aproximadamente creciente en los valores del histograma hasta el salto en el valor de saturación (no observada cuando el número de colisiones es muy pequeño). Estos resultados verifican que la población de polvo sometida a un número (relativamente bajo) de colisiones al azar, sufre una variación importante en su porosidad, que a su vez, determina los resultados de futuras re-colisiones de los agregados resultantes (Planes y col. 2020, Gunkelmann y col. 2016a).

## 7.3.6. Distribuciones de masas y tamaños según la porosidad de los agregados

En esta sección el interés radica en poder evaluar la distribución de masa y tamaño según intervalos de factores de llenados, y poder comparar con observaciones que se han focalizado en ciertos rangos de masa, tamaño y porosidades. Para ello se subdividieron los datos obtenidos en la matriz  $F(n, \phi)$  (el detalle puede encontrarse en la sección 6.5) según los siguientes intervalos de  $\phi$ :

- CC: φ > 0,40. Agregados compactos. Siguiendo el criterio de la sección 4 de Güttler y col. (2010).
- **PC**:  $0.25 \le \phi \le 0.40$ . Agregados porosos. Ventana de interés observada en Planes y col. (2021).
- **PP**:  $\phi < 0.25$ . Agregados muy porosos. La división entre *PP* y *PC* se basa en nuestro modelo (ver Figura 6.2). Aunque podrían ser englobados dentro de un sólo intervalo poroso, se busca evaluar si las poblaciones finales dentro de estos regímenes presentan cambios.

El usuario de este código abierto podrá optar por realizar el análisis que desee a partir de esta matriz que se imprime como resultado de la simulación, este tipo de resultados mostrados en esta sección corresponden a un post-procesamiento de los datos, donde fue utilizada una rutina corta en Python a fin de filtrar los datos como se detalló. Recordamos que generar la matriz  $F(n, \phi)$  aumenta considerablemente el tiempo de cómputo, por ejemplo una simulación en una máquina de escritorio con la convergencia utilizada en esta sección ( $C_{\rm conv} = 1 \times 10^{-6}$ ) para  $N_{\rm col} = 100$  demora 1 minuto y al agregar esta matriz, demora casi 2 minutos. Misma situación para  $N_{\rm col} = 5$  demora 3 minutos y al agregar la matriz 23 minutos.

Distribución de masas según la porosidad de los agregados

La Figura 7.10 muestra la distribución F(n) con diferentes colores de acuerdo a los intervalos de  $\phi$  mencionados: 7.10 (a) muestra el caso  $N_{\rm col} = 100, 7.10$  (b) el caso  $N_{\rm col} = 10, y 7.10$  (c) el  $N_{\rm col} = 5$ . Vemos que en todos los casos se respeta aproximadamente bien el ajuste propuesto para la distribución global de F(n) (Figura 7.7), presentando mayor divergencia entre los regímenes las simulaciones con menor  $N_{\rm col}$ . También se observa que a medida que  $N_{\rm col}$  aumenta, la generación de agregados pequeños aumenta, para todos los regímenes de  $\phi$ , aunque, por los criterios tomados, los monómeros y dímeros sólo pertenecen al grupo CC y por ello no se evidencian en los demás rangos.

Por otra parte, para todos los  $N_{\rm col}$  analizados, la generación de agregados de mayor tamaño (al final, cuando la relación en ley de potencias  $F(n) \propto n^{-2/3}$  termina), tiene más peso para el régimen CC, ya que estos agregados surgen de uno o más procesos colisionales, lo que implica un aumento de su densidad. Esto se observa viendo que el régimen CC abandona esta relación de potencias a un n mayor que para PC y éste a su vez, a un n mayor que para PP.

Sin bien los 3 regímenes presentan estructuras similares no son iguales, sobre todo en sus partes extremas, indicando que la mayoría de los agregados más pequeños y los agregados de mayor tamaño, presentan una mayor compactación. Por lo general, los primeros son el resultado de colisiones que resultan en fractura y los segundos



**Figura 7.10:** Distribución normalizada de masas según intervalos de porosidad para (a)  $N_{col} = 100$ , (b)  $N_{col} = 10$  y (c)  $N_{col} = 5$ .

en aglomeración. En ambos casos la compactación está presente y es la causante de los resultados obtenidos.

### Distribución de tamaño según la porosidad de los agregados

Partiendo de la distribución  $F(n, \phi)$  (Figura 7.10), se puede utilizar la ecuación 6.1 para encontrar  $F(R, \phi)$  de cada intervalo, si fuese necesario. Se debe tener en cuenta que como  $F(n, \phi)$  tiene una agrupación en intervalos logarítmicos, la distribución derivada  $F(R, \phi)$  tendrá barras de errores proporcionales a los mismos. Otra opción es implementar una modificación simple en el código para que se calcule directamente la matriz  $F(R, \phi)$  además o en lugar de  $F(n, \phi)$ . Esto puede ser relevante para aplicaciones astronómicas donde sea interesante evaluar el tamaño por rangos de porosidad. Sin embargo, F(n) tiene un aproximado de 60 intervalos en total, mientras que F(R) tiene 200-250 intervalos, por lo cual promediar sobre cada uno aumentará considerablemente el costo computacional de esta última opción, pero nuevamente es elección del usuario. Para esta tesis, hemos excluido este análisis específico pero se deja asentada esta posibilidad.

# 7.3.7. Sobre la convergencia de las simulaciones para pocas colisiones

En esta sección debatimos sobre la relación entre el tiempo de cómputo y los resultados obtenidos. Los datos aquí analizados pertenecen a simulaciones realizadas en una máquina de escritorio con las siguientes especificaciones: AMD Ryzen 7 3700X 8-Core, 64GB RAM 2600MHz. Hasta ahora se utilizo una convergencia global de  $C_{\rm conv} = 10^{-6}$ , lo cual implicó el tiempo de simulación detallado en la tabla 7.2 para los números de colisión  $N_{\rm col} = 100$ ; 10; 5 analizados. Una simulación más precisa requiere una mayor convergencia, sobre todo si el número de colisiones es muy bajo, ya que el proceso posee una alta aleatoriedad. Esto aumenta considerablemente el costo computacional, a modo de ejemplo se muestran en la tabla 7.3 los tiempos de cómputo en la misma máquina para simular los mismos casos pero con una convergencia  $C_{\rm conv} = 10^{-8}$ . Hay que estar seguros de que la simulación llegó a la convergencia deseada (es decir, que  $N_{\rm chain} \leq N_{\rm maxchain}$ ), lo cual puede llevar varias simulaciones de prueba hasta encontrar el equilibrio adecuado.

$N_{\rm col}$	$N_{\rm chain}$	time (hh:mm:ss)
5	26703142	36:47:32
10	13449547	18:31:48
100	908166	02:21:04

**Tabla 7.3:** Cadenas recorridas y tiempo de cómputo para un número  $N_{\rm col}$  de colisiones dado, para una convergencia  $C_{\rm conv} = 10^{-8}$ .

A continuación veremos cuánto mejoran los resultados al disminuir la convergencia. La Figura 7.11 a muestra la distribución F(R) para la población inicial, y cuando ocurren  $N_{\rm col} = 100$  colisiones para distintas convergencias  $C_{\rm conv}$ , correspondientes a distintos colores en la figura. Se observa que no hay diferencias notables en los histogramas para  $R < 100\mu$ m, es decir, dentro de los valores de tamaño de la población inicial. Para radios mayores, una mayor convergencia muestra una curva casi continua en contraposición con el ruido que vemos a medida que  $C_{\rm conv}$  disminuye. Sin embargo, la frecuencia de aparición de estos grandes agregados decae rápidamente, haciéndolos menos relevantes a medida que R crece desde los  $100\mu$ m. La Figura 7.11 b muestra una imagen detallada para  $100\mu$ m  $< R < 150\mu$ m, donde se ve la disminución en la dispersión de las frecuencias a medida que  $C_{\rm conv}$  disminuye. Sin embargo, se puede evidenciar que a partir de  $C_{\rm conv} = 10^{-6}$  no hay variaciones significativas, justificando la utilización de este valor. Se verificaron de forma análoga el resto de las distribuciones de salida del código y también los valores restantes

de  $N_{\rm col}$ , obteniendo resultados también análogos. Podemos concluir que la convergencia elegida  $C_{\rm conv} = 10^{-6}$  es suficiente y no se requiere un tiempo de simulación mayor.



**Figura 7.11:** Comparación de convergencias para la distribución de tamaños normalizada para el caso  $N_{col} = 100$ : (a) Diatribución completa y (b) considerando solamente tamaños entre  $100\mu m < R < 150 \mu m$ .

Nuevamente, la elección del valor elegido para  $C_{\rm conv}$  considerando el costo computacional que éste requiere queda a elección del usuario y puede ser afectado por la variación de parámetros como la distribución de velocidad elegida, el número de colisiones o agregados iniciales, etc. Por lo tanto, se sugiere realizar este análisis previo para elegir de forma correcta el parámetro de convergencia adecuado.

### 7.4. Comparación con observaciones astronómicas

### 7.4.1. Comparación con observaciones de masa y tamaño

En primer lugar remarcamos que muchos de los estudios presentados en la sección 1.6.4.3 hablan de distribución de tamaño para referirse de manera indistinta a masa o radio. Esto se debe a que asumen al polvo o bien como un material compacto en sus modelos, o bien como material con porosidad constante y uniforme (Fulle y col. 2000). En nuestro caso, tenemos agregados de porosidad variable y estas distribuciones no son análogas entre ellas.

Para ambas distribuciones (masa (n) y tamaño (R)), observamos 3 regímenes distintos (correspondientes a los ajustes de las Figuras 7.7 y 7.8):

- Régimen R1: Un aumento considerable en la población de agregados pequeños, hasta cierto  $n_{\rm crit}(R_{\rm crit})$  que aumenta con  $N_{\rm col}$ . Esto está en acuerdo con los análisis detallados en la sección 1.6.4.3, donde mediante diferentes técnicas observacionales, diferentes autores coinciden en que los agregados más pequeños presentan una pendiente más empinada respecto a los más grandes (Botet y col. 2020, Hilchenbach y col. 2016, Rotundi y col. 2015).
- Régimen R2: La población de agregados a partir de  $n_{\rm crit}(R_{\rm crit})$  hasta los valores máximos iniciales de n(R) mantienen su dependencia original, no se observan cambios notorios, salvo que a medida que  $N_{\rm col}$  aumenta, el rango de n(R) donde esto es válido, disminuye.
- Régimen R3: Generación de agregados mayores: Se observan valores mayores de n(R) al finalizar la simulación, respecto a los valores máximos iniciales. Sin embargo, éstos presentan una frecuencia de al menos dos ordenes de magnitud menor respecto de la frecuencia de los agregados originales. Por lo tanto su aparición es probable pero poco frecuente. Los agregados más grandes,  $n > 10^6 (R > 180 \mu m)$  tienen una frecuencia tan baja que pueden considerarse improbables.

Nuestros ajustes para las distribuciones de masa y tamaño han sido los siguientes:

$$F(n) \propto n^{\alpha},$$
 (7.3)

$$F(R) \propto R^{\beta},$$
 (7.4)

donde:  $\alpha = -0.66$  para  $n > n_{\rm crit}$ ,  $\alpha = -2.8$  para  $n < n_{\rm crit}$ ,  $\beta = -6$  para  $R < R_{\rm crit}$ y  $\beta = 0$  para  $R > R_{\rm crit}$ . Estos rangos de ajuste coinciden con los observados para cometas si se tiene en cuenta que la mayoría de los trabajos dan un sólo valor promedio del ajuste de todos los rangos, tanto para las distribuciones de masa como para las de tamaño (ver sección 1.6.4.3).

Remarcamos el resultado de Tuzzolino y col. (2004), quien encuentra un exponente promedio  $-0.3 < \alpha < -1.15$ , y distingue un exponente promedio de  $\alpha = -0.75$ para partículas  $< 50\mu$ m y uno de  $\alpha = -0.5$  si  $> 50\mu$ m. Recordemos que la mayoría de estos modelos excluyen la presencia de partículas menores a  $10\mu$ m, no porque no existan, sino por simplicidad y porque aseguran que no son necesarios para reproducir las observaciones. Por otro lado, la Figura 1.17, muestra que para varios cometas y mediante varias técnicas, el ajuste para F(R) es una ley de potencias con un exponente promedio, s, que es altamente variable (según el cometa y el método de estudio) pero cuyo valor más frecuente se encuentra entre -2 < s < -4 ( $s = -\beta$ ), en concordancia con nuestro ajuste. La Figura 1.19a resume los exponentes hallados para la ley de potencias de F(R), para el cometa 67P/C-G mediante los distintos instrumentos que lo midieron, y lo sitúa en  $-\beta = 2,5-3$  para nuestro "Grupo Poroso 1", nuevamente en concordancia con nuestros resultados.

A modo de ejemplificar la relación entre resultados observacionales y los nuestros, la Figura 7.12 muestra: (a) Fig. 2(a) de Hilchenbach y col. (2016): distribución diferencial de tamaños de partículas de polvo recolectado durante el intervalo de tiempo del 11 de agosto al 24 de octubre de 2014 por COSIMA, donde los contenedores (tamaño 10 $\mu$ m) se refieren al diámetro equivalente de partícula derivado de las imágenes del microscopio COSIMA del área cubierta por partículas individuales y grupos de partículas. La línea discontinua indica el mejor ajuste de la ley de potencia con un índice de  $\beta = -3,1$ ; y (b) nuestra Figura 7.8 en escala semi-log, excluyendo la distribución inicial y los monómeros, por una cuestión de escala. Se muestra hasta  $R < 50\mu$ m para poder observar el comportamiento de los agregados chicos, sabiendo que permanece constante hasta  $R = 180\mu$ m.



**Figura 7.12:** (a) Distribución diferencial de tamaño del polvo del cometa 67P/C-G, (Figura 2(a) de Hilchenbach y col. (2016)) (b) 7.8 en escala semi-log.

Ambas distribuciones parecieran tener semejanzas en su forma, aun teniendo en cuenta que (a) realiza una agrupación en intervalos de 10µm. Nosotros realizamos un ajuste diferenciado con dos valores  $\beta = -6$  y 0, mientras que Hilchenbach y col. (2016) (como la mayoría de los trabajos publicados al respecto) realiza un sólo ajuste global, obteniendo  $\beta = -3,1$ . El problema de globalizar es que la distribución de los agregados más grandes no está contemplada por el ajuste de Hilchenbach y col. 2016 (se observa que incluso quedan excluidos de la barra de error), y un valor  $\beta = 0$  para  $R > 50\mu$ m ajusta dentro de las barras de error para esta figura. En la Figura 7.12b se observa nuevamente que a medida que  $N_{\rm col}$  aumenta, el  $R_{\rm crit}$ también lo hace. Lo interesante de esta comparación, es que en la Figura 7.12a, el  $R_{\rm crit}$  pareciera ubicarse cerca de  $R \sim 40 \mu {\rm m}$ , lo que podría sugerir que el número de colisiones podría ser aún mayor que los supuestos en este capítulo.

### 7.4.2. Comparación con observaciones de porosidad

En la sección 1.6.4.1 se resumió la poca información que hay sobre la porosidad de estos agregados, aunque la mayoría de los autores ubican este valor generalmente en  $0.05 < \phi < 0.6$ . También se detallaron algunas preguntas que hay aún sin respuestas al respecto: (1) Explicación al hecho de que algunos agregados presentan una porosidad menor a la de los agregados que conforman el núcleo y (2) Incerteza sobre proceso de formación y evolución de la porosidad de este polvo: Güttler y col. (2019) luego de un análisis detallado al respecto, teniendo en cuenta la información recolectada por todos los instrumentos de Rosetta, concluye diciendo que "La estructura y la porosidad deben tratarse de forma individual. Es posible que la estructura sea el resultado de un proceso de aglomeración que también involucró compactación. La porosidad en función del tamaño aumentaría así para tamaños pequeños hasta que permanezca constante en un tamaño umbral, que se espera que esté cerca de la porosidad global del cometa".

Nosotros en esta sección queremos evaluar si lo que se observa puede explicarse al introducir la dinámica colisional como un proceso que ocurre entre que los agregados se desprenden del núcleo y son observados. Si bien nuestra Figura 7.9 representa un histograma de porosidades mediante el análisis del  $\phi$ , no tenemos histogramas observacionales para comparar. Sólo podemos decir que estamos dentro del rango de valores observados. Sin embargo, si analizamos la Figura 7.10, podemos obtener algunas conclusiones relevantes:

(1) En todos los casos analizados, para los agregados más chicos predomina en el rango  $\phi > 0,40$  (grupo CC). Por lo tanto, tienden a ser más compactos.

(2) Los agregados más grandes también pertenecen mayormente al grupo CC, por lo tanto son más compactos que los agregados originales de los cuales provienen.

Ambos resultados se atribuyen al proceso colisional, donde generalmente una colisión entre dos agregados granulares, compacta al material del agregado/s resultante/s. Consideramos que esto es una gran mejora respecto a tomar a los agregados como esferas compactas, ya que al tener en cuenta el factor de llenado de los mismos, los resultados son completamente diferentes. Esto puede dar respuesta a la disminución de la porosidad para los agregados de la coma y a las conjeturas de Güttler y col. (2019).

## 7.5. Otras posibles aplicaciones

Nuestro código puede extenderse a muchas aplicaciones astrofísicas, mencionaremos algunas específicas:

- Evolución del polvo en discos protoplanetarios: En este escenario puede aplicarse nuestro código para evaluar la aglomeración de polvo en la región del disco protoplanetario previa a la línea de hielo (donde abundan los silicatos). Por supuesto que se requiere un ajuste en  $N_{\rm col}$ , que estará sujeto al tiempo que se quiera simular, a la etapa en la que se encuentra el disco, y entonces a la tasa de colisiones por unidad de tiempo estimada en este contexto. También la velocidad puede verse afectada por efectos de deriva, entre otros. Sin embargo, los códigos actuales no incluyen en simultáneo las variables  $\phi$ ,  $\mu$  y v, por lo cual creemos que puede ser un avance en este campo. De hecho, nuestros resultados son concordantes con las distribuciones de tamaños observadas y con la disminución de la porosidad promedio que se registran en estos entornos (ver sección 1.4).
- Formación de núcleos cometarios: Siguiendo el ítem anterior, la formación en etapas tempranas del disco puede resultar en protoplanetas o bien, en cuerpos menores, como los cometas. No sólo puede utilizarse el código para evaluar colisiones en la coma, sino también para evaluar cómo los agregados porosos se aglomeraron previamente para formar la estructura porosa del núcleo. En este punto es importante remarcar que algunos modelos de formación de núcleo (ver sección 1.6.3.1) debaten sobre aglomerados de polvo ligados por estructuras de hielo y aglomerados de mezcla de hielo y polvo. Por lo tanto, se debe hacer un análisis cuidadoso antes de aplicar el código en este contexto.
- Anillos y polvo remanente: Nuestro código puede aplicarse en ambientes donde el polvo de sílica sea prevalente, y en anillos de polvo que orbitan al rededor de otros planetas.
- Discos de escombros: También pueden analizarse este tipo de estructuras, donde el polvo puede colisionar a velocidades relativamente altas, y analizar la retroalimentación del polvo en estos discos de escombro, donde su permanencia en el tiempo se justifica por el proceso de cadenas colisionales (ver sección 1.5).

En todos estos escenarios sería de gran utilidad ampliar e incorporar los resultados de las colisiones entre agregados de hielo (Capítulo 5) al código MC.

## 7.6. Conclusiones del capítulo

A principio de este capítulo hemos analizado la posibilidad de que los agregados de polvo desprendidos del núcleo cometario sufran procesos de colisión en la parte interna de la coma. Si bien determinar la tasa de colisiones no es fácil, aplicamos nuestro código de Monte Carlo (detallado en el Capítulo 6) para casos hipotéticos donde 5, 10 o 100 colisiones ocurren entre una población de 10000 agregados, a fin de evaluar si las distribuciones de masa, tamaño y porosidad globales de la muestra se verían afectadas por tal proceso. Los resultados obtenidos por nuestro código luego de que  $N_{\rm col}$  ocurrieron fueron:

1) La distribución inicial de masas mantiene su dependencia original  $F(n) \propto n^{-2/3}$ sólo a partir de cierta masa  $n_{\rm crit}$ , que es mayor a medida que  $N_{\rm col}$  crece. Para  $n < n_{\rm crit}$  se observa una dependencia  $F(n) \propto n^{-2,8}$ .

2) La distribución inicial de tamaños (radios) mantiene su relación uniforme a partir de cierto  $R_{\rm crit}$ , que también aumenta con  $N_{\rm col}$ . Cuando  $R < R_{\rm crit}$  la dependencia es  $F(R) \propto R^{-6}$ .

3) Al final del proceso colisional pueden aparecer agregados de tamaño mayor, además de una gran generación de agregados pequeños  $(R < 10 \mu \text{m})$ . La frecuencia de aparición de agregados demasiados grandes  $(R > 150 \mu \text{m})$  es tan baja que podrían ser despreciados.

4) A medida que  $N_{\rm col}$  aumenta, mayor es el número de agregados que alcanzan su saturación en porosidad, es decir, sufren una gran compactación por causa de una o más colisiones sucesivas.

5) Para  $N_{\rm col} = 100$  se registra una estructura creciente en los valores del histograma de  $\phi$  hasta el salto en el valor de saturación. Estos resultados verifican que la población de polvo sometida a un número (relativamente bajo) de colisiones al azar, sufre una variación importante en su distribución de porosidad, que a su vez, determina los resultados de futuras re-colisiones de los agregados resultantes (Planes y col. 2020, Gunkelmann y col. 2016a).

6) Cuando se evalúa F(n) según distintos rangos de porosidad, a nivel general se respeta aproximadamente bien el ajuste propuesto para la distribución global, presentando mayor divergencia a menor  $N_{\rm col}$ . Si bien los 3 regímenes presentan estructuras similares tienen una marcada diferencia en sus extremos, indicando que la mayoría de los agregados más pequeños y los agregados de mayor tamaño presentan una mayor compactación. Por lo general, los primeros son el resultado de colisiones que resultan en fractura y los segundos en aglomeración, siendo ambos procesos donde la compactación está presente.
En asociación con observaciones astronómicas de comas cometarias podemos afirmar que nuestros resultados se corresponden con las distribuciones de masa y tamaño reportadas a través de diferentes métodos observacionales, e incluso estas comparaciones podrían indicar que se requiere de un número mayor de colisiones para acercarnos aun más a los resultados reportados por Hilchenbach y col. (2016), quienes utilizaron datos de la misión Rosetta. Respecto a la porosidad hay muy pocos estudios realizados, pero nuestros estudios muestran que este parámetro es fundamental para definir la evolución de la población y también para reproducir las observaciones de polvo: Kolokolova y Kimura (2010) afirma que considerar al polvo cometario como agregados porosos compuestos por granos sub- $\mu$ m permite reproducir características observacionales que son exhibidas por todos los cometas, aunque remarca que su modelo computacional debería contemplar agregados de miles de monómeros para que los valores obtenidos sean semejantes a los observados. Si bien el radio de nuestro grano individual es menor al propuesto por Kolokolova y Kimura (2010), nuestro modelo abarca ese tipo de agregados granulares masivos, lo que permitiría realizar análisis similares en el futuro cercano.

Consideramos que esta línea de investigación debe aún ampliarse, pero nuestros resultados indican que incorporar el resultado de la evolución colisional entre agregados de polvo en los modelos actuales de coma cometaria (que sólo incluyen interacción entre moléculas de gas, o gas-polvo) puede mejorar la comprensión de los fenómenos que ocurren en este entorno, y también podrían ayudar a un mejor ajuste de las observaciones astronómicas.

## Capítulo 8

### Conclusiones y posibilidades futuras

En esta tesis doctoral se utilizaron simulaciones computacionales para estudiar el comportamiento de colisiones entre agregados de materia granular, componente primario de poblaciones de polvo de interés, entre las cuales se encuentra el material desprendido por los núcleos cometarios.

En el Capítulo 2 se detalló el modelo granular utilizado para crear los agregados y para evaluar la interacción que sufre cada par de granos individuales de los agregados cuando éstos se someten a una colisión entre sí.

En el Capítulo 3 se aplicó el modelo para evaluar el resultado luego de que un provectil granular esférico colisiona contra un blanco granular semi-inifinito. Los granos individuales de todo es sistema son de sílica y poseen las mismas propiedades (radio, masa, densidad, etc). La masa del proyectil y la velocidad de colisión fueron parámetros variables. Se analizó el volumen y la morfología del cráter formado, la compactación en sus paredes, así como también la cantidad de material eyectado según la variación de los parámetros iniciales. Estos resultados pueden aplicarse a interacción de micro-agregados con superficies granulares muy extensas (como regolito) y también con otros blancos granulares que poseen un tamaño mucho mayor. Además, en este capítulo se analizó el frenado del proyectil y la profundidad alcanzada por las partículas del mismo en el blanco. Esto es de gran interés para comprender procesos de deposición y mezcla de regolito y materiales similares. Nuestros resultados presentan fuerte contraste con la caracterización de impactos en escala macro y también con la escala atomística. Las principales contribuciones a estas diferencias son la naturaleza disipativa de nuestras colisiones y la naturaleza porosa del blanco.

En el Capítulo 4 se analizaron colisiones entre agregados granulares esféricos de sílica. Este tipo de eventos colisionales son importantes en muchos escenarios astrofísicos, tales como discos de escombros, polvo interplanetario, discos protoplanetarios, etc. En una primera parte dejamos fija la relación de masas (60) y la velocidad de colisión (100m/s) y nos ocupamos de ver el rol de la porosidad, ya que no suele incluirse en modelos que simulan la evolución colisional de este tipo de estructuras. Sin embargo, nuestro trabajo muestra el considerable impacto que la porosidad podría tener en tales modelos: para porosidades bajas (menores al 80%) el proyectil produce un cráter en el objetivo y se observa la formación de "pétalos" que son fracturas en la cresta del cráter. Sin embargo, para porosidades mayores, el proyectil pequeño atraviesa el objetivo grande y lo fragmenta fuertemente. Al considerar las velocidades laterales de los granos durante la colisión, atribuimos este comportamiento al "efecto pistón": el proyectil pierde impulso principalmente debido a los granos debajo de él. Por el aumento en las interacciones grano-grano a medida que disminuye la porosidad, el efecto pistón pierde su importancia a medida que la la muestra original es más compacta. En todos los casos se observa una gran compactación del material granular. En la segunda parte se varió además la velocidad de impacto y la diferencia de masas entre los agregados, tratando de estudiar casos más realistas. Se observan tres posibles resultados: (i) adherencia, que podría incluir la penetración del agregado más pequeño en el agregado más grande; (ii) fragmentación del agregado más grande en dos fragmentos grandes, particularmente debido al llamado efecto pistón para porosidades altas; y (iii) destrucción total de los agregados. La mayor parte de la energía del impacto se gasta por fricción, y una fracción conduce a la compactación del material poroso, la cual fue cuantificada. Se observa que la eficiencia de la erosión varía significativamente con velocidad de impacto, relación de masa y porosidad, pero la eficiencia de acreción no muestra variaciones tan fuertes. Para colisiones altamente asimétricas el crecimiento de agregados (por ganancia de masa) puede ocurrir incluso a altas velocidades (100m/s) para una "ventana" en porosidades de 65-80%. Esta ventana se ensancha a medida que disminuye la velocidad del impacto. También se cuantificó la distribución de masa de los fragmentos resultantes, la cual sigue una distribución de ley de potencia que es casi independiente de la relación de masa, el factor de llenado y la velocidad. A través de los Capítulos 3 y 4 concluimos que es un trabajo muy complejo construir un modelo completo de crecimiento/fractura como desenlace de un proceso colisional entre materiales granulares. Sin embargo, el trabajo realizado hasta aquí muestra grandes avances, asemejándose a entornos de colisión más reales donde los agregados poseen diferente tamaño, la porosidad no es constante y las fuerzas de fricción disipan grandes cantidades de energía del sistema.

En el Capítulo 5 indagamos sobre colisiones entre agregados esféricos compuestos de hielo de agua. Enfrentamos el desafío de encontrar que un parámetro clave, la energía superficial de este material, no está unánimemente definido en la bibliografía existente y decidimos investigar cuán diferentes pueden ser los resultados si tomamos los dos valores más referenciados. También variamos las porosidades, las

bios notorios, tanto cualitativos como cuantitativos al variar la energía superficial, por lo tanto concluimos en que no puede tomarse arbitrariamente cualquier valor y que su elección debe estar fuertemente fundamentada. Respecto a los resultados del proceso colisional, a priori estas nuevas simulaciones replican el efecto pistón y de pétalos observadas para sílica, aunque las velocidades a las cuales se observan son diferentes. En los casos particulares con gran energía superficial  $\gamma = 0.37 \text{J/m}^2$ , gran relación de masa y agregados muy porosos se observó que el blanco se cierra luego del paso del proyectil, cubriéndolo y dejando una cavidad hueca entre éste y el material que se une por encima. Se observa un cráter conformado exclusivamente por el material del blanco, siendo el proyectil no visible desde el exterior. Este resultado es relevante para astroquímica: proporciona superficies adicionales para reacciones químicas, y también para evolución granular con múltiples colisiones, ya que este proyectil con un hueco podría fracturarse con mayor facilidad en colisiones posteriores. En cuanto a la dependencia con la porosidad y con la relación de masas, se ven dependencias similares a las encontradas para los casos con sílica. La compactación muestra poca dependencia con la porosidad inicial, leve con la relación de masas y alta con la velocidad de impacto. Todas las simulaciones realizadas en este capítulo resultaron en crecimiento de los granos, mostrando que aún tomando diferentes valores de energía superficial, el hielo presenta mayor tendencia al crecimiento que la sílica.

En el Capítulo 6 se desarrolló un código de Monte Carlo para estudiar la evolución de una población de agregados granulares, luego de que un número dado de colisiones al azar tuvieran lugar. Se parte dando la distribución deseada de tamaños y porosidades, desde la cual se arma la población inicial de la cantidad deseada de agregados. Luego se brinda la distribución de velocidades de colisión y se indica número de colisiones y margen de error aceptable (a menor error, mayor tiempo computacional). El código elegirá al azar dos agregados y una velocidad de colisión. Para cada colisión individual evaluá cuántos fragmentos resultan, qué porosidad y cuántas partículas posee cada uno, teniendo en cuenta los resultados obtenidos de los Capítulos 3 y 4 (agregados de sílica). Remueve los agregados originales de la población y adiciona los nuevos. El proceso se repite hasta que se alcanza el número de colisiones indicado. El código devuelve la distribución de masas, tamaños y porosidades, todas normalizadas. Además permite obtener una matriz que relaciona la masa de los agregados con su porosidad.

Por último, en el Capítulo 7 se comienza analizando la posibilidad de que los agregados de polvo desprendidos de los núcleos cometarios colisionen entre sí en la coma interna, proceso que se ha despreciado hasta la actualidad pero que a partir de las imágenes in-situ tomadas del cometa 67/C-G y de diversos estudios pareciera que es un efecto evidente. Luego se aplica el código detallado en el capítulo anterior para evaluar cómo se modificarían las distribuciones de masa, tamaño y porosidad si un número pequeño de colisiones de polvo tienen lugar. Al comparar los resultados con observaciones astronómicas y resultados derivados de las mismas, se observa que ajustan dentro del rango de las distribuciones de tamaño y masa observadas, e incluso éstas parecieran sugerir que un mayor número de colisiones pueden mejorar el modelado. Además, se incluye un análisis de la porosidad final de los agregados, un tema que presenta muchos interrogantes y cuyas mediciones derivadas de observaciones son complejas y poco precisas. Si bien el trabajo presentado en este capítulo está actualmente en proceso, consideramos que incluir nuestros resultados a los procesos colisionales polvo-gas y gas-gas, incluidos en la mayoría de los modelos actuales, puede significar una mejora considerable para reproducir resultados observacionales, discutidos en el Capítulo 1.

Esta tesis abre las puertas a muchos desafíos en el corto plazo. Por un lado, continuar la investigación de colisiones entre agregados de hielo de agua, y sería de interés realizar en el futuro cercano simulaciones donde los agregados se compongan de una mezcla de hielo y sílica. Esto permitiría extender la aplicación de nuestros resultados a discos protoplanetarios más allá de la línea de hielo, anillos planetarios y mejorar el modelo colisional para comas cometarias, entre otros ambientes donde tanto el hielo de agua como la sílica están presentes. Además, dentro de los parámetros colisionales globales aún queda indagar cómo varían los resultados si el parámetro de impacto no es nulo (colisiones no centrales) y qué sucede si la porosidad entre estos agregados es diferente. Otro aspecto es que en toda la tesis se han considerado agregados conformados por granos individuales del mismo tamaño. Sin embargo, sería interesante analizar casos donde este radio es diferente: se conoce en mecánica granular que la presencia de granos de mucho menor tamaño puede modificar la deformación mecánica facilitando bandas de corte y disminuyendo el "strength" del agregado (Ueda y col. 2011, Gundlach y col. 2018). Estudios recientes derivan un tamaño de monómero menor para ajustar correctamente observaciones: por ejemplo, a partir de datos de VIRTIS, Güttler y col. (2019) determina un radio de  $0.1 \mu m$ . Kolokolova y Kimura (2010) encuentran que es  $0,2\mu m$ , o Mannel y col. (2019) sugiere que los agregados de polvo se conforman por sub-unidades aún menores (escala nm) a partir de datos obtenidos por MIDAS. Por lo tanto, repetir nuestro análisis con diversos valores de tamaño de grano sería de gran interés. Aún más: tenemos como objetivo considerar para los granos individuales, una distribución de tamaños. Por ejemplo, Umstätter y col. (Umstätter y col. 2019, Umstätter y Urbassek 2020) muestran que recubriendo un agregado esférico con granos mas finos se puede modificar significativamente la probabilidad de rebote en una colisión, ya que los granos pequeños mejoran la disipación de energía y dificultan la fragmentación. Este tipo de simulaciones podrían ser claves para un análisis más realista de estos procesos colisionales.

Por otro lado, utilizando los datos de salida del código MC (Capítulo 7), se podría calcular la evolución del espectro IR del polvo, dependiendo de la evolución colisional. El espectro IR de un solo grano compacto de sílica, puede obtenerse de la teoría de Mie (Fu y Sun 2001), para un grano de radio determinado, con la función dieléctrica compleja de sílica. El espectro de un conjunto de granos con cierta distribución de tamaño se obtiene integrando sobre esa distribución, como ya se ha hecho en trabajos sobre polvo interestelar (Saija y col. 2001, Witt y col. 2001). Esto tiene que ser corregido por el hecho de tener agregados con porosidad. Existen varias sugerencias sobre como llevar a cabo estas correcciones (Hage y Greenberg 1990, Voshchinnikov y col. 2007). Entre sus numerosas aplicaciones, este tipo de modela-do también se ha implementado para estudios de polvo cometario (Das y col. 2004, Shen y col. 2009), permitiendo unir resultados con observaciones polarimétricas.

Finalmente, en esta tesis nos hemos focalizado en agregados aproximadamente esféricos, pero existen trabajos utilizando agregados fractales (Wada y col. 2009, Fulle y Blum 2017). La topología del agregado depende del tipo de formación, y futuros trabajos deberían incluir otras geometrías. Es importante aclarar que desviaciones de la geometría esférica implican la necesidad de multiplicar el número de simulaciones, con distintas rotaciones relativas de los agregados para asegurar una estadística razonable sobre el resultado final de la colisión. Obviamente asumir que los agregados están compuestos de granos esféricos también es una simplificación. Sería interesante estudiar casos que tengan en cuenta granos poliédricos (Athanassiadis y col. 2014) para estudiar la influencia de esa geometría en las colisiones.

