

FRENADO, FRAGMENTACIÓN
Y FORMACIÓN DE CRÁTER
CAUSADO POR COLISIONES
DE GRANOS DE ALTA
POROSIDAD

por

María Belén Planes

Director: Dr. Eduardo Bringa
Co-Director: Emmanuel Millán

2016

Presentado ante la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad Nacional de Cuyo como parte de los requerimientos para la obtención del grado de Licenciado en Ciencias Básicas con Orientación en Física.

Dedicada a Yazmeene y Nicolás.

Agradecimientos

En primer lugar, quiero agradecer a mi mamá Karina y a mi abuela Elsa, orgullo y pilares de mi vida que me formaron y que, juntas, han constituido el modelo de mujer, profesional y persona que aspiro ser.

A mi compañero de vida Gonzalo, por su amor incondicional a través de todos estos años. Por enseñarme a nunca bajar los brazos. Por ser mi soporte y mi descarga en todos los momentos transitados durante la carrera.

A mi familia paterna: Daniel, Christian, Natalia y Sabina. Por haber llegado para brindarme su apoyo en mis decisiones y acompañarme en este camino siempre con una sonrisa e irradiando positivismo.

A mi familia política: Sandra, Alicia, Carlos y mi sobrina Guadalupe. Por ayudarme tantas veces con la economía y las tareas domésticas para que pueda estudiar, por estar en el día a día, convirtiéndose en una parte muy importante de mi vida.

A mi madrina Rosana y su familia, que siempre han estado presentes en mis momentos más importantes, hecho que valoro en demasía.

A mis amigos de la vida, entre ellos Arturo, Johana, Pablo; y en especial a mi editora y mejor amiga Natalia, por acompañarme en todo este tramo de mi vida incondicionalmente.

A mi director Eduardo Bringa por su apoyo incondicional. Por sus horas de paciencia, dedicación, esmero. Por ser una persona admirable y un investigador excepcional.

A mi co-director Emmanuel Millán por su tiempo dedicado, sus consejos, las lecciones de informática permanentes que me ayudaron tanto y su apoyo en todo el proceso de esta tesina. A Carlos Ruestes por su colaboración mediante su trabajo de tesis doctoral.

A todos los docentes y personal de la FCEN que no solo compartieron su sabiduría y me guiaron siempre para alcanzar mi meta, sino también porque hicieron que sintiera a la facultad como mi segundo hogar.

A mis compañeros de la facultad por las tardes interminables y las alegrías de los logros compartidos; en especial a mis amigas colegas Paula y Rocío.

Finalmente, a todos mis afectos que aportaron su granito de arena para que yo pudiera alcanzar mi sueño.

RESUMEN

Este proyecto implementará simulaciones computacionales para recrear impactos de proyectiles multigranos porosos de sílica sobre superficies de iguales características. Investigaciones de este tipo son relevantes para varias disciplinas, siendo una de las más relevantes la astrofísica, ya que el universo contiene un elevado porcentaje de granos de polvo, que forman, por ejemplo, nubes de polvo interestelares, anillos planetarios, etc. La formación de cráteres por el impacto de proyectiles como meteoritos o partículas de polvo también son interesantes desde el estudio de las superficies de nanoestructuras.

En este trabajo se estudiarán los cráteres formados por el impacto de proyectiles en los que varían su tamaño y su velocidad inicial. El modelo implementado incluye fuerzas de repulsión y adhesión, y fuerzas disipativas como rodamiento y fricción.

En este marco investigaremos si los modelos actuales para cráteres de impacto son válidos en la escala micro.

ABSTRACT

This project implements computer simulations to recreate impacts of multigrain porous silica projectiles on surfaces of the same characteristics. Investigations of this type are relevant to several disciplines, one of the most important is astrophysics, since the universe contains a high percentage of dust grains that form, for example, interstellar dust clouds, planetary rings, etc. Cratering by the impact of projectiles such as meteorites and dust particles are also interesting from a study of surfaces of nanostructures.

In this study the craters formed by the impact of projectiles in varying size and initial velocity are studied. The implemented model includes repulsive and adhesion forces, and dissipative ones as bearing and friction.

In this context we are going to investigate whether the current models for impact craters are valid on the micro scale.

ÍNDICE GENERAL

CAPÍTULO 1: Introducción	15
1.1 Motivación.....	15
1.2 Organización.....	16
1.3 Antecedentes.....	17
1.4 Objetivos.....	20
CAPÍTULO 2: Marco Teórico.....	23
2.1 Sistemas Planetarios	23
2.1.1. Descripción de cuerpos menores	23
2.2. Cráteres de impacto	25
2.3 Medios Granulares.....	26
2.3.1 Física General de Contacto entre dos Granos	27
CAPÍTULO 3: Método: Dinámica Molecular	35
3.1 Teoría General de la Dinámica Molecular.....	35
3.1.1. Introducción	35
3.1.2 Etapas de una simulación.....	37
3.1.3. LAMMPS	40
3.1.4. Potenciales de Interacción	41
3.1.5 Escalas temporales y geométricas.....	43

3.2 MD aplicada a materiales granulares.....	43
3.2.1 Modelo granular utilizado.....	44
3.2.2. MD en medios granulares	51
3.3. Selección de parámetros y armado de la muestra.....	53
CAPÍTULO 4: Resultados.....	55
4.1 Tamaño del cráter respecto del radio del proyectil.....	56
4.1.1. Diámetro vs Radio del proyectil	57
4.1.2. Profundidad vs Radio del proyectil	58
4.1.3. Volumen vs Radio del proyectil	59
4.1.4. Conclusiones.....	61
4.2 Análisis de las partículas eyectadas	61
4.2.1. Y vs tiempo (estabilización).....	62
4.2.2. Y vs Radio del proyectil.....	63
4.2.3. Y vs Velocidad del proyectil	64
4.2.4. Y vs volumen del cráter	65
4.2.5. Conclusiones.....	67
4.3 Análisis de la Energía	68
4.3.1. Volumen del cráter vs energía	68
4.3.2. Energía vs tiempo	70
4.3.3. Energía vs centro de masa del proyectil	70
4.3.4. dE/dz vs tiempo	72
4.3.5. Conclusiones.....	73

CAPÍTULO 5: Conclusiones y Nuevas Perspectivas	75
Apéndice A	79
Apéndice B	83
Bibliografía	85

Capítulo 1

Introducción

1.1 Motivación

Recientemente se han comenzado a estudiar los impactos entre medios granulares y los cráteres formados en zonas porosas, intentando investigar la dependencia de las variables y corroborando si los modelos actuales se cumplen a escalas mucho menores que en las que fueron establecidos. Desde el lado experimental, el desarrollo de la exploración túnel y microscopios de fuerza atómica han permitido que los estudios cada vez más sofisticados de interacción en las zonas de contacto de granos de tamaño submicrónico tengan lugar.

En el aspecto teórico, el hecho de aumentar la velocidad de las supercomputadoras permite ahora realizar investigaciones numéricas sobre interacciones microscópicas en una base átomo por átomo. Estos estudios permiten estudiar con gran detalle la morfología, estructura y la interacción entre las superficies, incluyendo la respuesta microscópica y procesos de deformación.

En publicaciones recientes se ha trabajado la variación de la porosidad en el objetivo y los ángulos de impacto del proyectil. Pero hasta el momento no había sido analizada la situación de tener un proyectil multigrano, es decir, un proyectil de igual porosidad, pero compuesto por granos individuales, dando la posibilidad de que el proyectil se fragmente al impactar en la superficie, simulando un caso realista y permitiendo el estudio de distintas variables, que hasta el momento no habían sido estudiadas.

Si bien la motivación inicial se centra en el campo de la astrofísica, ya que el estudio de estos procesos nos ayudará a comprender de una manera más confiable las interacciones del polvo que abunda en nuestro universo y el comportamiento de sus interacciones a escala real; vale mencionar que actualmente estas investigaciones están siendo de gran importancia en el estudio de superficies de nanoestructuras, y sugiere un rápido avance en los próximos tiempos, debido a las posibilidades que ofrece el método que presentaremos en cuanto a confiabilidad y sencillez, y también por la diversidad de aplicaciones e investigaciones que pueden lograrse a través de su aplicación, las mismas serán brevemente mencionadas a continuación.

1.2 Organización

Este trabajo se organiza en 5 grandes bloques.

En el primero se dará una breve introducción al trabajo, mencionando los antecedentes de investigaciones realizadas recientemente en esta área y las aplicaciones de interés que actualmente involucran a nuestro tema de estudio. Se plantearán los objetivos a alcanzar.

En el segundo se introducirán los conceptos básicos que trataremos a lo largo de este trabajo, en primer lugar, dando las definiciones necesarias para poder comprender su uso en astrofísica y luego expondremos las definiciones relevantes de medios granulares y explicaremos cómo trabajan las fuerzas entre dos granos aislados para entender mejor la mecánica del problema.

En el tercer bloque se desarrollará el modelo utilizado, explicando cómo consideramos las distintas fuerzas interactuantes y cómo, utilizando técnicas computacionales, obtenemos eficiencia y confiabilidad en la toma de datos. Se expondrán los datos de la muestra y se explicará cómo se llevarán a cabo el armado de la muestra y las simulaciones posteriores.

En el capítulo 4 se mostrarán los resultados obtenidos, haciendo un análisis de los mismos y comparando con modelos actuales para medios granulares.

Por último, se presentarán las conclusiones finales del trabajo. Se anexan las presentaciones a congresos realizadas, los posters presentados y las conferencias brindadas. También se debatirán las nuevas perspectivas para continuar con esta línea de investigación.

1.3 Antecedentes

En el pasado reciente se han realizado numerosos trabajos de investigación sobre impactos en materiales granulares, poniendo un mayor énfasis en objetivos no cohesivos, como arenas secas (1-4), dejando a los impactos en materiales adhesivos en un segundo plano.

Sin embargo, estos materiales tienen una importancia fundamental en varias ramas físicas, en especial en el campo de la astrofísica.

El estudio de impactos dentro de la astrofísica ha tenido interés por décadas, y como ejemplo podemos citar trabajos enfocados en proyectiles largos (de 0.1 – 1 km) (5). Sin embargo, el universo contiene un alto porcentaje de material granular, conocido comúnmente como polvo, que son granos de tamaño entre μm y sub- μm que tienen un importante rol, por ejemplo, en la evolución de regiones irradiadas. En este marco podemos citar los trabajos (6-7) donde se estudió cómo la aglomeración de polvo interestelar puede llevar a la formación de moléculas complejas, entre ellas moléculas orgánicas, lo que demuestra la factibilidad del proceso de enfriamiento y colisión de este material granular para dar lugar a estrellas y sistemas planetarios.

En adición a lo anteriormente mencionado, se ha iniciado el estudio de impactos en materiales granulares que además son materiales adhesivos. Como ejemplo, las propiedades mecánicas de los planetas, satélites, asteroides, etc. pueden determinarse mediante la dinámica que está involucrada en los impactos de proyectiles (8). Como una mención especial, tenemos la misión espacial DEEP IMPACT, en la cual se impacta un proyectil (364 kg, 49% Cu) con una velocidad de 10,3 km/s sobre el cometa Tempel 1 (9). Este cometa es altamente poroso, con un factor de llenado de 30%-50%. El objetivo de esta misión fue aprender más acerca de la estructura del núcleo del cometa

mediante un análisis del cráter formado y por el estudio del material eyectado. Impactos similares pueden ocurrir de forma natural si objetos compactos, como meteoritos, colisionan con cometas, superficies de satélites, o anillos planetarios.

También destacamos el estudio de los impactos de material cometario en la espuma de captura de la misión STARDUST (10), la cual realizó un extensivo análisis mediante modelos continuos de impactos de materiales de baja densidad. En este caso el modelado continuo puede ser problemático, ya que el tamaño de los granos alcanza la micro escala, y se comenzó a plantear la divergencia con los modelos existentes en esta y en menores escalas.

Los estudios experimentales de colisiones entre granos de tamaños menores a decenas de μm no son comunes. Sin embargo, podemos mencionar trabajos sobre colisiones de granos individuales de sílica o de pequeñas aglomeraciones con velocidades cercanas a 1 m/s sobre superficies planas (11-12), y sobre colisiones donde los granos se adhieren a las aglomeraciones de granos existentes (13-14). Procesos que se llevan a cabo en las escalas de milímetros y centímetros pueden entenderse aproximadamente con modelos del tipo continuo. Uno de estos modelos de colisiones, logrado con el aporte de experimentos y simulaciones numéricas es utilizado por Ormel et al. (15), que sigue una línea de trabajos de investigación que lleva más de 20 años (16-20). Estos modelos son usados para obtener la evolución de distribuciones del tamaño del polvo y el resultante espectro de absorción. De todas formas, estos tipos de modelos no están garantizados para ser utilizados por debajo de las micro-nano escalas. Para tener en cuenta los más finos detalles en las interacciones de polvo, se necesitarían simulaciones que incorporen interacciones complejas de los diferentes componentes de un típico grano de polvo.

Nuestra estrategia será modelar los clusters (denominación para los proyectiles granulares) y el volumen de impacto utilizando simulaciones de dinámica molecular (Molecular Dynamics – MD), la cual resuelve las ecuaciones de movimiento de Newton para un ensamble de granos interactuantes a través de un apropiado campo de fuerza, como se explicará con más detalle en el próximo bloque. Estos granos en sí mismos son considerados material sólido, que internamente no cambia durante el proceso de colisión. Esta estrategia ha sido usada en los últimos tiempos con gran éxito (21-26) y permite describir las colisiones de cluster granulares que consisten en conjuntos de varios granos contra otros clusters o contra distintas clases de superficies.

En los últimos tiempos es notable el aumento de trabajos que han sido publicados donde se ha

utilizado MD para analizar diferentes aspectos de las colisiones de clusters (clusters formados por átomos), obteniendo resultados verificados por experimentos, lo cual ha hecho de la MD un modelo sólido y confiable.

Dentro de este marco, surgió el problema de elegir de forma coherente los potenciales de interacción, uno de los modelos que tomó fuerza y se ha usado con mucha frecuencia es el potencial de Lennard – Jones (LJ), utilizado en distintos tipos de simulaciones de colisiones, como por ejemplo colisiones entre clusters de agua, clusters metálicos, etc. En este entorno puede citarse el trabajo realizado en el equipo del Dr. Bringa (27) sobre colisiones entre clusters de características iguales, formados por miles de granos cada uno, donde se analizaron la compactación, fragmentación y distribución de granos eyectados luego de la colisión. Otras publicaciones donde se muestra la eficacia de este modelo pueden citarse a modo de respaldar la eficacia del modelo (27, 57).

Respecto al interés en el tamaño de los granos en estudio, cabe considerar que los clusters de unos pocos granos son los que inicialmente comienzan el proceso de formación, es decir, si bien no hay límite en el tamaño de granos de polvo que forman las nubes protoplanetarias, o las nebulosas, las pequeñas formaciones de granos son las que inicialmente colisionan unas con otras, y con volúmenes mayores, y que, eventualmente, mediante la aglomeración llevan a la formación de protoestrellas, protoplanetas y demás cuerpos. Por lo tanto, estos tamaños son los que serán relevantes en el presente trabajo.

Las velocidades reales de colisión se estiman en unos pocos cm/s para clusters pequeños en nubes protoplanetarias, donde su movimiento puede ser descrito por el movimiento Browniano en el disco de gas (30). De todas formas, como los clusters un poco mayores tienden a desacoplarse del gas, sus velocidades relativas pueden ser razonablemente medidas, siendo mayores a 1 m/s para aglomeraciones de granos que estén en la escala del metro. Debemos notar que colisiones a velocidades relativas mucho mayores pueden ocurrir en tiempos posteriores, cuando las densidades de gas y polvo hayan decrecido. En este trabajo manejaremos velocidades entre 1-20 m/s. Actualmente, trabajos experimentales (11, 31-32) se extienden a velocidades de algunos m/s, de manera que los estudios computacionales deben estar en este rango para poder comparar sus resultados con los resultados experimentales.

Nos centraremos en la expansión del trabajo de Ringl (33), que utilizando el código mejorado que se desarrolla explícitamente en el trabajo de Ringl y Urbassek (34), realizó un análisis de los

cráteres formados al impactar un proyectil compuesto por un sólo grano de Sílica sobre un medio poroso (en forma de cubo) compuesto por granos adhesivos.

En este trabajo el proyectil está formado por un grano que tiene el tamaño equivalente a tres granos del blanco, pero es un sólo grano esférico indivisible.

En esta investigación se estudió la dependencia de la profundidad de penetración del cluster respecto a la velocidad de impacto (obteniendo una dependencia aproximadamente logarítmica) y respecto a la densidad del blanco (obteniendo una dependencia de proporcionalidad inversa). También se encontró que el tamaño del cráter formado decrece con el aumento de la densidad en el blanco. Un estudio sobre los granos eyectados del blanco al impactar el proyectil muestra que el número de granos eyectados se incrementa de forma proporcional con la velocidad de impacto, y que el ángulo donde se logra la mayor eyección de partículas es de 45° .

Este trabajo presenta nuestra motivación, ya que en esta investigación se modela un cluster compuesto de varios granos, donde al impactar con la superficie el proyectil se fragmenta, simulando un caso mucho más realista. Se analizará cómo se modifican los resultados obtenidos considerando los proyectiles multigranos. También analizaremos otras variables con el objetivo de estudiar este tipo de fenómenos de una forma que se asemeje a los casos reales sin perder certeza en la colección de datos y en su posterior análisis.

1.4 Objetivos

Estudiar las colisiones multigrano – substrato (una superficie representando un objeto de mucho mayor tamaño que el grano incidente). Un “multigrano” puede estar compuesto de numerosos granos.

Se estudiará el frenado del cluster incidente, la fragmentación del material, y la forma del cráter generado.

Se busca hallar la dependencia de varias variables tales como:

- (a) diámetro del cráter formado;
- (b) profundidad del cráter formado;
- (c) volumen del cráter;
- (d) cantidad de partículas eyectadas respecto del radio inicial del cluster y de la velocidad inicial del mismo.
- (e) Un nuevo aspecto a estudiar es el de la pérdida de energía en la trayectoria (poder de frenamiento) de los distintos clusters, como función de su velocidad inicial y su radio, independientemente de la formación del cráter.

Se planea estudiar la variabilidad de los resultados obtenidos en trabajos anteriores, en particular con los de Ringl (33), que desarrolla el análisis para proyectiles de un grano; y Anders (29), donde se estudia el impacto con materiales metálicos; realizando simulaciones que involucren proyectiles multigranos y diversas velocidades iniciales para el posterior análisis de los impactos. En la etapa final se evaluará la coincidencia o no coincidencia de nuestros resultados con los trabajos mencionados.

Capítulo 2

Marco Teórico

2.1 Sistemas Planetarios

Un sistema planetario se compone de una estrella alrededor de la cual orbitan otros cuerpos de menor masa (planetas, rocas, etc.). Desde el primer indicio en 1983, cuando se detectó un disco en torno a la estrella Beta Pictoris, ha crecido exponencialmente el descubrimiento de sistemas planetarios y el amplio estudio de los mismos, en gran medida gracias a la misión Kepler (35, 36).

En estos estudios se muestra que la composición de la mayoría de los sistemas planetarios es similar a la de nuestro sistema planetario, denominado Sistema Solar. Para dar una breve introducción a los conceptos astronómicos relevantes nos centraremos en la descripción de los objetos observables en nuestro sistema que son de importancia en el presente trabajo.

El Sistema Solar está formado por una única estrella, el Sol, ocho planetas que lo orbitan, un conjunto de cuerpos menores y el espacio comprendido entre todos ellos.

2.1.1. Descripción de cuerpos menores

Asteroides

En el espacio hay mucha materia que a lo largo de millones de años se ha compactado, normalmente por acción de la gravedad. Esta materia recibe el nombre de cuerpos celestes. Los asteroides son cuerpos celestes rocosos y metálicos que se formaron en los inicios del sistema solar, y que orbitan alrededor del Sol.

La mayoría se encuentran en el Cinturón de Asteroides, región comprendida entre Marte y Júpiter. Sus dimensiones pueden abarcar desde un grano de polvo hasta el tamaño de un planeta menor. De acuerdo a su composición se clasifican en:

*Asteroides tipo C, principalmente constituidos por composiciones carbonatadas. Son los más abundantes, cerca del 75% de los asteroides pertenecen a este grupo

*Asteroides tipo S, compuestos por una base de silicio y magnesio. Cerca del 15% de los asteroides pertenecen a este grupo

*Asteroides tipo M, compuestos de Hierro y Níquel. Sólo del 5% al 10% de los asteroides pertenecen a este grupo

Cometas

Los cometas giran en torno al Sol, la mayoría describiendo una órbita elíptica o incluso parabólica. El núcleo de un cometa es una masa compacta formada básicamente de agua helada y de hielo seco (dióxido de carbono). En proporción menor contiene otras sustancias como amoníaco y silicatos. Está recubierto de una corteza que se cree formada por arena y pequeños minerales, que atrapan el calor generado por el Sol, hecho que provoca la evaporación de hielo. Normalmente en las zonas de hielo más blandas se produce una apertura por donde se emite dióxido de Carbono y polvo que contiene el cometa formando una nube a su alrededor llamada coma.