# Bibliografía

#### Bibliografía

- Agarwal, J., Della Corte, V., Feldman, P. D., Geiger, B., Merouane, S., Bertini, I., Bodewits, D., Fornasier, S., Grün, E., Hasselmann, P. Y col. (2017). Evidence of sub-surface energy storage in comet 67P from the outburst of 2016 July 03. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 469(Suppl\_2), s606-s625.
- Alexander, C. M. O. D., Boss, A. P., Keller, L. P., Nuth, J. A. & Weinberger, A. (2007). Astronomical and meteoritic evidence for the nature of interstellar dust and its processing in protoplanetary disks. *Protostars* and Planets V, 801-813.
- Allen, M. P. & Tildesley, D. J. (2017). Computer simulation of liquids. Oxford university press.
- Altwegg, K., Balsiger, H. & Fuselier, S. A. (2019). Cometary chemistry and the origin of icy solar system bodies: the view after Rosetta. Annual Review of Astronomy and Astrophysics, 57, 113-155.
- Ambroso, M. A., Santore, C. R., Abate, A. R. & Durian, D. J. (2005). Penetration depth for shallow impact cratering. *Physical Review E*, 71(5), 051305.
- Anders, C., Bringa, E. M., Fioretti, F. D., Ziegenhain, G. & Urbassek, H. M. (2012). Crater formation caused by nanoparticle impact: A molecular dynamics study of crater volume and shape. *Physical Review B*, 85(23), 235440.
- Anders, C., Bringa, E. M., Ziegenhain, G. & Urbassek, H. M. (2011). Stopping of hypervelocity clusters in solids. New Journal of Physics, 13(11), 113019.
- Anders, C. & Urbassek, H. M. (2005). Cluster-size dependence of ranges of 100 eV/atom Aun clusters. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 228(1-4), 57-63.
- Anders, C. & Urbassek, H. M. (2013). Impacts into cosmic ice surfaces: A molecular-dynamics study using the Reax force field. Nuclear Instru-

ments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 303, 200-204.

- Anders, C. & Urbassek, H. M. (2007). Nonlinear stopping of heavy clusters in matter: A case study. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 258(2), 497-500.
- Anders, C., Urbassek, H. M. & Johnson, R. E. (2004). Linearity and additivity in cluster-induced sputtering: A molecular-dynamics study of van der Waals bonded systems. *Physical Review B*, 70(15), 155404.
- Anders, C., Ziegenhain, G., Zimmermann, S. & Urbassek, H. M. (2009). Cluster-induced crater formation. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 267(18), 3122-3125.
- Armitage, P. J. (2010). Astrophysics of Planet Formation. Astrophysics of Planet Formation (inf. téc.). ISBN 978-0-521-88745-8 (hardback). Cambridge, UK: Cambridge University Press.
- Athanassiadis, A. G., Miskin, M. Z., Kaplan, P., Rodenberg, N., Lee, S. H., Merritt, J., Brown, E., Amend, J., Lipson, H. & Jaeger, H. M. (2014). Particle shape effects on the stress response of granular packings. *Soft Matter*, 10(1), 48-59.
- Aumatell, G. & Wurm, G. (2014). Ice aggregate contacts at the nm-scale. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 437(1), 690-702.
- Banaszkiewicz, M., Marconi, M. L., Kömle, N. I. & Ip, W. H. (1990). Dust dynamics around cometary nuclei, En Asteroids, Comets, Meteors III.
- Bargiel, M. & Tory, E. M. (1993). Packing fraction and measures of disorder of ultradense irregular packings of equal spheres. I. Nearly ordered packing. Advanced Powder Technology, 4(2), 79-101.
- Bartali, R., Rodríguez-Liñán, G. M., Nahmad-Molinari, Y., Sarocchi, D. & Ruiz-Suárez, J. C. (2013). Role of the granular nature of meteoritic projectiles in impact crater morphogenesis. arXiv preprint ar-Xiv:1302.0259.
- Baule, A., Morone, F., Herrmann, H. J. & Makse, H. A. (2018). Edwards statistical mechanics for jammed granular matter. *Reviews of Modern Physics*, 90(1), 015006.
- Beer, E. H., Podolak, M. & Prialnik, D. (2006). The contribution of icy grains to the activity of comets: I. Grain lifetime and distribution. *Icarus*, 180(2), 473-486.
- Beitz, E., Güttler, C., Blum, J., Meisner, T., Teiser, J. & Wurm, G. (2011). Low-velocity collisions of centimeter-sized dust aggregates. *The Astrophysical Journal*, 736(1), 34.

- Beitz, E., Blum, J., Parisi, M. G. & Trigo-Rodriguez, J. (2016). The collisional evolution of undifferentiated asteroids and the formation of chondritic meteoroids. *The Astrophysical Journal*, 824(1), 12.
- Beitz, E., Güttler, C., Nakamura, A., Tsuchiyama, A. & Blum, J. (2013). Experiments on the consolidation of chondrites and the formation of dense rims around chondrules. *Icarus*, 225(1), 558-569.
- Belton, M. J. S., Zou, X. D., Li, J. Y. & Asphaug, E. (2018). On the origin of internal layers in comet nuclei. *Icarus*, 314, 364-375.
- Bentley, M. S., Arends, H., Butler, B., Gavira, J., Jeszenszky, H., Mannel, T., Romstedt, J., Schmied, R. & Torkar, K. (2016). MIDAS: Lessons learned from the first spaceborne atomic force microscope. Acta Astronautica, 125, 11-21.
- Birnstiel, T., Fang, M. & Johansen, A. (2016). Dust evolution and the formation of planetesimals. Space Science Reviews, 205(1-4), 41-75.
- Blum, J. (2006). Dust agglomeration. Advances in Physics, 55(7-8), 881-947.
- Blum, J. (2010). Dust growth in protoplanetary disks—a comprehensive experimental/theoretical approach. Research in Astronomy and Astrophysics, 10(12), 1199.
- Blum, J., Gundlach, B., Mühle, S. & Trigo-Rodriguez, J. M. (2014). Comets formed in solar-nebula instabilities!—An experimental and modeling attempt to relate the activity of comets to their formation process. *Icarus*, 235, 156-169.
- Blum, J. & Schräpler, R. (2004). Structure and mechanical properties of highporosity macroscopic agglomerates formed by random ballistic deposition. *Physical Review Letters*, 93(11), 115503.
- Blum, J. & Wurm, G. (2008). The growth mechanisms of macroscopic bodies in protoplanetary disks. Annual Review of Astronomy and Astrophysics, 46, 21-56.
- Blum, J., Gundlach, B., Krause, M., Fulle, M., Johansen, A., Agarwal, J., Von Borstel, I., Shi, X., Hu, X., Bentley, M. S. Y col. (2017). Evidence for the formation of comet 67P/Churyumov-Gerasimenko through gravitational collapse of a bound clump of pebbles. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 469(Suppl\_2), S755-S773.
- Bockelée-Morvan, D., Rinaldi, G., Erard, S., Leyrat, C., Capaccioni, F., Drossart, P., Filacchione, G., Migliorini, A., Quirico, E., Mottola, S. Y col. (2017). Comet 67P outbursts and quiescent coma at 1.3 au from the Sun: dust properties from Rosetta/VIRTIS-H observations. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 469 (Suppl 2), S443-S458.
- Bolin, B. T., Lisse, C. M., Kasliwal, M. M., Quimby, R., Tan, H., Copperwheat, C. M., Lin, Z., Morbidelli, A., Abe, L., Bendjoya, P. Y col. (2020). Characterization of the Nucleus, Morphology, and Activity of Interste-

llar Comet 2I/Borisov by Optical and Near-infrared GROWTH, Apache Point, IRTF, ZTF, and Keck Observations. *The Astronomical Journal*, 160(1), 26.

- Botet, R., Sen, A. K. & Hadamcik, E. (2020). Photometry and Colour Index of Comet 67P/Churyumov-Gerasimenko on 12 December 2015.
- Brauer, F., Henning, T. & Dullemond, C. P. (2008). Planetesimal formation near the snow line in MRI-driven turbulent protoplanetary disks. Astronomy & Astrophysics, 487(1), L1-L4.
- Brilliantov, N. V., Spahn, F., Hertzsch, J. M. & Pöschel, T. (1996). The collision of particles in granular systems. *Physica A: Statistical Mechanics* and its Applications, 231(4), 417-424.
- Bringa, E. M., Johnson, R. E. & Papaléo, R. M. (2002). Crater formation by single ions in the electronic stopping regime: Comparison of molecular dynamics simulations with experiments on organic films. *Physical Review B*, 65(9), 094113.
- Britt, D. T. & SJ, C. G. J. (2001). Modeling the structure of high porosity asteroids. *Icarus*, 152(1), 134-139.
- Brownlee, D., Tsou, P., Aléon, J., Alexander, C., Araki, T., Bajt, S., Baratta, G. A., Bastien, R., Bland, P., Bleuet, P. Y col. (2006). Comet 81P/Wild 2 under a microscope. *Science*, 314 (5806), 1711-1716.
- Burns, J. A., Hamilton, D. P. & Showalter, M. R. (2001). Dusty rings and circumplanetary dust: Observations and simple physics. En Interplanetary Dust (pp. 641-725). Springer.
- Burns, J. A., Showalter, M. R., Cuzzi, J. N. & Pollack, J. B. (1980). Physical processes in Jupiter's ring: Clues to its origin by Jove! *Icarus*, 44(2), 339-360.
- Caballero-Robledo, G. A., Kelly, K. P. D., Homan, T. A. M., Weijs, J. H., van der Meer, D. & Lohse, D. (2012). Suction of splash after impact on dry quick sand. *Granular matter*, 14(2), 179-184.
- Carrera, D., Johansen, A. & Davies, M. B. (2015). How to form planetesimals from mm-sized chondrules and chondrule aggregates. Astronomy & Astrophysics, 579, A43.
- Carroll, S. J., Nellist, P. D., Palmer, R. E., Hobday, S. & Smith, R. (2000). Shallow implantation of "size-selected" Ag clusters into graphite. *Physical Review Letters*, 84 (12), 2654.
- Chokshi, A., Tielens, A. G. G. M. & Hollenbach, D. (1993). Dust coagulation. The Astrophysical Journal, 407, 806-819.
- Ciamarra, M. P., Lara, A. H., Lee, A. T., Goldman, D. I., Vishik, I. & Swinney,
  H. L. (2004). Dynamics of drag and force distributions for projectile impact in a granular medium. *Physical Review Letters*, 92(19), 194301.

- Colla, T. J. & Urbassek, H. M. (2000). Au sputtering by cluster bombardment: A molecular dynamics study. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 164, 687-696.
- Colwell, J. E. & Esposito, L. W. (1993). Origins of the rings of Uranus and Neptune: 2. Initial conditions and ring moon populations. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 98(E4), 7387-7401.
- Combi, M. (2002). Hale-Bopp: What makes a big comet different? Coma dynamics: Observations and theory. En Cometary Science after Hale-Bopp (pp. 73-90). Springer.
- Cordiner, M. A., Boissier, J., Charnley, S. B., Remijan, A. J., Mumma, M. J., Villanueva, G., Lis, D. C., Milam, S. N., Paganini, L., Crovisier, J. Y col. (2017). ALMA mapping of rapid gas and dust variations in comet C/2012 S1 (ISON): new insights into the origin of cometary HNC. The Astrophysical Journal, 838(2), 147.
- Corrigan, C. M., Zolensky, M. E., Dahl, J., Long, M., Weir, J., Sapp, C. & Burkett, P. J. (1997). The porosity and permeability of chondritic meteorites and interplanetary dust particles. *Meteoritics & Planetary Science*, 32(4), 509-515.
- Crifo, J. F., Loukianov, G. A., Rodionov, A. V. & Zakharov, V. V. (2005). Direct Monte Carlo and multifluid modeling of the circumnuclear dust coma: Spherical grain dynamics revisited. *Icarus*, 176(1), 192-219.
- Crifo, J. F. & Rodionov, A. V. (1999). Modelling the circumnuclear coma of comets: objectives, methods and recent results. *Planetary and Space Science*, 47(6-7), 797-826.
- Das, H. S., Sen, A. K. & Kaul, C. L. (2004). The polarimetric properties of cometary dust and a possible effect of dust aging by the Sun. Astronomy & Astrophysics, 423(1), 373-380.
- Deboeuf, S., Gondret, P. & Rabaud, M. (2009). Dynamics of grain ejection by sphere impact on a granular bed. *Physical Review E*, 79(4), 041306.
- Deckers, J. & Teiser, J. (2014). Macroscopic dust in protoplanetary disks—from growth to destruction. The Astrophysical Journal, 796(2), 99.
- de Lubienietz, S. (1666). Historia Cometarum.
- Derjaguin, B. V., Muller, V. M. & Toporov, Y. P. (1975). Effect of contact deformations on the adhesion of particles. *Journal of Colloid and In*terface Science, 53, 314.
- Dominik, C. & Tielens, A. G. G. M. (1997). The physics of dust coagulation and the structure of dust aggregates in space. *The Astrophysical Journal*, 480(2), 647.

- Dominik, C. & Tielens, A. G. G. M. (1996). Resistance to sliding on atomic scales in the adhesive contact of two elastic spheres. *Philosophical Magazine A*, 73(5), 1279-1302.
- Donn, B. & Hughes, D. (1986). A fractal model of a cometary nucleus formed by random accretion, En ESLAB Symposium on the Exploration of Halley's Comet.
- Drążkowska, J. & Alibert, Y. (2017). Planetesimal formation starts at the snow line. Astronomy & Astrophysics, 608, A92.
- Drążkowska, J., Alibert, Y. & Moore, B. (2016). Close-in planetesimal formation by pile-up of drifting pebbles. Astronomy & Astrophysics, 594, A105.
- Drążkowska, J., Windmark, F. & Dullemond, C. P. (2014). Modeling dust growth in protoplanetary disks: The breakthrough case. Astronomy & Astrophysics, 567, A38.
- Dullemond, C. P., Hollenbach, D., Kamp, I., d'Alessio, P., Reipurth, B., Jewitt, D. & Keil, K. (2007). Protostars and Planets V. *Reipurth*, B, 555.
- Dullemond, C. P., Natta, A. & Testi, L. (2006). Accretion in protoplanetary disks: The imprint of core properties. The Astrophysical Journal Letters, 645(1), L69.
- Duran, J. (2000). Interactions in Granular Media. En Sands, Powders, and Grains (pp. 19-52). Springer.
- Edelsbrunner, H. & Mücke, E. P. (1994). Three-dimensional alpha shapes. ACM Transactions on Graphics (TOG), 13(1), 43-72.
- Edgeworth, K. E. (1943). The evolution of our planetary system. Journal of the British Astronomical Association, 53, 181-188.
- Edgeworth, K. E. (1949). The origin and evolution of the solar system. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 109(5), 600-609.
- Edwards, S. (1998). The equations of stress in a granular material. *Physica* A: Statistical Mechanics and its Applications, 249(1-4), 226-231.
- Ehrenfreund, P., Charnley, S. B. & Wooden, D. H. (2004). From interstellar material to cometary particles and molecules. *Comets II*, 115-133.
- El-Maarry, M. R., Groussin, O., Keller, H. U., Thomas, N., Vincent, J.-B., Mottola, S., Pajola, M., Otto, K., Herny, C. & Krasilnikov, S. (2019).
  Surface morphology of comets and associated evolutionary processes: a review of Rosetta's observations of 67p/Churyumov–Gerasimenko. Space Science Reviews, 215(4), 1-33.
- Ercolessi, F. (1997). A molecular dynamics primer. Spring College in Computational Physics, ICTP, Trieste, 19.
- Fernandez, J. A. (2006). Comets: Nature, Dynamics, Origin, and their Cosmogonical Relevance (Vol. 328). Springer Science & Business Media.

- Fernández, J. A. (1980). On the existence of a comet belt beyond Neptune. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 192(3), 481-491.
- Flandes, A., Albin, T., Arnold, W., Fischer, H. H., Hirn, A., Loose, A., Mewes, C., Podolak, M., Seidensticker, K. J., Volkert, C. Y col. (2018). Dust Impact Monitor (SESAME-DIM) on-board Rosetta/Philae: Aerogel as comet analog material. *Icarus*, 302, 1-9.
- Fomenkova, M. N., Chang, S. & Mukhin, L. M. (1994). Carbonaceous components in the comet Halley dust. *Geochimica et Cosmochimica acta*, 58(20), 4503-4512.
- Fu, Q. & Sun, W. (2001). Mie theory for light scattering by a spherical particle in an absorbing medium. Applied Optics, 40(9), 1354-1361.
- Fujiwara, A., Kawaguchi, J., Yeomans, D. K., Abe, M., Mukai, T., Okada, T., Saito, J., Yano, H., Yoshikawa, M., Scheeres, D. J., Barnouin-Jha, O., Cheng, A. F., Demura, H., Gaskell, R. W., Hirata, N., Ikeda, H., Kominato, T., Miyamoto, H., Nakamura, A. M., ... Uesugi, K. (2006). The rubble-pile asteroid Itokawa as observed by Hayabusa. *Science*, 312(5778), 1330-1334.
- Fulle, M. (1997). Injection of large grains into orbits around comet nuclei. Astronomy and Astrophysics, 325, 1237-1248.
- Fulle, M. & Blum, J. (2017). Fractal dust constrains the collisional history of comets. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 469(Suppl\_2), S39-S44.
- Fulle, M., Della Corte, V., Rotundi, A., Green, S. F., Accolla, M., Colangeli, L., Ferrari, M., Ivanovski, S., Sordini, R. & Zakharov, V. (2017). The dust-to-ices ratio in comets and Kuiper belt objects. *Monthly Notices* of the Royal Astronomical Society, 469 (Suppl\_2), S45-S49.
- Fulle, M., Levasseur-Regourd, A. C., McBride, N. & Hadamcik, E. (2000). In situ dust measurements from within the coma of 1P/Halley: firstorder approximation with a dust dynamical model. *The Astronomical Journal*, 119(4), 1968.
- Fulle, M., Marzari, F., Della Corte, V., Fornasier, S., Sierks, H., Rotundi, A., Barbieri, C., Lamy, P. L., Rodrigo, R., Koschny, D. Y col. (2016). Evolution of the dust size distribution of comet 67P/Churyumov– Gerasimenko from 2.2 AU to perihelion. *The Astrophysical Journal*, 821(1), 19.
- Garaud, P., Meru, F., Galvagni, M. & Olczak, C. (2013). From dust to planetesimals: an improved model for collisional growth in protoplanetary disks. *The Astrophysical Journal*, 764 (2), 146.
- Gáspár, A., Rieke, G. H. & Balog, Z. (2013). The collisional evolution of debris disks. The Astrophysical Journal, 768(1), 25.

- Gehrz, R. D. & Ney, E. P. (1992). 0.7-to 23- $\mu$ m photometric observations of P/Halley 1986 III and six recent bright comets. *Icarus*, 100(1), 162-186.
- Genge, M. J., Engrand, C., Gounelle, M. & Taylor, S. (2008). The classification of micrometeorites. *Meteoritics & Planetary Science*, 43(3), 497-515.
- Gicquel, A., Rose, M., Vincent, J.-B., Davidsson, B., Bodewits, D., A'Hearn, M. F., Agarwal, J., Fougere, N., Sierks, H., Bertini, I. Y col. (2017). Modelling of the outburst on 2015 July 29 observed with OSIRIS cameras in the Southern hemisphere of comet 67P/Churyumov–Gerasimenko. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 469(Suppl\_2), S178-S185.
- Graham, J. R., Kalas, P. G. & Matthews, B. C. (2007). The signature of primordial grain growth in the polarized light of the AU Microscopii debris disk. *The Astrophysical Journal*, 654(1), 595.
- Greenberg, J. M. & Grim, R. (1986). The origin and evolution of comet nuclei and Comet Halley results.
- Greenberg, J. M. & Hage, J. I. (1990). From interstellar dust to comets-A unification of observational constraints. Astrophysical Journal, 361, 260.
- Greenberg, J. M. & Li, A. (1999). Morphological structure and chemical composition of cometary nuclei and dust. Space Science Reviews, 90(1-2), 149-161.
- Grossman, E., Gouzman, I. & Verker, R. (2010). Debris/micrometeoroid impacts and synergistic effects on spacecraft materials. MRS bulletin, 35(1), 41-47.
- Guilera, O. M., Sándor, Z., Ronco, M. P., Venturini, J. & Bertolami, M. M. (2020). Giant planet formation at the pressure maxima of protoplanetary disks-II. A hybrid accretion scenario. Astronomy & Astrophysics, 642, A140.
- Güldemeister, N., Wünnemann, K. & Poelchau, M. H. (2015). Scaling impact crater dimensions in cohesive rock by numerical modeling and laboratory experiments. *Geological Society of America Special Papers*, 518, 17-29.
- Gundlach, B. & Blum, J. (2015). The stickiness of micrometer-sized water-ice particles. *The Astrophysical Journal*, 798(1), 34.
- Gundlach, B., Kilias, S., Beitz, E. & Blum, J. (2011). Micrometer-sized ice particles for planetary-science experiments–I. Preparation, critical rolling friction force, and specific surface energy. *Icarus*, 214(2), 717-723.
- Gundlach, B., Schmidt, K. P., Kreuzig, C., Bischoff, D., Rezaei, F., Kothe, S., Blum, J., Grzesik, B. & Stoll, E. (2018). The tensile strength of ice

and dust aggregates and its dependence on particle properties. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 479(1), 1273-1277.

- Gunkelmann, N., Ringl, C. & Urbassek, H. M. (2016a). Influence of porosity on collisions between dust aggregates. Astronomy & Astrophysics, 589, A30.
- Gunkelmann, N., Ringl, C. & Urbassek, H. M. (2016b). Instationary compaction wave propagation in highly porous cohesive granular media. *Computational Particle Mechanics*, 3(3), 429-434.
- Güttler, C., Blum, J., Zsom, A., Ormel, C. W. & Dullemond, C. P. (2010). The outcome of protoplanetary dust growth: pebbles, boulders, or planetesimals?-I. Mapping the zoo of laboratory collision experiments. Astronomy & Astrophysics, 513, A56.
- Güttler, C., Mannel, T., Rotundi, A., Merouane, S., Fulle, M., Bockelée-Morvan, D., Lasue, J., Levasseur-Regourd, A. C., Blum, J., Naletto, G. Y col. (2019). Synthesis of the morphological description of cometary dust at comet 67P/Churyumov-Gerasimenko. Astronomy & Astrophysics, 630, A24.
- Guyon, E., Roux, S., Hansen, A., Bideau, D., Troadec, J.-P. & Crapo, H. (1990). Non-local and non-linear problems in the mechanics of disordered systems: application to granular media and rigidity problems. *Reports on Progress in Physics*, 53(4), 373.
- Haff, P. K. & Werner, B. T. (1986). Computer simulation of the mechanical sorting of grains. *Powder Technology*, 48(3), 239-245.
- Hage, J. I. & Greenberg, J. M. (1990). A model for the optical properties of porous grains. Astrophysical Journal, 361, 251-259.
- Hanner, M. S. (2003). The scattering properties of cometary dust. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 79, 695-705.
- Hanner, M. S. (1999). The silicate material in comets. *Space Science Reviews*, 90(1-2), 99-108.
- Hasegawa, Y., Suzuki, T. K., Tanaka, H., Kobayashi, H. & Wada, K. (2021). Collisional Growth and Fragmentation of Dust Aggregates with Low Mass Ratios. I: Critical Collision Velocity for Water Ice. arXiv preprint arXiv:2104.06711.
- Hasselmann, P. H., Barucci, M. A., Fornasier, S., Bockelée-Morvan, D., Deshapriya, J., Feller, C., Sunshine, J., Hoang, V., Sierks, H., Naletto, G. Y col. (2019). Pronounced morphological changes in a southern active zone on comet 67P/Churyumov-Gerasimenko. Astronomy & Astrophysics, 630, A8.
- Heim, L. O., Blum, J., Preuss, M. & Butt, H. J. (1999). Adhesion and friction forces between spherical micrometer-sized particles. *Physical Review Letters*, 83(16), 3328.

- Henning, T. & Meeus, G. (2009). Dust processing and mineralogy in protoplanetary accretion disks. arXiv preprint arXiv:0911.1010.
- Hertz, H. & Reine, J. (1882). original Hertzian mechanics ref. Angew. Math, 92, 156.
- Hilchenbach, M., Kissel, J., Langevin, Y., Briois, C., Von Hoerner, H., Koch, A., Schulz, R., Silén, J., Altwegg, K. & Colangeli, L. (2016). Comet 67P/Churyumov–Gerasimenko: close-up on dust particle fragments. *The Astrophysical Journal Letters*, 816(2), L32.
- Hirashita, H. & Li, Z. (2013). Condition for the formation of micron-sized dust grains in dense molecular cloud cores. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society: Letters, 434(1), L70-L74.
- Holsapple, K. A. (1993). The scaling of impact processes in planetary sciences. Annual Review of Earth and Planetary Sciences, 21(1), 333-373.
- Hornung, K., Merouane, S., Hilchenbach, M., Langevin, Y., Mellado, E. M., Della Corte, V., Kissel, J., Engrand, C., Schulz, R., Ryno, J. Y col. (2016). A first assessment of the strength of cometary particles collected in-situ by the COSIMA instrument onboard ROSETTA. *Planetary* and Space Science, 133, 63-75.
- Hörz, F., Bastien, R., Borg, J., Bradley, J. P., Bridges, J. C., Brownlee, D. E., Burchell, M. J., Chi, M., Cintala, M. J., Djouadi, Z. Y col. (2006). Impact features on Stardust: Implications for comet 81P/Wild 2 dust. Science, 314 (5806), 1716-1719.
- Hou, M., Peng, Z., Liu, R., Lu, K. & Chan, C. K. (2005). Dynamics of a projectile penetrating in granular systems. *Physical Review E*, 72(6), 062301.
- Huebner, W. F., Benkhoff, J., Capria, M. T., Coradini, A., De Sanctis, C., Orosei, R. & Prialnik, D. (2006). *Heat and gas diffusion in comet nuclei* (Vol. 133). International Space Science Institute Bern.
- Hughes, A. M., Duchêne, G. & Matthews, B. C. (2018). Debris disks: Structure, composition, and variability. Annual Review of Astronomy and Astrophysics, 56, 541-591.
- Hughes, D. W. & Williams, I. P. (2000). The velocity distributions of periodic comets and stream meteoroids. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 315(3), 629-634.
- Hurley, R. C., Lim, K. W. & Andrade, J. E. (2015). Grain-Scale Measurements During Low Velocity Impact in Granular Media. Rapid Penetration into Granular Media: Visualizing the Fundamental Physics of Rapid Earth Penetration, 291.
- Ida, S. & Lin, D. N. C. (2008). Toward a deterministic model of planetary formation. V. Accumulation near the ice line and super-Earths. *The Astrophysical Journal*, 685(1), 584.

- Iida, Y., Tsuchiyama, A., Kadono, T., Sakamoto, K., Nakamura, T., Uesugi, K., Nakano, T. & Zolensky, M. E. (2010). Three-dimensional shapes and Fe contents of Stardust impact tracks: A track formation model and estimation of comet Wild 2 coma dust particle densities. *Meteoritics & Planetary Science*, 45(8), 1302-1319.
- Israelachvili, J. (1992). Intermolecular and Surface Forces 2nd edn (New York: Academic).
- Johansen, A. & Youdin, A. (2007). Protoplanetary disk turbulence driven by the streaming instability: nonlinear saturation and particle concentration. *The Astrophysical Journal*, 662(1), 627.
- Johansen, A., Blum, J., Tanaka, H., Ormel, C., Bizzarro, M. & Rickman, H. (2014). The multifaceted planetesimal formation process. arXiv preprint arXiv:1402.1344.
- Johnson, K. L. (1985). Contact Mechanics. Cambridge University Press.
- Johnson, K. L. (1989). Normal contact of elastic solids: Hertz theory. Contact Mechanics, 84-106.
- Johnson, K. L., Kendall, K. & Roberts, A. D. (1971). Surface energy and the contact of elastic solids. Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences, 324 (1558), 301-313.
- Joswiak, D. J., Brownlee, D. E., Matrajt, G., Westphal, A. J. & Snead, C. J. (2009). Kosmochloric Ca-rich pyroxenes and FeO-rich olivines (Kool grains) and associated phases in Stardust tracks and chondritic porous interplanetary dust particles: Possible precursors to FeO-rich type II chondrules in ordinary chondrites. *Meteoritics & Planetary Science*, 44(10), 1561-1588.
- Joswiak, D. J., Brownlee, D. E., Matrajt, G., Westphal, A. J., Snead, C. J. & Gainsforth, Z. (2012). Comprehensive examination of large mineral and rock fragments in Stardust tracks: Mineralogy, analogous extraterrestrial materials, and source regions. *Meteoritics & Planetary Science*, 47(4), 471-524.
- Jungmann, F., Steinpilz, T., Teiser, J. & Wurm, G. (2018). Sticking and restitution in collisions of charged sub-mm dielectric grains. *Journal* of Physics Communications, 2(9), 095009.
- Jutzi, M., Holsapple, K., Wünneman, K. & Michel, P. (2015). Asteroids IV ed P. Michel, FE DeMeo; WF Bottke (Tucson, AZ: Univ. Arizona Press).
- Kalweit, M. & Drikakis, D. (2006). Collision dynamics of nanoscale Lennard-Jones clusters. *Physical Review B*, 74 (23), 235415.
- Kataoka, A., Tanaka, H., Okuzumi, S. & Wada, K. (2013). Fluffy dust forms icy planetesimals by static compression. Astronomy & Astrophysics, 557, L4.
- Katsuragi, H. (2016). Physics of soft impact and cratering. Springer.

- Katsuragi, H. & Durian, D. J. (2007). Unified force law for granular impact cratering. *Nature Physics*, 3(6), 420-423.
- Kawakita, H., Watanabe, J., Furusho, R., Fuse, T., Capria, M. T., De Sanctis,
  M. C. & Cremonese, G. (2004). Spin temperatures of ammonia and water molecules in comets. *The Astrophysical Journal*, 601(2), 1152.
- Keller, H. U., Mottola, S., Hviid, S. F., Agarwal, J., Kührt, E., Skorov, Y., Otto, K., Vincent, J.-B., Oklay, N., Schröder, S. E. Y col. (2017). Seasonal mass transfer on the nucleus of comet 67P/Chuyumov–Gerasimenko. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 469(Suppl\_2), S357-S371.
- Kerrache, A., Teboul, V., Guichaoua, D. & Monteil, A. (2003). Aging effects in supercooled silica.: A molecular dynamics investigation. *Journal of* non-crystalline solids, 322(1-3), 41-45.
- Ketcham, W. M. & Hobbs, P. V. (1969). An experimental determination of the surface energies of ice. *Philosophical Magazine*, 19(162), 1161-1173.
- Kimura, H., Wada, K., Kobayashi, H., Senshu, H., Hirai, T., Yoshida, F., Kobayashi, M., Hong, P. K., Arai, T., Ishibashi, K. Y col. (2020). Is water ice an efficient facilitator for dust coagulation? *Monthly Notices* of the Royal Astronomical Society, 498(2), 1801-1813.
- Kofman, W., Herique, A., Barbin, Y., Barriot, J. P., Ciarletti, V., Clifford, S., Edenhofer, P., Elachi, C., Eyraud, C., Goutail, J. P., Heggy, E., Jorda, L., Lasue, J., Levasseur-Regourd, A. C., Nielsen, E., Pasquero, P., Preusker, F., Puget, P., Plettemeier, D., ... Van Zyl, J. (2015). Properties of the 67P/Churyumov-Gerasimenko interior revealed by CONSERT radar. Science, 349(6247), aab0639.
- Kolokolova, L., Hanner, M. S., Levasseur-Regourd, A. C. & Gustafson, B. Å. (2004). Physical properties of cometary dust from light scattering and thermal emission. *Comets II*, 577, 184.
- Kolokolova, L. & Kimura, H. (2010). Comet dust as a mixture of aggregates and solid particles: model consistent with ground-based and spacemission results. *Earth, Planets and Space*, 62(1), 17-21.
- Kolokolova, L., Kimura, H., Kiselev, N. & Rosenbush, V. (2007). Two different evolutionary types of comets proved by polarimetric and infrared properties of their dust. Astronomy & Astrophysics, 463(3), 1189-1196.
- Kolokolova, L., Lara, L. M., Schulz, R., Stüwe, J. A. & Tozzi, G. P. (2003). Color of an ensemble of particles with a wide power-law size distribution: application to observations of Comet Hale–Bopp at 3AU. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 79, 861-871.
- Kothe, S., Blum, J., Weidling, R. & Güttler, C. (2013). Free collisions in a microgravity many-particle experiment. III. The collision behavior of sub-millimeter-sized dust aggregates. *Icarus*, 225(1), 75-85.

- Krijt, S., Ormel, C. W., Dominik, C. & Tielens, A. G. G. M. (2015). Erosion and the limits to planetesimal growth. Astronomy & Astrophysics, 574, A83.
- Krijt, S., Ormel, C. W., Dominik, C. & Tielens, A. G. G. M. (2016). A panoptic model for planetesimal formation and pebble delivery. Astronomy & Astrophysics, 586, A20.
- Krivov, A. V. (2010). Debris disks: seeing dust, thinking of planetesimals and planets. *Research in Astronomy and Astrophysics*, 10(5), 383.
- Krivov, A. V., Löhne, T. & Sremčević, M. (2006). Dust distributions in debris disks: effects of gravity, radiation pressure and collisions. Astronomy & Astrophysics, 455(2), 509-519.
- Kuiper, G. P. (1951). On the origin of the solar system. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 37(1), 1.
- Lai, I.-L., Ip, W.-H., Lee, J.-C., Lin, Z.-Y., Vincent, J.-B., Oklay, N., Sierks, H., Barbieri, C., Lamy, P., Rodrigo, R. Y col. (2019). Seasonal variations in source regions of the dust jets on comet 67P/Churyumov-Gerasimenko. Astronomy & Astrophysics, 630, A17.
- Lamy, P. L., Toth, I., Fernández, Y. R. & Weaver, H. A. (2004). The sizes, shapes, albedos, and colors of cometary nuclei. *Comets II*, 1, 223-264.
- Lane, J. M. D. (2015). Cooling rate and stress relaxation in silica melts and glasses via microsecond molecular dynamics. *Physical Review E*, 92(1), 012320.
- Langevin, Y., Hilchenbach, M., Vincendon, M., Merouane, S., Hornung, K., Ligier, N., Engrand, C., Schulz, R., Kissel, J., Rynö, J. Y col. (2017). Optical properties of cometary particles collected by the COSIMA mass spectrometer on-board Rosetta during the rendezvous phase around comet 67P/Churyumov–Gerasimenko. *Monthly Notices of the Royal* Astronomical Society, 469(Suppl 2), S535-S549.
- Langkowski, D., Teiser, J. & Blum, J. (2008). The physics of protoplanetesimal dust agglomerates. II. Low-velocity collision properties. *The Astrophysical Journal*, 675(1), 764.
- Lasue, J., Levasseur-Regourd, A. C., Hadamcik, E. & Alcouffe, G. (2009). Cometary dust properties retrieved from polarization observations: application to C/1995 O1 Hale–Bopp and 1P/Halley. *Icarus*, 199(1), 129-144.
- Lenz, C. T., Klahr, H. & Birnstiel, T. (2019). Planetesimal population synthesis: Pebble flux-regulated planetesimal formation. *The Astrophysical Journal*, 874(1), 36.

- Levasseur-Regourd, A., Hadamcik, E. & Renard, J. B. (1996). Evidence for two classes of comets from their polarimetric properties at large phase angles. Astronomy & Astrophysics, 313, 327-333.
- Levasseur-Regourd, A. C., Agarwal, J., Cottin, H., Engrand, C., Flynn, G., Fulle, M., Gombosi, T., Langevin, Y., Lasue, J., Mannel, T. Y col. (2018). Cometary dust. Space Science Reviews, 214(3), 64.
- Li, A. & Greenberg, J. M. (1998). A comet dust model for the beta Pictoris disk. Astronomy & Astrophysics, 331, 291.
- Li, Y., Dove, A., Curtis, J. S. & Colwell, J. E. (2016). 3D DEM simulations and experiments exploring low-velocity projectile impacts into a granular bed. *Powder Technology*, 288, 303-314.
- Li, Z., Guo, Q., Li, Z., Fan, G., Xiong, D. B., Su, Y., Zhang, J. & Zhang, D. (2015). Enhanced mechanical properties of graphene (reduced graphene oxide)/aluminum composites with a bioinspired nanolaminated structure. Nano Letters, 15(12), 8077-8083.
- Lisse, C. M., Chen, C. H., Wyatt, M. C., Morlok, A., Song, I., Bryden, G. & Sheehan, P. (2009). Abundant circumstellar silica dust and SiO gas created by a giant hypervelocity collision in the 12 Myr HD172555 system. *The Astrophysical Journal*, 701(2), 2019.
- Lohse, D., Bergmann, R., Mikkelsen, R., Zeilstra, C., van der Meer, D., Versluis, M., van der Weele, K., van der Hoef, M. & Kuipers, H. (2004). Impact on soft sand: void collapse and jet formation. *Physical Review Letters*, 93(19), 198003.
- Lorek, S., Lacerda, P. & Blum, J. (2018). Local growth of dust-and ice-mixed aggregates as cometary building blocks in the solar nebula. Astronomy & Astrophysics, 611, A18.
- Lyttleton, R. A. (1972). Does a continuous solid nucleus exist in comets. Astrophysics and Space Science, 15(2), 175-184.
- Makse, H. A., Johnson, D. L. & Schwartz, L. M. (2000). Packing of compressible granular materials. *Physical review letters*, 84(18), 4160.
- Mannel, T., Bentley, M. S., Boakes, P. D., Jeszenszky, H., Ehrenfreund, P., Engrand, C., Koeberl, C., Levasseur-Regourd, A. C., Romstedt, J., Schmied, R. Y col. (2019). Dust of comet 67P/Churyumov-Gerasimenko collected by Rosetta/MIDAS: classification and extension to the nanometer scale. Astronomy & Astrophysics, 630, A26.
- Marchi, S., Durda, D. D., Polanskey, C. A., Asphaug, E., Bottke, W. F., Elkins-Tanton, L. T., Garvie, L. A. J., Ray, S., Chocron, S. & Williams, D. A. (2019). Hypervelocity impact experiments in iron-nickel ingots and iron meteorites: Implications for the NASA Psyche mission. *Journal of Geophysical Research: Planets.*

- Markkanen, J., Agarwal, J., Väisänen, T., Penttilä, A. & Muinonen, K. (2018). Interpretation of the phase functions measured by the OSIRIS instrument for comet 67P/Churyumov–Gerasimenko. The Astrophysical Journal Letters, 868(1), L16.
- Marston, J. O., Li, E. Q. & Thoroddsen, S. T. (2012). Evolution of fluid-like granular ejecta generated by sphere impact. *Journal of Fluid Mecha*nics, 704, 5-36.
- Mason, C. G., Gehrz, R. D., Jones, T. J., Woodward, C. E., Hanner, M. S. & Williams, D. M. (2001). Observations of unusually small dust grains in the coma of Comet Hale-Bopp C/1995 O1. *The Astrophysical Journal*, 549(1), 635.
- McKay, D. S., Heiken, G., Basu, A., Blanford, G., Simon, S., Reedy, R., French, B. M. & Papike, J. (1991). The lunar regolith. *Lunar source*book, 285-356.
- Meisner, T., Wurm, G., Teiser, J. & Schywek, M. (2013). Preplanetary scavengers: Growing tall in dust collisions. Astronomy & Astrophysics, 559, A123.
- Mekler, Y. & Podolak, M. (1994). Formation of amorphous ice in the protoplanetary nebula. *Planetary and Space Science*, 42(10), 865-870.
- Melosh, H. J. (2011). Planetary surface processes (Vol. 13). Cambridge University Press.
- Melosh, H. J. (1989). Impact cratering: A geologic process. Research Supported by NASA. New York, (Oxford Monographs on Geology and Geophysics), 11, 253.
- Meru, F., Geretshauser, R. J., Schäfer, C., Speith, R. & Kley, W. (2013). Growth and fragmentation of centimetre-sized dust aggregates: the dependence on aggregate size and porosity. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 435(3), 2371-2390.
- Min, M., Canovas, H., Mulders, G. D. & Keller, C. U. (2012). The effects of disk and dust structure on observed polarimetric images of protoplanetary disks. Astronomy & Astrophysics, 537, A75.
- Min, M. & Flynn, G. (2010). Dust composition in protoplanetary disks. *Pro*toplanetary Dust, 161.
- Morbidelli, A. (2010). A coherent and comprehensive model of the evolution of the outer Solar System. arXiv preprint arXiv:1010.6221.
- Mumma, M. J., Weissman, P. R. & Stern, S. A. (1993). Comets and the origin of the solar system-Reading the Rosetta Stone, En Protostars and Planets III.
- Musiolik, G. (2021). Growth of aggregates with liquid-like ice shells in protoplanetary discs. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 506(4), 5153-5159.

- Musiolik, G. & Wurm, G. (2019). Contacts of water ice in protoplanetary disks—laboratory experiments. *The Astrophysical Journal*, 873(1), 58.
- Nakamura, A. M., Setoh, M., Wada, K., Yamashita, Y. & Sangen, K. (2013). Impact and intrusion experiments on the deceleration of low-velocity impactors by small-body regolith. *Icarus*, 223(1), 222-233.
- Needham, J. (1974). Astronomy in ancient and medieval China. Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences, 276(1257), 67-82.
- Niimi, R., Kadono, T., Arakawa, M., Yasui, M., Dohi, K., Nakamura, A. M., Iida, Y. & Tsuchiyama, A. (2011). In situ observation of penetration process in silica aerogel: Deceleration mechanism of hard spherical projectiles. *Icarus*, 211(2), 986-992.
- Nozawa, T., Kozasa, T., Habe, A., Dwek, E., Umeda, H., Tominaga, N., Maeda, K. & Nomoto, K. (2007). Evolution of dust in primordial supernova remnants: Can dust grains formed in the ejecta survive and be injected into the early interstellar medium? *The Astrophysical Journal*, 666(2), 955.
- Okuzumi, S., Tanaka, H., Kobayashi, H. & Wada, K. (2012). Rapid coagulation of porous dust aggregates outside the snow line: A pathway to successful icy planetesimal formation. *The Astrophysical Journal*, 752(2), 106.
- Omidvar, M., Iskander, M. & Bless, S. (2014). Response of granular media to rapid penetration. International Journal of Impact Engineering, 66, 60-82.
- Ormel, C. W. & Cuzzi, J. N. (2007). Closed-form expressions for particle relative velocities induced by turbulence. Astronomy & Astrophysics, 466(2), 413-420.
- Ormel, C. W., Paszun, D., Dominik, C. & Tielens, A. G. G. M. (2009). Dust coagulation and fragmentation in molecular clouds-I. How collisions between dust aggregates alter the dust size distribution. Astronomy & Astrophysics, 502(3), 845-869.
- Osinski, G. R. & Pierazzo, E. (2013). Impact cratering: Processes and products. *Impact Cratering*, 1-20.
- Pacheco-Vázquez, F. & Ruiz-Suárez, J. C. (2011). Impact craters in granular media: grains against grains. *Physical Review Letters*, 107(21), 218001.
- Pan, D., Liu, L., Tribello, G. A., Slater, B., Michaelides, A. & Wang, E. (2008). Surface energy and surface proton order of ice I h. *Physical Review Letters*, 101(15), 155703.
- Paraskov, G. B., Wurm, G. & Krauss, O. (2007). Impacts into weak dust targets under microgravity and the formation of planetesimals. *Icarus*, 191(2), 779-789.

- Paszun, D. & Dominik, C. (2009). Collisional evolution of dust aggregates. From compaction to catastrophic destruction. Astronomy & Astrophysics, 507(2), 1023-1040.
- Pätzold, M., Andert, T., Hahn, M., Asmar, S. W., Barriot, J. P., Bird, M. K., Häusler, B., Peter, K., Tellmann, S., Grün, E., Weissman, P. R., Sierks, H., Jorda, L., Gaskell, R., F., P. & F., S. (2016). A homogeneous nucleus for comet 67P/Churyumov–Gerasimenko from its gravity field. *Nature*, 530(7588), 63-65.
- Penasa, L., Massironi, M., Naletto, G., Simioni, E., Ferrari, S., Pajola, M., Lucchetti, A., Preusker, F., Scholten, F., Jorda, L. Y col. (2017). A three-dimensional modelling of the layered structure of comet 67P/Churyumov-Gerasimenko. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 469(Suppl\_2), S741-S754.
- Petrenko, V. & Whitworth, R. W. (2002). Physics of Ice. Oxford Univ. Press.
- Planes, M. B., Millán, E. N., Urbassek, H. M. & Bringa, E. M. (2021). Collisions between micro-sized aggregates: role of porosity, mass ratio, and impact velocity. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 503(2), 1717-1733.
- Planes, M. B., Millán, E. N., Urbassek, H. M. & Bringa, E. M. (2017). Dustaggregate impact into granular matter: A systematic study of the influence of projectile velocity and size on crater formation and grain ejection. Astronomy & Astrophysics, 607, A19.
- Planes, M. B., Millán, E. N., Urbassek, H. M. & Bringa, E. M. (2020). Influence of porosity on high-velocity mass-asymmetric collisions. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 492(2), 1937-1946.
- Planes, M. B., Millán, E. N., Urbassek, H. M. & Bringa, E. M. (2019). Stopping of porous projectiles in granular targets. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society: Letters*, 487(1), L13-L17.
- Podolak, M., Flandes, A., Della Corte, V. & Krüger, H. (2016). A simple model for understanding the DIM dust measurement at comet 67P/Churyumov–Gerasimenko. *Planetary and Space Science*, 133, 85-89.
- Pollack, J. B., Hubickyj, O., Bodenheimer, P., Lissauer, J. J., Podolak, M. & Greenzweig, Y. (1996). Formation of the giant planets by concurrent accretion of solids and gas. *Icarus*, 124(1), 62-85.
- Popok, V. N., Barke, I., Campbell, E. E. B. & Meiwes-Broer, K. H. (2011). Cluster-surface interaction: From soft landing to implantation. Surface Science Reports, 66(10), 347-377.
- Poppe, T., Blum, J. & Henning, T. (2000). Analogous experiments on the stickiness of micron-sized preplanetary dust. *The Astrophysical Journal*, 533(1), 454.

- Pöschel, T. & Schwager, T. (2005). Computational granular dynamics: models and algorithms. Springer Science & Business Media.
- Pratontep, S., Preece, P., Xirouchaki, C., Palmer, R. E., Sanz-Navarro, C. F., Kenny, S. D. & Smith, R. (2003). Scaling relations for implantation of size-selected Au, Ag, and Si clusters into graphite. *Physical Review Letters*, 90(5), 055503.
- Prialnik, D. (1997). Modelling gas and dust release from Comet Hale–Bopp. Earth, Moon, and Planets, 77(3), 223-230.
- Rafikov, R. R. (2011). Constraint on the giant planet production by core accretion. *The Astrophysical Journal*, 727(2), 86.
- Richter, K. & Keller, H. U. (1995). On the stability of dust particle orbits around cometary nuclei. *Icarus*, 114(2), 355-371.
- Ringl, C., Bringa, E. M., Bertoldi, D. S. & Urbassek, H. M. (2012). Collisions of porous clusters: a granular-mechanics study of compaction and fragmentation. *The Astrophysical Journal*, 752(2), 151.
- Ringl, C., Bringa, E. M. & Urbassek, H. M. (2012). Impact on porous targets: Penetration, crater formation, target compaction, and ejection. *Physical Review E*, 86(6), 061313.
- Ringl, C., Gunkelmann, N., Bringa, E. M. & Urbassek, H. M. (2015). Compaction of highly porous granular matter by impacts on a hard wall. *Physical Review E*, 91(4), 042205.
- Ringl, C. & Urbassek, H. M. (2012). A LAMMPS implementation of granular mechanics: Inclusion of adhesive and microscopic friction forces. *Computer Physics Communications*, 183(4), 986-992.
- Rotundi, A., Sierks, H., Della Corte, V., Fulle, M., Gutierrez, P. J., Lara, L., Barbieri, C., Lamy, P. L., Rodrigo, R., Koschny, D. Y col. (2015). Dust measurements in the coma of comet 67P/Churyumov-Gerasimenko inbound to the Sun. *Science*, 347(6220).
- Rubin, M., Tenishev, V. M., Combi, M. R., Hansen, K. C., Gombosi, T. I., Altwegg, K. & Balsiger, H. (2011). Monte Carlo modeling of neutral gas and dust in the coma of Comet 1P/Halley. *Icarus*, 213(2), 655-677.
- Saija, R., Iatı, M. A., Borghese, F., Denti, P., Aiello, S. & Cecchi-Pestellini, C. (2001). Beyond Mie theory: the transition matrix approach in interstellar dust modeling. *The Astrophysical Journal*, 559(2), 993.
- San Sebastián, I. L., Dolff, A., Blum, J., Parisi, M. G. & Kothe, S. (2020). The tensile strength of compressed dust samples and the catastrophic disruption threshold of pre-planetary matter. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 497(2), 2418-2424.
- San Sebastián, I. L., Guilera, O. M. & Parisi, M. G. (2019). Planetesimal fragmentation and giant planet formation. Astronomy & Astrophysics, 625, A138.

- Schechner, S. & Genuth, S. S. (1999). Comets, popular culture, and the birth of modern cosmology. Princeton University Press.
- Scheeres, D. J., Britt, D., Carry, B. & Holsapple, K. A. (2015). Asteroid interiors and morphology. Asteroids IV, 745766.
- Schmidt, R. M. & Housen, K. R. (1987). Some recent advances in the scaling of impact and explosion cratering. *International Journal of Impact Engineering*, 5(1-4), 543-560.
- Schnee, S., Li, J., Goodman, A. A. & Sargent, A. I. (2008). Dust emission from the Perseus molecular cloud. *The Astrophysical Journal*, 684(2), 1228.
- Schräpler, R. & Blum, J. (2011). The physics of protoplanetesimal dust agglomerates. VI. Erosion of large aggregates as a source of micrometer-sized particles. *The Astrophysical Journal*, 734 (2), 108.
- Schräpler, R., Blum, J., Krijt, S. & Raabe, J. H. (2018). The physics of protoplanetary dust agglomerates. X. High-velocity collisions between small and large dust agglomerates as a growth barrier. *The Astrophysical Journal*, 853(1), 74.
- Schwartz, S. R., Michel, P., Richardson, D. C. & Yano, H. (2014). Low-speed impact simulations into regolith in support of asteroid sampling mechanism design I: Comparison with 1-g experiments. *Planetary and Space Science*, 103, 174-183.
- Scott, E. R. D. (2007). Chondrites and the protoplanetary disk. Annual Review of Earth and Planetary Sciences, 35, 577-620.
- Seah, M. P. (2013). Universal equation for argon gas cluster sputtering yields. The Journal of Physical Chemistry C, 117(24), 12622-12632.
- Seah, M. P., Havelund, R. & Gilmore, I. S. (2014). Universal equation for argon cluster size-dependence of secondary ion spectra in SIMS of organic materials. *The Journal of Physical Chemistry C*, 118(24), 12862-12872.
- Seizinger, A. & Kley, W. (2013). Bouncing behavior of microscopic dust aggregates. Astronomy & Astrophysics, 551, A65.
- Seizinger, A., Krijt, S. & Kley, W. (2013). Erosion of dust aggregates. Astronomy & Astrophysics, 560, A45.
- Sekanina, Z. & Schuster, H. E. (1978). Meteoroids from periodic comet d'Arrest. Astronomy & Astrophysics, 65, 29-35.
- Sen, A. K., Deshpande, M. R., Joshi, U. C., Kameswara Rao, N. & Raveendran, A. V. (1991). Polarimetry of Comet P/Halley-Properties of dust.
- Shäfer, J., Dippel, S. & Wolf, D. E. (1996). Force schemes in simulations of granular materials. *Journal de Physique I*, 6(1), 5-20.
- Shen, Y., Draine, B. T. & Johnson, E. T. (2009). Modeling porous dust grains with ballistic aggregates. II. Light scattering properties. *The Astrophy*sical Journal, 696(2), 2126.

- Shi, X., Hu, X., Mottola, S., Sierks, H., Keller, H. U., Rose, M., Güttler, C., Fulle, M., Fornasier, S., Agarwal, J. Y col. (2018). Coma morphology of comet 67P controlled by insolation over irregular nucleus. *Nature Astronomy*, 2(7), 562-567.
- Shulga, V. I., Vicanek, M. & Sigmund, P. (1989). Pronounced nonlinear behavior of atomic collision sequences induced by keV-energy heavy ions in solids and molecules. *Physical Review A*, 39(7), 3360.
- Sierks, H., Barbieri, C., Lamy, P. L., Rodrigo, R., Koschny, D., Rickman, H., Keller, H. U., Agarwal, J., A'hearn, M. F., Angrilli, F. Y col. (2015). On the nucleus structure and activity of comet 67P/Churyumov-Gerasimenko. *Science*, 347(6220), aaa1044.
- Sigmund, P. (1989). Interplay between computer simulation and transport theory in the analysis of ion-beam-induced collision processes in solids. Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films, 7(3), 585-597.
- Sigmund, P. (1981). Sputtering by particle bombardment I. Topics in Applied Physics, 47, 9.
- Sigmund, P. (2000). Stopping power: Wrong terminology. *Icru News*, 2000, 5-7.
- Silbert, L. E., Ertaş, D., Grest, G. S., Halsey, T. C. & Levine, D. (2002). Geometry of frictionless and frictional sphere packings. *Physical Review E*, 65(3), 031304.
- Simon, J. & De Bruyn, J. R. (2007). Shape of impact craters in granular media. *Physical Review E*, 76(4), 041306.
- Sirono, S. (1999). Effects by sintering on the energy dissipation efficiency in collisions of grain aggregates. Astronomy & Astrophysics, 347, 720-723.
- Sirono, S. (2011). The sintering region of icy dust aggregates in a protoplanetary nebula. The Astrophysical Journal, 735(2), 131.
- Sirono, S. & Ueno, H. (2017). Collisions between sintered icy aggregates. The Astrophysical Journal, 841(1), 36.
- Sobol, I. M. (1994). A primer for the Monte Carlo method. CRC press.
- Song, C., Wang, P. & Makse, H. A. (2008). A phase diagram for jammed matter. *Nature*, 453(7195), 629-632.
- Speyerer, E. J., Povilaitis, R. Z., Robinson, M. S., Thomas, P. C. & Wagner, R. V. (2016). Quantifying crater production and regolith overturn on the Moon with temporal imaging. *Nature*, 538(7624), 215-218.
- Steinpilz, T., Joeris, K., Jungmann, F., Wolf, D., Brendel, L., Teiser, J., Shinbrot, T. & Wurm, G. (2020). Electrical charging overcomes the bouncing barrier in planet formation. *Nature Physics*, 16(2), 225-229.
- Stukowski, A. (2014). Computational analysis methods in atomistic modeling of crystals. *Jom*, 66(3), 399-407.

- Stukowski, A. (2009). Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO-the Open Visualization Tool. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 18(1), 015012.
- Suyama, T., Wada, K. & Tanaka, H. (2008). Numerical simulation of density evolution of dust aggregates in protoplanetary disks. I. Head-on collisions. *The Astrophysical Journal*, 684(2), 1310.
- Teiser, J., Engelhardt, I. & Wurm, G. (2011). Porosities of protoplanetary dust agglomerates from collision experiments. *The Astrophysical Journal*, 742(1), 5.
- Teiser, J. & Wurm, G. (2009). High-velocity dust collisions: forming planetesimals in a fragmentation cascade with final accretion. *Monthly Notices* of the Royal Astronomical Society, 393(4), 1584-1594.
- Tenishev, V., Combi, M. & Davidsson, B. (2008). A global kinetic model for cometary comae: The evolution of the coma of the Rosetta target comet Churyumov-Gerasimenko throughout the mission. *The Astrophysical Journal*, 685(1), 659.
- Tenishev, V., Combi, M. R. & Rubin, M. (2011). Numerical simulation of dust in a cometary coma: Application to Comet 67P/Churyumov-Gerasimenko. *The Astrophysical Journal*, 732(2), 104.
- Thompson, M. W. (1968). II. The energy spectrum of ejected atoms during the high energy sputtering of gold. *Philosophical Magazine*, 18(152), 377-414.
- Torquato, S., Truskett, T. M. & Debenedetti, P. G. (2000). Is random close packing of spheres well defined? *Physical Review Letters*, 84(10), 2064.
- Tsiganis, K., Gomes, R., Morbidelli, A. & Levison, H. F. (2005). Origin of the orbital architecture of the giant planets of the Solar System. *Nature*, 435(7041), 459-461.
- Tsimring, L. S. & Volfson, D. (2005). Modeling of impact cratering in granular media. Powders and Grains, 2, 1215-1223.
- Tuzzolino, A. J., Economou, T. E., Clark, B. C., Tsou, P., Brownlee, D. E., Green, S. F., McDonnell, J., McBride, N. & Colwell, M. (2004). Dust measurements in the coma of comet 81P/Wild 2 by the Dust Flux Monitor Instrument. *Science*, 304 (5678), 1776-1780.
- Ueda, T., Matsushima, T. & Yamada, Y. (2011). Effect of particle size ratio and volume fraction on shear strength of binary granular mixture. *Granular Matter*, 13(6), 731-742.
- Uehara, J. S., Ambroso, M. A., Ojha, R. P. & Durian, D. J. (2003). Lowspeed impact craters in loose granular media. *Physical Review Letters*, 90(19), 194301.

- Umstätter, P., Gunkelmann, N., Dullemond, C. P. & Urbassek, H. M. (2019). Shedding of dust rims in chondrule collisions in the protoplanetary disc. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 483(4), 4938-4948.
- Umstätter, P. & Urbassek, H. M. (2020). Fragmentation and energy dissipation in collisions of polydisperse granular clusters. Astronomy & Astrophysics, 633, A24.
- Urbassek, H. M., Mayer, G., Gades, H. & Vicanek, M. (1995). Effect of bulk binding forces on energetic-ion-induced collision cascades: A combined simulational and analytical approach. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 103(3), 275-283.
- Valerio-Flores, O. L., Murr, L. E., Hernandez, V. S. & Quinones, S. A. (2004). Observations and simulations of the low velocity-to-hypervelocity impact crater transition for a range of penetrator densities into thick aluminum targets. *Journal of Materials Science*, 39(20), 6271-6289.
- van Boekel, R. J. H. M., Waters, L. B. F. M., Dominik, C., Bouwman, J., de Koter, A., Dullemond, C. P. & Paresce, F. (2003). Grain growth in the inner regions of Herbig Ae/Be star disks. Astronomy & Astrophysics, 400(3), L21-L24.
- van Breemen, J. M., Min, M., Chiar, J. E., Waters, L. B. F. M., Kemper, F., Boogert, A. C. A., Cami, J., Decin, L., Knez, C., Sloan, G. C. Y col. (2011). The 9.7 and 18 μm silicate absorption profiles towards diffuse and molecular cloud lines-of-sight. Astronomy & Astrophysics, 526, A152.
- Venturini, J., Ronco, M. P. & Guilera, O. M. (2020). Setting the stage: planet formation and volatile delivery. Space Science Reviews, 216(5), 1-32.
- Vigren, E., Galand, M., Lavvas, P., Eriksson, A. I. & Wahlund, J. E. (2015). On the possibility of significant electron depletion due to nanograin charging in the coma of comet 67p/Churyumov-Gerasimenko near perihelion. *The Astrophysical Journal*, 798(2), 130.
- Vincent, J.-B., Birch, S., Hayes, A., Zacny, K., Oklay, N. & Cambianica, P. (2019). Bouncing boulders on comet 67P.
- Vincent, J.-B., Bodewits, D., Besse, S., Sierks, H., Barbieri, C., Lamy, P., Rodrigo, R., Koschny, D., Rickman, H., Keller, H. U. Y col. (2015). Large heterogeneities in comet 67P as revealed by active pits from sinkhole collapse. *Nature*, 523(7558), 63-66.
- Vincent, J.-B., Farnham, T., Kührt, E., Skorov, Y., Marschall, R., Oklay, N., El-Maarry, M. R. & Keller, H. U. (2019). Local manifestations of cometary activity. *Space Science Reviews*, 215(4), 1-27.
- Vincent, J.-B., Hviid, S. F., Mottola, S., Kührt, E., Preusker, F., Scholten, F., Keller, H. U., Oklay, N., de Niem, D., Davidsson, B. Y col. (2017).

Constraints on cometary surface evolution derived from a statistical analysis of 67P's topography. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 469(Suppl\_2), S329-S338.

- Voshchinnikov, N. V., Il'in, V. B. & Henning, T. (2005). Modelling the optical properties of composite and porous interstellar grains. Astronomy & Astrophysics, 429(2), 371-381.
- Voshchinnikov, N. V., Videen, G. & Henning, T. (2007). Effective medium theories for irregular fluffy structures: aggregation of small particles. *Applied Optics*, 46(19), 4065-4072.
- Wada, K., Tanaka, H., Okuzumi, S., Kobayashi, H., Suyama, T., Kimura, H. & Yamamoto, T. (2013). Growth efficiency of dust aggregates through collisions with high mass ratios. Astronomy & Astrophysics, 559, A62.
- Wada, K., Tanaka, H., Suyama, T., Kimura, H. & Yamamoto, T. (2009). Collisional growth conditions for dust aggregates. *The Astrophysical Journal*, 702(2), 1490.
- Wada, K., Tanaka, H., Suyama, T., Kimura, H. & Yamamoto, T. (2007). Numerical simulation of dust aggregate collisions. I. Compression and disruption of two-dimensional aggregates. *The Astrophysical Journal*, 661(1), 320.
- Wada, K., Tanaka, H., Suyama, T., Kimura, H. & Yamamoto, T. (2008). Numerical simulation of dust aggregate collisions. II. Compression and disruption of three-dimensional aggregates in head-on collisions. *The Astrophysical Journal*, 677(2), 1296.
- Wada, K., Tanaka, H., Suyama, T., Kimura, H. & Yamamoto, T. (2011). The rebound condition of dust aggregates revealed by numerical simulation of their collisions. *The Astrophysical Journal*, 737(1), 36.
- Walsh, A. M., Holloway, K. E., Habdas, P. & De Bruyn, J. R. (2003). Morphology and scaling of impact craters in granular media. *Physical Review Letters*, 91(10), 104301.
- Wang, H., Bell, R. C., Iedema, M. J., Tsekouras, A. A. & Cowin, J. P. (2005). Sticky ice grains aid planet formation: Unusual properties of cryogenic water ice. *The Astrophysical Journal*, 620(2), 1027.
- Weidling, R., Güttler, C., Blum, J. & Brauer, F. (2009). The physics of protoplanetesimal dust agglomerates. III. Compaction in multiple collisions. *The Astrophysical Journal*, 696(2), 2036.
- Weissman, P. R. (1986). Are cometary nuclei primordial rubble piles? *Nature*, 320(6059), 242-244.
- Weissman, P. R. & Lowry, S. C. (2008). Structure and density of cometary nuclei. *Meteoritics & Planetary Science*, 43(6), 1033-1047.

- Westphal, A. J., Fakra, S. C., Gainsforth, Z., Marcus, M. A., Ogliore, R. C.
  & Butterworth, A. L. (2009). Mixing fraction of inner solar system material in Comet 81P/Wild2. *The Astrophysical Journal*, 694(1), 18.
- Whipple, F. L. (1950). A comet model. I. The acceleration of Comet Encke. The Astrophysical Journal, 111, 375-394.
- Whizin, A. D., Blum, J. & Colwell, J. E. (2017). The physics of protoplanetesimal dust agglomerates. VIII. Microgravity collisions between porous SiO2 aggregates and loosely bound agglomerates. *The Astrophysical Journal*, 836(1), 94.
- Williams, D. M., Mason, C. G., Gehrz, R. D., Jones, T. J., Woodward, C. E., Harker, D. E., Hanner, M. S., Wooden, D. H., Witteborn, F. C. & Butner, H. M. (1997). Measurement of submicron grains in the coma of comet Hale-Bopp C/1995 O1 during 1997 February 15-20 UT. The Astrophysical Journal Letters, 489(1), L91.
- Windmark, F., Birnstiel, T., Ormel, C. W. & Dullemond, C. P. (2012). Breaking through: The effects of a velocity distribution on barriers to dust growth. Astronomy & Astrophysics, 544, L16.
- Witt, A. N., Smith, R. K. & Dwek, E. (2001). X-ray halos and large grains in the diffuse interstellar medium. The Astrophysical Journal Letters, 550(2), L201.
- Wooden, D. H., Harker, D. E. & Brearley, A. J. (2005). Thermal processing and radial mixing of dust: Evidence from comets and primitive chondrites, En Chondrites and the Protoplanetary Disk.
- Wurm, G., Paraskov, G. & Krauss, O. (2005). Growth of planetesimals by impacts at 25 m/s. *Icarus*, 178(1), 253-263.
- Yamamoto, S. (2002). Measurement of impact ejecta from regolith targets in oblique impacts. *Icarus*, 158(1), 87-97.
- Yoshimatsu, R., Araújo, N. A. M., Wurm, G., Herrmann, H. J. & Shinbrot, T. (2017). Self-charging of identical grains in the absence of an external field. *Scientific Reports*, 7(1), 1-11.
- Zolensky, M., Nakamura-Messenger, K., Rietmeijer, F., Leroux, H., Mikouchi, T., Ohsumi, K., Simon, S., Grossman, L., Stephan, T., Weisberg, M. Y col. (2008). Comparing Wild 2 particles to chondrites and IDPs. *Meteoritics & Planetary Science*, 43(1-2), 261-272.
- Zolensky, M. E., Zega, T. J., Yano, H., Wirick, S., Westphal, A. J., Weisberg, M. K., Weber, I., Warren, J. L., Velbel, M. A., Tsuchiyama, A. Y col. (2006). Mineralogy and petrology of comet 81P/Wild 2 nucleus samples. *Science*, 314 (5806), 1735-1739.
- Zubko, E., Muinonen, K., Shkuratov, Y. & Videen, G. (2013). Characteristics of cometary dust in the innermost coma derived from polarimetry by

Giotto. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 430(2), 1118-1124.

## Apéndice

En este apéndice se adjuntan las siguientes publicaciones de los trabajos científicos que forman parte de esta Tesis doctoral:

- "Dust-aggregate impact into granular matter: A systematic study of the influence of projectile velocity and size on crater formation and grain ejection" por M. B. Planes, E. N. Millán, H. M. Urbassek y E. M. Bringa, Astronomy and Astrophysics 607, A19, del año 2017 que corresponde a resultados mostrados en el Capítulo 3.
- "Stopping of porous projectiles in granular targets" por M. B. Planes, E. N. Millán, H. M. Urbassek y E. M. Bringa, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society: Letters 487, 13 del año 2019 que corresponde a resultados mostrados en el Capítulo 3.
- 3. "Influence of porosity on high-velocity mass-asymmetric collisions" por M. B. Planes, E. N. Millán, H. M. Urbassek y E. M. Bringa, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 402, 1937 del año 2020 que corresponde a resultados mostrados en el Capítulo 4.
- 4. "Collisions between micro-sized aggregates: Role of porosity, mass ratio, and impact velocity" por M. B. Planes, E. N. Millán, H. M. Urbassek y E. M. Bringa, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 503, 1717 del año 2021 que corresponde a resultados mostrados en el Capítulo 4.

#### Dust-aggregate impact into granular matter: A systematic study of the influence of projectile velocity and size on crater formation and grain ejection

María Belén Planes<sup>1</sup>, Emmanuel N. Millán<sup>1</sup>, Herbert M. Urbassek<sup>2</sup>, and Eduardo M. Bringa<sup>1</sup>

<sup>1</sup> CONICET and Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Cuyo, 5500 Mendoza, Argentina

<sup>2</sup> Physics Department and Research Center OPTIMAS, University Kaiserslautern, Erwin-Schrödinger-Straße, 67663 Kaiserslautern, Germany

e-mail: urbassek@uni-kl.de

Received 7 April 2017 / Accepted 4 June 2017

#### ABSTRACT

Context. Dust impact into granular materials leads to crater formation and material ejection.

*Aims.* The impact of dust aggregates, composed of a number  $N_p$  of grains, into a granular bed consisting of the same grains is studied as a function of impact velocity v and projectile size  $N_p$ . No gravitational effects are included.

*Methods.* Granular-mechanics simulations are used to study the outcome of dust-aggregate impacts. The granular bed and the aggregates are composed of silica grains and have filling factor 0.36.

*Results.* Both the crater volume and the ejection yield increase sublinearly with total impact energy. No crater rims are formed. Crater shapes change from hemispheric to elongated when increasing either projectile size or velocity. The crater walls are compacted by the impact within a zone of a size comparable to the crater radius. Ejecta are produced at the edges of the impact; only a small fraction of the ejecta stem from the projectile. The energy distribution of the ejecta follows at high energies a  $1/E^2$  decay reminiscent of sputtering from atomic targets. The maximum of the distribution is shifted to higher energies for larger projectiles; this is caused by the increasing depth from which ejected grains originate.

*Conclusions.* Due to the dissipative nature of intergranular collisions and the porosity of the target, crater morphology and ejecta yield deviate characteristically from impacts into atomic materials.

**Key words.** planets and satellites: formation – protoplanetary disks – methods: numerical

#### 1. Introduction

Impacts into granular beds may lead to cratering of the surface and eject material. Such impacts are of considerable relevance in an astrophysical context. The surfaces of regolith-covered moons and asteroids are constantly subjected to impacts by dust particles and micro-meteorites, with consequences on the composition and mechanical properties of these surfaces (Schwartz et al. 2014; Speyerer et al. 2016).

This process can also be considered as the extreme case of a very asymmetrical collision in which a small dust aggregate collides with a big one. Such collisions are typical in protoplanetary disks and may occur at high relative velocities, since the large aggregate may already have decoupled from the motion of the gas corotating with the disk (Birnstiel et al. 2016). Impact size and speed then decide on the growth (or erosion) of the collision partners (Blum 2010; Birnstiel et al. 2016).

Collisions into granular beds have been studied experimentally and theoretically by including the relevant stopping forces, the constitutive laws governing the behavior of the granular target and gravity (Uehara et al. 2003; Walsh et al. 2003; Lohse et al. 2004; Pica Ciamarra et al. 2004; Hou et al. 2005; Tsimring & Volfson 2005; Katsuragi & Durian 2007; Katsuragi 2016). Such studies allowed for the attainment of general scaling laws of the cratering process. These investigations are complemented by studies of cratering in (porous) rocks (Melosh 1989, 2011; Güldemeister et al. 2015) and asteroids (Jutzi et al. 2015).

On a microscopic scale, granular-mechanics simulations are able to capture the behavior of individual grains during the impact. Such simulations have been successfully applied to understanding the collision behavior of dust aggregates composed of thousands of grains and to determine the erosion and growth characteristics (Wada et al. 2007; Paszun & Dominik 2009; Wada et al. 2011; Ringl et al. 2012a; Gunkelmann et al. 2016a; Li et al. 2016). This technique was also applied to the process of crater formation in a granular bed (Ringl et al. 2012b; Hurley et al. 2015; Li et al. 2015), albeit only with monomeric, that is, indestructible, projectiles.