La coma es el envoltorio formado por gases y polvo en torno a un cometa.

Hay dos tipos de comas cometarias, la de plasma y la de polvo, la más conocida y posible objeto de este trabajo.

Meteoritos

Cuando un cuerpo celeste, por ejemplo, un asteroide o cometa atraviesan la atmósfera, éste aumenta su temperatura a causa de la fricción atmosférica. Estos objetos que no llegan a impactar sobre la Tierra porque se desintegran son llamados meteoros. Si el objeto no se destruye, impactará contra la superficie, y en este caso se denominan meteoritos. Según su composición química se dividen en:

*Meteoritos féreos o holosideritos: Compuestos mayormente por aleaciones de hierro y níquel. Representan el 6% del total.

*Litosideritos: formados por mezclas de silicatos y metales. Sólo representan el 1% del total.

*Meteoritos rocosos: formados únicamente por roca, son los más abundantes.

2.2. Cráteres de impacto

Los cráteres de impacto se originan por la colisión de un cuerpo sobre la superficie de otro cuerpo celeste. En todos los cuerpos celestes con falta de atmósfera y de actividad geológica pueden apreciarse cráteres formados hace millones de años, como ejemplo tenemos a la Luna. En cambio, los cuerpos celestes con atmósfera reducen la magnitud del impacto si no es que destruyen al cuerpo antes de llegar a colisionar.

En este ámbito macroscópico y con evidencia para comparar modelos propuestos los cráteres de impacto se explican en dos fases (5,37):

La primera es la fase de compresión, en la que el meteorito impacta sobre la superficie generando una presión que varía entre los 5 Gpa hasta los 1.000 Gpa. Estas presiones pueden alcanzar el límite elástico tanto del meteorito como de la superficie de impacto, es decir, la fuerza máxima que puede soportar un material sin experimentar una deformación permanente. Así, en esta fase se produce una compresión seguida de una descompresión del material, tanto del proyectil como de la superficie impactada. También en esta fase una gran cantidad de fragmentos de rocas y minerales son expulsados a mucha distancia del cráter, formando lo que se denomina “eyecta del cráter”.

La segunda fase es la excavación. Después del impacto, se produce la descompresión y la consiguiente excavación, proceso que puede durar hasta algunos minutos. En esta etapa, la energía cinética del meteorito se convierte en energía mecánica, responsable de que gran material sea expulsado en forma de rocas y polvo, provocando que la eyecta del cráter producida en la fase anterior aumente considerablemente.

Las eyecciones alrededor del cráter forman una base más gruesa y, a medida que se aleja del centro del impacto se encuentra una menor cantidad de minerales y sedimentos.

Este proceso, debido principalmente a la gravedad en blancos masivos, provoca que los materiales más densos (minerales y rocas) permanezcan cerca del cráter, y los más ligeros (polvo, sobre todo) se presenten a una distancia mayor.

En la actualidad se diferencian dos grandes tipos de cráteres de impacto: los más abundantes y estudiados se denominan cráteres simples. La profundidad de este tipo de cráter es normalmente la tercera parte de su diámetro. Por otra parte, encontramos los cráteres complejos, mucho más difíciles de reproducir en un modelo de pequeña escala, y todavía no del todo comprendidos. Estos presentan una elevación situada justo en el centro que se forma cuando el suelo es poco profundo. La profundidad del cráter es aproximadamente la quinta o sexta parte de su diámetro.

2.3 Medios Granulares

Un medio granular está compuesto por partículas macroscópicas que interactúan mutuamente por medio de fuerzas de contacto. El tamaño de los granos varía desde las décimas de micrómetros de polvo hasta los centímetros o metros en las aplicaciones industriales o estudios geológicos. La característica fundamental de los denominados medios granulares secos, es que las fuerzas de interacción son de contacto y disipativas. Los mecanismos de disipación de energía incluyen la deformación o rotura de pequeñas irregularidades en la superficie de los granos, la deformación permanente de las partículas y la propagación de fonones en el material. En los medios granulares húmedos se toman en cuenta, además, fuerzas adhesivas como la de Van der Waals.

Los medios granulares presentan gran variedad de comportamientos en función de las fuerzas que se les apliquen. En ausencia de gravedad o en las capas superiores de un depósito agitado verticalmente, los granos se comportan de forma similar a las partículas de un gas de moléculas, con la salvedad de que las colisiones son disipativas.

2.3.1 Física General de Contacto entre dos Granos

Con el fin de estudiar el proceso de las colisiones entre los granos de una forma más realista, es necesario comprender la física de un contacto entre dos granos de polvo. Presentamos a continuación una síntesis del comportamiento de la colisión entre dos granos.

Las grandes tensiones pueden conducir a la deformación plástica o incluso ondas de choque. Aquí, nos concentraremos en las pequeñas tensiones.

Dos granos pueden hacer contacto si hay una atracción entre ellos. El límite inferior de dicha fuerza es, por supuesto, la atracción de van der Waals, pero hay otras más fuertes, fuerzas como la interacción dipolo-dipolo pueden estar implicadas en algunos materiales. En principio, los granos también pueden estar cargados, dando lugar a tanto las fuerzas atractivas o repulsivas.

En contraste, en presencia de energía turbulenta, ésta domina en muchos órdenes de magnitud de la energía térmica de las nubes moleculares y las fuerzas de Coulomb tienen poca influencia en el

proceso de coagulación.

Las fuerzas de atracción empujan a los dos granos entre sí, formando un área de contacto, donde las superficies de los granos pueden reaccionar con deformación hasta que la fuerza de repulsión elástica equilibra las fuerzas de atracción. Este tipo de contacto es de un punto de vista teórico una extensión de la obra clásica de Hertz, que, a raíz de los famosos experimentos de Newton, estudió la deformación de los cuerpos en contacto sin adhesión en la década de 1880.

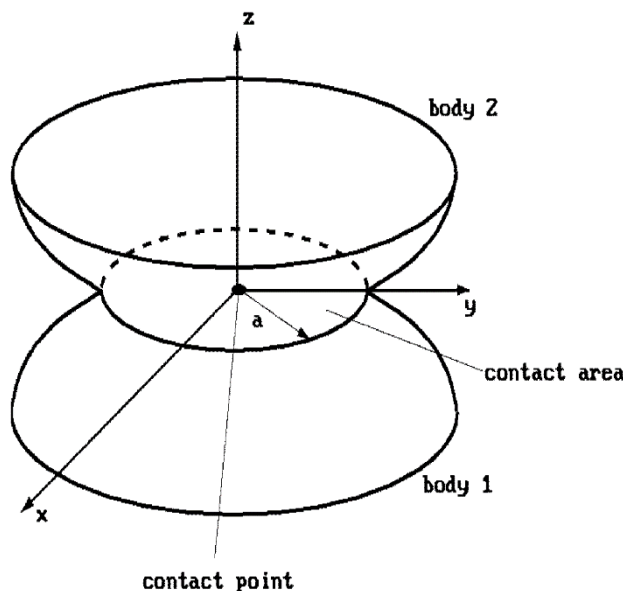


Fig.1. Dos granos hacen contacto en una finita área circular de radio a . El tamaño de esta área es controlado por la competición entre las fuerzas de atracción y de repulsión. *Imagen obtenida de (20)*

En 1971 Johnson, Kendall y Robert formularon la teoría JKR, donde encuentran una solución similar para el caso de contacto adhesivo.

En este modelo las fuerzas entre los cuerpos en contacto se asumen como fuerzas de contacto puras, es decir, los granos sienten atracción mutua sólo cuando en realidad están en contacto y sólo en la zona donde existe un contacto. La geometría de tal contacto se muestra en la figura 1.

En ausencia de fuerzas externas, el radio de contacto, está dado por:

$$a_0 = 9\pi\gamma R^2 / \varepsilon^* \quad [1]$$

Las fuerzas atractivas son descritas por la energía superficial γ del material. ε^* es la fuerza elástica constante que entra a través del material y depende del radio de Poisson y del módulo de Young del grano correspondiente.

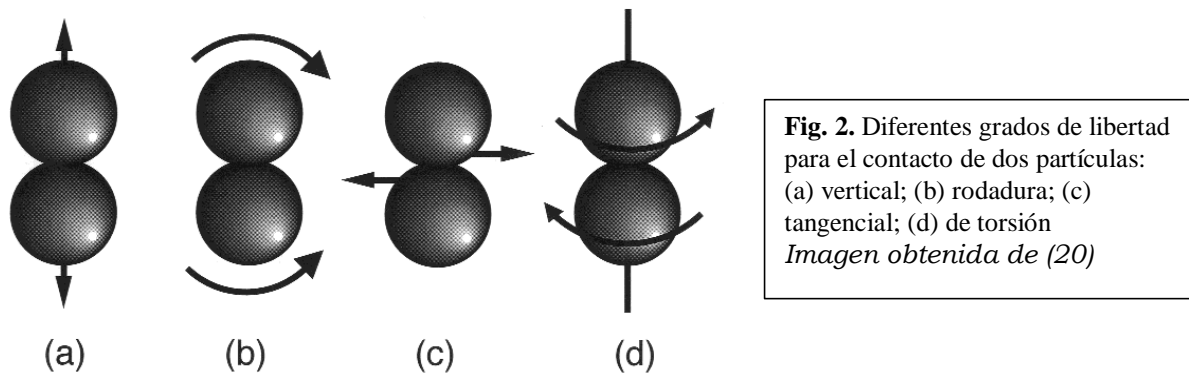


Fig. 2. Diferentes grados de libertad para el contacto de dos partículas: (a) vertical; (b) rodadura; (c) tangencial; (d) de torsión
Imagen obtenida de (20)

El contacto entre dos granos tiene un total de 6 grados de libertad como se indica en la Figura 2: hay 1 grado vertical (arriba y abajo); 2 tangenciales para las 2 rotaciones, y 1 para un movimiento relativo de rotación de los dos granos sobre el eje que conecta los centros de las dos esferas.

El movimiento relativo de cada grano puede ser descompuesto en estos seis componentes.