A number of simulation studies and experiments were performed on the impact of atomic clusters on atomic targets – for example, metals, but also organic targets – with the aim of exploring the dependence of the crater sizes and sputter yields on the projectile characteristics (Anders et al. 2004; Samela & Nordlund 2008; Anders et al. 2009; Anders & Urbassek 2013; Seah 2013; Seah et al. 2014). In these studies it was found that – above a threshold regime – the main projectile characteristic affecting crater volume and ejection yield is the total projectile energy. This surprisingly simple behavior is in contrast to available knowledge of crater formation in granular targets (Katsuragi 2016).
In the present work, we wish to investigate the cratering process induced by composite projectiles in granular beds for the special case where the projectile is composed of the same grains as the target material. It is assumed that gravity plays no role during and after the impact; in other words, the gravitational interaction among the grains is negligible and the impact occurs in space far from the gravitational influence of other bodies. The granular-mechanics algorithm used is outlined in Sect. 2. By systematically varying projectile size and velocity, we study the crater volumes obtained in Sect. 3, and the ejection process in Sect. 4.

#### 2. Method

#### 2.1. Setup of the system

Both the target and the projectile are composed of silica grains. All grains are spherical with a radius of  $R_{\text{grain}} = 0.76 \,\mu\text{m}$ . Our targets are cubic boxes with a side length of 70.7  $\mu$ m. They contain about 70 000 grains, and have a filling factor of 36%. They were constructed using the method of Ringl et al. (2012b) by filling grains homogeneously into a box until the required filling factor is reached. The projectile contains a number of  $N_p$  grains, varying between 1 and 500. This projectile is cut out of the target with approximately spherical shape, and has hence the same porosity as the target.

Initially the projectile is set at a position above the target such that there is no interaction with it. Then the simulation is started by giving each grain in the projectile the same velocity v, which we vary between 5 and 200 m s<sup>-1</sup>. The top and bottom surfaces of the target are free; at the sides we employ periodic boundary conditions. The time step of the simulation amounts to 50 ps (Ringl & Urbassek 2012); we perform 400 000 time steps in total for each simulation, amounting to 20  $\mu$ s.

#### 2.2. Granular mechanics algorithm

The details of our simulation method have been published by Ringl & Urbassek (2012). We repeat here the essential details for the convenience of the reader.

The overlap of two grains at distance d is denoted as  $\delta = 2R_{\text{grain}} - d$ . The normal force between two grains consists of a repulsive and an attractive contribution. The repulsive part (Pöschel & Schwager 2005),

$$f_{\rm rep} = \frac{4}{3} M \sqrt{R_{\rm red}\delta} (\delta + A v_n), \tag{1}$$

is described by the Hertzian  $\delta^{3/2}$  law, based on elastic theory, and a dissipative part, describing a viscoelastic contact (Brilliantov et al. 1996). Both interactions vanish for  $\delta < 0$ . Here  $R_{\text{red}} = R_{\text{grain}}/2$  is the reduced radius,  $M = Y/[2(1 - v^2)]$  is the reduced modulus, Y Young's modulus, v Poisson's ratio,  $v_n$  is the velocity component in normal direction, and A is an empirical factor modeling dissipation. The attractive part of the normal force is taken to be proportional to the specific surface energy  $\gamma$  (Derjaguin et al. 1975; Maugis 2000; Blum 2006) as

$$f_{\rm adh} = 8\pi R_{\rm red}\gamma.$$
 (2)

The tangential forces between two grains model the relevant friction forces acting between the two grains. Gliding friction,

$$f_{\text{slide}} = \frac{1}{2}G\pi a^2,\tag{3}$$

depends on the shear modulus  $G = Y/[2(1 + \nu)]$  and the radius  $a = \sqrt{\delta R_{red}}$  of the contact area (Burnham & Kulik 1999). Rolling motion is decelerated by a torque (Dominik & Tielens 1997),

$$D_r = 2f_{\text{adh}}\xi_{\text{yield}}.\tag{4}$$

Here,  $\xi_{yield}$  is the distance that two grains can roll over each other without breaking their atomic contacts. Finally, torsional motion is also decelerated by a torque, whose strength is given by Dominik & Tielens (1997) as

$$D_t = \frac{1}{3}G\frac{a^3}{\pi}.$$
(5)

For more details on the calculation of the forces, we refer to Ringl & Urbassek (2012).

The algorithm is implemented in the open-source code LAMMPS (Plimpton 1995). Data analysis and rendering of granular snapshots has been performed using OVITO (Stukowski 2010a).

In our simulations we employ the material parameters for silica; the Young's modulus is Y = 54 GPa, the Poisson ratio v = 0.17, and the specific surface energy  $\gamma = 25$  mJ/m<sup>2</sup> (Chokshi et al. 1993). The mass density is taken as  $\rho = 2 \times 10^3$  kg m<sup>-3</sup> (Blum & Schräpler 2004), such that the mass of a grain amounts to  $m = 3.68 \times 10^{-15}$  kg. The dissipation constant A = 0.5 ns is obtained from a fit to the experimentally measured (Poppe et al. 2000) coefficient of restitution of silica grains (Ringl & Urbassek 2012). The parameter describing rolling friction,  $\xi_{yield}$ , is taken to be 1 Å (Dominik & Tielens 1997).

Two energy scales may be used to characterize the strength of intergranular contacts. One of these parameters is the energy needed to break the contact between two spheres; it is given by (Ringl & Urbassek 2012; Ringl et al. 2012a,b)

$$E_{\text{break}} = f_{\text{adh}} \delta_{\text{equ}}.$$
 (6)

Here,  $\delta_{equ}$  is the equilibrium distance between two grains in contact and amounts to 3.0 Å for our system. Hence  $E_{break} = 2.66 \times 10^{-17}$  J. Another parameter is the so-called rolling energy, that is, the energy needed to roll two spheres through 90° over each other; it amounts to  $E_{roll} = 1.1 \times 10^{-16}$  J (Ringl et al. 2012a).

We considered two sources of systematic calculation errors. (i) For several projectiles, for example,  $N_p = 50$  and  $v = 150 \text{ m s}^{-1}$ , we continued our trajectories up to  $10^6$  time steps in order to verify whether or not the crater sobtained are already final. We observe changes in the crater extensions of less than 8%, and in the volumes of less than 2%; for the ejection yields, there errors are around 5%. (ii) In addition, we created several independent impact trajectories by shifting the projectile impact position slightly on the surface. The changes in the crater extensions are in the range of 3%, in the volumes 4%, and in the ejection yields 15%.

#### 3. Craters

#### 3.1. Analysis of an exemplary case

In this section we analyze a specific case,  $N_p = 50$  and  $v = 150 \text{ m s}^{-1}$ , in detail. Figure 1 shows the time evolution of the crater formation process. During this process, the projectile is quickly destroyed, Fig. 1b, while the crater formation takes longer, and is only finished at around 5  $\mu$ s, Fig. 1d; thereafter only small changes in the crater volume occur, Fig. 1e. During

A19, page 2 of 11



Fig. 1. Time series showing the formation of a crater during impact of a  $N_p = 50$  projectile at velocity 150 m s<sup>-1</sup> (*a*) before impact and at times of 0.5 (*b*), 2 (*c*), 5 (*d*) and 10  $\mu$ s (*e*) after impact. Slices shown are 10  $\mu$ m thick. Grains are colored to differentiate whether they originate from the projectile or from the target.

the energetic phase of the crater formation, abundant grain ejection is observed, Fig. 1c; the ejection yield amounts to 291 grains in the present case. Most ejection occurs from the crater side walls and around the crater rim. Most of the ejecta are target grains; only occasionally a projectile grain is ejected.

The process visualized here looks similar to that studied using continuum-mechanics models for crater formation in rocks (Melosh 1989, 2011; Osinski & Pierazzo 2013). In our granular material, it is helpful to consider the impact-induced changes on the number of contacts that each grain experiences; this notion is equivalent to the coordination number used in solid atomic materials. The number of contacts of a grain is calculated by determining the number of adjacent grains with a distance  $\leq 2R_{\text{grain}}$ , since for larger distances the intergranular interaction is zero, cf. Sect. 2.2.

Before impact the sample shows an average coordination of 2.75; as Fig. 2a shows, fluctuations occur and we find some grains exhibiting four or even five contacts. After impact, the number of contacts increases in a region radially surrounding the crater that is forming. First, at 2  $\mu$ s after impact, Fig. 2b, this zone is still relatively narrow, but it expands further until the final crater shape has established, Fig. 2c. These figures demonstrate how the impact leads to a localized compaction of the target, showing up as a more highly connected granular network.

We quantify the compaction occurring in the material by plotting in Fig. 3a the density increase in a column located below the impact point. The data have been normalized to the initial target density. At 2  $\mu$ s, the crater has already reached a depth of 20  $\mu$ m; in the crater wall below the impact point a considerable compaction amounting to around 20% has been reached which extends around 10–15  $\mu$ m in thickness. Below this compaction the material shows no variation with respect to the original material.

The situation has changed again at 20  $\mu$ s after the impact, where the final crater shape has stabilized (Fig. 1e). The density increase in the crater wall has relaxed to values of around only 10%. However the affected zone now extends deep into the material, down to depths of 60  $\mu$ m below the original surface. This demonstrates that after the initial crater excavation phase, the final settling of the crater shape is accompanied by considerable relaxation processes in the wider environment of the crater.

The deformation of the material after impact can be further discussed with the help of the displacement field shown in Fig. 4. Here vectors connect the initial and final positions of each grain in the target. Around the projectile impact point, a radial motion of the material is observed, which is reminiscent of the simple "Z model" of crater formation based on a one-dimensional radial expansion (Melosh 1989). Farther away from the impact point



Fig. 2. Side view of the target before (*a*) and at 2  $\mu$ s (*b*) and at 10  $\mu$ s (*c*) after impact of a  $N_p = 50$  projectile at velocity 150 m s<sup>-1</sup>. Slices shown are 10  $\mu$ m thick. Grains are colored according to coordination number.



**Fig. 3.** *a*) Relative density, normalized to the average target density, below the impact crater formed by the impact of a  $N_p = 50$  projectile at velocity 150 m s<sup>-1</sup>, Fig. 1e. Data are taken in a prismatic column with a square cross-section of 10  $\mu$ m edge length below the center of the impact point. Depth 0 denotes the position of the original surface. *b*) Relative density for the same event evaluated in spherical shells of 5  $\mu$ m thickness around the projectile impact point.



**Fig. 4.** Displacement vector field created by the impact of a  $N_p = 50$  projectile at velocity 150 m s<sup>-1</sup>. The vectors show the grain displacement from their original to their final positions. Final positions are marked by blue dots. Slice shown is 10  $\mu$ m thick.

- outside the final crater formed – an exclusively downward motion of the target is observed. This appears to be particular for the porous granular material studied here. In simulations of projectiles impacting atomic solids, a collective motion is also observed; however, it is directed downward only below the impactor, while it is directed upwards around the crater walls leading to pronounced crater rims being formed (Colla et al. 2000). This reversal of motion is natural for high-density solids and also occurs in continuum studies (Melosh 1989), but is prohibited in the porous matter of our simulations, and no crater rims are observed. However, there is grain re-deposition at the surface, leading to increased surface roughness.

The approximate radial symmetry found here can be used to plot the radial dependence of the compaction after impact. To this end we plot in Fig. 3b the density as evaluated in spherical shells of 5  $\mu$ m thickness around the projectile impact point. Due to the larger amount of material contained in these shells the fluctuations are considerably reduced. We see a strong compaction immediately around the temporary crater wall at 2  $\mu$ s after impact reaching values of 25% above the initial density. This density maximum travels outward with a speed of roughly 1–1.25 m s<sup>-1</sup>, while it loses intensity. The compaction wave generated by the impact is thus strongly subsonic and does not have the characteristics of a shock wave; general features of such compaction waves have been recently studied for a onedimensional scenario by Gunkelmann et al. (2016b).



Fig. 5. Dependence of the crater volume, V, as a function of a) total impact energy,  $E_{tot}$ , b) projectile velocity, v, and c) projectile size,  $N_p$ . Lines indicate power-law relations to guide the eye, with exponents of a) 1/2 and 2/3, b) 1, and c) 2/3 and 1.

#### 3.2. Crater volume

We calculate the crater volume numerically using a built-in routine in OVITO (Stukowski 2010b); this approximates the crater surface by a polygonal mesh and calculates the crater volume from that (Edelsbrunner & Mücke 1994; Stukowski 2014). The essential parameter of the method is the radius of the probe sphere used to probe the surface, which defines the length scale of the approximation process; it has been set to 3  $\mu$ m.

The total crater volume V is displayed in Fig. 5a as a function of the total impact energy  $E_{tot}$  of the projectile. We observe a clear correlation, which we can render in the form of a power law:

$$V \propto E_{\text{tot}}^{\nu}$$
 (7)

Here  $\nu < 1$ ; we observe  $\nu = 1/2$  for small projectiles,  $N_p < 100$ , and  $\nu = 2/3$  for larger projectiles, and  $N_p \ge 100$ . It is noteworthy that our simulations exclude the simple law  $V \propto E_{tot}$ , that is,  $\nu = 1$ . This simple law was found for cluster impact into atomic solids (Anders et al. 2012a), such as Cu or frozen Ar. We surmise that the highly dissipative nature of collisions in granular targets prohibits a constant fraction of the impact energy being used for crater formation; this results in the sublinear dependence of the crater volume on impact energy found here.

In Figs. 5b and c we plot the dependence of the crater volume on projectile velocity and size, respectively. In both cases, power-law dependencies are observed. The dependence on v shows the same steepening of the exponent as was observed above for  $\mu$ . Quantitatively, if we set

$$V \propto v^{\alpha} N_{\rm p}^{\beta},$$
 (8)

 $\alpha$  increases from 1 to 4/3 with increasing projectile size. The analogous exponent for the  $N_p$  dependence, however, does not change with velocity and remains equal to  $\beta = 2/3$ . However, for larger projectiles and low velocities,  $\beta$  is closer to one, indicating increased efficiency in the cratering process.

Traditionally the dependence of the crater volume on impactor and target properties has been discussed using scaling laws (Schmidt & Housen 1987; Melosh 1989; Holsapple 1993). Impacts are attributed to the so-called strength and gravity regimes according to whether the ratio between gravitational stress –  $\rho gR$ , where g is the gravitational acceleration – and the yield strength S of the target is smaller or larger than 1. Our simulations cover the strength regime, since we consider gravity to play no role in the impact; actually all impacts of small impactors tend to belong to the strength regime. In this regime, scaling considerations predict for equal properties of projectile and target materials a dependence such as (Katsuragi 2016, Eq. (5.58))

$$V \propto \frac{mN_{\rm p}}{\rho} \left(\frac{\rho v^2}{S}\right)^{\mu} \propto N_{\rm p} v^{2\mu},\tag{9}$$

where  $mN_p$  is the mass of the impactor. Values of  $\mu = 1$  (1/2) correspond to the so-called energy (momentum) scaling. Impact experiments in dry sand obtained  $\mu = 0.62$  (Schmidt & Housen 1987; Holsapple 1993; Katsuragi 2016). This value is close to that predicted for the momentum-scaling regime; this fact has been rationalized by considering that energy dissipation in granular materials prevents energy conservation, while momentum conservation still holds.

Also, our results, Eq. (8), are closer to the momentum scaling regime, since our  $\alpha = 2\mu$  assumes values of 1 to 4/3. An exponent  $\beta = 1$  of the  $N_p$  dependence, which would correspond to the momentum scaling of Eq. (9), however, shows up only for large and slow projectiles (Fig. 5c). We conclude that our simulation results for dust-aggregate impact cratering do not completely follow the traditional strength-dominated scaling, but require more flexibility.

#### 3.3. Crater morphology

The crater shape – as quantified by its depth, d, and its radius, r, measured at the crater top opening – show a strong dependence on the projectile speed, v, and size,  $N_p$ . We determine the depth in the final snapshot as the distance of the deepest grain in the crater wall to the original surface. In addition, we determine the diameter of the crater top opening in two orthogonal planes running perpendicular to the surface, and determine r from their average. We demonstrate the v and  $N_p$  dependencies for the crater depth, d, in Figs. 6a and b. The findings can be approximated by power laws of the form

$$d \propto v^{\alpha'} N_{\rm p}^{\beta'},\tag{10}$$

where the exponent  $\alpha'$  slowly increases from 1/3 for  $N_p < 100$  to 4/9 for  $N_p \ge 100$ , and  $\beta'$  remains constant at a value of  $\beta' = 1/3$ . These values correspond quite closely to the momentum-scaling regime seen in Eq. (9), above. We note, however, that the scaling does not fulfill  $V \propto d^3$ ; while  $\alpha' = 3\alpha$  for the velocity dependence,  $\beta' \neq 3\beta$ . The reason for this lies in the fact that the



Fig. 6. Dependence of the crater depth on the projectile velocity (a) and size (b). Panel c displays the evolution of the crater aspect ratio, d/r, with projectile velocity. Lines indicate power-law relations to guide the eye, with exponents of 1/3 in panels a and b.



**Fig. 7.** Final state of the crater formed by the impact of a  $N_p = 10$  projectile at velocity 25 m s<sup>-1</sup>, at 20  $\mu$ s after impact. Grains are colored according to coordination number. The slice shown is 10  $\mu$ m thick.

size of the projectile,  $N_p$ , influences the crater radius differently from the crater depth.

Indeed, the crater radius, *r*, shows a slightly different dependence. This is best shown by plotting the crater aspect ratio, d/r (Fig. 6c). While craters formed with small projectiles and/or at low velocities are hemispheric or even shallow (d < r), there is a strong tendency to form deep craters (d > r) for both large and fast projectiles. In our simulations, the largest aspect ratio was around 1.6. In fact the aspect ratio of the exemplary case studied in Sect. 3.1 was d/r = 1.62. We note that for small impact velocities, we studied the crater aspect ratio also for larger impactors ( $N_p = 100-500$ ); the aspect ratio was found not to change further for such large impactor sizes and remained fixed at values of around 0.8 ( $v = 10 \text{ m s}^{-1}$ ) and 1.6 ( $v = 25 \text{ m s}^{-1}$ ).

Figure 7 gives an example of a hemispheric crater formed for  $N_p = 10$ , v = 25 m s<sup>-1</sup>. Here again a compaction zone surrounding the crater walls is established with a width that is of the order of the crater radius, or even slightly larger.

Experimental studies of crater formation in granular beds are usually performed using balls – large indestructible spherical grains – as impactors. The results of such studies are summarized by Katsuragi (2016). An early study (Walsh et al. 2003) reports an  $E_{\text{tot}}^{0.25}$  dependence for both crater depth and radius, while another study (Uehara et al. 2003) finds different scalings for radius and depth,  $r \propto E_{\text{tot}}^{0.25}$  and  $d \propto E_{\text{tot}}^{0.33}$ , respectively. A later study (de Vet & de Bruyn 2007) finds  $r \propto E_{\text{tot}}^{0.23}$  and  $d \propto E_{\text{tot}}^{0.21}$ , in rough agreement with Walsh et al. (2003). more rare. A notable exception is provided by Pacheco-Vázquez & Ruiz-Suárez (2011) who employ velocities large enough to break the impactor during impact. They report that the dependence  $r \propto E_{\text{tot}}^{0.25}$  found for a monolithic impactor (Uehara et al. 2003; Walsh et al. 2003) must be supplemented by a constant summand taking care of horizontal energy transfer during impactor break-up. In contrast, the crater depth remains constant once the impactor breaks up. This behavior is in contrast to the results of our study, where the scaling with impact energy, Eqs. (7) and (10), implies that both *d* and *r* increase  $\propto E_{\text{tot}}^{\kappa}$  with  $\kappa < 0.25$ , and crater depth continues increasing with  $E_{\text{tot}}$  despite impactor fragmentation. However, we note that our data show that, at small impact energies, the crater radius converges to a finite value, equal to a few grain radii.

Impact studies on granular beds using granular impactors are

We note that all these studies use macroscopic impactors and gravity plays a role during the impact, influencing the scaling (Melosh 1989; Holsapple 1993; Katsuragi 2016), such that these experimental results cannot be immediately compared to our findings. We can thus only conclude that the availability of simple power laws relating crater sizes to impact energy, projectile velocity, and size is a common feature of all cratering studies, even though the exponents vary in the different scenarios studied.

Studies of crater formation by cluster impact in atomic matter (solid Cu or Ar) show that shallow craters are formed at small impact velocities, which develop into hemispherical craters at high velocities (Anders et al. 2012a); deep craters such as those found here were not observed. We therefore surmise that the feature of deep craters is closely connected to the porous nature of the granular solids studied here, which allow for compaction below the projectile that is not available in compact solids. As mentioned above, Sect. 3.1, the flow pattern of the material after impact is also downward directed for granular matter – strongly different from impact into compact atomic solids – and thus allows for downward elongation of the crater shapes.

We note that the volume obtained by the polynomial mesh algorithm used here (Stukowski 2010b) agrees well with the ellipsoidal approximation,  $V = (2\pi/3)r^2d$ , with the exception of small craters that may be quite irregular.

In a previous study (Ringl et al. 2012b), a crater formed by impact of a single grain on a granular bed similar to ours – but simulated for granular beds with various porosities – was studied; however, the impactor was three times the size (and 27 times the mass) of the grains constituting the target. There, more irregularly shaped (tubelike, conical or "carrot-like") craters were M. Belén Planes et al.: Dust-aggregate impact into granular matter



Fig. 8. *a*) Correlation of the sputter yield, *Y*, with the number of grains emitted from the crater volume,  $V/\Omega$ . The line indicates a relation  $Y = 0.05V/\Omega$  to guide the eye. *b*) Same data set as  $YN_p^{1/3}$  versus  $V/\Omega$ ; the line indicates a linear relation,  $YN_p^{1/3} = 0.2V/\Omega$ .

**Table 1.** Number of clusters containing *n* grains emitted in two representative impacts.

Projectile	<i>n</i> = 1	<i>n</i> = 2	<i>n</i> = 3	<i>n</i> = 4	<i>n</i> = 5	n = 6	<i>n</i> = 7
$N_{\rm p} = 30, v = 100 \text{ m s}^{-1}$	121	7	-	2	_	-	1
$N_{\rm p} = 500, v = 25 \text{ m s}^{-1}$	76	11	1	2	-	-	_

obtained, in particular for highly porous targets, that were reminiscent of craters found during the STARDUST mission (Iida et al. 2010). For granular targets with porosities increasing to our values, the craters assumed an aspect ratio of d/r = 1.2 for impact velocities of 10–30 m s<sup>-1</sup>; these values are in the range of our data for small projectiles (Fig. 6c).

#### 4. Ejecta

#### 4.1. Yields

While during crater formation the major part of the material is pressed into the crater walls, compacting the wall material, part of the crater volume is emitted into the vacuum above the surface. We determine the ejection yield, Y, that is, the number of ejected grains per impact, by counting all grains that have been removed by at least  $3.5 \,\mu$ m above the original surface. The choice of this height is somewhat arbitrary; it was taken as a compromise to guarantee that all ejecta that have reached this height will not collide with other grains or the crater rim and be reflected back to the surface, and that even slow grains will have escaped past this height until the end of the simulation. We verified that a slightly smaller value, or any larger value, would not change the final count of ejecta by more than around 5% (we refer to Sect. 2.2).

In their experimental work, Deboeuf et al. (2009) assume that the crater volume is directly given by the corresponding volume of ejected particles. This is not always the case, however, at the nanoscale (Bringa et al. 2002), and might not be the case for granular impacts. In order to correlate the ejection yield with the excavated crater volume, we divide the measured crater volume, V, by the average volume of a grain in the target (obtained by dividing the target volume by the number of grains),  $\Omega = 5.11 \ \mu m^3$ ; this gives us the effective number of grains that have been excavated from the crater volume. Figure 8a shows that in all cases, Y is less than approximately 10% of the grains removed from the crater; and these high fractions are only reached for small projectile sizes,  $N_p \leq 10$ . For larger projectiles the ejection process is even less efficient, such that only <1% of the grains removed from the crater show up as ejecta. Figure 8a demonstrates the trend that with increasing crater volume also the fraction of ejected grains increases.

We also note that the ejecta are constituted mainly of target material, in particular for the larger projectiles. For instance in the case of impacts with a velocity of 100 m s<sup>-1</sup>, for  $N_p \ge 20$ , there is, at most, one projectile grain reflected from the target, while the total ejection yield is Y > 100. For smaller impactors, the situation changes somewhat; thus there are three reflected grains for  $N_p = 5$  (Y = 69), and for  $N_p = 1$  the projectile grain is reflected while no target grain joins it.

In general we find that the ejecta exist mainly as monomers; only a few dimers and larger clusters are ejected. Table 1 gives representative examples for a small, fast projectile and a large, slow projectile. In both cases, tetramers are the largest clusters, with the exception of one emitted heptamer. The ejection of larger clusters is prevented by the smallness of the attractive forces between the grains.

Anders et al. (2012a) showed that during emission from atomic solids, around one third to one tenth of the crater volume is ejected into the vacuum above the solid; the fraction decreases with increasing projectile size. These values are considerably higher than the values found here. The reason for the stronger contribution of ejection to crater excavation for compact atomic solids lies in the fact that compaction of the target material is hardly possible in this case, leaving ejection – besides uplift of crater material onto the surface, that is, rim formation – as the main channel for crater excavation. In atomic solids, melt flow can also contribute significantly to crater excavation (Anders et al. 2012b), and this is also prevented in granular materials.

Figure 9 shows the dependence of the ejecta yield, *Y*, on impact velocity and size. Again, we can use a power law to describe our data,

 $Y \propto v^{\epsilon} N_{\rm p}^{\zeta}$ .



**Fig. 9.** Ejection yields, *Y*, as a function of projectile velocity (*a*) and projectile size (*b*). The black lines indicate power-law dependencies,  $Y \propto v$  in *panel a*, and  $Y \propto N_p^{1/3}$  in *panel b*. The thin line in *panel b* marks the boundary between target erosion and target growth,  $Y = N_p$ .

Our simulation results are well described by  $\epsilon = 1$  and  $\zeta = 1/3$  throughout the parameter space investigated in this study. We note that a  $Y \propto v$  dependence has also been found previously for impacts of single grains ("balls') into granular beds (Ringl et al. 2012b). Figure 9b shows that velocities below approximately 25 m s<sup>-1</sup> ensure target growth despite ejection, due to accretion of the projectile, for  $N_p$  larger than around 10.

The scaling of the yield, Eq. (11), differs somewhat from that of the volume, Eq. (8). While the velocity dependence is similar,  $\alpha \approx \epsilon = 1$ , the projectile-size dependence is different ( $\beta = 2/3$ , while  $\zeta = 1/3$ ). This different scaling results in the scatter of the Y(V) correlation displayed in Fig. 8a. We can decrease the scatter somewhat by eliminating the velocity dependence from Eqs. (8) and (11), assuming  $\alpha = 1$ ; this suggests that

$$Y \propto V N_{\rm p}^{-1/3}.\tag{12}$$

Figure 8b shows that this relation is justified for large craters,  $V > 2000\Omega$ , where the constant of proportionality in Eq. (12) is 0.2. Deviations are observed for smaller velocities, where only small craters are produced, and are particularly pronounced for large projectiles, since here the projectile shields the crater center from emitting matter. This is in contrast with the macroscopic impacts studied by Deboeuf et al. (2009), where it was concluded that impactor size does not affect ejection scaling.

This behavior is in gross contrast to the sputter yield induced by atomic clusters on atomic targets. There, the sputter yield is proportional to the total impact energy, above a threshold energy, as has been reported first for Lennard-Jones bonded solids (Anders et al. 2004), but later also for metal targets (Anders et al. 2009; Anders & Urbassek 2013) and organic materials (Seah 2013; Seah et al. 2014). The physical picture behind this simple dependence is that the projectile energy is deposited close to the target surface and is hence available for inducing sputtering. This is different from the bombardment of granular targets since here dissipation is strong and hence not all the impact energy – or at least not a constant,  $N_p$  and v independent fraction – is available for ejection.

#### 4.2. Energy distributions

In Fig. 10a we display the energy distributions of ejecta for several representative cases. In these cases, in order to enhance the statistical significance of our data set, we performed up to five impacts for a given projectile size and velocity. The distributions feature a broad maximum at an energy,  $E_{\text{max}}$ , in the range of  $(1-10) \times 10^{-15}$  J.

An astonishing characteristic of the energy distribution of the ejecta is their slow fall-off at high velocities, which follows a power-law,  $\propto E^{-2}$ , with ejecta energy *E*. Such power-law distributions are well-known in the field of sputtering of solids by energetic particle impact, and are the signature of linear collision cascades (Sigmund 1981). In these cascades, the impacting projectile shares its energy with a target atom, which consequently recoils from its lattice site; both the deflected projectile and the recoil then continue colliding with other atoms, and so on, thus establishing a collision cascade. The energy sharing in this cascade can be shown to lead to a  $1/E^2$  distribution of recoil atoms (Thompson 1968; Sigmund 1981). When particles are emitted from the surface, they lose the surface binding energy, *U*, and the energy distribution of sputtered atoms is given by

$$f(E) \propto \frac{E}{(E+U)^3},\tag{13}$$

with a maximum at  $E_{\text{max}} = U/2$ .

We fitted our energy distributions to this law, Eq. (13), in Fig. 10a; the fits describe the data surprisingly well. We interpret this agreement as a sign that also the stopping of granular clusters leads to the generation of collision cascades among the target grains by which the incident energy is distributed to neighboring grains; near-surface grains which have received an outward-directed momentum may then be ejected.

The values of U obtained in the fit process amount to  $1.4 \times 10^{-15}$  J (v = 25 m s<sup>-1</sup>,  $N_p = 50$ ) and  $2.0 \times 10^{-15}$  J (v = 25 m s<sup>-1</sup>,  $N_p = 150$ ) for the low-velocity impacts and  $8.0 \times 10^{-15}$  J for the high-velocity impact (v = 150 m s<sup>-1</sup>,  $N_p = 50$ ). Such a dependence on the impact conditions is not observed for sputtering of atomic solids, where U is a constant, depending only on the target material but not on the projectile species or energy. For our granular material, a first idea might be to assume that the surface-binding energy equals the break-up energy,  $E_{\text{break}}$ , multiplied by the average number of contacts in the material,  $N_c$ ,

$$U = N_{\rm c} E_{\rm break}.\tag{14}$$

Since  $N_c = 2.75$  (Sect. 3.1) and  $E_{break} = 2.8 \times 10^{-17}$  J, the estimate Eq. (14) predicts  $U = 7.7 \times 10^{-17}$  J, which is one to two orders of magnitude too small. A similar estimate based on the rolling energy,  $E_{roll}$ , gives  $U = 2 \times 10^{-16}$  J, which is again too small. This demonstrates that – in contrast to atomic solids – the energy loss of ejected grains does not occur only on the last step of emission from the surface, but is rather connected to the energy dissipation during the entire chain of collisions to which the ejected grain is subjected before emission. Indeed, it was shown

M. Belén Planes et al.: Dust-aggregate impact into granular matter



**Fig. 10.** Distribution of *a*) energy and *b*) depth of origin of grains ejected from the target for various projectiles. Lines in *panel a* indicate fits to Eq. (13) (see text).



Fig. 11. Trajectories of the grains ejected from the target by the impact of a  $N_p = 50$  projectile at velocity 150 m s<sup>-1</sup>. *a*) top view, *b*) side view. The initial grain positions of ejecta are marked by dots; all non-ejected grains are omitted. Bends in the trajectories are caused by collisions with other grains.

previously by means of transport theory and Monte Carlo simulations (Urbassek et al. 1995) that the energy distribution in an atomic collision cascade changes if recoiling particles lose energy inside the material; the energy spectrum at low energies is flattened in a similar way as would be the case for a "surface binding energy".

The apparent increase in the fitted values of U (Fig. 10a) can be related to the increase in the depth of origin of the ejecta. We display in Fig. 10b the distribution of the depths of origin of ejected grains. The average depth increases from  $1.10 \pm 0.07 \,\mu\text{m}$ in the case of the low-velocity impact ( $v = 25 \text{ m s}^{-1}$ ,  $N_p = 50$ ) to  $1.53 \pm 0.05 \,\mu\text{m}$  for the high-velocity impact ( $v = 150 \text{ m s}^{-1}$ ,  $N_p = 50$ ). This increased depth of origin will lead to an increased number of contacts, which need to be broken during emission, and hence a higher apparent value of U.

We illustrate the collisions that ejected grains suffered before final ejection in Fig. 11, which displays the trajectories of the ejecta for the specific case discussed in detail in Sect. 3.1; both a top and a side view are provided. The ejecta originate from an annular region surrounding the projectile impact point. We note that most ejecta suffered collisions after they first started as recoils to be ejected, as becomes particularly evident from the side view. During these collisions, ejecta may lose a considerable part of their initial kinetic energy.

The results obtained here on the ejection process generalize previous findings of Ringl et al. (2012b) on the impact of a monatomic projectile,  $v = 30 \text{ m s}^{-1}$ , on a granular bed. Also there, power-law-like energy distributions of the ejecta were obtained with an apparent value of  $U = 1.4 \times 10^{-15}$  J, close to the value for small projectiles found here. Our present findings show that U increases with projectile size and speed.

Experiments on the properties of ejecta produced during impacts on granular targets are rare (Katsuragi 2016). One exception is the work of Deboeuf et al. (2009) who shot steel spheres into beds formed of glass beads and determined the average energy of ejecta,  $E_{av}$ , from the motion of the ejected beads. They found a scaling  $E_{av} \propto E_{tot}^{0.37}$ . Another, similar experiment (Marston et al. 2012) observed a different exponent in this relation, such that Katsuragi (2016) concludes that the experimentall situation is confusing. We note, however, that the experimentally observed increase of  $E_{av}$  with  $E_{tot}$  is in line with our finding that the maximum of the energy distribution,  $E_{max} = U/2$ , increases with projectile velocity and size.

Another series of experiments have been performed by Beladjine et al. (2007) and Ammi et al. (2009) who studied the splash process – the grain ejection caused by oblique impact of a single grain on a granular bed, basic for sand movement in dunes – using mm-sized polymer beads impacting with velocities in the range of 10–40 m s<sup>-1</sup>; the results were analyzed by numerical simulations (Crassous et al. 2007; Tanabe et al. 2017). In these experiments, gravity is relevant; hence the ejecta velocity is measured at a distance of one grain diameter above the original target surface. It was found that the vertical velocity component of the ejecta does not follow a power law as in our case (Eq. (13)) but instead a lognormal distribution. Crassous et al. (2007) argue that the splash emission is caused by collision chains, analogous

to force bridges supported by neighboring grains; however, such a scenario is unlikely to work in our case of perpendicular impact. Tanabe et al. (2017) found that ejecta carry only approximately 10% of the impact energy, and Deboeuf et al. (2009) found a fraction of 3% for larger projectiles. Our simulations display much smaller fractions of the energy going into the energy of the ejecta. For instance, for the case in Fig. 1, the fraction is only 0.3%. This reduction might be due to the break-up of the projectile and also to the larger friction between  $\mu$ m-sized grains than between macroscopic grains.

#### 5. Summary

Impacts of granular clusters on a granular target are studied with the help of granular-mechanics simulations. By performing an extensive set of simulations we investigate the dependence of crater formation and grain ejection on projectile speed and size. It is assumed that gravity plays no role during the impact and crater formation. We find the following results on crater formation by dust-aggregate clusters.

- 1. For small cluster sizes and velocities, the crater has approximately hemispherical shape. Its depth increases in relation to its width with increasing size and velocity.
- 2. The total crater volume increases sublinearly with the total impact energy. This is in contrast to craters in atomic targets.
- 3. Material processes in the irradiated granular target are characterized by an overall downward motion of the porous target inducing a compaction in the vicinity of the crater walls and an increase of the number of contacts of the grains. There is no rim formation.
- 4. While the scaling of the crater depth follows quite closely that predicted by the so-called momentum-scaling of the strength-dominated cratering regime, this scaling is not followed so clearly for the crater volume. The reason is that crater morphology changes with impactor size and speed.

As a rule, crater formation is accompanied by grain ejection. We find the following systematics.

- 5. Ejecta yields amount to ≤10% of the grains excavated from the crater; the majority of grains are compacted into the crater walls. The fraction of ejected grains increases with projectile size and speed.
- 6. Also ejection yields scale sublinearly with impact energy, again in strong contrast to cluster-induced sputtering from atomic targets.
- 7. Ejecta have energy distributions characterized by a powerlaw decay  $\propto E^{-2}$  at high ejection energies *E*; this is analogous to sputtered-particle distributions from atomic targets.
- 8. The depth of origin of ejecta and the number of collisions they suffer before emission increases with projectile size and speed. Concomitantly the energy distribution of emitted ejecta shifts to higher energies.
- Impact velocities below approximately 25 m s<sup>-1</sup> ensure target growth despite ejection, due to accretion of the projectile, for N<sub>p</sub> larger than around 10.

In summary, our study shows that cratering of granular targets exhibits strong differences to cratering of atomic targets. Both the dissipative nature of grain collisions and the porous nature of the target contribute to this difference.

In the future, impacts of larger projectiles, requiring much larger targets, should be investigated. Such impacts might display shielding effects leading to crater volumes further deviating from simple linear scaling with incoming energy. In addition, targets and projectiles might consist of poly-disperse grain sizes; the investigation of such collisions might show enhanced friction loss, and larger changes in the cratering and ejection process, such as those recently described for aggregate collisions with a bimodal grain-size distribution (Gunkelmann et al. 2017).

*Acknowledgements.* We thank Christian Ringl and Nina Gunkelmann for help with the setup of the simulation target and for discussions. E.M. and E.M.B. thank for support from SeCTyP-UNCuyo grant 2016-M003, and ANPCyT grant PICT-2014-0696.

#### References

- Ammi, M., Oger, L., Beladjine, D., & Valance, A. 2009, Phys. Rev. E, 79, 021305 Anders, C., & Urbassek, H. M. 2013, Nucl. Instr. Meth. B, 303, 200
- Anders, C., Urbassek, H. M., & Johnson, R. E. 2004, Phys. Rev. B, 70, 155404
- Anders, C., Ziegenhain, G., Zimmermann, S., & Urbassek, H. M. 2009, Nucl. Instr. Meth. B, 267, 3122
- Anders, C., Bringa, E. M., Fioretti, F. D., Ziegenhain, G., & Urbassek, H. M. 2012a, Phys. Rev. B, 85, 235440
- Anders, C., Ziegenhain, G., Ruestes, C. J., Bringa, E. M., & Urbassek, H. M. 2012b, New J. Phys., 14, 083016
- Beladjine, D., Ammi, M., Oger, L., & Valance, A. 2007, Phys. Rev. E, 75, 061305 Birnstiel, T., Fang, M., & Johansen, A. 2016, Space Sci. Rev., 205, 41
- Blum, J. 2006, Adv. Phys., 55, 881
- Blum, J. 2010, Res. Astron. Astrophys., 10, 1199
- Blum, J., & Schräpler, R. 2004, Phys. Rev. Lett., 93, 115503
- Brilliantov, N. V., Spahn, F., Hertzsch, J.-M., & Pöschel, T. 1996, Phys. Rev. E, 53, 5382
- Bringa, E. M., Johnson, R. E., & Papaleo, R. 2002, Phys. Rev. B, 65, 094113 Burnham, N., & Kulik, A. A. 1999, in Handbook of Micro/Nano Tribology, 2nd
- edn., ed. B. Bhushan (Boca Raton: CRC Press), 247
- Chokshi, A., Tielens, A. G. G. M., & Hollenbach, D. 1993, ApJ, 407, 806
- Colla, T. J., Aderjan, R., Kissel, R., & Urbassek, H. M. 2000, Phys. Rev. B, 62, 8487
- Crassous, J., Beladjine, D., & Valance, A. 2007, Phys. Rev. Lett., 99, 248001
- Deboeuf, S., Gondret, P., & Rabaud, M. 2009, Phys. Rev. E, 79, 041306
- Derjaguin, B. V., Muller, V. M., & Toporov, Y. P. 1975, J. Colloid Interface Sci., 53, 314
- de Vet, S. J., & de Bruyn, J. R. 2007, Phys. Rev. E, 76, 041306
- Dominik, C., & Tielens, A. G. G. M. 1997, ApJ, 480, 647
- Edelsbrunner, H., & Mücke, E. P. 1994, ACM Trans. Graphic, 13, 43
- Güldemeister, N., Wünnemann, K., & Poelchau, M. H. 2015, in Large Meteorite Impacts and Planetary Evolution V, eds. G. R. Osinski, & D. A. Kring (The Geological Society of America), Geological Society of America Special Papers, 518, 17
- Gunkelmann, N., Ringl, C., & Urbassek, H. M. 2016a, A&A, 589, A30
- Gunkelmann, N., Ringl, C., & Urbassek, H. M. 2016b, Comp. Part. Mech., 3, 429
- Gunkelmann, N., Kataoka, A., Dullemond, C. P., & Urbassek, H. M. 2017, A&A, 599, L4
- Holsapple, K. A. 1993, Annu. Rev. Earth Planet. Sci., 21, 333
- Hou, M., Peng, Z., Liu, R., Lu, K., & Chan, C. K. 2005, Phys. Rev. E, 72, 062301
- Hurley, R. C., Lim, K.-W., & Andrade, J. E. 2015, in Rapid Penetration into Granular Media, eds. M. Iskander, S. Bless, & M. Omidvar (Oxford: Elsevier), 291
- Iida, Y., Tsuchiyama, A., Kadono, T., et al. 2010, Meteorit. Planet. Sci., 45, 1302 Jutzi, M., Holsapple, K., Wünneman, K., & Michel, P. 2015, in Asteroids IV, eds.
- P. Michel, F. E. DeMeo, & W. F. Bottke Jr. (University of Arizona Press), 679 Katsuragi, H. 2016, Physics of soft impact and cratering, Lecture Notes in Physics, Vol. 910 (Springer)
- Katsuragi, H., & Durian, D. J. 2007, Nature Phys., 3, 420
- Li, Z., Guo, Q., Li, Z., et al. 2015, Nano Lett., 15, 8077
- Li, Y., Dove, A., Curtis, J. S., & Colwell, J. E. 2016, Powder Technol., 288, 303
- Lohse, D., Bergmann, R., Mikkelsen, R., et al. 2004, Phys. Rev. Lett., 93, 198003
- Marston, J., Li, E., & Thoroddsen, S. 2012, J. Fluid Mech., 704, 5
- Maugis, D. 2000, Contact, adhesion and rupture of elastic solids (Berlin:
- Springer) Melosh, H. J. 1989, Impact Cratering: A geologic process (New York: Oxford
- UP) Melosh, H. J. 2011, Planetary Surface Processes (Cambridge: Cambridge
- University Press) Osinchi, G. P., & Pierezzo, F. 2013, Impact Cratering: Processes and Products
- Osinski, G. R., & Pierazzo, E. 2013, Impact Cratering: Processes and Products (Wiley-Blackwell)

- Pacheco-Vázquez, F., & Ruiz-Suárez, J. C. 2011, Phys. Rev. Lett., 107, 218001 Paszun, D., & Dominik, C. 2009, A&A, 507, 1023
- Pica Ciamarra, M., Lara, A. H., Lee, A. T., et al. 2004, Phys. Rev. Lett., 92, 194301
- Plimpton, S. 1995, J. Comput. Phys., 117, 1
- Poppe, T., Blum, J., & Henning, T. 2000, ApJ, 533, 454
- Pöschel, T., & Schwager, T. 2005, Computational granular dynamics: models and algorithms (Springer)
- Ringl, C., & Urbassek, H. M. 2012, Comput. Phys. Commun., 183, 986
- Ringl, C., Bringa, E. M., Bertoldi, D. S., & Urbassek, H. M. 2012a, ApJ, 752, 151
- Ringl, C., Bringa, E. M., & Urbassek, H. M. 2012b, Phys. Rev. E, 86, 061313
- Samela, J., & Nordlund, K. 2008, Phys. Rev. Lett., 101, 027601
- Schmidt, R., & Housen, K. 1987, Int. J. Impact Eng., 5, 543
- Schwartz, S. R., Michel, P., Richardson, D. C., & Yano, H. 2014, Planet. Space Sci., 103, 174
- Seah, M. P. 2013, J. Phys. Chem. C, 117, 12622
- Seah, M. P., Havelund, R., & Gilmore, I. S. 2014, J. Phys. Chem. C, 118, 12862
   Sigmund, P. 1981, in Sputtering by particle bombardment I, ed. R. Behrisch (Berlin: Springer), 9

- Speyerer, E. J., Povilaitis, R. Z., Robinson, M. S., Thomas, P. C., & Wagner, R. V. 2016, Nature, 538, 215
- Stukowski, A. 2010a, Model. Simul. Mater. Sci. Eng., 18, 015012 , http:// www.ovito.org/
- Stukowski, A. 2010b, https://www.ovito.org/manual/
- Stukowski, A. 2014, JOM, 66, 399
- Tanabe, T., Shimada, T., Ito, N., & Nishimori, H. 2017, Phys. Rev. E, 95, 022906
- Thompson, M. W. 1968, Philos. Mag., 18, 377
- Tsimring, L. S., & Volfson, D. 2005, in Powders and Grains 2005, eds. R. Garcia-Rojo, H. J. Herrmann, & S. McNamara (Rotterdam: A. A. Balkema), 1215
- Uehara, J. S., Ambroso, M. A., Ojha, R. P., & Durian, D. J. 2003, Phys. Rev. Lett., 90, 194301; Erratum: 91, 149902
- Urbassek, H. M., Mayer, G., Gades, H., & Vicanek, M. 1995, Nucl. Instr. Meth. B, 103, 275
- Wada, K., Tanaka, H., Suyama, T., Kimura, H., & Yamamoto, T. 2007, ApJ, 661, 320
- Wada, K., Tanaka, H., Suyama, T., Kimura, H., & Yamamoto, T. 2011, ApJ, 737, 36
- Walsh, A. M., Holloway, K. E., Habdas, P., & de Bruyn, J. R. 2003, Phys. Rev. Lett., 91, 104301

## **Stopping of porous projectiles in granular targets**

# María Belén Planes,<sup>1</sup> Emmanuel N. Millán,<sup>2</sup> Herbert M. Urbassek<sup>03\*</sup> and Eduardo M. Bringa<sup>1</sup>

<sup>1</sup>CONICET and Facultad de Ingenería, Universidad de Mendoza, Mendoza 5500, Argentina

<sup>2</sup>CONICET, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales and ITIC, Universidad Nacional de Cuyo, Mendoza 5500, Argentina <sup>3</sup>Rhuriss Den artmunt and Research Canter ORTIMAS, University Kristerelautern, Emrin Schnödinger, Starfe, D. 6766, Kristerelautern, G

<sup>3</sup>Physics Department and Research Center OPTIMAS, University Kaiserslautern, Erwin-Schrödinger-Straße, D-67663 Kaiserslautern, Germany

Accepted 2019 May 21. Received 2019 May 16; in original form 2019 March 15

#### ABSTRACT

Using granular mechanics, we determine the stopping force acting on spherical granular projectiles impinging on a flat granular bed. We find that the stopping force is proportional to the impact energy, as in Poncelet's law. For fixed velocity, it is proportional to the projectile cross-sectional area rather than to its volume. These dependences only hold in the early stages of stopping, before the projectile has been strongly fragmented. Analogies to the stopping of atomic clusters in compact matter are pointed out.

Key words: methods: numerical - planets and satellites: formation - protoplanetary discs.

#### **1 INTRODUCTION**

Impacts into granular media have been studied for long; recent reviews are provided by Katsuragi (2016), Omidvar, Iskander & Bless (2014), and in an astrophysical context with a focus on impact cratering by Melosh (1989, 2011). The majority of studies focus on the impact of a hard, rigid impactor – such as a block of rock – on a granular target such as regolith.

Comparatively few studies are concerned with the impacts of projectiles that are granular themselves (Bartali et al. 2013). However, in an astrophysical environment, often the impactor itself is granular and possesses a high porosity. Comets have a higher porosity than previously assumed, reaching values of 72-74 per cent (Kofman et al. 2015; Pätzold et al. 2016), and the same applies to asteroids, which reach porosities of 40-60 per cent (Britt & Consolmagno 2001; Fujiwara et al. 2006). In addition, dust agglomerates, which are ubiquitous in the planetary system, have a high porosity. While their constitution certainly depends on the objects under study, interplanetary dust particles are reported to possess a high variety of porosities with peak values in the range of 0-4 per cent and tails reaching up to >50 per cent (Corrigan et al. 1997). Such dust agglomerates are a frequent source of impacts on other bodies such as moons and asteroids. Impact into regolith in particular occurs frequently on rocky moons and asteroid surfaces (Yamamoto 2002; Nakamura et al. 2013). During the formation of planetary systems, dust aggregates are believed to have filling factors as low as  $10^{-4}$ (Okuzumi et al. 2012; Kataoka et al. 2013; Krijt et al. 2015, 2016).

Granular mechanics offers an important tool to study impacts into granular materials (Dominik & Tielens 1997; Prabhu & Sharp 2005; Paszun & Dominik 2009). Among the first to study such impacts were Tsimring & Volfson (2005) using two-dimensional granular mechanics simulations. Three-dimensional simulations were provided by Hurley, Lim & Andrade (2015), who studied low-velocity impact in granular media with a particular focus on the role of frictional forces. More recently, Li et al. (2016) studied ejecta mass and velocity. Among the few studies considering porous projectiles, Planes et al. (2017) focused on the cratering process.

In this paper, we study impacts of porous aggregates, rather than hard projectiles, on a granular bed. In contrast to previous studies that concentrated on the cratering, fragmentation, and ejection processes, our interest is here with the projectile stopping process, and with the analysis of the stopping force. In particular, we discuss the influence of the projectile size on the slowing-down force of the projectile.

#### 2 METHOD

Both the target and the projectile aggregates are composed of silica grains. All grains are spherical with a radius of  $R_{\text{grain}} = 0.76 \,\mu\text{m}$ . The target has the form of a cubic box with a side length of 70.7  $\mu\text{m}$ . It contains about 70 000 grains, and has a filling factor of 36 per cent. It was constructed using the method of Ringl, Bringa & Urbassek (2012) by filling grains homogeneously into a box until the required filling factor is reached. We construct spherical projectile aggregates by cutting them out of the target; they hence also have a filling factor of 36 per cent. The number of grains in the projectile, *N*, varies between 1 and 500.

Initially the projectile is set at a position above the target such that there is no interaction with it. Then the simulation is started by giving each grain in the projectile the same velocity v, which we vary between 5 and 200 m s<sup>-1</sup>. The top and bottom surfaces of the target are free; at the sides we employ periodic boundary conditions. The time-step of the simulation amounts to 50 ps (Ringl & Urbassek 2012); we perform for each simulation in total 400 000 time-steps,

amounting to 20  $\mu$ s. Simulation data are recorded every 0.25  $\mu$ s. In addition, in some representative simulations, we monitored the output more frequently, every 5 ns, in order to analyse the energy variation in the stopping process with higher resolution.

In several cases we prolonged the simulation time to  $10^6$  timesteps to verify the convergence of our results. In the last  $6 \times 10^5$  time steps, the final position varied by less than 8 per cent. In addition, we estimated the statistical error of our simulations by repeating the simulations with a slightly different (lateral) projectile starting position; the differences in the final positions were only 3 per cent.

We employ a granular mechanics simulation code whose details have been published by Ringl & Urbassek (2012). Besides the Hertzian elastic contact forces, it includes intergranular adhesion, viscoelastic energy dissipation as well as friction during sliding, rolling, and twisting motion (Dominik & Tielens 1997). In our simulations we employ the material parameters for silica; the Young's modulus is Y = 54 GPa, the Poisson ratio v = 0.17, and the specific surface energy  $\gamma = 25$  mJ m<sup>-2</sup> (Chokshi, Tielens & Hollenbach 1993). The mass density is taken as  $\rho = 2 \times 10^3$  kg m<sup>-3</sup> (Blum & Schräpler 2004), such that the mass of a grain amounts to  $m = 3.68 \times 10^{-15}$  kg.

Data analysis and rendering of granular snapshots has been performed using OVITO (Stukowski 2010).

#### **3 RESULTS**

#### 3.1 A representative case

Fig. 1 demonstrates the penetration of a projectile aggregate into the target for a representative case, N = 200 at  $v = 50 \text{ m s}^{-1}$ . Immediately upon impact, the projectile is flattened, assuming a lenslike form at 0.65 µs. After 1.5 µs, the projectile has been fragmented; it covers the bottom of the crater that it has excavated as a thin and non-continuous layer.

Due to the stopping process, energy is transferred from the projectile to the target grains. Fig. 1(b) shows that a considerable volume below and also at the sides of the forming crater has received energy. The volume has reached its maximum between times of 0.65 and 1.3 µs. Later, dissipation by friction forces as well as viscoelastic dissipation reduces the energy again, first at the sides and then below the crater, such that grain motion dies out. A few grains ( $\simeq 160$ ) are ejected from the surface in this event. During the expansion phase of the crater,  $t \le 1.5 \mu s$ , the boundary between energized and uncollided target grains is sharp; afterwards, during the cooling phase, energy gradients become softer.

#### 3.2 Stopping force

Fig. 2 shows the decrease of the projectile kinetic energy *E* with penetration depth *z* for two velocities and various projectile sizes. Here *E* has been calculated as the sum of the kinetic energies of all projectile grains, while *z* denotes the centre-of-mass position of the aggregate. The curves do not start at the initial projectile energy,  $E = E_0$ , since when the projectile centre of mass enters the target, z = 0, half the projectile has already penetrated the target and stopping has already started. We observe an exponential decrease of the energy with *z* during the initial part of the trajectory; the higher the velocity, the longer the exponential decrease continues. After the end of the exponential phase, the kinetic energy quickly drops to zero; we correlate this abrupt decay with the aggregate fragmentation occurring at the end of the trajectory. The decay

length of the exponential phase depends on the projectile size N; larger aggregates have a longer decay length.

It might be surmised that the transition from the exponential regime to the final abrupt-stopping regime occurs at a fixed energy value,  $E_{\min}$ , which is independent of  $E_0$ . However, inspection of our data (not shown here) excludes this possibility.

Denoting the decay length of the projectile energy by  $\lambda$  and the initial projectile energy by  $E_0$ , the results of Fig. 2 can be quantified as

$$E = E_0 e^{-z/\lambda}.$$
(1)

An essential result of our data analysis is that  $\lambda$  depends only on the projectile size *N*, but not on the projectile energy or velocity,  $\lambda = \lambda(N)$ .

Such a law, equation (1), corresponds to an energy-proportional stopping power (or 'stopping force'; Sigmund 2000) of the cluster. The stopping force, dE/dz is generally defined as the energy lost, dE, while traversing a small path length, dz. It is equal to the force *F* decelerating the projectile, since

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}z} = Mv\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}z} = M\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = F.$$
(2)

Here, the projectile mass, M = Nm, and the projectile velocity v have been used; the last identity simply expresses Newton's second law. In granular mechanics, the stopping force is often denoted as the 'drag force'.

For energy-proportional stopping,

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}z} = -\frac{E}{\lambda},\tag{3}$$

the decrease of E with z indeed follows the law, equation (1), observed by us. Such a law is known in the literature as Poncelet's law (due to its use in the stopping of rigid solids in granular matter) or as the inertial drag (Katsuragi & Durian 2007; Omidvar et al. 2014; Katsuragi 2016).

Our simulations allow us to extract the value of  $\lambda$  and its size dependence. We extract it from the slopes of the E(z) dependences such as those displayed in Fig. 2. The results are displayed in Fig. 3; for clarity, we restrict the figure to two velocities, 25 and 50 m s<sup>-1</sup>. We see that  $\lambda$  is indeed independent of the projectile velocity; its dependence on projectile size follows a power law

$$\lambda = \lambda_1 N^{\alpha},\tag{4}$$

where  $\alpha \simeq 0.335$ , close to 1/3. The length  $\lambda_1$  quantifies the stopping of a monomer; it has a value of 0.78  $\mu$ m.

The fact that the decay length increases – and hence stopping decreases – with projectile size is a prime result of this study. This behaviour is analogous to that found for atomic cluster impact into bulk materials (Anders & Urbassek 2007; Anders et al. 2011). There, for such diverse systems as Cu cluster impact into a Cu target, Ar cluster impact into a condensed Ar target, and even Au cluster impact into condensed Ar targets, molecular dynamics simulations exhibit an energy-proportional stopping with a prefactor that depends on projectile size as a power law, with an exponent of around 1/3. The same exponent was also found in experiments and simulations of Ag cluster impacts into graphite (Carroll et al. 2000; Pratontep et al. 2003). The fact that we find (approximately) the same size dependence here points to a common physical origin of this dependence.

The idea leading to an increase of the decay length  $\lambda$  as a power law, equation (4), with  $\alpha \simeq 1/3$  may be expressed as follows. A *size-independent* coefficient  $\lambda$  in the stopping force, equation (1), would



**Figure 1.** Time series of snapshots showing the stopping of an aggregate of N = 200 grains impacting with a velocity of  $v = 50 \text{ m s}^{-1}$  on a flat granular bed. Times are chosen as (from left to right) 0.325, 0.65, 1.5, 3.75, and 5 µs. Grains are coloured according to (a) grain origin (blue: projectile, red: target); (b) grain kinetic energy in fJ. Slices shown are 6 µm thick.



Figure 2. Decrease of the normalized aggregate kinetic energy,  $E/E_0$ , as a function of the penetration depth, z, for aggregates with various sizes, N, and velocities, v.



**Figure 3.** Variation of  $\lambda$ , equation (1), with *N* for velocities v = 25 and  $50 \text{ m s}^{-1}$ . The results demonstrate that  $\lambda$  is independent of v and depends on *N* as a power law, equation (4).

mean that each grain in the aggregate experiences the same stopping, and this stopping is independent of the other grains surrounding it. Writing  $E_g = E/N$  for the energy of a grain in the projectile, we can rewrite equation (3) as

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}z} = -N\frac{E_{\mathrm{g}}}{\lambda_{\mathrm{l}}}.$$
(5)

Under this assumption, the stopping of equi-velocity aggregates increases in proportion to the number of grains in the aggregate.

If however the stopping is proportional to the *cross-sectional area* rather than to the projectile volume, it is

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}z} = -N^{2/3} \frac{E_{\mathrm{g}}}{\lambda_1}.\tag{6}$$

This law is identical with equations (3) and (4) with  $\alpha = 1/3$  (Carroll et al. 2000; Anders & Urbassek 2005).

The idea that the stopping force of equi-velocity clusters decreases with increasing cluster size has first been known under the notion of the 'clearing-the-way effect' (Sigmund 1989; Shulga, Vicanek & Sigmund 1989); this term puts emphasis on the fact that the front grains in the projectile suffer the heaviest collisions with the target while the following grains encounter matter that has either been removed from the projectile path or at least has a reduced relative velocity, thus effectively diminishing the stopping force.

We finally note that an inertial drag term proportional to  $v^2$  and proportional to the cross-sectional area of the projectile can be calculated from the macroscopic hydrodynamics at large Reynolds numbers, i.e. when viscous effects are small (see e.g. chapter 2.6.2, Katsuragi 2016).

#### 3.3 Range and stopping time

Under an energy-proportional stopping, equation (3), projectiles never come to rest, while their energy decreases exponentially with distance to the surface (cf. equation 1 and Fig. 1). Indeed, denoting as the projectile range the depth  $Z(\epsilon)$ , where the projectile energy



Figure 4. Dependence of the total aggregate penetration depth,  $Z_{\text{fin}}$ , on the (a) aggregate size N for various aggregate velocities v and (b) aggregate velocity v for various aggregate sizes N.

has decreased to a fraction,  $\epsilon$ , of the initial energy, we have

$$Z(\epsilon) = \lambda \ln \frac{1}{\epsilon} \tag{7}$$

in the energy-proportional stopping regime, expressing the formally infinite range as  $\epsilon \to 0$ .

However, as noted above, the stopping force becomes stronger as soon as projectile fragmentation sets in (see Fig. 2), leading to a finite value of the actual range,  $Z_{\text{fin}}$ . We plot in Fig. 4 the dependence of the penetration depth  $Z_{\text{fin}}$  on the projectile size and the velocity. Indeed the size dependence of  $Z_{\text{fin}}$ , Fig. 4(a), follows well the  $N^{1/3}$ dependence of the stopping discussed above, even though the data now refer to the complete stopping of the projectile beyond the validity of the exponential regime. This is in accordance with the observed dependence for atomistic impacts of different materials (Popok et al. 2011).

However, the velocity dependence, Fig. 4(b), of  $Z_{\text{fin}}$  differs strongly from that expected from equation (7), which predicts  $Z(\epsilon)$ to be independent of velocity. Rather we find that  $Z_{\text{fin}}$  exhibits a pronounced velocity dependence that follows a power law,  $Z_{\text{fin}} \propto v^{\beta}$ , with  $\beta = 0.4$ –0.6. Indeed the power seems to increase slightly with projectile size, N. The origin of the velocity dependence of  $Z_{\text{fin}}$  – in contrast to  $Z(\epsilon)$  – is easy to spot: The exponential stopping regime ends earlier for slow particles than for fast particles (see Fig. 2); since projectiles are stopped quickly once they leave the exponential regime, the finite range of validity of the exponential



Figure 5. Dependence of the stopping time,  $t_{\text{stop}}$ , on the aggregate size, N, for velocities v = 25 and 50 m s<sup>-1</sup>.

stopping regime introduces a strong velocity dependence into the actual range,  $Z_{\rm fin}$ .

The exponent  $\beta$  can be discussed in the light of available studies on the penetration depth of rigid impactors (Ambroso et al. 2005) and of the resulting crater sizes (Melosh 1989; Holsapple 1993; Katsuragi 2016). There, a proportionality with  $E_0^{1/3}$  (corresponding to  $\beta = 0.67$ ) is interpreted as a strength-dominated behaviour, where energy is dissipated by displacing all particles in the crater volume. A weaker dependence,  $E_0^{1/4}$  ( $\beta = 0.5$ ), is described as the gravitydominated regime, as here also work against the gravitational field costs energy. Our results lie on the lower side of this window of  $\beta$  values, indicating that besides material strength other energy dissipation channels, such as intergranular friction, are operative.

Finally, we may discuss the time,  $t_{stop}$ , that it takes for the aggregate to slow down. Using Newton's law, equation (2), and the energy-proportional stopping, equation (3), we have

$$M\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = -\frac{M}{2}\frac{1}{\lambda}v^2.$$
(8)

This equation can be trivially integrated to find the time  $t_{\text{stop}}$  at which the projectile velocity decreased from its initial value v to a fraction  $\sqrt{\epsilon}v$ ,

$$t_{\text{stop}} = \frac{2\lambda}{v} \left[ \frac{1}{\sqrt{\epsilon}} - 1 \right]. \tag{9}$$

Hence,  $t_{\text{stop}} \simeq \lambda/v$ , up to a factor of order unity. Again, for  $\epsilon \to 0$ , the stopping time formally diverges.

We plot in Fig. 5 the time it takes projectiles to slow down to a fraction,  $\epsilon = 0.1$ , of the initial energy. Indeed, the data show an approximate  $N^{1/3}$  dependence of  $t_{\text{stop}}$  as it originates from the proportionality of  $t_{\text{stop}}$  with  $\lambda$ . Also the 1/v dependence is manifest, in that aggregates with  $v = 50 \text{ m s}^{-1}$  need only half the time for stopping as compared to aggregates with  $v = 25 \text{ m s}^{-1}$ .

#### 4 SUMMARY

We identified a regime in the stopping of granular aggregates in which the projectile kinetic energy decreases exponentially with penetration depth. This regime ends when the projectile is so strongly fragmented that individual grains are stopped in the target rather than the aggregate as an ensemble. The stopping processes occurring during and after projectile fragmentation are complex, since they are influenced by fragment shape and even fragment– fragment collisions can occur; also energy dissipation processes resulting from intergranular friction and viscoelastic forces become more dominant at small grain velocities. We therefore exclude them from our analysis. We have assumed equally weak bonding amongst grains in the projectile and in the target. Changing this scenario might lead to different results. A projectile with weaker bonding than the target will likely fragment completely upon impact, and strongly bonding the projectile will approach the limit of a compact impactor. Our results indicate that, even in this regime of weak bonding, stopping can be described using Poncelet's law, which was originally designed for the stopping of compact objects in granular media (Katsuragi & Durian 2007). This regime is characterized by a stopping force proportional to the projectile energy. In our simulations, this stopping phase proceeds extremely rapidly and, therefore, most of the energy is lost while the projectile maintains its integrity, and fragmentation can be roughly neglected.

In addition, the stopping force of an aggregate containing N grains is proportional to  $N^{2/3}$  rather than N; that is, it increases with the cross-sectional area rather than with the volume of the projectile. Such a dependence is reminiscent of hydrodynamic drag forces, but has also been found in the stopping of (compact) atomic clusters in bulk materials. The grains at the collision interface lose energy while the grains farther up in the projectile are not yet aware of that energy loss, until nearly complete cluster fragmentation occurs: the 'clearing the way effect' (Anders & Urbassek 2007).

These results are relevant for the interaction of granular aggregates impinging on porous matter with applications in dust interaction with rocky moons or asteroids, mass-asymmetric collisions of dust aggregates in the protoplanetary disc, and collisions between particles in planetary rings. For instance, this might be relevant for mixing in regoliths like the lunar regolith (Szalay et al. 2019).

#### ACKNOWLEDGEMENTS

We thank for useful discussions with S. Simondi and N. Arista. ENM acknowledges support by a SIIP-UNCuyo grant and EMB thanks PICT2014-0696.

#### REFERENCES

- Ambroso M. A., Santore C. R., Abate A. R., Durian D. J., 2005, Phys. Rev. E, 71, 051305
- Anders C., Urbassek H. M., 2005, Nucl. Instrum. Meth. B, 228, 57
- Anders C., Urbassek H. M., 2007, Nucl. Instrum. Meth. B, 258, 497
- Anders C., Bringa E. M., Ziegenhain G., Urbassek H. M., 2011, New J. Phys., 13, 113019
- Bartali R., Rodriguez-Linan G. M., Nahmad-Molinari Y., Sarocchi D., 2013, Role of the Granular Nature of Meteoritic Projectiles in Impact Crater Morphogenesis. preprint (arXiv:1302.0259v2)
- Blum J., Schräpler R., 2004, Phys. Rev. Lett., 93, 115503
- Britt D. T., Consolmagno G. J., 2001, Icarus, 152, 134
- Carroll S. J., Nellist P. D., Palmer R. E., Hobday S., Smith R., 2000, Phys.
- Rev. Lett., 84, 2654

#### Stopping of porous projectiles L17

- Chokshi A., Tielens A. G. G. M., Hollenbach D., 1993, ApJ, 407, 806
- Corrigan C. M., Zolensky M. E., Dahl J., Long M., Weir J., Sapp C., Burkett P. J., 1997, Meteorit. Planet. Sci., 32, 509
- Dominik C., Tielens A. G. G. M., 1997, ApJ, 480, 647
- Fujiwara A. et al., 2006, Science, 312, 1330
- Holsapple K. A., 1993, Annu. Rev. Earth Planet. Sci., 21, 333
- Hurley R. C., Lim K.-W., Andrade J. E., 2015, in Iskander M., Bless S., Omidvar M., eds, Rapid Penetration into Granular Media. Elsevier, Oxford, p. 291
- Kataoka A., Tanaka H., Okuzumi S., Wada K., 2013, A&A, 557, L4
- Katsuragi H., 2016, Physics of Soft Impact and Cratering. Lecture Notes in Physics, Vol. 910. Springer, Tokyo, Japan
- Katsuragi H., Durian D. J., 2007, Nature Phys., 3, 420
- Kofman W. et al., 2015, Science, 349, aab0639
- Krijt S., Ormel C. W., Dominik C., Tielens A. G. G. M., 2015, A&A, 574, A83
- Krijt S., Ormel C. W., Dominik C., Tielens A. G. G. M., 2016, A&A, 586, A20
- Li Y., Dove A., Curtis J. S., Colwell J. E., 2016, Powder Technol., 288, 303
- Melosh H. J., 1989, Impact Cratering: A Geologic Process. Oxford Univ. Press, New York
- Melosh H. J., 2011, Planetary Surface Processes. Cambridge Univ. Press, Cambridge
- Nakamura A. M., Setoh M., Wada K., Yamashita Y., Sangen K., 2013, Icarus, 223, 222
- Okuzumi S., Tanaka H., Kobayashi H., Wada K., 2012, ApJ, 752, 106
- Omidvar M., Iskander M., Bless S., 2014, Int. J. Impact Eng., 66, 60
- Paszun D., Dominik C., 2009, A&A, 507, 1023
- Pätzold M. et al., 2016, Nature, 530, 63
- Planes M. B., Millán E. N., Urbassek H. M., Bringa E. M., 2017, A&A, 607, A19
- Popok V. N., Barke I., Campbell E. E. B., Meiwes-Broer K.-H., 2011, Surf. Sci. Rep., 66, 347
- Prabhu N. V., Sharp K. A., 2005, Annu. Rev. Phys. Chem., 56, 521
- Pratontep S., Preece P., Xirouchaki C., Palmer R. E., Sanz-Navarro C. F., Kenny S. D., Smith R., 2003, Phys. Rev. Lett., 90, 055503
- Ringl C., Urbassek H. M., 2012, Comput. Phys. Commun., 183, 986
- Ringl C., Bringa E. M., Urbassek H. M., 2012, Phys. Rev. E, 86, 061313
- Shulga V. I., Vicanek M., Sigmund P., 1989, Phys. Rev. A, 39, 3360
- Sigmund P., 1989, J. Vac. Sci. Technol., A7, 585
- Sigmund P., 2000, ICRU News, 1, 5
- Stukowski A., 2010, Model. Simul. Mater. Sci. Eng., 18, 015012Szalay J. R., Pokorny P., Sternovsky Z., Kupihar Z., Poppe A. R., Horanyi M., 2019, J. Geophys. Res., 124, 143
- Tsimring L. S., Volfson D., 2005, in Garcia-Rojo R., Herrmann H. J., Mc-Namara S., eds, Powders and Grains 2005. A. A. Balkema, Rotterdam, p. 1215
- Yamamoto S., 2002, Icarus, 158, 87

This paper has been typeset from a TEX/LATEX file prepared by the author.

## Influence of porosity on high-velocity mass-asymmetric collisions

María Belén Planes,<sup>1</sup> Emmanuel N. Millán,<sup>2</sup> Herbert M. Urbassek<sup>®3★</sup> and Eduardo M. Bringa<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup>CONICET and Facultad de Ingenería, Universidad de Mendoza, Mendoza 5500, Argentina

<sup>2</sup>CONICET, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales and ITIC, Universidad Nacional de Cuyo, Mendoza 5500, Argentina

<sup>3</sup>Physics Department and Research Center OPTIMAS, University Kaiserslautern, Erwin-Schrödinger-Straße, D-67663 Kaiserslautern, Germany

<sup>4</sup>Centro de Nanotecnología Aplicada, Facultad de Ciencias, Universidad Mayor, 8580000 Huechuraba, Santiago, Chile

Accepted 2019 December 20. Received 2019 December 17; in original form 2019 November 19

#### ABSTRACT

Using granular mechanics, we study the influence of porosity on the collisions of spherical granular aggregates with a mass ratio of around 60. At high filling factors, the projectile produces a crater on the target, similar to impacts on a granular bed. However, at low filling factors, the small projectile passes through the large target, strongly fragmenting it. By a consideration of the lateral grain velocities during the collision, we attribute this behaviour to the 'piston effect', in which the projectile loses momentum mainly to the grains below it. Due to an increase in grain–grain interactions as porosity decreases, the piston effect loses its importance for higher filling factors,  $\phi \gtrsim 0.2$ . These results may prove useful in modelling collisions occurring in debris discs.