El grado de libertad vertical abarca movimientos a lo largo del eje que conecta los centros de los dos granos, es decir, cuando los granos se mueven más cerca o más separados. El grado de libertad de laminación (Fig1.b) describe la rodadura de los dos granos entre sí. Se trata de un movimiento con una distancia constante y sin deslizamiento de las superficies. El centro del contacto círculo (punto de contacto) se mueve con igual velocidad en la misma dirección sobre las dos superficies

de los granos. El grado de libertad de deslizamiento cubre un movimiento relativo de los granos (Fig. 2c) sin rotación y con la distancia constante. Las superficies de los granos se deslizan unas sobre otras, y el punto de contacto se mueve en la dirección opuesta sobre ambas superficies. Finalmente, el grado de libertad hilatura (fig 1.d) cubre una rotación preferencial de los granos alrededor del eje que conecta los centros de las esferas. El punto de contacto no se mueve, pero las superficies en contacto se deslizan en relación una con la otra con una velocidad proporcional a la distancia desde el punto de contacto.

Cuando las fuerzas externas se aplican a los granos (por ejemplo, fuerzas de inercia en una colisión), las fuerzas se transmiten desde un grano a otro a través de las tensiones en la región de contacto. En general, podemos esperar para las fuerzas pequeñas una reacción de contacto elástico: cuando las fuerzas externas se liberan, la deformación se invierte y se recupera el estado original. Sin embargo, cuando las fuerzas se hacen más grandes de cierto límite, se producen cambios irreversibles.

De manera similar, una fuerza tangencial pequeña sólo deforma los granos cerca del contacto, pero una fuerza mayor dará lugar a la rodadura o deslizamiento y al movimiento del contacto alrededor del eje. Estos procesos irreversibles están conectados con la disipación de energía. Su comprensión es esencial para la física de la coagulación, ya que, en última instancia, determina la estructura y la estabilidad de agregados de polvo.

Explicaremos a continuación de forma resumida el comportamiento asociado a los grados de libertad. Para un análisis detallado recurrir a (20).

Grados de libertad normales

El primer grado de libertad que se muestra en la Figura 2a es el grado normal (también llamado vertical). Las fuerzas que actúan sólo en esta dirección deben, o bien tirar de los granos para separarlos, o empujarlos a lo largo de la línea que conecta los centros de los dos granos. Esto se observa en particular en el caso de colisiones frontales de esferas no giratorias. Como se trata de la solución estática del problema de contacto, es importante darse cuenta que el contacto puede de hecho ser tratado como cuasi-estático en un proceso dinámico, como una colisión de dos granos. Vamos a considerar dos granos luego del choque, que ya han estado en contacto durante un tiempo largo, por lo que toda la energía vibratoria en la dirección vertical se ha disipado.

Los granos están en reposo uno respecto al otro, y el radio de la zona de contacto es igual al valor de equilibrio a_0 . Si ahora empujamos los granos, el radio de contacto cambiará a algún valor a que dependerá del radio, el módulo de young y el radio de Poisson del grano, y también de la fuerza aplicada.

Si queremos romper el contacto tirando de los granos debemos aportar una cierta cantidad de energía. Debido a las fuerzas de atracción en el área de contacto, las superficies de los granos pueden permanecer en contacto, incluso si la separación de los centros de los granos se hace mayor que la suma de los radios de grano, esto se aprecia en la Fig3.a (exagerando las dimensiones).

La fuerza crítica:

$$F_c = 3\pi\gamma R \quad [2]$$

tira para separar las superficies instantáneamente, y se almacena la energía elástica en el cuello que se transforma en una onda elástica y lentamente se disipa.

Esta situación es ligeramente diferente en un caso dinámico como una colisión. Por ahora, nos limitamos a una colisión frontal, de modo que los componentes tangenciales de las fuerzas de contacto se pueden despreciar. Durante una colisión frontal, los granos se aproximan entre sí a lo largo de una línea que conecta los centros de las dos esferas. Antes del contacto, no se sienten las fuerzas mutuas, ya que consideramos las fuerzas de contacto solamente. Una vez que se produce el contacto entre las superficies de los granos, las fuerzas se transmiten. El punto de contacto crece a un área de contacto con un tamaño dado por la teoría estática. La energía de interacción atractiva a través de este contacto recién formado se acelera rápidamente. Como los granos continúan moviéndose, el área de contacto crece de manera constante. Cuando el radio de contacto alcanza el valor de equilibrio de los granos, a_0 , éstos ya no están acelerados, pero todavía se mueven debido a su inercia. La fuerza total en el área de contacto se convierte ahora en repulsión, se desacelera el movimiento, y eventualmente puede cambiar la dirección del movimiento de los granos por separado.

Lo importante ahora es que las superficies de los granos no se separarán de nuevo a la misma distancia que se hizo que se pusieran en contacto. En su lugar, como se discutió anteriormente, un cuello de material sufrirá una deformación elástica (Fig 3a).

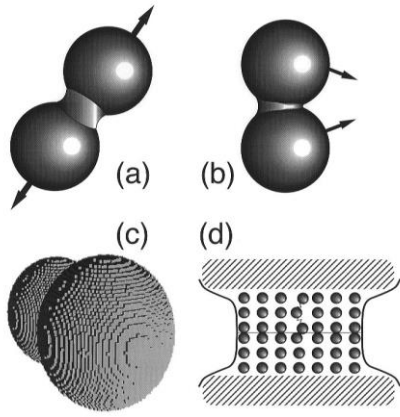


Fig 3.

(a) Deformación del cuello que une los granos cuando se aplica una fuerza para separarlos.

(b) zona de contacto durante una rotación

(c) limitaciones reales en las superficies de los granos

(d) Disipación de energía de los átomos individuales que pertenecen a la región de contacto entre las esferas.

Imagen obtenida de (20)

Los granos se separan solamente cuando se alcanza una fuerza crítica.

Si la energía cinética inicial de la colisión no fue lo suficientemente grande para separar el cuello, los granos no se separarán, permanecerán pegados. Así, esta asimetría entre el contacto de conexión y de desconexión, es la que en realidad permite que los granos peguen entre sí.

En general se asignan los valores críticos de la energía, la cantidad más fundamental. Sin embargo, a veces es más fácil pensar en términos de una velocidad crítica que es equivalente a las energías críticas.

La velocidad crítica correspondiente está dada por:

$$v_{stick} = [(2/\mu) E_{stick}]^{1/2} \quad [4]$$

donde $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ es la masa reducida de los dos granos. Para calcular las velocidades críticas, por lo tanto, es necesario especificar las masas o dimensiones de ambos granos. Para dos esferas idénticas, cada una de ellas con un radio de R la velocidad crítica de adherencia es:

$$v_{stick} = \frac{1.07 \gamma^{5/6}}{\epsilon^* R^{5/6} \rho^{1/2}} \quad [5]$$

Donde ρ es la densidad del material de los granos.

Es fácil ver que, aunque la energía crítica aumenta por aumentar el tamaño de grano, la disminución de la velocidad crítica con la masa de los granos es una función de mayor pendiente de R que la energía crítica.

La energía crítica para pegar es menor por un factor constante de aproximadamente 4.75, que la energía necesaria para romper un contacto existente.

Grado de libertad rotacional

El grado de libertad de rotación se muestra en la fig 2b.

Cualquier resistencia a este tipo de movimiento se llama la fricción de rodadura. Para entender la respuesta de un contacto a este tipo de movimiento, las fuentes de esta fricción deben ser estudiadas. Las fuentes clásicas de fricción tales como microdeslizamiento por la deformación de la interfaz, inelástica o viscoelástica de los materiales involucrados, y las irregularidades de la superficie no resultan ser importantes en el caso de partículas de tamaños del orden del micrón que debemos tener en cuenta en el contexto astrofísico. Sin embargo, para tales partículas pequeñas, es importante considerar que las superficies no son suaves en todas las escalas, pero están formadas por átomos. Cuando dos granos giran uno sobre el otro, se genera un contacto entre los átomos en el borde delantero, y el contacto entre los átomos en el borde de salida se va perdiendo. Para las esferas ideales, y en un enfoque cuasi-estático, el área de contacto siempre sería simétrica alrededor del eje que conecta los centros de las esferas. Sin embargo, puesto que las superficies están hechas de átomos, los nuevos contactos sólo pueden hacerse en pasos de al menos un átomo, y el contacto antiguo sólo puede ser perdido en los mismos pasos también. Así, cuando los granos comienzan a rodar uno sobre el otro, el área de contacto no se mueve al principio, permanece fija. Esto conduce a una distribución de la presión asimétrica que está conectado con una fuerza de torsión que se opone al movimiento.

Para pequeños movimientos alrededor del punto de equilibrio, el área de contacto no se mueve en absoluto. Cuando la rotación supera un cierto cambio crítico, el área de contacto empieza a moverse y la energía se disipa. Por lo tanto, al igual que en el grado de libertad vertical, hay un régimen limitado en el que el contacto reacciona elásticamente a las fuerzas. Más allá de este rango limitado, se produce un comportamiento inelástico.

El par necesario para empezar a rodar es irreversible. Su dependencia del tamaño del área de contacto es débil. Sin embargo, se debe tener plenamente en cuenta en los cálculos numéricos. La energía asociada con la rotación inicial es también la energía disipada en promedio durante toda la rotación sobre una distancia que es independiente del radio reducido R .

Grados de libertad tangenciales

Las fricciones asociadas a las fig 2c y 2d tienen su origen en el desgaste del material. En las escalas sub- μm las irregularidades en las superficies son menos relevantes. Por otro lado, los granos se mantienen unidos por su atracción mutua en lugar de fuerzas externas y, por lo tanto, las presiones en la región de contacto son generalmente muy bajas.

Sin embargo, hay dos fuentes de fricción relevantes:

- 1) Superficie “rugosa” en escala atómica
- 2) Las pérdidas de energía a escala atómica debidas a la inestabilidad en el deslizamiento de átomos individuales. Estas pérdidas pueden estar presentes aun cuando dos superficies perfectamente lisas se deslizan una sobre otra.

Dominik (20) demuestra que para el caso del sílice sólo la fuente 1 es relevante. Y de esta consideración deriva las fórmulas para la fricción de deslizamiento y de torsión.

Una vez comprendido el comportamiento de la interacción entre dos granos aislados, procederemos a la descripción del método que utilizamos para armar tanto el blanco como el proyectil, ambos compuestos por el mismo tipo de grano, y luego para simular la colisión del proyectil multigrano sobre la superficie, que dará como resultado un cráter de impacto.

Capítulo 3

Método: Dinámica Molecular

3.1 Teoría General de la Dinámica Molecular

3.1.1. Introducción

Una simulación numérica es una recreación matemática de un proceso natural. El campo de las simulaciones numéricas constituye un nutrido campo de investigación interdisciplinar. Algunos problemas científicos son estudiados primariamente mediante el uso de simulaciones numéricas, cómo los problemas de caos, fractalidad o de complejidad y en general todos aquellos campos de la naturaleza gobernados por sistemas de ecuaciones no lineales o no reproducibles fácilmente en el laboratorio.