Key words: methods: numerical – planets and satellites: formation – protoplanetary discs.

#### **1 INTRODUCTION**

The study of granular collisions often relies on the use of granularmechanics codes, in which the collision between aggregates can be modelled by the numerical simulation of the interaction between individual grains. Several such codes have been devised and applied to collision scenarios (Dominik & Tielens 1997; Wada et al. 2007; Paszun & Dominik 2009; Ringl & Urbassek 2012). Here, the interaction between equal-mass aggregates has been studied with particular intensity, varying parameters such as the aggregate porosity, the collision velocity, or the impact parameter (Wada et al. 2007, 2008; Suyama, Wada & Tanaka 2008; Paszun & Dominik 2009; Wada et al. 2009, 2011; Ringl et al. 2012b; Gunkelmann, Ringl & Urbassek 2016b; Katsuragi 2016). However, in reality collisions will, as a rule, be asymmetric in that the size – and mass – of the collision partners will differ (Birnstiel, Fang & Johansen 2016).

Mass-asymmetric collisions were studied experimentally and reviewed by Güttler et al. (2010) and Schräpler et al. (2018). For mm- and cm-sized aggregates, they find the barrier between fragmentation and growth to be situated at around 1 m s<sup>-1</sup>, independently of the mass ratio, in a wide range of projectile masses; these findings agree with earlier studies (Blum & Wurm 2008). Further experiments were performed by Whizin, Blum & Colwell (2017) by colliding mm-sized dust aggregates with loosely bound cm-sized agglomerates. For mass ratios around 60, a filling factor of 0.3, and velocities above 1 m s<sup>-1</sup>, they found fragmentation in the majority of their experiments, and a few cases termed erosion. In these studies, no dependence on aggregate porosity is discussed. The influence of porosity on aggregate collisions was studied by Meru et al. (2013), who modelled asymmetric collisions of aggregates using hydrocode simulations via smoothed particle hydrodynamics. They found that aggregate growth was weakened for high porosities (above 0.37) and generally increased for low porosities. Gunkelmann et al. (2016b) used granular mechanics to study the influence of porosity, albeit only in symmetrical collisions. They found that the threshold velocity for agglomerate fragmentation decreases with the porosity of the aggregates.

In this work, we explore asymmetric collisions at relatively high collision velocities with particular emphasis on their dependence on aggregate porosity. We focus on a high velocity,  $100 \text{ m s}^{-1}$ , such that it is typical of debris discs (Krivov, Löhne & Sremcević 2006; Wyatt et al. 2007; Gáspár, Rieke & Balog 2013). In protoplanetary dust discs, velocities will be usually smaller, around  $1 \text{ m s}^{-1}$ , but may also reach 60–100 m s<sup>-1</sup> (Blum & Wurm 2008; Brauer, Henning & Dullemond 2008). We show that even for a mass ratio of 60, distinct differences to impacts on a flat bed arise. These are particularly pronounced for small filling factors, where the projectile penetrates the target. The physical origin of this phenomenon will be traced back to what may be termed as the piston effect in the snow-plow model of granular compaction (Johnson 1991; Borg et al. 2005).

#### 2 METHOD

Our model of granular interactions is based on the work by Dominik & Tielens (1997). It assumes a repulsive normal force based on the Hertzian model, additionally viscoelastic dissipation

<sup>\*</sup> E-mail: urbassek@rhrk.uni-kl.de

**Table 1.** Characteristics of the projectile and target clusters constructed for a nominal filling factor  $\phi$ .  $N_p$  and  $\phi_p$ : the number of grains and filling factor of the projectile, respectively.  $N_t$  and  $\phi_t$ : analogous for the target.  $\mu$ : mass ratio between target and projectile.

$\phi$	Np	$\phi_{ m p}$	Nt	$\phi_{ m t}$	$\mu$
0.12	1842	0.13	99 206	0.114	53.86
0.15	2248	0.16	133 834	0.154	59.53
0.18	2535	0.183	157 951	0.182	62.31
0.20	2777	0.201	180 893	0.208	65.14
0.22	3246	0.235	199311	0.229	61.40
0.25	3551	0.257	224 478	0.2585	63.22
0.30	4094	0.296	267 687	0.308	65.39
0.35	5093	0.36	309 379	0.356	60.75
0.40	5667	0.403	347 175	0.399	61.26

of the motion in normal direction, an attractive force, sliding friction, rolling friction, and friction of twisting motion.

The exact numerical expressions for these forces are given by Ringl & Urbassek (2012), where also the details of the implementation are provided. Of particular importance is the attractive force, which we model according to the Derjaguin–Muller–Toporov model (Derjaguin, Muller & Toporov 1975; Maugis 2000).

As it is typical of simulations (Wada et al. 2007; Ringl et al. 2012b) – as well as for dedicated experiments (Poppe, Blum & Henning 2000; Blum & Wurm 2008) – of aggregate collisions, we use spherical grains, and all grains have the same radius. Our aggregates are composed of such spherical silica grains with a radius of  $R_{\text{grain}} = 0.76 \,\mu\text{m}$ ; this grain size was the one adopted according to Poppe et al. (2000). A cluster is defined as a set of connected grains, where the distance between the centres of two connected grains must be  $\leq 2R_{\text{grain}} = 1.52 \,\mu\text{m}$ .

The projectile and target aggregates are constructed using the method of Ringl, Bringa & Urbassek (2012a), which allows us to build aggregates of a predefined filling factor. It puts grains stochastically into a sphere until the required filling factor is reached. Grains that fall outside of the sphere are considered for the local filling factor of the grains inside the sphere but are not present in the final aggregates. This allows us to obtain a homogeneous filling factor: in the aggregates. We study the following values of filling factors:  $\phi = 0.12, 0.15, 0.17, 0.20, 0.25, 0.30, 0.35, and 0.40$ .

We employ a granular-mechanics simulation code whose details have been published by Ringl & Urbassek (2012). In the simulation, a small spherical projectile aggregate of radius  $R_p$  collides with a large target aggregate of radius  $R_t$ . We fix here  $R_p = 24R_{grain} =$ 18.235 µm and  $R_t = 4R_p = 72.5$  µm. Since projectile and target have the same filling factor, the mass ratio between the target and projectile is hence expected to be around  $\mu = 60$ . However, fluctuations in the packing density can occur inside the aggregates due to the statistical nature of the grain packings, and as a consequence, the actual mass ratio varies around  $60 \pm 6$ . The total number of grains in the projectile,  $N_p$ , varies between 1842 and 5667, and in the target,  $N_t$ , between 99 206 and 347 175, for the lowest and largest  $\phi$ , respectively. For more details, see Table 1.

In our simulations, we employ the material parameters for silica; the Young's modulus is Y = 54 GPa, the Poisson ratio  $\nu = 0.17$ , and the specific surface energy  $\gamma = 25$  mJ m<sup>-2</sup> (Chokshi, Tielens & Hollenbach 1993). The mass density is taken as  $\rho = 2 \times 10^3$  kg m<sup>-3</sup> (Blum & Schräpler 2004), such that the mass of a grain amounts to  $m = 3.68 \times 10^{-15}$  kg.

The time-step of the simulation amounts to 50 ps (Ringl & Urbassek 2012); we perform for each simulation of the order of

 $2\times10^6$  time-steps, amounting to 100  $\mu s$ . The equilibrium overlap between grains in our model is such that the distance between grain centres is 1.5197  $\mu m$ . Grains are considered to be in contact if they have non-zero overlap, and their coordination number indicates the number of contacts for each grain.

The collisions are performed in a system, where the target is initially at rest,  $v_t = 0$ , and the projectile moves towards it with a predefined velocity  $v = 100 \text{ m s}^{-1}$ , such that a head-on collision with the target aggregate takes place. We choose the *z*-axis of our coordinate system in the direction antiparallel to the impinging projectile velocity such that negative velocities are in the direction of the impinging projectile.

Data analysis and rendering of granular snapshots have been performed using OVITO (Stukowski 2010).

#### **3 RESULTS**

#### 3.1 Difference between lower and higher filling factors

We start by comparing the collisions in the two most extreme cases,  $\phi = 0.15$  and 0.40. This will give us qualitative insight into the relevant processes. Later, quantitative data for all filling factors will be presented.

Fig. 1 displays the initial state and the result of a collision of two aggregates with a low filling factor,  $\phi = 0.15$ . As a result of the collision, the projectile has completely penetrated the target and dragged part of the material, which continues to move down, out of the target. A hollow-cylinder structure has been left as a remnant of the target that remains almost at rest and contains 78.5 per cent of the total grain number,  $N_{\text{tot}}$ . Here, we denote by  $N_{\text{tot}} = N_p + N_t$ the total number of grains in the system. Also, large clusters are observed that have been fragmented off the target; the six largest clusters contain 16.7 per cent of  $N_{\text{tot}}$ . A number of individual grains are ejected from the target, amounting to 4.8 per cent of  $N_{\text{tot}}$ , in addition to the grains counted in the above-mentioned clusters. As can be seen in Fig. 1, these are isolated grains rather than small contiguous clusters.

Fig. 2 shows the initial state and the result of a collision with the same velocity, and same radius for both projectile and target, but with a higher filling factor, 0.40. There is a drastic change in the outcome of the collision, with respect to the low filling-factor case. The projectile fuses with the target. In the terminology of Güttler et al. (2010), this collision could be classified as 'sticking by penetration'. There are no large clusters ejected and the number of ejected grains is now only 3.6 per cent of  $N_{tot}$ . The final state shows a crater with a rim that has evolved into rim 'petals'. Similar structures have been observed in the hypervelocity impact of compact targets (Valerio-Flores et al. 2004; Marchi et al. 2019), and have been discussed there to originate from solid flow. We note that our results are different from the transient structures, which appear due to the fluidization of an impacted granular target, leading to splash (Caballero-Robledo et al. 2012).

#### 3.2 Differences in the initial stage of the collision

Fig. 3 highlights the boundaries of the collided region by colouring grains with their lateral velocities  $(v_{xy})$ , i.e. the collision component perpendicular to the impact velocity. Note that this criterion allows us to separate quite sharply the boundary between the uncollided target and the zone affected by the collision. For small  $\phi$ , Fig. 3(a), the projectile remains well recognizable while penetrating the target. Indeed, the collision zone appears to be not much larger than the



Figure 1. Snapshots showing the outcome of a collision at a velocity of  $100 \text{ m s}^{-1}$  for a filling factor of 0.15. Grains are coloured according to their vertical position. Left: initial snapshot. Right: final snapshot.



Figure 2. Analogous to Fig. 1, but for a filling factor of 0.40.



**Figure 3.** Time series showing the collision of two aggregates at a velocity of 100 m s<sup>-1</sup> for a filling factor of 0.15 (a) and 0.40 (b). Grains are coloured according to their lateral velocity,  $v_{xy}$ . A central slice of thickness 10 µm is shown. Times from left to right: 0.175, 0.25, 0.375, and 0.5 µs.



Figure 4. Continuation of Fig. 3 for times from left to right: 1.5, 3.0, 4.5, 7.5, and 15 µs.

projectile's initial extensions. Note also that the collision zone does not penetrate back into the projectile while it impinges on the target, in contrast to the case of high  $\phi$ . For the high filling factor, 0.40, Fig. 3(b) shows the spherical growth of the collided zone. There is a transmission of the collision to the sides, outside the projectile, and a rapid spread of lateral velocity at the target.

#### 3.3 Piston effect versus petal structures

In order to study the physics behind this behaviour, we present in Figs 4 and 5 snapshots for filling factors of  $\phi = 0.15$  and 0.40. Grains are coloured with their local lateral velocity,  $v_{xy}$ , in Fig. 4 and with their local velocity in the collision direction,  $v_z$ , in Fig. 5. These snapshots are taken at later times than those of Fig. 3 and thus show how the final shapes of the collided clusters emerge.

Fig. 4 shows the propagation of the lateral velocity. While for the low filling factor ( $\phi = 0.15$ ), Fig. 4(a), the grains collide with each other while they make their way, generating lateral velocities in the contour of this path, for high filling factor ( $\phi = 0.40$ ), Fig. 4(b), the higher grain density translates into a totally different behaviour, where all the grains of the target are affected by this lateral transmission, except those that are below the impact zone, where this effect dissipates rapidly.

Fig. 5 shows the vertical velocities for the two filling factors chosen. Note that grain velocities in vertical direction are initially 100 m s<sup>-1</sup> in the projectile, but will approach velocities close to the centre-of-mass velocity of the system,  $100/61 \sim 1.6 \text{ m s}^{-1}$  for a mass ratio of 60:1. As we are interested in the final stages of the slowing-down process, the figure focuses on velocities in the range of 0–5 m s<sup>-1</sup>. Fig. 5 demonstrates how, as time advances, the collision sets larger amounts of the target interior in motion. However, while the collided region grows in all three dimensions approximately spherically for large filling factors, it grows mainly in one dimension – in the collision direction – for small filling factors.

From the snapshots, we calculate the average velocity with which the collision zone expands, differentiating between the velocity for lateral expansion,  $v_1$ , and the velocity for vertical expansion,  $v_v$ . Since these expansion velocities are not the velocities of individual grains, they are not immediately provided by the granularmechanics code, but are evaluated by analysing the distance covered by the expansion front in a time interval. Analogously, the velocity



Figure 5. Time series showing the collision of two aggregates at a velocity of 100 m s<sup>-1</sup> for a filling factor of 0.15 (a) and 0.40 (b). Grains are coloured according to their vertical velocity,  $v_z$ . A central slice of thickness 10 µm is shown. Times from left to right: 1.5, 3.0, 4.5, 7.5, and 15 µs.



Figure 6. Time dependence of the collision-zone expansion velocity in lateral,  $v_1$ , and vertical,  $v_v$ , directions, and compared to the velocity of the projectile ('piston'),  $v_p$ . Data are for the collision of two aggregates at a velocity of 100 m s<sup>-1</sup> for filling factors  $\phi = 0.15$  and 0.40.

of the expanding crater is determined and denoted as the 'piston' (or slowing-down projectile) speed,  $v_p$ . All these velocities depend on the time after impact; their time evolution is displayed in Fig. 6.

For the denser clusters,  $\phi = 0.40$ , the velocities for vertical and lateral expansions fairly coincide with each other; this agrees with the roughly spherical expansion of the collision zone seen in Figs 4 and 5. In detail, the vertical expansion is slightly, but systematically, faster than the lateral expansion; this is plausible as the driving force of the expansion, the projectile momentum, is directed along the vertical direction. Both expansion speeds are also larger than the momentary speed of the projectile, that is, the target response always travels ahead of the projectile.

For the tenuous target,  $\phi = 0.15$ , the vertical expansion speed closely coincides with the momentary projectile speed; it is even slightly higher than that for the denser target. This is because the resistive force for decelerating the projectile in the tenuous target is smaller than that in the dense target. The largest deviation from the physics of the dense target, however, shows up for the lateral

#### 1942 M. B. Planes et al.



Figure 7. Final structure ( $t = 100 \ \mu s$ ) of the crater rim decaying into a petal structure with increasing filling factor  $\phi$ :  $\phi = 0.20$  (a), 0.25 (b), and 0.30 (c). Grains are coloured according to their lateral velocity,  $v_{xy}$  (perpendicular to the incident projectile direction).

speed, which is considerably below the vertical expansion speed by a factor of around 5. This feature corresponds to the strongly asymmetric expansion of the collision zone highlighted in Figs 4 and 5.

The phenomenon that a projectile travels on a straight line through the medium without considerable energy loss has been termed as 'snow-plow' or 'piston effect'. The snow-plow model assumes no strength and no pressure build-up (Johnson 1991), which also implies the lack of high-velocity ejecta. Attenuation is due to momentum spread but there is neither a fracture nor a plasticity contribution to the attenuation. The lack of strength in the model is an approximation, which leads to disagreement with experimental results (Borg et al. 2005). Other models like the  $P-\alpha$ model (Wünnemann, Collins & Melosh 2006; Collins, Melosh & Wünnemann 2011) include strength and are used for granular materials (Borg et al. 2005). However, they were intended for ductile porous materials, and might not be easily applied for brittle granular materials. Even 2D simulations of sand compaction, without inner grain fragmentation or thermal effects, can be challenging (Dwivedi, Pei & Teeter 2015). The piston effect describes, for example, collisions with aerogel targets (Coulson 2009; Niimi et al. 2011). It has also been considered as the reason for an increase in cluster ranges as compared to monomer ranges in the bombardment of solids by nanoprojectiles (Anders et al. 2012).

The 'piston effect' could have been seen in experiments like those performed by Paraskov, Wurm & Krauss (2007), who studied impacts into highly porous targets ( $\sim$ 80 per cent) in the mm-scale. These collisions generally show a very destructive behaviour for impact velocities of a few tens of  $m s^{-1}$ , resulting in crater formation and an extensive erosion of the whole target surface and deeper target layers. However, for the impacts at higher collision velocities, ejecta were also detected on the back side of the planar-bed target, reminiscent of the behaviour observed here for spherical targets.

The situation is very different for the final status in the highfilling-factor collision systems, where we already mentioned the formation of petal structures. These petals originate from the rim that inevitably surrounds the crater in impact phenomena (Melosh 1989; Katsuragi 2016). In impacts on granular beds, the rim usually has a (roughly) axisymmetric form (Planes et al. 2017, 2019). Here, in our simulations, the rim tears during formation and thus forms the eight petals seen in Fig. 2(b).

Further examples of the final rim structure are shown for filling factors of  $\phi = 0.20$ –0.30 in Fig. 7. The grain colouring in these snapshots was chosen according to the velocity,  $v_{xy}$ , perpendicular to the impinging projectile velocity, and hence it shows the transverse expansion of the opening crater structure. As only small velocity gradients show up in these snapshots, we can be confident that the petal structures are near-final. This is because the fragmentation velocity between two grains is 0.17  $m\,s^{-1}$  in this model (Ringl & Urbassek 2012).

We see that, as the filling factor increases, the tendency for the crater rim to display ruptures also increases, creating the petal structures.

Two effects are responsible hereto, as can be seen when studying videos of the impact dynamics. (i) At smaller  $\phi$ , the rim ruptures during its expansion after the impact, since cohesion between the grains is not strong due to the low filling factor. (ii) At higher  $\phi$ , we observe the emission of aggregated clusters from the rim, leaving holes behind that induce the transformation from a coherent rim to an ensemble of petals. When the filling factor is too low, as in the case of  $\phi = 0.15$  in Fig. 2(b), the lateral velocity gradient is too small such that the rim retains its coherence.

Note also that for  $\phi = 0.20$ , Fig. 7(a), the action of the piston effect is visible in that the lower cap of the target aggregate has almost been fragmented off; however, we did not observe its detachment until the end of the simulations, and the gradients in  $v_z$  velocity were then too small to expect full fragmentation from the target to occur even on much longer time-scales.

We finally compare the collision results with the collision of a spherical granular projectile on a planar granular bed. Such simulations were performed recently (Planes et al. 2017), where the filling factor was fixed to 0.36, and the velocities were between 5 and 200  ${\rm m\,s^{-1}}.$  However, the results were quite different, showing no fragmentation, since the assumption of the target to be a (semiinfinite) planar medium does not allow the projectile, or the collided target, to continue its motion. Rather the projectile is efficiently stopped at the surface, resulting in a fused aggregate and a minor contribution of ejecta. These processes were already discussed in the context of a collision against a much larger (semi-infinite and flat surface) aggregate (Planes et al. 2019). We conclude that even collisions with a mass ratio of 60 behave quite differently than impacts into a planar granular bed.



**Figure 8.** Time series showing the collision of two aggregates at a velocity of 100 m s<sup>-1</sup> for a filling factor of 0.15 (a) and 0.40 (b). Grains are coloured according to their coordination number,  $N_c$ . A central slice of thickness 10 µm is shown. Times from left to right: 1.5, 3.0, 4.5, 7.5, and 15 µs.

#### 3.4 Compaction

The compaction of the aggregate can be analysed through the coordination number,  $N_c$ , which is given by the number of contacts each grain has. Fig. 8 shows the time evolution for  $\phi = 0.15$  (Fig. 8a) and  $\phi = 0.40$  (Fig. 8b), where the grains were coloured by their individual coordination number.

Below the projectile, there is a compaction wave (Ringl et al. 2015; Gunkelmann, Ringl & Urbassek 2016a). For a filling factor of 0.15, initially there is a strong reflected wave that leads to a thin layer of grains with coordination number equal to 0; this means that these grains have lost all contact with the aggregate and are ejected. This effect is much weaker for  $\phi = 0.40$ .

Fig. 9 shows the coordination number averaged over all grains, Z, at the end of the collision, as a function of  $\phi$ ; also, the coordination number averaged over only the largest cluster (i.e. the collided target) is shown. Note that before the collision, the coordination number equals 2 for all filling factors. This is natural for the way in which clusters are built in this study and is a common feature of clusters assembled by ballistic aggregation (Wada et al. 2011). It is observed that compaction increases strongly due to the collision, both for low and high filling factors. The increase is non-linear in  $\phi$ ; it is naturally somewhat higher in the collided target than when averaged over all grains after the collision, since in the ejecta, low coordination may still persevere. This difference between compaction in the largest cluster and the entire system is particularly pronounced for the smallest filling factors where ejection is strongest; see Section 3.5. Güttler et al. (2010) assumed that after a collision,  $\phi$  has increased by 50 per cent. We agree only for low  $\phi$ , but a change is found in this dependence for higher  $\phi$ , where for  $\phi = 0.4$ , the mean coordination has doubled.

#### 3.5 Ejecta

Finally, we analyse the number of ejected grains, *Y*, in its dependence on  $\phi$ . For this calculation, we take into account all the grains that have lost contact with the target remnant. For low  $\phi$ , this includes large clusters that come off the target, while for cases of high  $\phi$ , the ejecta are mostly monomers.

Fig. 10 shows an abrupt change for  $\phi \sim 0.2$ . For  $\phi < 0.2$ , we find a linear relationship between the normalized number of ejecta and  $\phi$ , but for higher values this dependence dramatically changes. This happens due to the fact that as the filling factor increases, the projectile fragments but fails to detach clusters below the target. So ejection decreases while a deformation of the aggregate is observed as it tends to an oval shape. As the filling factor continues to increase,  $\phi \geq 0.3$ , there is a transition to rim growth and fracture. The crater rim starts to grow and leads to the petals described above, with ejection of loose grains. At even higher  $\phi \geq 0.3$ , fragments from the petals are also ejected, causing a new increase in ejection *Y*, as seen in Fig. 10.

We included in Fig. 10(a) a dashed line,  $Y/N_{tot} = 0.016$ , that separates the mass-gain regime from the mass-loss regime. Here, we define as mass-gain if  $Y < N_p$ , and as we have  $\mu = 60$ ,  $Y/N_{tot} < 1/61 \sim 0.016$  defines mass-gain in the target. From the point of view of mass-loss/gain, in the case of  $\phi = 0.15$ , a fraction of 79.8 per cent of the initial mass remains in the target, indicating a considerable loss of mass as a result of the collision. On the other hand, in the case of filling factor 0.4, the target maintains 96.4 per cent of its initial mass, so its mass-loss is much smaller. For intermediate filling factors, it is observed that some of them are on the line of mass-gain, indicating little or (surprisingly) no mass lost in this hypervelocity collision.

Previous studies found growth for similar collision conditions. Meisner et al. (2013) studied impacts between sub-mm SiO<sub>2</sub> dust aggregates at high speed (up to 71 m s<sup>-1</sup>) for an initial filling factor of 0.32. They experimentally observed mass growth as a result of these collisions, with an efficiency depending on impact velocity. On the other hand, Teiser & Wurm (2009) found in experiments that a collision of sub-cm SiO<sub>2</sub> projectiles with a compact SiO<sub>2</sub> target at high collision velocities (several tens of m s<sup>-1</sup>) could result in the addition of projectile mass to the target.

However, some experiments predict a lower number of ejecta. Güttler et al. (2010) – in equations (39) for porous materials and (41) for compact ones – predict for our collision systems a number of ejected grains, Y = 23 and 2 for  $\phi = 0.15$  and 0.40, respectively. These predictions are considerably smaller than our results. Also, we differ strongly from the results presented in fig. 11 by Güttler



Figure 9. Coordination number, Z, at the end of the simulation,  $t = 100 \ \mu s$ , as a function of filling factor  $\phi$ . Data show averages over all grains,  $Z_N$ , and averages only over the largest cluster (i.e. the collided target),  $Z_{LC}$ .



Figure 10. The number of ejected grains, Y, normalized with the total number of grains,  $N_{tot}$ , as a function of filling factor  $\phi$ . The dashed line separates the mass-gain regime (below the line) from the mass-loss regime (above the line).

et al. (2010), where for similar mass of the projectile, the collision between porous projectiles and porous target leads to fragmentation for impact velocities above 5 m s<sup>-1</sup>; only if both projectile and target are compact, this threshold increases to 25 m s<sup>-1</sup>. In this work, for an impact velocity several times higher, we find fragmentation in the porous case, but only a strong erosion for the compact case, instead of total fragmentation.

#### **4** CONCLUSIONS

In summary, even for mass ratios as high as  $\mu = 60$  studied here, collisions between granular aggregates may differ strongly from those of an aggregate with a granular bed. For high filling factors ( $\phi \gtrsim 0.2$ ), a crater is formed in the target. Extrapolating previous results on impacts on a granular bed from Planes et al. (2017) gives a slight overestimation of crater depth. This is because previous results were

concerned with smaller impacting clusters, and in this work, finitesize effects are likely affecting final penetration. Recent simulations also indicate that the dependence of penetration on cluster size might have a different power-law behaviour for large clusters (Planes et al. 2019). We find here that – in contrast to impacts on granular beds – the crater rim fractures, forming petals. For low filling factors, the projectile can simply penetrate through the target, leaving a big hole. The separation between the two regimes is quite abrupt and occurs for filling factors of  $\phi \sim 0.2$ .

During the collision, a collision zone develops, which can be analysed by the vertical and lateral velocities of grains in it. We observe a quite localized expansion of the collision zone, which shares many features with a shock front, albeit moving at much smaller velocity. While this collision zone expands approximately spherically in dense targets, such that eventually the entire target is included, in highly porous, tenuous targets the collision zone does not expand laterally; rather, the projectile moves like a piston through the target. This effect may hence be termed as snow-plow or piston effect (Johnson 1991; Borg et al. 2005).

In the window of  $0.20 < \phi < 0.35$ , we observe the target to grow by the assembly of mass from the projectile. At larger filling factors, grain ejection increases, leading to a net mass-loss, while at smaller  $\phi$ , the projectile tears the target aggregate. In any event, the material below and at the sides of the crater formed (in cases of high filling factors) has been strongly compacted; the average number of contacts has almost doubled from its original value. This compaction effect also shows up for the target that was torn by the passing projectile (at low  $\phi$ ) and refers to the side walls of the remaining hollow-cylindrical structure.

Our results show that in mass-asymmetric collisions, even at high velocities ( $v = 100 \text{ m s}^{-1}$  in the case studied here), aggregates may not completely fragment but may even grow. This result may be particularly important for the description of collision processes in debris discs, where such high velocities are common (Gáspár et al. 2013).

The surface energy  $\gamma$  is a decisive parameter for modelling mutual collisions between silicate grains. The surface energy of hydrophilic amorphous silica is commonly assumed to be  $\gamma =$ 0.020-0.025 J m<sup>-2</sup> in the previous models of silica-grain collisions in a space environment (Chokshi et al. 1993; Dominik & Tielens 1997; Wada et al. 2007; Ormel et al. 2009; Ringl et al. 2012b; Hirashita & Li 2013; Seizinger, Speith & Kley 2013; Planes et al. 2017). In their compilation, Kimura et al. (2015) suggest surface energies of a few times 0.01 J m<sup>-2</sup> for wet silica and  $\gamma$  $\sim 0.2~J\,m^{-2}$  for dry silica, a large difference of up to an order of magnitude. The recent experimental results of Steinpilz, Teiser & Wurm (2019) are in support of Kimura et al. (2015); however, they only used samples with filling factors of 0.44  $< \phi < 0.54$ . The precise value of  $\gamma$  might change depending on the astrophysical environment, and large changes might modify quantitatively the value for the transition between fracture and aggregation, but the qualitative scenario, where porosity plays a key role, would remain the same.

High-velocity collisions between dust particles are prominent in debris discs (Krivov et al. 2006; Wyatt et al. 2007; Gáspár et al. 2013). Here, our findings may be used for setting up self-consistent models of dust collisions that describe the temporal evolution of the dust distribution, which immediately determines the lifetime of such discs (Krivov 2010). While destructive collisions dominate debris discs (Krivov et al. 2006), in this work, we find a narrow porosity window where growth is possible even at high collision velocities. These kinds of processes should be taken into account in collision models of debris discs (Krivov et al. 2006; Wyatt et al. 2007).

The porosity of dust aggregates has rarely been taken into account in previous models, because it is difficult to determine accurately as the scattering properties of large porous grains are qualitatively similar to those of small compact grains of the same mass and composition (Graham, Kalas & Matthews 2007; Shen, Draine & Johnson 2009; Kirchschlager & Wolf 2013; Hughes, Duchêne & Matthews 2018). However, this work points at the considerable impact that porosity could have on collisional models.

#### ACKNOWLEDGEMENTS

ENM acknowledges support by an SIIP-UNCuyo grant.

#### REFERENCES

- Anders C., Ziegenhain G., Ruestes C. J., Bringa E. M., Urbassek H. M., 2012, New J. Phys., 14, 083016
- Birnstiel T., Fang M., Johansen A., 2016, Space Sci. Rev., 205, 41
- Blum J., Schräpler R., 2004, Phys. Rev. Lett., 93, 115503
- Blum J., Wurm G., 2008, ARA&A, 46, 21
- Borg J. P., Chapman D. J., Tsembelis K., Proud W. G., Cogar J. R., 2005, J. Appl. Phys., 98, 073509
- Brauer F., Henning T., Dullemond C. P., 2008, A&A, 487, L1
- Caballero-Robledo G. A., Kelly K. P. D., Homan T. A. M., Weijs J. H., van der Meer D., Lohse D., 2012, Granular Matter, 14, 179
- Chokshi A., Tielens A. G. G. M., Hollenbach D., 1993, ApJ, 407, 806
- Collins G. S., Melosh H. J., Wünnemann K., 2011, Int. J. Impact Eng., 38, 434
- Coulson S. G., 2009, Meteorit. Planet. Sci., 44, 1421
- Derjaguin B. V., Muller V. M., Toporov Y. P., 1975, J. Colloid Interface Sci., 53, 314
- Dominik C., Tielens A. G. G. M., 1997, ApJ, 480, 647
- Dwivedi S. K., Pei L., Teeter R., 2015, J. Appl. Phys., 117, 085902
- Gáspár A., Rieke G. H., Balog Z., 2013, ApJ, 768, 25
- Graham J. R., Kalas P. G., Matthews B. C., 2007, ApJ, 654, 595
- Gunkelmann N., Ringl C., Urbassek H. M., 2016a, Comput. Part. Mech., 3, 429
- Gunkelmann N., Ringl C., Urbassek H. M., 2016b, A&A, 589, A30
- Güttler C., Blum J., Zsom A., Ormel C. W., Dullemond C. P., 2010, A&A,
- 513, A56
- Hirashita H., Li Z.-Y., 2013, MNRAS, 434, L70
- Hughes A. M., Duchêne G., Matthews B. C., 2018, ARA&A, 56, 541
- Johnson J. B., 1991, J. Glaciol., 37, 303
- Katsuragi H., 2016, Lecture Notes in Physics, Vol. 910, Physics of Soft Impact and Cratering. Springer, Japan
- Kimura H., Wada K., Senshu H., Kobayashi H., 2015, ApJ, 812, 67
- Kirchschlager F., Wolf S., 2013, A&A, 552, A54
- Krivov A. V., 2010, Res. Astron. Astrophys., 10, 383
- Krivov A. V., Löhne T., Sremcević M., 2006, A&A, 455, 509
- Marchi S. et al., 2019, J. Geophys. Res.: Planets
- Maugis D., 2000, Contact, Adhesion and Rupture of Elastic Solids. Springer, Berlin
- Meisner T., Wurm G., Teiser J., Schywek M., 2013, A&A, 559, A123 Melosh H. J., 1989, Impact Cratering: A Geologic Process. Oxford UP, New
- York
- Meru F., Geretshauser R. J., Schäfer C., Speith R., Kley W., 2013, MNRAS, 435, 2371
- Niimi R., Kadono T., Arakawa M., Yasui M., Dohi K., Nakamura A. M., Iida Y., Tsuchiyama A., 2011, Icarus, 211, 986
- Ormel C. W., Paszun D., Dominik C., Tielens A. G. G. M., 2009, A&A, 502, 845
- Paraskov G. B., Wurm G., Krauss O., 2007, Icarus, 191, 779
- Paszun D., Dominik C., 2009, A&A, 507, 1023
- Planes M. B., Millán E. N., Urbassek H. M., Bringa E. M., 2017, A&A, 607, A19
- Planes M. B., Millan E. N., Urbassek H. M., Bringa E. M., 2019, MNRAS, 487, L13
- Poppe T., Blum J., Henning T., 2000, ApJ, 533, 454
- Ringl C., Urbassek H. M., 2012, Comput. Phys. Commun., 183, 986
- Ringl C., Bringa E. M., Urbassek H. M., 2012a, Phys. Rev. E, 86, 061313
- Ringl C., Bringa E. M., Bertoldi D. S., Urbassek H. M., 2012b, ApJ, 752, 151
- Ringl C., Gunkelmann N., Bringa E. M., Urbassek H. M., 2015, Phys. Rev. E, 91, 042205
- Schräpler R., Blum J., Krijt S., Raabe J.-H., 2018, ApJ, 853, 74
- Seizinger A., Speith R., Kley W., 2013, A&A, 559, A19
- Shen Y., Draine B. T., Johnson E. T., 2009, ApJ, 696, 2126
- Steinpilz T., Teiser J., Wurm G., 2019, ApJ, 874, 60
- Stukowski A., 2010, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng., 18, 015012
- Suyama T., Wada K., Tanaka H., 2008, ApJ, 684, 1310

### 1946 M. B. Planes et al.

- Teiser J., Wurm G., 2009, MNRAS, 393, 1584
- Valerio-Flores O. L., Murr L. E., Hernandez V. S., Quinones S. A., 2004, J. Mater. Sci., 39, 6271
- Wada K., Tanaka H., Suyama T., Kimura H., Yamamoto T., 2007, ApJ, 661, 320
- Wada K., Tanaka H., Suyama T., Kimura H., Yamamoto T., 2008, ApJ, 677, 1296
- Wada K., Tanaka H., Suyama T., Kimura H., Yamamoto T., 2009, ApJ, 702, 1490
- Wada K., Tanaka H., Suyama T., Kimura H., Yamamoto T., 2011, ApJ, 737, 36
- Whizin A. D., Blum J., Colwell J. E., 2017, ApJ, 836, 94
- Wünnemann K., Collins G. S., Melosh H. J., 2006, Icarus, 180, 514
- Wyatt M. C., Smith R., Su K. Y. L., Rieke G. H., Greaves J. S., Beichman C. A., Bryden G., 2007, ApJ, 663, 365

This paper has been typeset from a  $T_{\ensuremath{E}} X/I \!\! \ensuremath{\Delta} T_{\ensuremath{E}} X$  file prepared by the author.