El uso de simulaciones numéricas para estudiar un problema requiere normalmente un cuidadoso estudio de los métodos numéricos y algoritmos a utilizar y de los procesos fundamentales a incluir en la simulación.

Una simulación numérica difiere de un modelo matemático en que, el primero constituye una representación en cada instante del proceso a simular mientras que el modelo constituye una abstracción matemática de las ecuaciones fundamentales necesarias para estudiar dicho fenómeno. Normalmente la utilización de una simulación numérica para estudiar un problema dado requiere una cuidadosa planificación del modelo matemático a utilizar y de los algoritmos necesarios para resolver dicho modelo.

Dinámica Molecular (MD por las siglas en inglés de Molecular Dynamics) es el término utilizado para describir una técnica adoptada para obtener la solución de las ecuaciones clásicas de movimiento (ecuaciones de Newton) para un conjunto de átomos, moléculas, etc. (47)

Entonces, en teoría, y dada una configuración inicial de posiciones y velocidades, la evolución del sistema se puede describir de forma determinística.

La Dinámica Molecular es una técnica de simulación en la que se permite que átomos y moléculas interactúen por un período, permitiendo una visualización del movimiento de las partículas. Originalmente fue concebida dentro de la física teórica, aunque hoy presenta numerosas aplicaciones.

La dinámica molecular es un campo multidisciplinario. Permite entender a los materiales y las moléculas no cómo entidades rígidas, sino como cuerpos flexibles.

Ningún experimento es capaz de acceder a todas las escalas de tiempo involucradas en ciertos problemas complejos. En general, los sistemas granulares son complejos y consisten de un gran número de partículas, por lo cual sería imposible encontrar sus propiedades de forma analítica. Para evitar este problema, la MD utiliza métodos numéricos. La MD representa un punto intermedio entre los experimentos y la teoría.

Para utilizar esta técnica de forma correcta, es importante entender las aproximaciones utilizadas y evitar caer en el error conceptual de que estamos simulando el comportamiento real y exacto de un sistema molecular. Lo que se busca son algoritmos que minimicen el error para dar un resultado lo más certero posible.

Por otro lado, las interacciones entre las partículas se modelan con un campo de fuerza aproximado, elegido de acuerdo al problema puntual que se trata.

El estado microscópico de un sistema puede expresarse en términos de las posiciones y momentos de los elementos que lo constituyen (átomos, moléculas, etc.). Dentro de la aproximación de Born-Oppenheimer, es posible expresar el hamiltoniano de un sistema según las coordenadas y momentos de los centros de los núcleos atómicos, promediando el efecto causado por la densidad de la nube electrónica. Adoptando una notación condensada:

$$H(q,p) = K(p) + U(q) \quad [6]$$

donde $q = (q_1, q_2, \dots, q_N)$ son las coordenadas generalizadas de los N átomos, $p = (p_1, p_2, \dots, p_N)$ son los momentos conjugados correspondientes, K es la energía cinética y U es la energía potencial del sistema.

Las ecuaciones de movimiento del sistema están dadas por:

$$q = \frac{dH}{dp_k} = \frac{p_k}{m_i} \quad [7]$$

$$p = \frac{-dH}{dq_k} = -\nabla_{q_k} U = f_k \quad [8]$$

donde m_i es la masa de cada partícula. En general, estos sistemas de ecuaciones diferenciales acopladas tienen solución analítica hasta $N = 2$. A partir de este punto, estas ecuaciones ya no tienen solución analítica exacta salvo para algunos casos particulares (48). La práctica habitual en aquellos casos más generales es recurrir a técnicas de aproximación numérica implementadas en computadoras; la técnica de dinámica molecular es una de ellas.

El planteo anterior es conocido como el problema de muchos cuerpos, que ha sido ampliamente estudiado en diversos campos de la ciencia (49).

3.1.2 Etapas de una simulación

En general, un estudio mediante la técnica de dinámica molecular requiere de una serie de etapas que, independientemente del problema en cuestión, pueden ser clasificadas como: construcción del dominio, equilibrio y relajación, ejecución, y post-procesado. Normalmente, estos pasos se repiten para los diferentes modelos o simulaciones. La tercera etapa, la ejecución, se puede repetir para distintos tipos de condiciones y es seguida luego de una etapa de post-proceso. La etapa de post-proceso suele ser realizada, en general, en forma separada de la ejecución del código de MD propiamente dicho y es durante la misma que se analizan los resultados; en nuestro caso, gráficos de la dependencia de varios factores como profundidad, volumen de cráter, etc, respecto al tamaño del proyectil y de su velocidad inicial, relación de las partículas eyectadas respecto al tiempo, variación de la energía, etc. Todos estos pasos se encuentran representados en la figura 4.

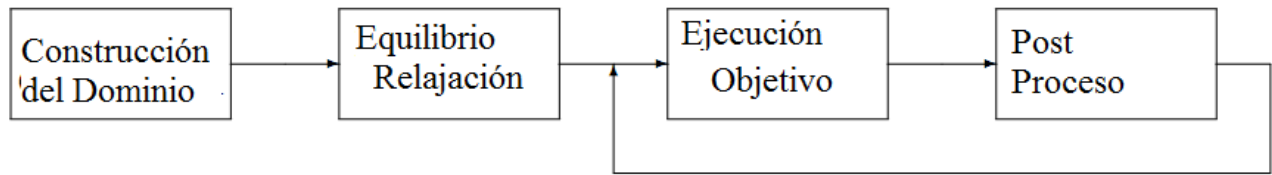


Figura 4: Diagrama de flujo de una simulación MD típica.

Construcción del dominio

El proceso de construcción del dominio involucra la generación de las posiciones de los átomos, teniendo en cuenta la organización de la microestructura deseada, así como la asignación de cada posición a un dado elemento. En esta etapa suelen asignarse las condiciones de borde, pudiendo estas ser periódicas o no. El tamaño del dominio está limitado por el número de partículas que podemos incluir en la simulación, típicamente en el orden de $10^4 - 10^8$ partículas. En nuestras simulaciones trabajamos con 70.000 partículas esféricas idénticas. En cuanto a las condiciones de borde, tenemos un blanco cúbico donde sólo los lados laterales permanecen fijos.

Equilibrio y relajación

Ya sea que se utilice una geometría obtenida de otro programa o bien se la genere con el mismo programa de MD, la siguiente etapa es equilibrar a todas las partículas, llevando el sistema a un estado de mínima energía. El objetivo de esta etapa es comenzar la ejecución con un estado próximo al de un material real. El procedimiento de equilibrio y relajación se realiza bajo condiciones definidas, tales como condiciones isotérmicas y/o isobáricas, para llevar a la muestra a una temperatura y presión específica.

Ejecución

En esta etapa, se somete al dominio al conjunto de solicitaciones deseado (ver apéndice A para detalles del script).

En este punto, resulta fundamental aclarar un aspecto numérico que se transforma en un factor limitante de la técnica. El sistema a simular se resuelve mediante la integración numérica de un sistema de ecuaciones de Newton. Es lógico preguntarse ¿cuál es el paso temporal adecuado a utilizar en la integración? El valor máximo que se puede asignar al paso temporal de integración está definido por la frecuencia de vibración de las partículas del sistema. Así, la frecuencia de un sistema molecular puede ser de hasta 3000 cm^{-1} , que corresponde a un período de 10 femtosegundos.

Las frecuencias de los fonones son del orden de 10 THz (período 100 fs). Por estos motivos, un paso temporal típico se encuentra en el orden de 1 a 3 femtosegundos, para capturar estas frecuencias.

Mediante computadoras modernas (<https://computing.llnl.gov/>), es posible calcular de 10^6 a 10^8 pasos en 24 horas, utilizando 32.000 procesadores o más. Por esta razón solo podemos simular procesos que ocurren durante 1 a 100 nanosegundos. Este es un limitante serio para muchos problemas con escala temporal característica mayor.

Post – Proceso

Durante una simulación, se puede escribir la posición de todas las partículas, junto con otros datos de interés, tales como velocidad, energía, etc.

Esto puede realizarse periódicamente durante la simulación, para monitorear el estado del dominio cada determinado número de pasos. Esta información puede ser luego procesada mediante distintas herramientas como veremos en el capítulo de resultados. En nuestro caso hicimos cortes cada 10.000 pasos temporales para seguir el curso de la simulación.

3.1.3. Lammops

LAMMPS (46) es un código de dinámica molecular que permite modelar el comportamiento de partículas en distintos estados (50). Se pueden modelar sistemas atómicos, poliméricos, biológicos, metálicos, granulares, etc., usando diferentes tipos de campos de fuerzas y condiciones de borde.

LAMMPS realiza la integración numérica de las ecuaciones de movimiento de Newton para una colección de átomos, moléculas, o partículas macroscópicas que interactúan mediante fuerzas de corto y largo alcance, a través de un potencial interatómico. Para ser eficaz computacionalmente, LAMMPS emplea “listas de vecinos” para monitorear las partículas en un determinado entorno. En computación en paralelo, LAMMPS emplea técnicas de descomposición espacial para particionar el dominio de la simulación en pequeños subdominios tridimensionales (51), que luego son asignados a distintos procesadores.

LAMMPS utiliza el paradigma de memoria distribuida MPI “Message Passing Interface” para comunicar datos entre subdominios asignados en nodos de un cluster. También tiene la posibilidad de utilizar memoria compartida a través de OpenMP para paralelizar el dominio dentro de un mismo nodo multi-núcleo.

Rapaport (51) define de forma resumida los tres posibles algoritmos utilizados para descomponer la simulación para que pueda ser ejecutada en varios procesadores. La partición se puede hacer sobre los cálculos, los átomos/partículas o por la región simulada (3). La primera opción, particionar los cálculos entre distintos procesadores implica que la información de todo el sistema esté alojada en la memoria de todos los procesadores, lo cual conlleva un desperdicio de memoria. La siguiente alternativa es particionar basándose en los átomos, con esto, los átomos son asignados a un procesador y se mantienen en él sin importar su ubicación espacial en la región simulada. Este método puede funcionar bien para potenciales de largo alcance, pero para potenciales de corto alcance puede resultar en un bajo rendimiento. Esto es debido a que átomos que se encuentran espacialmente cerca pueden estar en procesadores distintos, lo cual aumentará la comunicación entre ellos. El último esquema implica dividir el dominio de simulación de forma espacial, cada procesador recibe una región de la simulación en la cual debe realizar el cálculo de fuerzas de los átomos/partículas que están dentro de ella. Si un átomo se desplaza de una región o subdominio a

otro, ese átomo es transferido al procesador al cual le corresponde el subdominio.

En el esquema de descomposición de dominio, es necesario que cada subdominio tenga información de los átomos que se encuentran en los bordes de los subdominios vecinos para poder hacer el cálculo de fuerzas entre átomos vecinos que no están ubicados en el mismo subdominio. En la figura 4.3 se puede ver un ejemplo de este pasaje de información entre subdominios (51).

La documentación de LAMMPS incluye una detallada explicación de cómo es posible optimizar las simulaciones ejecutadas (<http://lammps.sandia.gov/doc/Sectionaccelerate.html>) y sobre la ejecución en GPUs.

3.1.4. Potenciales de Interacción

En dinámica molecular, los átomos de un dominio se vinculan entre sí a través de un potencial de interacción. Estos potenciales interatómicos suelen definirse mediante el uso de funciones potenciales. Esto es, funciones que permiten determinar la energía potencial de una partícula en función de su posición relativa respecto de su entorno. Luego, las fuerzas resultantes sobre cada partícula se derivan a partir de esta función potencial. En términos matemáticos se puede escribir en forma general como:

$$F_i = -\nabla_{\mathbf{r}_i} \phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) \quad [9]$$

Esta forma implica la presencia de una ley de conservación de la energía total $E = K + V$, donde K es la energía cinética instantánea.

La opción más sencilla para la V es escribirlo como una suma de interacciones por parejas:

$$V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_i \sum_{j>i} \phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \quad [10]$$

La cláusula $j > i$ en la segunda suma tiene el fin de examinar cada par átomo sólo una vez.

El desarrollo de los potenciales de precisión representa una importante línea de investigación. Mencionaremos uno de los potenciales más utilizados, el potencial de Lennard – Jones.

El potencial de Lennard – Jones

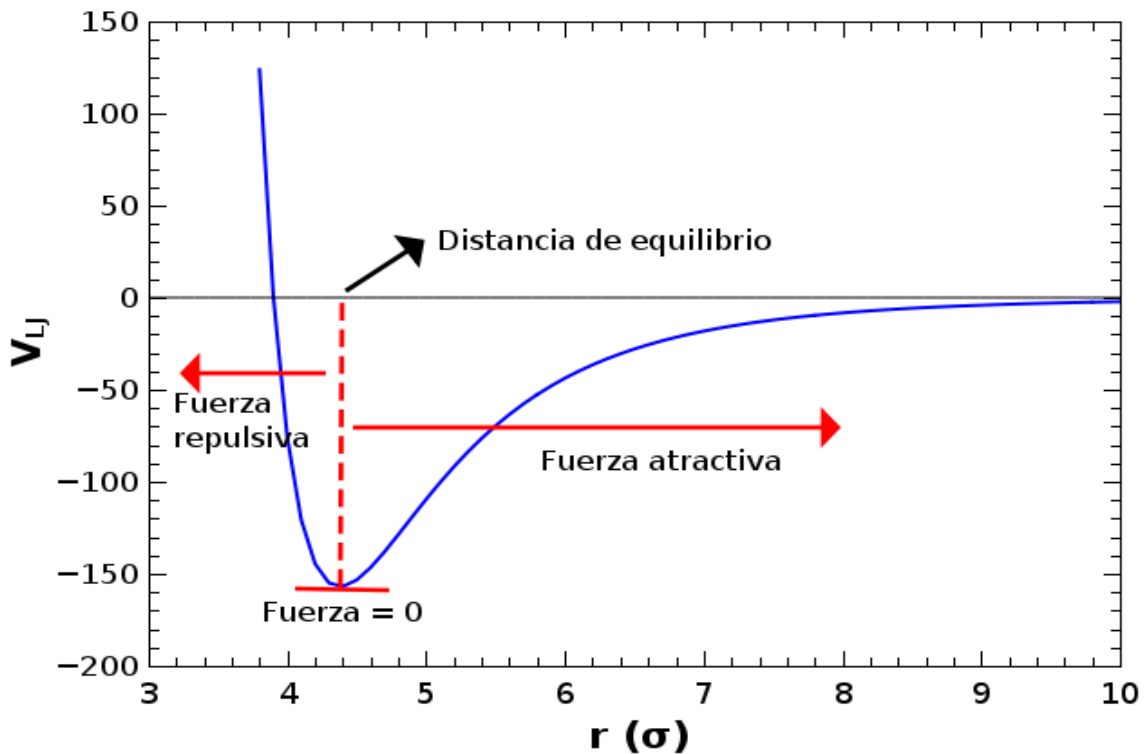


Fig. 5 Potencial de Lennard-Jones
Imagen obtenida de la tesis doctoral de Emmanuel Millán

El potencial Lennard-Jones está dado por la expresión

$$\phi_{LJ}(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad [11]$$

para la interacción potencial entre un par de átomos, donde ϵ es la profundidad del potencial, σ es el parámetro de distancia y r es la distancia entre partículas (ver figura 5).

3.1.5 Escalas temporales y geométricas

Una visión de la técnica con cierta perspectiva permite ver que la misma tiene sus limitaciones:

*La validez de la simulación depende del potencial interatómico utilizado, y de la precisión del mismo para representar la física asociada al problema en cuestión.

*Escala geométrica: El recurso computacional con que se cuenta limita el tamaño de la muestra a simular, típicamente en el orden de los cientos de nanómetros si se cuenta con un cluster computacional potente.

*Escala temporal: Para reproducir adecuadamente el movimiento atómico, se deben emplear pasos temporales del orden de 1-3 fs. Esto, en conjunto con el tamaño de la muestra, limita la extensión de la simulación en términos temporales, o bien impone el uso de tasas de deformación sumamente altas.

3.2 MD aplicada a materiales granulares

Las simulaciones granulares siguen la trayectoria de partículas con un volumen finito y que no pueden ser penetradas por otras partículas. La interacción entre partículas es típicamente de corto alcance, e incluyen fuerzas de contacto y adhesivas. Existen varios métodos para llevar a cabo estas simulaciones, y dentro de un contexto de ingeniería o industrial, las simulaciones granulares generalmente se estudian utilizando Discrete Element Method (DEM) (52). Códigos de MD típicos pueden ser adaptados para ejecutar simulaciones granulares eficientemente, y LAMMPS incluye la posibilidad de ejecutar algunos modelos granulares tanto en CPUs como en GPUs.

Ringl y Urbassek presentaron un modelo de simulaciones granular mejorado (34), y su

implementación fue realizada dentro del código de LAMMPS para su ejecución en CPUs. En esta tesis, utilizamos este código modificado para obtener variantes de los trabajos posteriores de Ringl (33).

3.2.1 Modelo granular utilizado

Los detalles completos de nuestro método de simulación y el código de mecánica granular utilizado son ampliamente discutidos por Ringl y Urbassek (34) y han sido utilizados para simular colisiones entre granos (27) y colisiones de un sólo grano contra una superficie (33).

Para una descripción del modelo de base utilizado por LAMMPS ver (53), para una introducción a la física de materiales granulares ver (54).

A continuación, describiremos las principales características de nuestro método.

Nuestra muestra total está formada por una colección de 70.000 granos esféricos, todos ellos con iguales propiedades (radio del grano R , masa, módulo elástico, etc.)

Nuestro objetivo de impacto es un cubo poroso (fig.6) de lado 71×10^{-6} m, con un factor de llenado de 35,962%

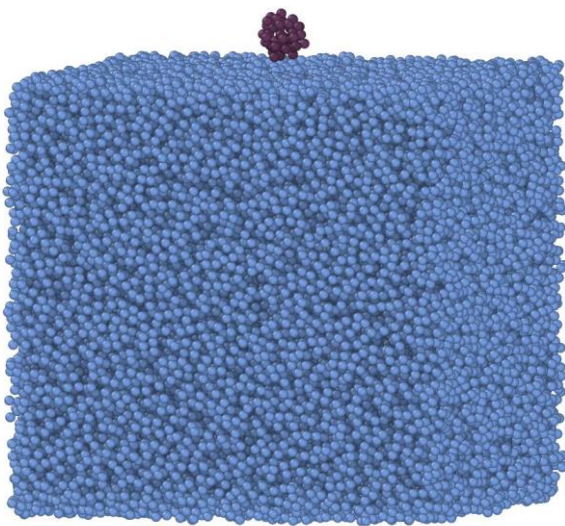


Fig. 6. Estado inicial de la simulación. Blanco cúbico compuesto de 70.000 partículas esféricas. proyectil aproximadamente esférico (en color violeta) en este caso particular

Nuestro proyectil está compuesto por granos extraídos del objetivo y ubicados en una aglomeración aproximadamente esférica a una distancia considerable del cubo.

El número de granos que conforman el proyectil (N_p) varía entre 1 y 50, a fin de estudiar las propiedades del cráter formado ante la variación de N_p .

Los granos sólo interactúan si la distancia entre sus centros, d , cumple $d < 2R$.

De acuerdo a nuestro marco teórico, las fuerzas entre los granos son clasificadas en fuerzas normales y tangenciales.

Mencionaremos a continuación un resumen del modelo mejorado que utilizaremos en este trabajo.

Cinemática de colisiones

Los granos considerados son esféricos. Cada grano i tiene un radio r_i

Sea \bar{x}_i la posición del centro del grano i ; \bar{V}_i la velocidad de su centro de masa y $\bar{\omega}_i$ su velocidad angular. Estas tres cantidades especifican unívocamente el estado mecánico del grano (la orientación del grano no será relevante).

Cuando dos granos i y j colisionan necesitamos especificar algunas variables que caracterizan la colisión.

El vector normal (unitario):

$$\hat{n} = \frac{\bar{x}_i - \bar{x}_j}{|\bar{x}_i - \bar{x}_j|} \quad [12]$$

especifica el eje de contacto.

Mientras que $\bar{V}_i - \bar{V}_j$ denota la velocidad relativa del centro de masa de los dos granos.