ROYAL ASTRONOMICAL SOCIETY MNRAS **503**, 1717–1733 (2021) Advance Access publication 2021 March 05

## Collisions between micro-sized aggregates: role of porosity, mass ratio, and impact velocity

María Belén Planes,<sup>1</sup> Emmanuel N. Millán,<sup>2</sup> Herbert M. Urbassek<sup>03</sup> and Eduardo M. Bringa<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup>CONICET and Facultad de Ingenería, Universidad de Mendoza, Mendoza 5500, Argentina

<sup>2</sup>CONICET, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales and ITIC, Universidad Nacional de Cuyo, Mendoza 5500, Argentina

<sup>3</sup>Physics Department and Research Center OPTIMAS, University Kaiserslautern, Erwin-Schrödinger-Straße, D-67663 Kaiserslautern, Germany

<sup>4</sup>Centro de Nanotecnología Aplicada, Facultad de Ciencias, Universidad Mayor, Av. Alemania 281, Temuco, Santiago, Chile

Accepted 2021 February 26. Received 2021 February 24; in original form 2020 November 23

#### ABSTRACT

Dust aggregate collisions usually occur between mass-asymmetric collision partners. Granular-mechanics simulations are used to study the influence of filling factor,  $\varphi$ , and impact velocity in collisions of spherical granular aggregates with different values of their mass ratio, but the same filling factor. Three possible outcomes are observed: (i) sticking, which might include penetration of the smaller aggregate into the larger aggregate; (ii) fragmentation of the largest aggregate into two large fragments, particularly due to the so-called piston effect for low filling factors; and (iii) total destruction of the aggregates. Most of the impact energy is spent by friction, with some fraction leading to compaction of the porous material. The erosion efficiency varies significantly with impact velocity, mass ratio, and porosity, but the accretion efficiency does not show such strong variations. For highly asymmetric collisions with high impact velocities ( $\simeq 100 \text{ m s}^{-1}$ ), grain accretion (growth) can occur for a 'window' in the filling factor ( $0.20 < \varphi < 0.35$ ). This window becomes wider as the impact velocity decreases. As the mass ratio of the aggregates decreases, the impact velocities that enable growth can also decrease. The mass distribution of the fragments follows a power-law distribution that is almost independent of the mass ratio, filling factor, and velocity.

Key words: methods: numerical - planets and satellites: formation - protoplanetary discs.

#### **1 INTRODUCTION**

Collisions between granular aggregates play an important role in several branches of astrophysics. Nowadays it is not well understood how aggregates of micron-sized grains (dust) could agglomerate to form planetesimals. In this context, in protoplanetary discs, collisions between dust particles may lead to the build-up of increasingly larger aggregates that are important intermediates in the building of planets (Armitage 2010; Blum 2010). Hence, in such collisions, the main issue is whether they lead to aggregate growth or fragmentation. The study of cometary dust allows obtaining information about such collision processes since comets are formed by aggregates of dust that are believed to have maintained their features since their formation in the solar nebula (Jewitt & Meech 1986; Musiolik, de Beule & Wurm 2017). Other places where granular collisions are important include interplanetary dust (Yang & Ishiguro 2018) or debris discs (Gáspár, Rieke & Balog 2013).

The outcome of a collision of dust aggregates depends on a variety of factors, which may be divided up into the aggregate properties (the material of the dust consists, the size and number of the grains in the aggregates, the porosity) and collision parameters (the mass ratio between the colliding aggregates, the collision velocity, and the impact parameter). In this wide field of parameters, up to now the effects of collision velocity and aggregate size have been studied with most care both by experiment and simulation (Wada et al. 2009; Beitz et al. 2011; Seizinger & Kley 2013). However, most studies focused on the case that both colliding aggregates have equal mass; this is certainly an unlikely case. Also, the influence of porosity has up to now not been sufficiently clarified. However, it has been shown both by experiment and simulation that porosity strongly influences the collision outcome (Ormel, Spaans & Tielens 2007; Langkowski, Teiser & Blum 2008; Okuzumi, Tanaka & aki Sakagami 2009; Gunkelmann, Ringl & Urbassek 2016; Planes et al. 2019, 2020). In order to obtain an overview of the collision processes occurring in aggregate collisions protoplanetary discs, and to identify the influence of all these factors, it is relevant to study the influence of each factor.

The study of granular collisions often relies on the use of granular mechanics software, in which the collision between aggregates can be modeled by the numerical simulation of the interaction between individual grains. Several such codes have been devised and applied to collision physics (Dominik & Tielens 1997; Wada et al. 2007; Paszun & Dominik 2009; Ringl et al. 2012b). Here the interaction between equal-mass aggregates has been studied with particular intensity, varying parameters such as the aggregate porosity, the collision velocity or the impact parameter (Wada et al. 2007, 2008, 2009; Suyama, Wada & Tanaka 2008; Paszun & Dominik 2009; Ringl et al. 2012b; Gunkelmann et al. 2016; Katsuragi 2016). However, in reality collisions will, as a rule, be asymmetric in that the size and mass - of the collision partners will differ. Birnstiel, Fang & Johansen (2016) and Wada et al. (2011) estimate that two aggregates will stick to each other if the impact velocity is less than  $10 \text{ m s}^{-1}$ . Their aggregates are built in a very different form from us. The

<sup>\*</sup> E-mail: urbassek@rhrk.uni-kl.de

simulations of agglomerates, based on hexagonal packing (porosity, p = 0.26), by Wada et al. (2011) have shown that highly porous dust aggregates (low coordination number) stick to each other even if their collision velocity is as high as  $22 \text{ m s}^{-1}$ .

Mass-asymmetric collisions were studied experimentally and reviewed by Güttler et al. (2010) and Schräpler et al. (2018). For mm- and cm-sized aggregates, they find the barrier between fragmentation and growth to be situated at around 1  ${\rm m\,s^{-1}}$  in a wide range of projectile masses; these findings agree with earlier studies (Blum & Wurm 2008). Further experiments were performed by Whizin, Blum & Colwell (2017) by colliding mm-sized dust aggregates with loosely bound cm-sized agglomerates. They discuss the dependence of the threshold velocity to fragmentation  $(v_{thr})$  on the mass ratio between target and projectile,  $\mu$ . In these studies, no dependence on aggregate porosity is discussed. The influence of porosity on aggregate collisions was studied by Meru et al. (2013), who model asymmetric collisions of aggregates using hydrocode simulations via smoothed particle hydrodynamics. They find that aggregate growth is weakened for high porosities (above  $p \sim 0.63$ ) and generally increases for low porosities. Gunkelmann et al. (2016) used granular mechanics to study the influence of porosity, albeit only in symmetrical collisions at velocities above  $1 \text{ m s}^{-1}$ . They find that the threshold velocity for agglomerate fragmentation decreases with the porosity of the aggregates. Planes et al. (2020) show how different an asymmetric collision could be when porosity changes: For aggregates with porosities below p = 0.8, they find that the crater rim fractures, forming petals. For collisions between more porous aggregates, the projectile can simply penetrate through the target, leaving a big hole.

In this work, we explore asymmetric collisions between porous aggregates (with a value of porosity within  $0.6 \le p \le 0.85$ ) at various collision velocities, with particular emphasis on their outcomes. Our results will show how the different initial parameters (porosity, collision velocity and mass ratio) are relevant in the main question: Will the aggregates stick together, or will they destroy each other as a consequence of the collision? Analysis in this work would give clues about how planetesimals are formed in protoplanetary discs. We also simulated high velocities, which may be particularly important for the description of collision processes in debris discs, where such high velocities are common (Gáspár et al. 2013).

#### 2 METHOD

#### 2.1 Granular-mechanics algorithm

Both our projectile and our target were built based on the model published by Ringl & Urbassek (2012), where granular interactions are based on the work by Dominik & Tielens (1997, hereafter [D&T]). The aggregates consist of a collection of spherical grains that have the same properties (radius of grain  $R_{\text{grain}}$ , density, mass, etc.) as it is typical in simulations (Wada et al. 2007; Ringl, Bringa & Urbassek 2012a) – as well as for dedicated experiments (Poppe, Blum & Henning 2000; Blum & Wurm 2008) – of aggregate collisions. These grains only interact with each other if the distance between their centres, d, is  $d < 2R_{\text{grain}}$ . The length  $\delta = 2R_{\text{grain}} - d$  is called overlap, and the grains will interact only if  $\delta > 0$ .

Our model assumes

(i) repulsive normal force based on the Hertzian model,

(ii) additionally viscoelastic dissipation of the motion in normal direction,

(iii) an attractive force,

#### (iv) sliding friction,

(v) rolling friction,

(vi) friction of twisting motion.

The exact numerical expressions for these forces are found in Ringl & Urbassek (2012), where also the details of the implementation are provided. Of particular importance is the attractive force, which we model according to the Derjaguin–Muller–Toporov (DMT) model (Derjaguin, Muller & Toporov 1975; Maugis 2000). For two identical grains, this force is proportional to the grain radius  $R_{\text{grain}}$  and the specific surface energy  $\gamma$ :  $f_{adh} = 2\pi\gamma R_{\text{grain}}$ . Note that this value corresponds to the pull-off force needed to break a contact. We simplify the complex dependence of the adhesive force – as given by JKR theory (Johnson, Kendall & Roberts 1971; Johnson 1985) – by a constant value (Ringl & Urbassek 2012). Therefore, the energy needed to break a contact between two spheres is given by (Ringl et al. 2012a)

$$E_{\text{break}} = f_{\text{adh}} \delta_{\text{eq}},\tag{1}$$

where  $\delta_{eq}$  is the equilibrium distance and is given by the condition  $f_{rep} = f_{adh}$  ( $f_{rep}$  is the repulsive force). Another important quantity is the rolling energy, which is the energy required to roll a distance  $\pi R_{grain}$  and is given by ([D&T])

$$E_{\rm roll} = 3\pi^2 \gamma R_{\rm grain} \xi_{\rm yield},\tag{2}$$

where  $\xi_{\text{yield}}$  is the distance which two grains can roll over each other without breaking their atomic contacts. We assume  $\xi_{\text{yield}} = 10^{-10}$  m (according to [D&T]).

Our simulations have been performed with the well-documented MD package LAMMPS (Plimpton 1995) after the above features have been coded into this software.

#### 2.2 Aggregate building

The global filling factor of an ensemble of N grains – each with a volume  $V_{\text{grain}} = 4\pi R_{\text{grain}}^3$  – in a volume V is defined as  $\varphi = (NV_{\text{grain}})/V$ ; it is related to the porosity p by  $\varphi = 1 - p$ .

The projectile and target aggregate are constructed using the method of Ringl et al. (2012a), which allows us to build aggregates of a predefined filling factor. This method puts grains stochastically into a volume until the required filling factor is reached. We improved this method to build roughly spherical aggregates. For an aggregate with radius  $R_{agg}$  the steps to follow are summarized below:

(i) Set a grain at the centre of the aggregate.

(ii) Calculate the local filling factor for each grain; this is done by counting the number of grains in a sphere of radius  $R_c$  around it.

(iii) Determine the grain with the smallest local filling factor.

(iv) Attach a grain to it in a random direction. This new grain can be in two different positions:

(a) Inside the  $R_{\rm agg}$ : The grain will be attached at a distance of  $\delta_{\rm eq}$ .

(b) Outside the  $R_{agg}$ : We call them 'ghost grains' and we mark them. This grains will be taken into account for the local filling factor calculation of the border aggregate, but they will not be taken into account for the global filling factor calculation and they will be removed from the aggregate.

(v) If the global filling factor is less than the desired value of filling factor, go to step 2.

This allows us to obtain a homogeneous filling factor in the spherical aggregates.

φ	Nt	Np	N <sub>tot</sub>	μ
0.12	99 206	1842	101 048	53.86
0.15	133 835	12 842	146 677	10.42
0.15	133 835	2248	136 083	59.54
0.18	157 951	2535	160 486	62.31
0.20	180 893	2727	183 620	66.33
0.22	199311	3346	202 657	59.57
0.25	224 478	21 643	246 121	10.37
0.25	224 478	3551	228 029	63.22
0.30	267 687	4094	271 781	65.39
0.35	309 379	5093	314 472	60.75
0.40	347 175	33 246	380 421	10.44
0.40	347 175	5667	352 842	61.26

*Notes.*  $N_p$  and  $\varphi_p$  are the number of grains and filling factor, respectively, of the projectile.  $N_t$  and  $\varphi_t$  are analogous for the target.  $\mu$  is the mass ratio between the target and projectile.

#### 2.3 Parameter selection

Our aggregates are composed of spherical silica grains with a radius of  $R_{\text{grain}} = 0.76 \ \mu\text{m}$ ; this grain size was the one adopted by Poppe et al. (2000). A cluster is defined as a set of connected grains, where the distance between the centres of two connected grains must be  $\leq 1.52 \ \mu\text{m}$ . The equilibrium overlap between grains in our model is such that the distance between grain centres is  $\delta_{\text{eq}} = 1.5197 \ \mu\text{m}$ . Grains are considered to be in contact if they have non-zero overlap, and their coordination number *C* indicates the number of contacts for each grain. The total number of contacts in the aggregates is then  $N_c = \sum C/2$ , and the average number of contacts per grain, for an aggregate with *N* grains, is  $\langle C \rangle = N_c/N$ . The method proposed by Ringl (Ringl & Urbassek 2012) is such that the initial value  $\langle C_0 \rangle \simeq$ 2, independently of filling factor. As expected,  $\langle C \rangle$  will change due to a strong collision between grains, as discussed below.

The filling factor of aggregates is often difficult to estimate in both experiments and in observations. In protoplanetary discs, the filling factor generally depends on the age and evolution of the disc, but can be very low (Suyama et al. 2008). Initially, the dust is considered to start out as very porous – filling factors as low as  $\phi = 10^{-5}$  (Krijt et al. 2015, 2016) - and once the collisional process begins, porosity decreases because aggregates are compacted by collisions. Some authors consider a minimum value of  $\phi = 0.13$  and a maximum of  $\phi = 0.35$  based on other previous studies (Meisner et al. 2013) and references therein). Güttler et al. (2010) summarized previous works with an impact on planetary formation and there they considered porous aggregates if  $\phi < 0.4$  and compact ones if  $\phi \ge 0.4$ . To study the behaviour when collisional process are relevant and involving all possible scenarios, we will consider filling factors between 12 and 40 per cent:  $\varphi = 0.12, 0.15, 0.17, 0.20, 0.25, 0.30, 0.35$ , and 0.40. We note that the number of contacts in our grains is in good approximation proportional to the filling factor,

$$N_{\rm c} = 0.92 \times 10^6 \varphi. \tag{3}$$

In the simulation, a small spherical projectile aggregate of radius  $R_p$  collides with a large target aggregate of radius  $R_t$ . We fix here  $R_t = 72.5 \ \mu\text{m}$ , and two  $R_p$  values: (a) 18 and (b) 32.5  $\mu\text{m}$ . The number of grains contains in the target ( $N_t$ ) and in the projectile ( $N_p$ ) depends on  $\varphi$ . Since projectile and target have the same filling factor, the mass ratio between target and projectile ( $\mu = N_t/N_p$ ) is hence expected to be 60 in case (a) and 10 in case (b). However, fluctuations in the packing density can occur inside the aggregates due to the statistical

nature of the grain packing, as consequence the actual mass ratio may contain a 10 per cent error. For more details, see Table 1.

In our simulations, we employ the material parameters for silica; the Young's modulus is Y = 54 GPa, the Poisson ratio v = 0.17, and the specific surface energy  $\gamma = 25 \text{ mJ m}^{-2}$  (Chokshi, Tielens & Hollenbach 1993). The mass density is taken as  $\rho = 2 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3}$ (Blum & Schräpler 2004), such that the mass of a grain amounts to  $m = 3.68 \times 10^{-15}$  kg. Taking this values in equations (1) and (2), we obtain  $E_{\text{break}} = 2.66 \times 10^{-17}$  and  $E_{\text{roll}} = 1.125 \times 10^{-16}$  J, respectively. This can be used to calculate the fragmentation velocity,  $v_{\rm frag}$ , defined as the smallest velocity that a bound pair of grains needs to be imparted for dissociation, via  $E_{\text{break}} = (m/4)v_{\text{frag}}^2$ . For the silica grains used in this work, it is  $v_{\text{frag}} = 0.17 \text{ m s}^{-1}$  (Ringl & Urbassek 2012). We note that this fragmentation velocity is the minimum velocity a grain has to be imparted to break the contact with another grain; it holds for separation of the two grains in normal direction. If the grains are separated in oblique or even tangential direction, also sliding friction forces have to be overcome, and separation requires higher energy.

The time-step of the simulation amounts to 50 ps (Ringl & Urbassek 2012); we perform for each simulation of the order of  $1 \times 10^{6}-5 \times 10^{7}$  time-steps, amounting to  $5 \times 10^{-5}-2.5 \times 10^{-3}$  s. The simulations were terminated as soon as either the target was fragmented or all grains moved with approximately similar velocity so that no further fragmentation could be expected; some simulations were run for a longer time to verify the stability of the final state.

The collisions are performed in a system, where the target is initially at rest,  $v_t = 0$ , and the projectile moves towards it with a velocity v, such that a head-on collision with the target aggregate takes place.

We run simulations with  $1 \text{ m s}^{-1} < v < 200 \text{ m s}^{-1}$ , where plastic effects can be safely ignored (for the silica grains used here, the critical velocity above which plasticity sets in is at least 250 m s<sup>-1</sup> (Ringl et al. 2012b).

We repeated some simulation by rotating both, projectile and target before the projectile start to move. Statistical error was  $\simeq 2$  per cent for aggregates with intermediate values of  $\varphi$  and  $\simeq 5$  per cent for very porous aggregates.

Data analysis and rendering of granular snapshots has been performed using OVITO (Stukowski 2010).

#### **3 RESULTS**

In this section, we present the most relevant results of our research. In Sections 3.1–3.2, we use OVITO to show some results of our simulations and introduce some nomenclature that help us to classify the outcome of each collision, observing that in addition to the impact velocity, also the mass ratio and the porosity of the aggregates influence the final picture of collisions. In Sections 3.3 and 3.4, we focus on relating these outcomes to the initial number of contacts in aggregates through energetic analysis and the compaction process. Finally, we analyse the impact of the parameters used in this work on the growth/fracture of the target aggregate in Sections 3.5–3.7. For this purpose, we studied erosion/accretion efficiencies and the number of ejected grains. Here we estimate the minimum impact velocity that causes the target to lose mass and analyse its variation with  $\mu$  and  $\varphi$ . We also study the mass distribution of the small fragments resulting from each collision.

#### 3.1 Sticking versus fracture

Figs 1 and 2 display the result of collisions of two aggregates with  $\mu = 60$ . The collision setup is chosen here as in all following figures:



**Figure 1.** Final snapshots for  $\mu = 60$ ,  $\varphi = 0.4$ , and different velocities  $v \text{ (m s}^{-1})$ : (a) 10, (b) 25, (c) 50, (d) 75, (e) 100, (f) 125, (g) 150, and (h) 200. Subpanels (a)–(d) show slices with width 20 µm, and (e)–(h) exhibit a perspective view of the collision outcome. Colour legend shows vertical velocity,  $v_z$ , for each individual grain.

![](_page_281_Figure_1.jpeg)

**Figure 2.** Analogous to Fig. 1, but for a filling factor of  $\varphi = 0.15$  at velocities  $v \text{ (m s}^{-1})$ : (a) 5, (b) 10, (c) 25, (d) 50, (e) 60, (f) 100, and (g) 200.

The projectile moves vertically down and hits the target, which is initially at rest, centrally. Colour shows the vertical velocity of each grain  $v_z$ . In order to contrast the behaviour for different  $\varphi$  we choose two cases, one with very porous aggregates ( $\varphi = 0.15$ ) and another one with less porous aggregates ( $\varphi = 0.40$ ).

Fig. 1 shows the results of collisions between two aggregates with a high filling factor  $\varphi = 0.40$  and different initial velocities v. For velocities  $v \le 75 \text{ m s}^{-1}$ , a slice of 20 µm is shown in Figs 1(a)–(d).

In these cases, the projectile is fused with the target, the difference in  $v_z$  between the grains in the aggregate is always less than  $10^{-2}$  m s<sup>-1</sup> ( $< v_{\rm frag}$ ) so we conclude that fragmentation will not occur in these cases. Fig. 1(a) shows that the projectile stops near the top of the target, so obviously compaction is present here because the final volume of the almost spherical aggregate is very close to the initial target volume, but now contains  $\simeq 5 \times 10^3$  more grains. As v increases, a crater appears on the target, whose volume increases with v. For  $v \simeq 100 \text{ m s}^{-1}$ , the target starts to spread out, so Figs 1(e)–(h) show a global view of the outcome in order to appreciate the final state of the main structure. Now, as v increases, the rim of the crater evolves into rim 'petals' (Planes et al. 2020), where an increasing number Y of grains are ejected, most of them monomers. For higher v, the grains in these petals acquire sufficient  $v_z$  to break away, causing total fracture of the aggregate in several large groups, besides the large numbers of grains ejected in monomers or dimers. For example, for the case with  $v = 200 \text{ m s}^{-1}$  the first five clusters have 14.6, 8.6, 8.3, 7.5, and 7 per cent of the total mass, respectively, whereas monomers and dimers contain 7.2 and 1 per cent of the total mass, respectively.

We note that the final snapshots still show a slight inhomogeneity in the distribution of the vertical velocity,  $v_z$ , which corresponds to a rigid-body rotation of the fused cluster or its fragments. Such a rotation is caused by the statistical grain distribution inside the clusters that induces – even for a perfectly central collision – a torque on the aggregates. The rotational velocities reached are tiny and will not lead to any further cluster fragmentation events.

Fig. 2 shows the results of collisions between two aggregates with a high porosity ( $\varphi = 0.15$ ) and different initial velocities v. For velocities  $v \le 50 \text{ m s}^{-1}$ , a slice of 20 µm is shown in Figs 2(a)–(d). Again, after projectile impact, a crater is formed on the target. For these cases, the difference in vertical velocity between the grains in the aggregate,  $v_z$ , is of the order of  $10^{-3} - 10^{-4}$  m s<sup>-1</sup> so we conclude that no fragmentation will occur in these cases either. Anyway, these slices show a different crater form compared with Figs 1(a)-(d). Because of the high porosity of the aggregates, the piston effect described in Planes et al. (2020) is observed. This term denotes the phenomenon that the projectile travels on a straight line through the medium without suffering major energy loss. In Fig. 2(d), the slim part of the structure would seem to indicate that the aggregate is about to fracture, but in this case, we checked that it will not occur. Figs 2(e)–(g) show a global view of the outcomes of the collisions that result in fragmentation.

We remark that different types of fragmentation are observed according to the impact velocity. For  $60 \le v \le 100 \text{ m s}^{-1}$ , the piston effect still governs, and two large fragments are observed: one is the hollow cylinder (remnant of the target), and the other is made up by the majority of the projectile grains plus the grains that it dragged off. In addition, grain ejection (formed by monomers principally) is also important. As v increases, a total destruction of the aggregates takes place. Higher v appear to involve smaller aggregates at the end of the collision.

We conclude that the outcome of the collision between porous aggregates depends on mass ratio, porosity of aggregates and impact velocity. Another parameter (not studied here) that could influence the results is the 'impact parameter', defined as the perpendicular distance between the path of the projectile centre and the target centre. Some previous works studied how the impact parameter, *b*, modifies the collision outcomes (Ringl et al. 2012b), and concluded that as *b* increases, the velocity needed to break the aggregates decreases. In this work, we focus exclusively on central collisions (b = 0).

#### 3.2 Collision outcomes

In this section, we will classify the different results of the collisions or outcomes. According to fig. 1 in Güttler et al. (2010), we denote by SP (Sticking by Penetration) the case when the projectile hits and penetrates the target. In a few of our simulations with small v, the projectile hits the target and sticks to it only disturbing the target

surface and surroundings, so formally our SP denomination includes the outcomes S2 and S3 from Güttler's fig. 1 in Güttler et al. (2010).

Total fragmentation (or disruption) is a concept that can have different meanings according to the author. In the Güttler et al. figure, this outcome could be represented by F1 or F3. Quantitatively, it occurs when  $N_{\text{large}}/N_{\text{tot}} \leq 0.5$  ( $N_{\text{large}}$  is the number of grains of the largest fragment and  $N_{\text{tot}} = N_{\text{p}} + N_{\text{t}}$ ) according to Wada et al. (2008). We take this criterion and denote this outcome TD (Total Destruction).

In this context, the results of each simulation were studied in order to categorize them according to the different outcomes previously established.

Fig. 3 shows a collision between two aggregates with  $\varphi = 0.40$ , whose mass ratio is  $\mu = 10$ . We explored impact velocities closer to the critical velocity that would separate the adhesion between aggregates from their fracture.

Fig. 3(a) shows the temporal evolution when the impact velocity is  $v = 30 \text{ m s}^{-1}$ . Here the projectile penetrates into the target and there is no fracture of the large cluster. We add a colour coding with vertical velocity in order to show that at the end the grains present a vertical velocity gradient of the order of  $10^{-2} \text{ m s}^{-1}$  ( $< v_{\text{frag}}$ ), so no fracture is expected. This outcome belongs to SP classification. We can see in Fig. 3(a) the formation of a petal-like structure, as we also detailed in Planes et al. (2020).

Fig. 3(b) show the temporal evolution when the impact velocity is  $v = 40 \text{ m s}^{-1}$ . We can see that this velocity produces a total fracture of the aggregates, leaving large clusters and a big number of ejected grains. In this case, we observed one big cluster (~0.5 $N_{\text{tot}}$ ) and nine more fragments that contain ~0.42 $N_{\text{tot}}$ . As v increases, more big clusters of similar size are formed; for example, for the same  $\mu$  and  $\varphi$  but with  $v = 200 \text{ m s}^{-1}$ , the collision also results in fragmentation but here the five largest aggregates have 3.4, 3.3, 2.6, 2.5, and 2.1 per cent of  $N_{\text{tot}}$ , respectively. The final picture is a similar to Fig. 2(g). These outcomes are TD.

Fig. 4 shows collisions between two more porous aggregates,  $\varphi = 0.15$ , with mass ratio  $\mu = 10$ . Again, we display two collision events close to the impact velocity that separates the case of adhesion between the aggregates from their fracture.

In Fig. 4(a), we ran a simulation with  $v = 10 \text{ m s}^{-1}$  for a very long time (1075  $\mu$ s), and coloured the individual grains by their vertical velocity. We observed a small gradient of  $v_z$ , of the order of  $10^{-3} \text{ m s}^{-1}$ , so we conclude that the grains will stay connected as a result of this collision. Here the projectile penetrates in the target generating a crater (as we observed in Figs 2 a–d), corresponding to the outcome SP.

Fig. 4(b) shows the same case but for an impact velocity of  $v = 15 \text{ m s}^{-1}$ ; this velocity is large enough to break the target. But the outcome is very different from the case where the aggregates were more compact (Fig. 3b). The collision between very porous aggregates results in two fragments: one of them has the structure of a hollow cylinder, and the other contains a part of the target remnant and the majority of the projectile, forming a structure similar to a hemisphere. This process results from the piston effect mentioned in the previous section, and it is similar to Fig. 2. Here, the criterion by Wada et al. (2008) for the outcome TD discussed above is not fulfilled: The largest fragment has more than  $0.5N_{total}$ . It is also not similar to any of the results for Güttler's fig. 1 in Güttler et al. (2010). We differentiate this outcome and denote it as TF (Two Fragments).

**D&T** proposed another criterion for TD: they consider that total disruption takes place when half (or more) of the contacts between individual grains of the aggregates are lost after the collision. However, the problem with this definition is that when the aggregates

![](_page_283_Figure_1.jpeg)

Figure 3. Perspective view of collisions with  $\mu = 10$  and  $\varphi = 0.40$ . The left-hand panel shows the initial state. Panel (a): temporal evolution of a case with  $v = 30 \text{ m s}^{-1}$ . A big spread of the target is observed. Panel (b): temporal evolution of a case with  $v = 40 \text{ m s}^{-1}$ . Aggregates suffer a total destruction.

![](_page_283_Figure_3.jpeg)

Figure 4. Perspective view of collisions with  $\mu = 10$  and  $\varphi = 0.15$ . The left-hand panel shows the initial state. Panel (a): temporal evolution of a case with  $v = 10 \text{ m s}^{-1}$ . No fracture is observed. Panel (b): temporal evolution of a case with  $v = 15 \text{ m s}^{-1}$ . Two fragments result from this collision.

are very porous, a strong compaction is observed after the collision, so there is a probability that the final number of contacts  $(N_c^f)$  would be greater than the initial one  $(N_c^0)$ , but also a fracture process occurs. We demonstrate this by calculating the initial and final number of contacts for the cases shown in Figs 3 and 4. For collisions of Fig. 3  $(\varphi = 0.40)$ , where  $N_c^0 = 382\,972$ , the final number of contacts is  $N_c^f = 761\,063$  for v = 30 m s<sup>-1</sup> (Fig. 3a) and  $N_c^f = 712\,583$  for v =40 m s<sup>-1</sup> (Fig. 3b). For cases in Fig. 4 ( $\varphi = 0.15$ ), the initial number of contacts is  $N_c^0 = 146\,899$ , while the final number of contacts is  $N_c^f = 260\,181$  for  $v = 10 \text{ m s}^{-1}$  (Fig. 4a) and  $N_c^f = 272\,477$  for  $v = 15 \text{ m s}^{-1}$  (Fig. 4b). So we conclude that a criterion based on the number of contacts has to be considered with caution due to the compaction occurring in porous aggregates.

Besides the outcomes defined here, it is important to know if at the end of the collision the initially largest aggregate (in our case, the target) grows or not, which corresponds with the mass-

![](_page_284_Figure_1.jpeg)

Figure 5. Final mean coordination number,  $\langle C_f \rangle$ , versus initial velocity v for collisions with  $\mu = 10$  and various filling factors  $\varphi$ .

gain/mass-loss regimes, respectively. Note that there is not a unique correspondence between outcomes and regimes since even in the SP regime, considerable grain loss by ejection of monomers and dimers can occur; see Section 3.7. From now on, we will refer to both, possible outcomes and resulting regimes.

#### 3.3 Compaction

One way to study the evolution of highly porous materials when they undergo a collision event is to study compaction. Compaction can be quantified through the mean coordination number  $\langle C \rangle$ . We are interested in determining the compaction of the final clusters that could emerge from a collision; focusing on this, we calculate the final mean coordination,  $\langle C_f \rangle$ , of the clusters that resulted from the collisional process: we take the largest cluster when we are in the SP regime, the two largest clusters in the TF regime and the 25 largest fragments when the outcome was TD (and we ignore the rest of ejected grains because the majority of these were ejected alone or in pairs). In Section 3.6, we will study the mass distribution of the ejecta in detail.

There are several challenges in determining the filling factor of aggregates after a collision: There are many fragments, specially for TD collisions, and they might have irregular shapes, which makes the determination of the aggregate volume difficult. Ringl et al. (2012b) proposed using an an average of the local filling factors calculated for spheres of radius  $R_g$ . This leads to significant error for aggregates with irregular surfaces. Gunkelmann et al. (2016) determined aggregate volume using a surface mesh, and volume will depend on mesh refinement. Because of this, we focus on the evolution of contacts, rather than filling factor.

Fig. 5 displays  $\langle C_f \rangle$  versus v for collisions between aggregates with  $\mu = 10$  and various filling factors  $\varphi$ . In all cases studied, we can observe a maximum in the curves. The velocity where this maximum occurs increases with  $\varphi$ , but in all cases, the maximum value is  $\langle C_f \rangle \simeq 4$ .

Using the same granular code as employed here, Ringl et al. (2012b) found that maximum compression for collisions between equal-mass aggregates ( $\mu = 1$ ) and  $\varphi = 0.205$  occurs at  $v \simeq 4.5$  m s<sup>-1</sup>, in contrast with [D&T] whose prediction that this occurs when the collision energy  $E = N_c E_{roll}$ , implies  $v \simeq 0.5 \text{ m s}^{-1}$ . In our case, the [D&T] criterion results in  $v \simeq 1.2 \text{ m s}^{-1}$ , but from Fig. 5, we observe that maximum compression occurs at  $v \simeq 18 \text{ m s}^{-1}$  for  $\varphi =$ 0.15–0.25 and at  $v \simeq 29 \text{ m s}^{-1}$  for  $\varphi = 0.4$ . The difference of one order if magnitude remains. Our results are in agreement with Ringl et al. (2012b) for low values of  $\mu$ , and the likely cause for this large discrepancy is the friction loss in the model. As outlined in Section 2.1, friction is caused by viscoelastic forces and by sliding friction; rotational movement is in addition damped by rolling and twisting torques. The energy that is available for compaction is hence substantially smaller than the initial collision energy. Details of the energy loss were explored for this model by Planes et al. (2019) and more recently by Umstätter & Urbassek (2021).

Gunkelmann et al. (2016) analysed the variation in  $\varphi$  with v, for very porous equal-mass aggregates ( $\varphi \le 0.21$ ). They found that maximum compression occurs at  $v = 5 \text{ m s}^{-1}$  for all  $\varphi$  considered, but aggregates that were initially more porous ( $\varphi = 0.08$ ) could present an increase in filling factor up to 250 per cent (with a final value of  $\sim 0.2$ ), whereas aggregates with an initial value of  $\varphi = 0.21$  exhibit a final value of filling factor of 0.35 (170 per cent of its initial value).

When  $\mu$  is larger than 10, the scenario is very different from the cases discussed above. In Fig. 6, we plot  $\langle C_f \rangle$  versus v again, but for  $\mu = 60$ . No peak is observed, and  $\langle C_f \rangle$  increases exponentially with v; nevertheless, the value of  $\langle C_f \rangle$  is between 3.5 and 4 when the outcome is TF or TD.

Meisner et al. (2013) found the following relation between  $\varphi$  and impact velocity v (their equation 7):

$$(v) = a/(b + e^{-cv}),$$

φ

(4)

![](_page_285_Figure_0.jpeg)

**Figure 6.** Final mean coordination number,  $\langle C_f \rangle$ , versus initial velocity v for collisions with  $\mu = 60$  and various filling factors  $\varphi$ . Lines are fits to the equation  $\langle C_f \rangle = a/(b + e^{-cv})$ , equation (5): in solid line, a = 3, b = 0.8, and c = 0.25 s m<sup>-1</sup>; in dashed line, a = 3.8, b = 0.98, and c = 0.1 s m<sup>-1</sup>.

and a good fit with values: a = 0.19, b = 0.49, c = 0.39 s m<sup>-1</sup>; in their studies about growth/erosion, they used aggregates of a size  $\simeq 45 \,\mu\text{m}$  impacting on a larger target implying a large value of  $\mu$ . They assume an initial  $\varphi \simeq 0.3$  (but they said that cannot be further quantified), and an initial collision velocity up to 50 m s<sup>-1</sup> for their fig. 14, which also includes the experimental results of Teiser, Engelhardt & Wurm (2011). We extend this relation from  $\varphi$  to  $\langle C_f \rangle$  which is another way to analyse compaction and use

$$\langle C_f \rangle(v) = a/(b + e^{-cv}), \tag{5}$$

We plot this relation in Fig. 6 (solid line) with a = 3, b = 0.8, and  $c = 0.25 \text{ s m}^{-1}$ ; this equation provides a satisfactory fit for all our data for  $v \le 50 \text{ m s}^{-1}$ . This fit works better for higher velocities if we use a = 3.8, b = 0.98, and  $c = 0.1 \text{ s m}^{-1}$  (dashed line in Fig. 6). Thus, we find that the relation of Meisner et al. (2013) works surprisingly well, which could indicate that in our collisions, when the material is compacted, the increase in filling factor obeys an approximately linear relation with the increase in the average number of contacts.