La velocidad relativa del punto de contacto viene dada por:

$$\bar{V}_c = \bar{V}_i - \bar{V}_j - (r_i \bar{\omega}_i + r_j \bar{\omega}_j) \times \hat{n} \quad [13]$$

Su proyección en \hat{n} :

$$\bar{V}_n = \bar{V}_c \cdot \hat{n} \quad [14]$$

define la velocidad radial de la colisión, mientras que la velocidad de colisión tangencial está dada por:

$$\bar{V}_t = \bar{V}_c - \bar{V}_n \hat{n} \quad [15]$$

\bar{V}_t define una única dirección tangencial:

$$\hat{t} = \frac{\bar{V}_t}{|\bar{V}_t|} \quad [16]$$

Con la velocidad angular relativa:

$$\bar{\omega}_{rel} = \bar{\omega}_i - \bar{\omega}_j \quad [17]$$

podemos definir una velocidad angular de torsión como:

$$\bar{\omega}_{twist} = (\bar{\omega}_{rel} \cdot \hat{n}) \hat{n} \quad [18]$$

Esto caracteriza la torsión relativa o spin de dos granos alrededor de su eje de contacto. Su dirección está dada por:

$$\hat{\omega}_{twist} = \hat{n} \quad [19]$$

La parte remanente de la velocidad angular define la velocidad angular de rodadura:

$$\bar{\omega}_{roll} = \bar{\omega}_{rel} - \bar{\omega}_{twist} \quad [20]$$

cuya dirección yace en el plano de contacto.

Fuerzas Normales

Siguiendo la aproximación usada en mecánica granular, los granos se consideran elásticos.

Entonces durante su movimiento, la distancia relativa entre sus centros de masa, $|\bar{x}_i - \bar{x}_j|$ se convierte en $< (r_i + r_j)$. Luego, los dos granos transmiten sus fuerzas el uno al otro. Introducimos la noción de solapamiento de los dos granos:

$$\sigma = r_i + r_j - |\bar{x}_i - \bar{x}_j| \quad [21]$$

La cual es fundamental para describir las fuerzas entre los 2 granos. En nuestro modelo, las fuerzas existirán sólo si $\sigma > 0$ (si los dos granos están solapados).

En el cálculo de fuerzas entre dos granos de radios r_i y r_j la geometría de las dos esferas se tiene en cuenta a través de un radio efectivo:

$$r_{ef} = \frac{r_i r_j}{r_i + r_j} \quad [22]$$

En el caso de dos granos solapados, resulta un área de contacto distinta de cero. Para granos isotrópicos, ésta será circular, con un radio de contacto a . Asumimos a como el dado por la teoría de Hertz como:

$$a = \sqrt{\sigma r_{ef}} \quad [23]$$

Además de las velocidades de contacto asumimos que sólo el solapamiento (y el radio de contacto que esto produce) determina las fuerzas de interacción.

Fuerza Normal – Parte repulsiva

La bien conocida ley de Hertz sobre la interacción elástica de dos esferas está dada por:

$$f_{Hertz} = \frac{2}{3} \frac{E}{1-\nu^2} \sqrt{r_{ef}} \sigma^{3/2} \quad [24]$$

Esto depende del módulo de Young E y de la constante de Poisson ν del grano.

Una fuerza de interacción puramente elástica es justificada para velocidades no muy altas, de otra forma podría ocurrir una deformación plástica. Según los estudios sobre sílice de Chokshi (16), esto limita nuestro modelo a velocidades menores a 580 m/s.

La f_{Hertz} forma parte de la fuerza normal total que consideramos.

Agregamos una segunda contribución que viene del hecho de considerar que, durante la colisión, parte de la energía es disipada. De acuerdo con Brilliantov (39), agregamos una parte disipativa a la fuerza normal que es tomada proporcional a la derivada temporal de f_{Hertz} , y por lo tanto a $\sqrt{\sigma} V_n$. Este modelo describe un contacto viscoelástico (amortiguado) (39).

Manteniendo los factores como en la ley de Hertz, podemos escribir:

$$f_{dis} = \frac{2}{3} \frac{E}{1-\nu^2} \sqrt{r_{ef}} A \sqrt{\sigma} V_n \quad [25]$$

La disipación es modelada por la constante disipativa A, que tiene unidades de tiempo.

Experimentalmente se ha aceptado tomar A como el coeficiente de restitución.

Para $V_n < 0$, es decir, una fase tardía de la colisión cuando los granos se separan de nuevo, obtenemos $f_{dis} < 0$. Para prevenir que la fuerza normal total se vuelva atractiva durante la disipación se adopta la siguiente forma final para la parte repulsiva de la fuerza normal:

$$f_n = \max \left\{ 0, \frac{2}{3} \frac{E}{1-\nu^2} \sqrt{r_{ef}} (\sigma^{3/2} + A \sqrt{\sigma} V_n) \right\} \quad [26]$$

Fuerza Normal – Parte atractiva

Cuando dos granos se aproximan entre sí experimentan una fuerza atractiva, que tiene como origen la atracción de Van der Waals. A una distancia de equilibrio, las 2 esferas experimentan una fuerza proporcional a la energía superficial γ , dada por el modelo DMT propuesto por Derjaguin – Muller – Toporov (40):

$$f_{adh} = 4\pi \gamma r_{ef} \quad [27]$$

Esta fuerza debe superar a la de separar los granos, y experimentalmente se ha demostrado que para granos de sílice de tamaños μm esto se cumple.

En nuestro modelo, consideramos la parte atractiva de la fuerza dada por la ecuación [27] para $\sigma > 0$, es decir, asumimos que es independiente de la separación de los granos, siempre que haya un solapamiento positivo.

Se ha demostrado que la inclusión de las fuerzas de Van der Waals para $\sigma < 0$ puede influenciar el proceso de aglomeración ya que cambia la densidad de la misma. De todas formas, en este trabajo (y, en general, en las ciencias planetarias) se ignoran las fuerzas de atracción para $\sigma < 0$.

Notemos que, durante un contacto dinámico (como una colisión), donde el solapamiento varía, también varía el radio de contacto. Como consecuencia, los modelos de contacto asumen la formación de un cuello (creación de un puente de materia entre los granos), como se ha discutido anteriormente en este trabajo al presentar los modelos generales de contacto granular. Esta es una característica importante de nuestra implementación, ya que este fenómeno se ha simplificado al hacer la f_{adh} independiente del solapamiento.

Si dos granos están en contacto, su solapamiento de equilibrio σ_{eq} es determinado al requerir $f_{adh} = f_{Hertz}$, ya que cuando la velocidad es cero, la f_{dis} también es cero y sólo nos queda la f_{Hertz} en la parte repulsiva.

Fricción tangencial (Sliding)

Si la velocidad de contacto tiene una contribución tangencial distinta de cero (ec. [15]), los dos granos experimentarán fricción de deslizamiento.

Para cuerpos macroscópicos, se asume que se originan por la rugosidad de las superficies macroscópicas y se modela con la fricción de Coulomb-Mohr.

Para esferas de tamaño μm , la fricción de deslizamiento se debe a la rugosidad en la escala atómica.

Según el modelo de Dominik y Tielens (20) la magnitud de esta fuerza de fricción de deslizamiento viene dada por:

$$f_{slid} = \frac{G a^2}{2} \quad [28]$$

donde G es el módulo de corte del material: $G = \frac{E}{2(1+\nu)}$ y a el radio del área de contacto (ecuación [23]).

La dirección de la fricción de deslizamiento es opuesta a la velocidad tangencial \bar{V}_t , y entonces, desacelera a \bar{V}_t . Notar que la magnitud de la fuerza no depende de \bar{V}_t , entonces salta abruptamente si \bar{V}_t cambia el signo. Esto otorga una inestabilidad numérica en el caso de pequeñas \bar{V}_t , porque el signo de \bar{V}_t puede oscilar entre cada paso temporal.

Este problema se resolvió considerando que la fuerza tangencial decrece continuamente a cero para \bar{V}_t pequeñas:

$$f_t = -\text{signo}(V_t) \cdot \min \{ \eta_{tang} V_t, f_{slid} \} \quad [29]$$

El valor de la constante de amortiguación η_{tang} es elegido para que las oscilaciones mencionadas no ocurran. La elección de η_{tang} depende entonces del paso temporal elegido y se determina mediante simulaciones computacionales.

Fricción Rotacional

En adición a la fricción de deslizamiento, que sólo ocurre cuando \bar{V}_t es distinta de cero, también la rotación relativa de dos esferas entre sí produce una fuerza de fricción que tienden a producir una disminución en el momento angular rotacional.

Fricción Rotacional - Torsión (Twisting)

En la rotación de torsión, los dos granos rotan alrededor de su eje de contacto (ecuación [18]) Según el modelo de Dominik y Tielens (20) la fricción de torsión se modela similar a la de deslizamiento, ya que tiene el mismo origen:

$$d_{twist} = \frac{G a^3}{3\pi} \quad [30]$$

Esta fricción produce un torque que desacelera el movimiento.

Como en el caso de la fricción de deslizamiento, este torque es independiente de la velocidad angular de torsión (ecuación [28]). Procederemos como en la ecuación [29] introduciendo una constante de amortiguamiento η_{twist} :

$$\bar{D}_{twist} = -\min \{ \eta_{twist} \cdot |\bar{\omega}_{twist}|, d_{twist} \} \cdot \hat{\omega}_{twist} \quad [31]$$

Fricción Rotacional - Rodamiento (Rolling)

El origen de la fricción de rodamiento proviene de la naturaleza atómica de los granos. Cuando dos granos ruedan uno sobre otro, se forman nuevas uniones atómicas en el borde delantero y se rompen las uniones del borde trasero. Mientras que este proceso parece balanceado desde el punto de vista energético, hay una histéresis en el proceso de formación y rotura que produce una disipación de energía y un torque que desacelera, d_{roll} . Desde un punto de vista macroscópico, este torque se debe a la distribución de presión asimétrica bajo el punto de contacto del rodamiento de las dos esferas.

Desde el punto de vista atomístico Dominik muestra que d_{roll} puede escribirse como (20):

$$d_{roll} = 2 \cdot f_{adh} \cdot \xi^{yield} \quad [32]$$

Aquí f_{adh} es la ecuación [27] y ξ^{yield} denota la distancia crítica a la cual dos esferas pueden rodar una sobre otra sin romper contactos. Se asume $\xi^{yield} = 1\text{\AA}$.

De nuevo, dejamos que el torque se desvanezca con la velocidad angular relativa introduciendo una constante de amortiguamiento η_{roll} y finalmente tenemos:

$$\bar{D}_{roll} = - \min \{ \eta_{roll} \cdot |\bar{\omega}_{roll}|, d_{roll} \} \cdot \hat{\omega}_{roll} \quad [33]$$

3.2.2. MD en medios granulares

La colisión de nanogranos tiene un rol importante en varios escenarios, desde la nanotecnología (29,55,56) a la astrofísica (29,34, 57). Es posible utilizar simulaciones de Dinámica Molecular (MD) para modelar el proceso de la colisión. Existen estudios previos que simulan la colisión de nanogranos utilizando simulaciones atomísticas o de grano grueso. Algunos estudios se enfocan en la mezcla de granos (55) o la fragmentación (34, 58, 59).