In all of our results, when fracture occurs, we measured the final mean coordination,  $\langle C_f \rangle$ , in the largest aggregates at the end of the simulations. Considering that the coordination number is initially around 2, we found that the collision approximately doubles this number, resulting in  $\langle C_f \rangle \simeq 4$ . We can assume that this leads to a doubling of the filing factor of the post-collisional aggregates. This is somewhat larger than earlier assumptions of an increase of the filling factor by 50 per cent (Güttler et al. 2010).

For collisions of icy equal-mass aggregates, Wada et al. (2009) found in simulations that head-on collisions result in the largest value of  $\langle C_f \rangle$  with increasing impact energy but the maximum value of  $\langle C_f \rangle$  can not exceed 4, suggesting that a further increase in  $\langle C_f \rangle$  is prohibited by disruption or fragmentation of aggregates. They conclude that the reason that  $\langle C_f \rangle \simeq 4$  is the maximum for collision-produced aggregates is not clear, but they consider that

grains in contact with a grain of  $\langle C \rangle = 4$  make a tetrahedral structure, which is stable enough with the minimum number of grains in three dimensions and makes it difficult for aggregates to increase  $\langle C_f \rangle$  over 4. We agree with this conclusion of Wada et al. (2009).

#### 3.4 Energy analysis

It may be important to relate the impact energy necessary to achieve the different outcomes stated here, or also the initial energy threshold that will enable the target growth.

The impact is given by the relative energy between the projectile and target,

$$E = \frac{1}{2} \frac{m_{\rm t} m_{\rm p}}{m_{\rm t} + m_{\rm p}} v^2, \tag{6}$$

where  $m_t$  ( $m_p$ ) denotes the target (projectile) mass. [D&T] related the impact energies needed for sticking/bouncing/maximum compression/catastrophic disruption with  $E_{break}$  and  $E_{roll}$  and summarized their results in their table 3.

If the collision energy *E* is lower than  $5E_{\text{roll}} \simeq 5.6 \times 10^{-16}$  J (see equation 2), then sticking/bouncing without visible restructuring is observed by [D&T]. All collisions analysed here have a collision energy *E* several orders of magnitude above this value, therefore this regime will not be evidenced. Unlike the model of [D&T], our system is highly dissipative, and for this reason we expect that a higher *E* will be needed to reach the different regimes studied by [D&T].

According to table 3 in [D&T], the number of contacts in the aggregates plays a crucial role for separating the various collision regimes. For this reason, we plot in Fig. 7 the values of *E* for collisions with different  $\mu$  versus the initial number of contacts of each system,  $N_c^0$ ; note that this latter quantity also depends on  $\varphi$ . We coloured the outcome of each simulation according to the criteria provided in Section 3.2. [D&T] propose that catastrophic disruption

![](_page_286_Figure_1.jpeg)

Figure 7. For each individual collision: impact energy *E* as a function of the initial number of contacts,  $N_c^0$ . Colours indicated final collision outcomes. The dashed line follows the relation,  $E(J) = 2.66 \times 10^{-13} N_c^0$  (equation 7).

(if the colliding aggregates are dissolved into monomers and very small fragments) happens when  $E > 10N_c^0 E_{break}$ . Previously we showed that this formula severely underestimates the energy needed to fragment clusters of µm-sized grains (Ringl et al. 2012b). We obtain good agreement with our simulation results if we assume that our systems dissipate 99.9 per cent of *E*; this gives us then

$$E(\mathbf{J}) > (10E_{\text{break}}N_{\text{c}}^{0})/0.001 = 2.66 \times 10^{-13}N_{\text{c}}^{0}.$$
(7)

This relation is displayed by a dashed line in Fig. 7, where it is observed that SP and TF outcomes (below the line) are approximately well separated from the TD outcome (above the line). In this context, we agree with these criteria from [D&T].

Here, TF belongs to the fracture regime (visually observed) but the final structure maintains a high number of contacts, due to compaction as we saw in the previous section. For example, for the case with  $\mu = 60$ ,  $\varphi = 0.15$ , and  $v = 60 \text{ m s}^{-1}$  (Fig. 2e), initially  $N_c^0 = 136\,293$ , and finally, when two fragments are observed,  $N_c^f =$ 242 825 for the total sample (only 1469 monomers are observed). For this reason, TF is similar to the SP regime and occurs at small collision energies, below the dashed line in Fig. 7.

If the main purpose is to be able to distinguish the mass-loss regime (L) from the mass-gain regime (G), Fig. 8 shows the regime resulting in each collision with different colours. Here we use  $\varphi$  on the abscissa to clarify the relation with this parameter as it could be obtained in laboratory experiments.

The line separating SP and TF outcomes from TD outcomes, equation (7), is also appropriate to separate gain from loss regimes. To this end we make use of the proportionality between the number of contacts and the filling factor, equation (3), and obtain that the line separating the gain and the loss regimes is given by

$$E(\mathbf{J}) = 0.92 \times 10^{10} E_{\text{break}} \varphi \cong 2 \times 10^{-7} \varphi.$$
(8)

This fit works very well with two important exceptions: In the first place, at very low filling factors  $\varphi \simeq 0.15$ , mass loss is observed when agglomeration is expected. This may indicate that the simple relationship equation (8) does not well describe collisions of very porous aggregates; grains in such porous aggregates are arranged in dendritic structures, which allow more easily for destruction. Secondly, there is a window for  $0.20 < \varphi < 0.35$ , where this model underestimates the energy needed to produce mass loss, so we observe that growth would be possible for energies that are somewhat higher than predicted for intermediate filling factor values. We will analyse this point in more detail in the next sections.

We note that the good description of the separation of erosion and accretion regimes by equations (7) and (8) validates our assumption that a large portion (99.9 per cent) of the collision energy is dissipated in the collision process and hence not available for cluster breakup.

#### 3.5 Erosion efficiency and accretion efficiency

In this section, we will study, in first place, the erosion efficiency,  $\epsilon$ , which is defined by Seizinger, Krijt & Kley (2013) as

$$\epsilon = \frac{N_{\rm t}^0 - N_{\rm t}^f}{N_{\rm p}^0}.\tag{9}$$

 $N_t^0$  ( $N_t^f$ ) denotes the initial (final) number of grains in the target, and  $N_p^0$  is the initial number of grains in the projectile. Thus, erosion occurs if  $\epsilon > 0$ , i.e. where equation (9) has a positive domain between 0 and  $\mu = N_t/N_p$ . The erosion efficiency is relevant when no fracture

![](_page_287_Figure_0.jpeg)

Figure 8. Impact energy E versus filling factor  $\varphi$  for various mass ratio values. Colours indicate mass gain (G)/loss (L) at the end of the collision. Solid line indicates a relation  $E(J) = 2 \times 10^{-7} \varphi$ , equation (8).

process has occurred, but the target loses mass anyway. Studying this process in the context of protoplanetary discs is relevant because erosion has been proposed to be a strong source of micrometer-sized dust particles in this environment (Schräpler & Blum 2011).

1.5e-07

1.0e-07

5.0e-08

0.0e+00

If, however,  $\epsilon < 0$ , some projectile mass has been accreted on to the target; a negative value of  $\epsilon$  means growth and not erosion. In this case, it is important to understand what initial conditions allow the growth of dust, enabling the formation of larger bodies. Some authors introduced an accretion efficiency,  $\alpha$ , to refer to this regime. For example, Meisner et al. (2013) define as accretion efficiency the ratio  $m_{\rm stick}/m_{\rm tot}$  with  $m_{\rm stick}$  as the mass sticking to the target and  $m_{\rm tot}$ the total mass that impacted. As our aggregates are composed by equal grains, we can use the number of particles instead of the mass. Considering equation (9), accretion takes place only if  $\epsilon < 0$  and the possible values are between 0 and 1 (because the maximum number of grains that could be added to target is  $N_p$ ). This accretion efficiency is generally multiplied by a factor of 100 to show the percentage of mass attached to the target after a collision (Meisner et al. 2013):

$$\alpha = 100 \times \frac{N_{\rm t}^f - N_{\rm t}^0}{N_{\rm p}^0} = 100 \times (-\epsilon).$$
(10)

Fig. 9 displays  $\epsilon$  and  $\alpha$  as a function of collision velocity v for several mass ratios ( $\mu = 10$  is represented by triangles and  $\mu = 60$ by circles) and filling factors (denoted by colours). Fig. 9 allows us to estimate the velocity  $v_{ae}$ , at which the erosion regime ends (and the accretion regime starts) for each collision scenario. Thus, for the example of  $\mu = 60$  and  $\varphi = 0.15$ , the white circles that represent this case only appear for velocities larger than 55 m  $s^{-1}$  in the erosion regime, and lower than 55 m s<sup>-1</sup> in the accretion regime; hence, we

have  $v_{ae} = 55 \text{ m s}^{-1}$  in this case and marked this in Fig. 9. Similarly, for each set of parameters  $(\phi, \mu)$ ,  $v_{ae}$  can be determined.

Let us first focus on erosion, Fig. 9(a). For  $\mu = 10$ ,  $\epsilon$  depends on the filling factor  $\varphi$  as long as  $v < 50 \text{ m s}^{-1}$ , but for  $v > 50 \text{ m s}^{-1}$ , the efficiency becomes independent of  $\varphi$ ; here a maximum value of  $\epsilon \simeq 8-10$  is reached. We note that for this range of high velocities aggregates are fractured. When no fracture occurs,  $v_{ae}$  increases with  $\varphi$ . Cases with  $\mu = 60$  show a different behaviour. The maximum value of  $\epsilon$  depends on v and  $\varphi$ ; this maximum is higher for lower  $\varphi$ (0.15–0.18), and lower for the largest  $\varphi$  studied here (0.40); but the lowest values are for intermediate values of  $\varphi$  (0.20–0.35). There is a general tendency of  $v_{ae}$  increasing with  $\varphi$ , from 55 m s<sup>-1</sup> ( $\varphi = 0.15$ ) and 77 m s<sup>-1</sup> ( $\varphi = 0.18$ ) to above 100 m s<sup>-1</sup> for  $\varphi = 0.25$ -0.35; it decreases again to 80 m s<sup>-1</sup> for the most compact aggregates,  $\varphi =$ 0.40. Seizinger et al. (2013) studied the variation of  $\epsilon$  with v when a large target was hit by projectiles in the mass range of  $1 \le N_p$ < 256. Using very porous aggregates ( $\varphi \simeq 0.19$ ), with initial mean coordination  $\simeq 2$ , they found that, in general, the erosion efficiency is lower for compact aggregates. We agree with their findings if only our extreme values of  $\varphi$  are considered, but we remark that there are some intermediate values of  $\varphi$  that appear to have the lowest  $\epsilon$ .

We observe that generally  $v_{ae}$  increases with  $\varphi$  and  $\mu$ . To clarify, if we consider our values of  $\mu - \mu =$  (a) 60 and (b) 10, and two extreme values of  $\varphi$ :  $\varphi = (1) 0.40$  and (2) 0.15 – we can combine them and obtain four cases with the following values of  $v_{ae} \simeq:$  (a1) 80, (a2) 55, (b1) 40, and (b2) 15 m s<sup>-1</sup>. These parameter combinations correspond to Figs 1-4.

Seizinger et al. (2013) found that  $v_{ae}$  increases with  $N_p$ , independently of  $\varphi$ . From Table 1, case (a1) has a projectile with  $N_p = 5667$ and case (b2) with  $N_p = 12842$ , but  $v_{ae}$  for case (a1) is approximately


**Figure 9.** Erosion efficiency (panel a) and (panel b) accretion efficiency as a function of impact velocity v for various mass ratios and filling factors. Gray dashed lines: fit lines, (panel a) equation (11), (panel b) equation (12). The vertical dotted line indicates  $v_{ae}$  for  $\mu = 60$  and  $\phi = 0.15$ , as discussed in the text.

five times higher than in case (b2). So our results show a different behaviour.

Schräpler & Blum (2011) perform experiments and simulations where spherical SiO<sub>2</sub> particles (diameter of 1.5 µm, mass  $3.5 \times 10^{-15}$  kg) impact with velocity v = 15, 30, 44, 59 m s<sup>-1</sup> on a porous target ( $\varphi \simeq 0.15$ ). Their fig. 5 presents the following fit for targets with  $\langle C_0 \rangle \sim 2$ :

$$\epsilon = \sqrt{(a \times v - c)} \tag{11}$$

with a = 1.25 s m<sup>-1</sup> and c = 7.5 for  $v \ge 15$  m s<sup>-1</sup>. This fit is shown as a grey dashed line in Fig. 9(a), and for  $\mu = 10$ , an excellent fit to our results is obtained.

The accretion efficiency is analysed in Fig. 9(b). Here no differences for different  $\mu$  are observed, but the values for  $\mu = 60$ cover a larger range of v than the values of  $\mu = 10$ , which end for  $v \simeq 40 \text{ m s}^{-1}$ . This means that collisions between aggregates with high mass ratio have a higher probability of growing at high velocities. Wada et al. (2013) perform simulations between microsized aggregates with similar values of  $\mu$  (1, 16, 64), but they simulated ice aggregates. They concluded that the positive region of  $\alpha$  is stretched with increasing mass ratio and the growth efficiency (averaged over the impact parameter) is significantly enhanced for collisions with high mass ratios. We agree with their conclusion.

We observed a dependence of  $\alpha$  on the filling factor  $\varphi$  when  $v \ge 50 \text{ m s}^{-1}$ . Meisner et al. (2013) studied the variation of  $\alpha$  with v when aggregates with a mass of  $\simeq 0.27 \ \mu \text{g}$  collide with a large target (initial  $\varphi \simeq 0.3$ ). They found a linear relationship,

$$\alpha = c_1 - c_2 \times v, \tag{12}$$

with constants  $c_1$  and  $c_2$ , so the accretion efficiency decreases when v increases. We include such a linear relation – with  $c_1 = 100$  and  $c_2 = 0.85$  s m<sup>-1</sup> – in Fig. 9(b) as a grey dashed line; the fit agrees nicely with our results. However, it overestimates for the highest and lowest values of  $\varphi$ , while it underestimates for the intermediate values (0.20  $< \varphi < 0.35$ ). For example, for v = 75 m s<sup>-1</sup>, the fit predicts  $\alpha = 0.36$ , but  $\alpha = 0.48$  when  $\varphi = 0.25$  and  $\alpha = 0.09$  when  $\varphi = 0.40$ . This indicates once again that the intermediate values of  $\varphi$  exhibit a better tendency for growing. This might be understood if we consider

that these intermediate  $\varphi$  values are in the transition phase between piston-effect and petal-like structure, where projectiles have enough energy to penetrate into targets (SP outcome), but not enough energy to produce the detachment of the petals that are formed on the crater walls (Planes et al. 2020).

The dependence of  $\alpha$  with  $\varphi$  was studied experimentally, albeit under gravity collisions that could not exclude re-accretion after the collision. Beitz et al. (2011) found in experiments that  $\alpha$ depends on  $\varphi$  when colliding such equal-mass aggregates of cm– dm sizes with  $v \leq 2 \text{ m s}^{-1}$  and  $\varphi < 0.13$ . Deckers & Teiser (2014) studied experimentally collisions of cm–dm sized aggregates built of irregular micrometer-sized quartz grains with  $\varphi \simeq 0.45$ . They found that the accretion efficiency does not only depend on the collision energy, but also on the volume-filling factor.

We conclude that both the erosion efficiency and the accretion efficiency show simple dependences on the parameters studied by us; the strongest dependence is on velocity v, as long as  $v < 100 \text{ m s}^{-1}$ .

#### 3.6 Mass distribution of small fragments

For SP and TF outcomes, we observed one or two big fragments, respectively, while for TD outcome, several big clusters plus a large number of ejecta are produced. We now focus on the massive distribution of the small fragments that have been eroded from the target.

Fig. 10 shows the distribution of the fragment mass for small clusters (number of grains in clusters, *n*, less than  $10^3$ ), normalized with the total number of grains,  $N_{\text{tot}}$ . For simplicity, we only display eight different cases (varying  $\mu$ ,  $\varphi$ , and v). The low-size tails of the distribution, can be fitted to a power-law distribution,

$$F(n) = kn^{-\tau},\tag{13}$$

where k is a constant. The lines in Fig. 10 give fits to power-law distributions, all of them with the same exponent,  $\tau = 2.8$ . A more precise adjustment presents a variation in the value of  $\tau$  less than 15 per cent. So this surprisingly shows that  $\tau$  could be approximately independent of parameters studied here.



Figure 10. Fragment distributions F(n), normalized with  $N_{\text{tot}}$ , for some cases. Lines indicate power-law relations (equation 13) to guide the eye, with exponent  $\tau = -2.8$ .

This power-law fit and this value for  $\tau$  are common in models of the size distribution for ejected grains during a collision. Ormel et al. (2009) found values of  $\tau \simeq 3.7$  when destruction between clusters is very strong, and  $\tau \simeq 2$  when erosion dominates. Ringl et al. (2012b) studied these distributions for equal-sized aggregates ( $\varphi = 20.5$ ), varying v. Between 10 m s<sup>-1</sup> <v < 85 m s<sup>-1</sup>, they found 2 <  $\tau$  < 3.8, or  $\tau = 2.9 \pm 30$  per cent. So we generally agree with the previous studies done by Ringl et al. (2012b).

Finally, we note that strong differences may appear on larger scales. For example, Wurm, Paraskov & Krauss (2005) experimentally studied the size distribution of fragments for collisions of mm-projectiles against large targets, considering a filling factor of  $\varphi \simeq 0.35$  and  $v \simeq 20 \text{ ms}^{-1}$ ; they found that for small grains the size distribution is flat and might be described by a constant.

# 3.7 Growth threshold

Finally, we present some boundaries on v,  $\varphi$ , and  $\mu$  that could allow for the growth of porous aggregates as a result of collisions.

Figs 11 and 12 show  $Y/N_{tot}$  versus  $\varphi$ . Y denotes here the total number of ejected grains, where all grains outside the largest remnant are counted. Y is normalized with the total number of grains  $N_{tot}$ . Colours in Figs 11 and 12 differentiate the initial velocities.

Fig. 11 is only for collisions with  $\mu = 10$ . The dashed line,  $Y/N_{tot} = 1/11$ , separates the mass-gain regime from the mass-loss regime. We define mass gain if  $Y < N_p$ , and as we have  $\mu = 10$ ,  $Y/N_{tot} < 1/11 \simeq 0.091$  defines mass gain in the target. We define the critical velocity  $v_c$  as the limiting velocity, above which collisions lead to mass loss; it depends on porosity. For  $\varphi = 0.15$ ,  $v_c$  must be lower than 15 m s<sup>-1</sup>, when  $\varphi = 0.25$ ,  $v_c$  is around 30 m s<sup>-1</sup>, and for  $\varphi = 0.40$ ,  $v_c$  increase, and would be close to 35 m s<sup>-1</sup>.

Fig. 12 represents collisions with  $\mu = 60$ . Here  $Y/N_{tot} < 1/61 \approx 0.016$  defines mass-gain in the target (dashed line). This plot completes the analysis of fig. 10 in Planes et al. (2020) by adding

more initial velocities, which are represented by different colours. This figure shows that aggregates could grow even when the collision velocity is as high as 100 m s<sup>-1</sup>, when  $0.22 \le \varphi \le 0.30$ . Again, a greater possibility of growth is observed for intermediate filling factors, showing agreement with what was observed and explained in sections 3.4 and 3.5. This window in  $\varphi$  increases when v decreases. For  $v \le 50$  m s<sup>-1</sup>, we observed this possibility of growing for all  $\varphi$  analysed.

Thus, Fig. 12 constitutes maybe the best way to capture one of the key results of this study: The existence of a 'filling-factor window' that allows for mass gain even at relatively high-energy collisions. The reason for this window is the change of the energy deposition process of the projectile (Planes et al. 2020). While for highly porous targets,  $\varphi \leq 0.20$ , the projectile can easily penetrate the target and leave it on the back side inducing erosion and mass loss (so-called 'piston effect', Fig. 2), a compact target  $\varphi \ge 0.40$ , stops the projectile close to the surface, inducing abundant grain loss from the front side; for finite mass ratios, like those considered here, this latter effect is based on the emission of the fracturing crater rim (so-called 'petals', Fig. 1). For filling factors in the 'filling-factor window',  $0.20 < \varphi$ < 0.35, the projectile is stopped deep in the target such that erosion from both the front and the back side become strongly suppressed. This is visualized in Fig. 13, which shows the deep energy deposition for an intermediate filling-factor case,  $\varphi = 0.20$ .

In general, previous studies also found growth for aggregates that collide at high velocities: Teiser & Wurm (2009) performed experiments in mm-scale, and they found growth for v up to  $\simeq 50 \text{ m s}^{-1}$ , and Meisner et al. (2013) found growth for v up to  $\simeq 70 \text{ m s}^{-1}$ . In this work, we try to connect this critical velocity with variations in  $\mu$  and  $\varphi$ .

The behaviour observed in Figs 11 and 12 is quite different from ejection observed when a granular projectile collides against a granular bed. Simulations performed recently (Planes et al. 2017) where the filling factor was fixed to 0.36 and  $5 < v < 200 \text{ m s}^{-1}$ ,



Figure 11. Number of ejected grains normalized with  $N_{\text{tot}}$  as a function of the filling factor  $\varphi$ , for cases with  $\mu = 10$  and different impact velocities v. Dashed line separates mass-gain from mass-loss regimes.



Figure 12. Ejected grains normalized with  $N_{\text{tot}}$  as a function of  $\varphi$ , for cases with  $\mu = 60$  and different impact velocities v. Dashed line separates mass-gain from mass-loss regimes.

showed no fragmentation, since the assumption of the target to be a (semi-infinite) planar medium does not allow the projectile, or the collided target to continue its motion. The actual mass ratio here was  $140 \le \mu \le 14\,000$ . The projectile penetrates and is efficiently

stopped by the target, resulting in a fused aggregate where a crater is formed and a minor contribution of ejecta. The authors concluded that ejecta yields amount to  $\leq 10$  per cent of the grains excavated from the crater; most of the grains are compacted into the crater



**Figure 13.** Final snapshots for  $\mu = 60$ ,  $\varphi = 0.25$ , and different velocities  $v \pmod{m s^{-1}}$ : (a) 25, (b) 50, (c) 75, and (d) 100. Top panels: side views for slices with width 20 µm; bottom panels: perspective view of the collision outcome. Colour legend shows vertical velocity,  $v_z$ , for each individual grain. Data were taken at 500, 250, 150, and 100 µs for subpanels (a)–(f).

walls. That percentage is easily exceeded by the present collisions between aggregates with  $\mu = 10$ , 60 when the outcomes are TF or TD. We conclude that collisions with different mass ratios between aggregates exhibit a very different behaviour.

Some authors have concluded that  $\mu$  does not affect the value of  $v_c$ , others have tried to separate  $v_c$  for several values of  $\mu$  and others have tried to give a relation between  $v_c$  and  $\mu$ . Thus, on the one side, Wada et al. (2013) found in simulations that the high mass ratio does not affect significantly the critical velocity for dust growth, in contrast with our results. They obtained the relation  $v_c = 8(R_{\text{grain}}/0.1 \,\mu\text{m})^{-5/6}$  for silicate – which amounts to 1.5 m s<sup>-1</sup> in our case – almost independent on the size and the mass ratio.

Whizin et al. (2017) collided mm-sized dust aggregates with loosely bound cm-sized agglomerates and discussed the dependence of  $v_c$  on the mass ratio between target and projectile,  $\mu$ ; they obtained  $v_c = 1.01\mu^{1.54}$  cm s<sup>-1</sup>. For  $\mu = 10$ , this equation gives  $\simeq 0.35$  m s<sup>-1</sup> and for  $\mu = 60, 5.53$  m s<sup>-1</sup>. These values are too low compared with our results, but these are different situations, and we agree that the impact velocity needed to fracture the aggregate increases when  $\mu$ increases. Their models do not include the effect of  $\varphi$ .

According to Güttler et al. (2010),  $\varphi \ge 0.40$  is considered compact, and for  $\mu \ne 1$  they found a critical velocity of  $v_c \simeq 25 \text{ m s}^{-1}$ . If we compare our results from Figs 11 and 12 with fig. 11 in Güttler et al. (2010), we obtain a slightly higher  $v_c$  for  $\mu = 10$ , but for  $\mu = 60$ , we found a  $v_c$  close to the double of Güttler's value. This suggests that maybe  $\mu \ne 1$  is not enough to establish a regime because there could be slight variations when  $\mu$  varies. Another important factor to consider is that we only have the value  $\varphi = 0.40$  to compare; as porosity plays a crucial role maybe for higher values of  $\varphi$  these differences could shrink.

If now we compare results for  $\varphi < 0.40$ , Güttler et al. (2010) found a value of  $v_c = 3.5 \text{ m s}^{-1}$  for  $\mu \neq 1$ . In this study, we found a several times higher  $v_c$ , which increases with both  $\mu$  and  $\varphi$ .

We conclude that the intermediate filling factors  $(0.20 < \varphi \le 0.30)$  have exhibited better possibilities for the growth of the target after the collision process. Besides, the dependences of  $v_c$  analysed in this

section show that the critical velocity for mass gain depends on both the mass ratio and the filling factor.

#### **4 SUMMARY AND CONCLUSIONS**

The interaction between dust aggregates made up of hundreds or thousands of individual silica grains has been studied by simulations. These dust collisions are important in many astrophysical situations, such as debris discs, regolith impacts, interplanetary dust, and protoplanetary discs. In the latter case, it is crucial to understand how a system evolves through collisions, as the details of how dust aggregates grow to form planetesimals and eventually larger bodies are still unknown. In this study, several impact velocities, porosities, and mass ratios between the aggregates were used to determine the threshold values that could separate the agglomeration from the fragmentation of the target aggregate. Erosion and accretion efficiencies are also studied, and the minimum impact energy required to fracture the sample is discussed. The mass distribution of the fragments produced after the collision has been analysed.

In summary, we find the following results:

(i) We can classify the result of simulations in three possible outcomes: SP (Sticking by Penetration), TD (Total Destruction) – both observed previously by other authors – and TF (Two Fragments) related with the piston effect (Planes et al. 2020).

(ii) A large compaction is observed within the aggregates as a result of the collisional process. Although the mean number of contacts as a function of the impact velocity exhibits a very different behaviour for the two mass ratios studied here, the maximum value reached in both cases is close to double the initial one.

(iii) The friction incorporated to our system allows agglomeration at higher impact energies. We found the relation  $E(J) = 2 \times 10^{-7} \varphi$  divide the gain/loss mass regimes quite well.

(iv) The mass distribution of small fragments produced by the collision follows the relation  $F(n) \propto n^{-\tau}$ , with the same exponent,

 $\tau = 2.8$ , for all cases (error less than 15 per cent). So the exponent  $\tau$  is approximately independent of the parameters studied here.

(v) The minimum velocity needed to break the target depends on  $\varphi$  and  $\mu$ , contrary to some previous studies that assume it independent of these parameters.

(vi) The relation proposed by Schräpler & Blum (2011),  $\epsilon = \sqrt{a \times v - c}$ , fits our erosion results very well. Furthermore, when fracture occurs for  $\mu = 10$ , the erosion efficiency is independent of  $\varphi$  reaching a maximum value of ~10.

(vii) We do not observe large differences in the accretion efficiency for different  $\mu$ , but the values for  $\mu = 60$  cover a large range of v, compared with the values of  $\mu = 10$ . We hence observe a greater probability of growth if a high-velocity collision occurs between grains with a high mass ratio.

(viii) For a high mass ratio ( $\mu = 60$ ), our results show a greater growth trend for aggregates with porosity between 0.65 and 0.8 (0.2  $\langle \varphi \rangle < 0.35$ ), where even collision velocities of up to 100 m s<sup>-1</sup> could allow the growth of the target, offering a much more positive scenario for the formation of larger bodies by collisional processes. This window in  $\varphi$  increases when v decreases. For  $v \leq 50$  m s<sup>-1</sup>, this growth possibility is observed for all  $\varphi$  analysed. However, for a lower mass ratio ( $\mu = 10$ ), we observe that the target has the possibility of growing only if  $v \leq 40$  m s<sup>-1</sup> for  $\varphi = 0.4$ , and this critical velocity decreases with  $\varphi$ .

We conclude that obtaining a complete growth/fracture model is not simple, and it would appear that a single value of the ratio of mass and filling factor might not be sufficient to define the threshold line that separates these regimes.

One of the key findings of this study is the existence of a 'filling-factor window'  $0.20 < \varphi < 0.35$ , in which mass-asymmetric collisions lead to growth even at (relatively) high collision velocities. The physical origin for this window lies in a change of the energy deposition process with increasing filling factor, from a piston-like penetration of the target to a near-surface stopping. In the 'filling-factor window'  $0.20 < \varphi < 0.35$ , the projectile is stopped deep in the target such that erosion from both the front and the back side become strongly suppressed. This window positively affects the aggregation probability of colliding dust in protoplanetary discs, at least for mass-asymmetric collisions, which are however the majority situation.

The assessment of how important this window may be, should best be done in the framework of studying the time evolution of dust discs. Making a complete model of early-stage planetary formation should include a temporal evolution of the dust as its aggregates collides with each other, taking into account all possible parameters: different compositions, impact velocities, porosities, size, and so on. This is a complex task, but recently attempts have been made to achieve this goal by including some of the more important parameters. Some authors have recently pointed out the importance of porosity in planetary formation modelling. Ormel et al. (2007) found that the collisional evolution of their porosity-evolution model is quantitatively different from aggregation models in which porosity can be parametrized by a fixed exponent. Therefore, a microphysical collision model is a key requirement for coagulation models. Zsom et al. (2011) affirm that a more realistic collision model is needed that includes compaction and fragmentation of dust aggregates. They used a Monte Carlo code to follow the mass and porosity evolution of the particles in time and they found that significant changes in the porosity of aggregates has the potential to significantly alter their collision model and thus the obtained results.

### ACKNOWLEDGEMENTS

BP, EM, and EMB acknowledge support from SIIP-UNCuyo grant 06/M025. This work used the Toko cluster from FCEN-UNCuyo that is part of SNCAD MinCyT, Argentina.

# DATA AVAILABILITY

There are no new data associated with this paper other than those generated in the simulation runs.

#### REFERENCES

- Armitage P. J., 2010, Astrophysics of Planet Formation. Cambridge Univ. Press, New York
- Beitz E., Güttler C., Blum J., Meisner T., Teiser J., Wurm G., 2011, ApJ, 736, 34
- Birnstiel T., Fang M., Johansen A., 2016, Space Sci. Rev., 205, 41
- Blum J., 2010, Res. Astron. Astrophys., 10, 1199
- Blum J., Schräpler R., 2004, Phys. Rev. Lett., 93, 115503
- Blum J., Wurm G., 2008, ARA&A, 46, 21
- Chokshi A., Tielens A. G. G. M., Hollenbach D., 1993, ApJ, 407, 806
- Deckers J., Teiser J., 2014, ApJ, 796, 99
- Derjaguin B. V., Muller V. M., Toporov Y. P., 1975, J. Colloid Interface Sci., 53, 314
- Dominik C., Tielens A. G. G. M., 1997, ApJ, 480, 647 ([D&T])
- Gáspár A., Rieke G. H., Balog Z., 2013, ApJ, 768, 25
- Gunkelmann N., Ringl C., Urbassek H. M., 2016, A&A, 589, A30 Güttler C., Blum J., Zsom A., Ormel C. W., Dullemond C. P., 2010, A&A,
- 513, A56
- Jewitt D., Meech K. J., 1986, ApJ, 310, 937
- Johnson K. L., 1985, Contact Mechanics. Cambridge Univ. Press, Cambridge Johnson K. L., Kendall K., Roberts A. D., 1971, Proc. R. Soc. London. Ser.
- A, 324, 301 Katsuragi H., 2016, Lecture Notes in Physics, Vol. 910, Physics of Soft Impact and Cratering, Springer, Tokyo
- Krijt S., Ormel C. W., Dominik C., Tielens A. G. G. M., 2015, A&A, 574, A83
- Krijt S., Ormel C. W., Dominik C., Tielens A. G. G. M., 2016, A&A, 586, A20
- Langkowski D., Teiser J., Blum J., 2008, ApJ, 675, 764
- Maugis D., 2000, Contact, Adhesion and Rupture of Elastic Solids. Springer, Berlin
- Meisner T., Wurm G., Teiser J., Schywek M., 2013, A&A, 559, A123
- Meru F., Geretshauser R. J., Schäfer C., Speith R., Kley W., 2013, MNRAS, 435, 2371
- Musiolik G., de Beule C., Wurm G., 2017, Icarus, 296, 110
- Okuzumi S., Tanaka H., aki Sakagami M., 2009, ApJ, 707, 1247
- Ormel C. W., Spaans M., Tielens A. G. G. M., 2007, A&A, 461, 215
- Ormel C. W., Paszun D., Dominik C., Tielens A. G. G. M., 2009, A&A, 502, 845
- Paszun D., Dominik C., 2009, A&A, 507, 1023
- Planes M. B., Millán E. N., Urbassek H. M., Bringa E. M., 2017, A&A, 607, A19
- Planes M. B., Millan E. N., Urbassek H. M., Bringa E. M., 2019, MNRAS, 487, L13
- Planes M. B., Millan E. N., Urbassek H. M., Bringa E. M., 2020, MNRAS, 492, 1937
- Plimpton S., 1995, J. Comput. Phys., 117, 1
- Poppe T., Blum J., Henning T., 2000, ApJ, 533, 454
- Ringl C., Urbassek H. M., 2012, Comput. Phys. Commun., 183, 986
- Ringl C., Bringa E. M., Urbassek H. M., 2012a, Phys. Rev. E, 86, 061313
- Ringl C., Bringa E. M., Bertoldi D. S., Urbassek H. M., 2012b, ApJ, 752, 151
- Schräpler R., Blum J., 2011, ApJ, 734, 108
- Schräpler R., Blum J., Krijt S., Raabe J.-H., 2018, ApJ, 853, 74
- Seizinger A., Kley W., 2013, A&A, 551, A65
- Seizinger A., Krijt S., Kley W., 2013, A&A, 560, A45

- Stukowski A., 2010, Model. Simul. Mater. Sci. Eng., 18, 015012
- Suyama T., Wada K., Tanaka H., 2008, ApJ, 684, 1310
- Teiser J., Wurm G., 2009, MNRAS, 393, 1584
- Teiser J., Engelhardt I., Wurm G., 2011, ApJ, 742, 5
- Umstätter P., Urbassek H. M., 2021, Granular Matter, Springer.
- Wada K., Tanaka H., Suyama T., Kimura H., Yamamoto T., 2007, ApJ, 661, 320
- Wada K., Tanaka H., Suyama T., Kimura H., Yamamoto T., 2008, ApJ, 677, 1296
- Wada K., Tanaka H., Suyama T., Kimura H., Yamamoto T., 2009, ApJ, 702, 1490

# Collisions between micro-sized aggregates 1733

- Wada K., Tanaka H., Suyama T., Kimura H., Yamamoto T., 2011, ApJ, 737, 36
- Wada K., Tanaka H., Okuzumi S., Kobayashi H., Suyama T., Kimura H., Yamamoto T., 2013, A&A, 559, A62
- Whizin A. D., Blum J., Colwell J. E., 2017, ApJ, 836, 94
- Wurm G., Paraskov G., Krauss O., 2005, Icarus, 178, 253
- Yang H., Ishiguro M., 2018, ApJ, 854, 173
- Zsom A., Ormel C. W., Dullemond C. P., Henning T., 2011, A&A, 534, A73

This paper has been typeset from a TEX/LATEX file prepared by the author.