En las simulaciones de grano grueso, los granos son típicamente aproximaciones a esferas perfectamente elásticas (34) lo cual limita su aplicación a velocidades más bajas que el umbral de plasticidad para el material simulado.

Una determinación precisa del umbral de plasticidad no es fácil de obtener, porque la flexibilidad plástica macroscópica cambia en la escala nano, incluyendo los efectos de la tensión, que dependerán del tamaño del grano y las velocidades de colisión.

Un estudio reciente analiza el umbral de plasticidad para la colisión de nanogranos amorfos contra una pared dura (56), y encuentra el umbral de velocidad para que ocurra plasticidad de un grano con unos pocos miles de átomos, analizando los cambios de energía antes y después de la colisión.

En este trabajo, debido a que se trata de un problema que contiene granos que a su vez se componen de miles de átomos; y a la dificultad de tratar las fuerzas disipativas, se hará uso de técnicas numéricas para integrar las ecuaciones de movimiento de los constituyentes individuales del medio. A partir del conocimiento de todas las trayectorias y fuerzas se pueden obtener las cantidades de interés como, por ejemplo, energía total del sistema, velocidades de las partículas en un tiempo dado, posiciones de cada grano en cada instante, etc.

Este método se desarrolló originalmente para calcular la interacción entre moléculas en aproximación con las fórmulas de Newton.

Las ecuaciones a integrar son las de Newton con la fuerza dada por un potencial de interacción que consta de dos partes: Una ligeramente atractiva a distancias mayores que el tamaño de un átomo o molécula, y otra fuertemente repulsiva a distancias menores, cuando las nubes electrónicas se solapan levemente.

Este método se aplica a los medios granulares truncando el potencial de interacción, que conserva su parte repulsiva a distancias que ahora se interpretan como inferiores al diámetro del grano, mientras que es nulo a distancias superiores. La interacción es, por tanto, de contacto y consistente en un ligero solapamiento de los granos en colisión.

Los detalles de la fuerza que experimentan las partículas dependen del modelo que uno escoja. Sin embargo, todos comparten algunas características necesarias para modelar un medio granular:

*La fuerza repulsiva es proporcional al solapamiento de los granos.

*La fuerza disipativa es proporcional a la velocidad de impacto relativa.

*Hay una fuerza perpendicular a la dirección de la colisión dada por el criterio de Coulomb-Mohr.

Una vez conocidos los detalles de la fuerza, el método de MD procede a la integración de las ecuaciones de movimiento, para lo que será necesario conocer las posiciones y velocidades iniciales de todas las partículas.

A su vez, como se indicó previamente, LAMMPS permite ejecutar simulaciones tanto en CPUs con MPI y OpenMP, como en GPUs. Aprovechamos esta característica y se realizaron la mayoría de las simulaciones utilizando una CPU de doble núcleo, y algunas simulaciones mayores utilizando 16 núcleos CPUs de un cluster y una GPU NVIDIA C2050.

El script toma un arreglo que contiene los parámetros de entrada y sus valores, en nuestro caso contienen los valores de velocidad inicial y posiciones de todos los granos. En el mismo se indica, para cada caso, el radio del proyectil y su velocidad inicial, y se procede con la simulación. Cada proceso ejecutado crea un directorio para cada simulación, y mantiene el archivo de entrada y todos los archivos de salida creados por LAMMPS en ese directorio, separados del resto de las simulaciones.

Cada vez que una simulación de LAMMPS finaliza, contamos con un archivo de salida que contiene la posición y velocidad de todas las partículas, además de otros parámetros como energía, etc. Además, en nuestro trabajo se guardaron datos de cada simulación cada un intervalo de tiempo determinado, para poder seguir la evolución del sistema. Estos archivos se utilizarán para realizar los cálculos de post-proceso.

El script completo se puede ver en el **APENDICE A**

3.3. Selección de parámetros y armado de la muestra

Los parámetros del material fueron elegidos como los apropiados para el SiO₂ (16): Módulo de Young $Y = 54\text{GPa}$; radio de Poisson $\nu = 0.17$; módulo de corte $G = Y/[2(1+\nu)]$; y $\gamma = 0.05\text{Jm}^{-2}$ es dos veces la energía específica superficial del SiO₂.

El radio de cada grano individual es de: $R = 0.76\ \mu\text{m}$ y su masa es: $m = 3.68 \times 10^{-15}\ \text{kg}$.

La densidad para granos de SiO₂ es $\rho = 2 \times 10^3\ \text{Kg m}^{-3}$.

El factor de llenado de un ensamble de N granos, cada uno con un volumen $V_{\text{grain}} = 4\pi R^3/3$, en un volumen V es definido como $\phi = NV_{\text{grain}}/V$. Nosotros construimos nuestro blanco con un factor de llenado específico (en nuestro caso 35,962%) de la siguiente manera:

- (1) Se establece un grano en una posición arbitraria del volumen
- (2) Se calcula el factor de llenado local para cada grano; esto es hecho contando el número de granos en una esfera de radio $5R$ alrededor del grano establecido.
- (3) Se determina el grano con el menor factor de llenado local
- (4) Se adjunta un grano en una dirección al azar.
- (5) Si el actual número de granos es $< N$ se vuelve al paso (2).

Este simple algoritmo distribuye los granos de manera homogénea en el volumen.

El volumen construido es cúbico, con longitud de lado $93R$, o equivalente a $71 \mu\text{m}$, como mencionamos anteriormente.

Para las superficies del cubo se utilizaron condiciones de borde periódicas. La caja de nuestra simulación limita las paredes laterales impidiendo la deformación del cuerpo, y sólo hay espacio libre sobre y debajo del cubo.

Para formar el proyectil se tomó un grano del volumen, se trazó una esfera de radio igual al radio deseado del proyectil y se la desplazó hacia arriba, corroborando que efectivamente quedase a una distancia relevante del blanco. El grano inicial que se elige pertenece a la parte inferior del blanco, y representa menos del 0,07% del total de granos, por tal motivo este recorte en la muestra no modifica las propiedades generales del bloque y al estar en un extremo inferior no intercede en la formación del cráter.

Las propiedades de los granos son las propiedades elásticas y de contacto del sílice. Además, no poseen ninguna estructura interna.

Capítulo 4

Resultados

Se realizaron simulaciones numéricas considerando proyectiles compuestos por 1, 5, 10, 20, 30 y 50 partículas y con velocidades iniciales del proyectil de 10, 100 y 200 m/s. Este rango de velocidades es elegido para la relevancia en el campo de la astronomía (39).

Todas las simulaciones constaron de 400.000 pasos temporales (con una equivalencia de 1 paso temporal = $5e-11$ segundos). Y se realizaron simulaciones extras de 700.000 pasos temporales para evaluar la estabilidad del sistema en función del tiempo. Cada simulación emitió un archivo de salida cada 10.000 pasos temporales, lo que nos permitió evaluar la evolución temporal de cada muestra. En la fig. 7 puede verse la evolución de una colisión para un proyectil formado por 50 partículas, cuya velocidad inicial es de 200m/s, los gráficos se obtuvieron utilizando el programa Ovito. Al ser una velocidad elevada y un proyectil grande cercano a la superficie, el impacto se visualiza en el primer corte, es decir, a los 10.000 pasos temporales.

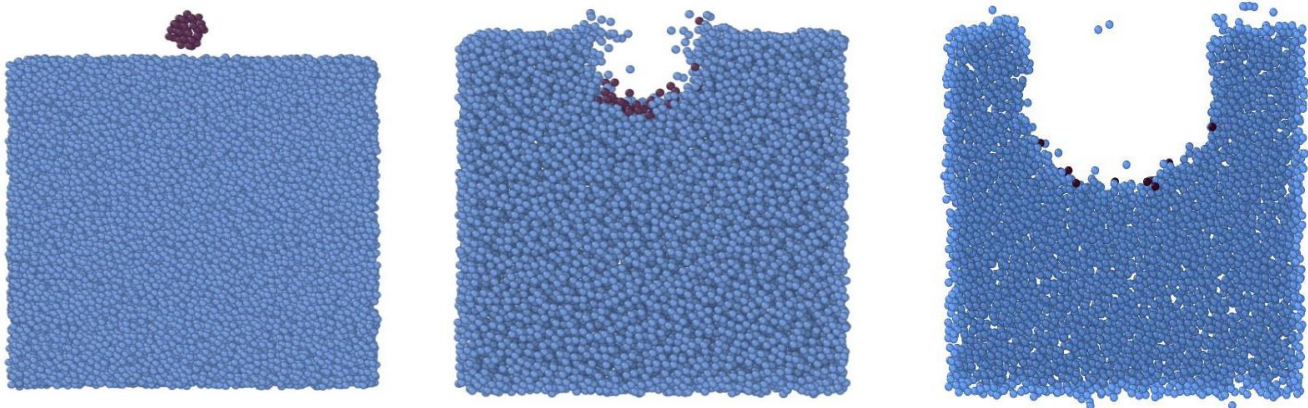


Fig. 7 Colisión de un proyectil formado por 50 partículas y velocidad inicial de 200 m/s. Se muestra el sistema en los outputs (a) 0 (estado inicial) (b) 10.000 (c) 400.000 (estado final)

Para el análisis de datos se utilizaron los programas Ovito, Xmgrace y Qtplot.

4.1 Tamaño del cráter respecto del radio del proyectil

En el siguiente análisis se estudiará la profundidad, el diámetro y el volumen del cráter formado luego de la colisión. Todos los datos pertenecen al último output de cada simulación, es decir, al paso 400.000 donde la muestra es relativamente estable. Las variaciones del volumen calculadas en una simulación corrida hasta los 700.000 pasos aportan un error menor al 2%.

Como se explicó en el armado de la muestra, el proyectil se crea reuniendo partículas en un volumen aproximadamente esférico a cierta distancia del blanco. Por simplicidad en la comparación con los trabajos existentes, se ha trabajado con el número de partículas que conforman el proyectil. A continuación, se adjunta el radio equivalente a cada uno de los proyectiles utilizados.

Np	Radio del proyectil (m)
1	0,76 e-6
5	1,034 ($\pm 0,4$) e-6
10	1,99 ($\pm 0,47$) e-6
20	2,25 ($\pm 0,23$) e-6
30	2,7 ($\pm 0,4$) e-6
50	3,41 ($\pm 0,2$) e-6

4.1.1. Diámetro del cráter vs Radio del proyectil

Vemos que para las distintas velocidades analizadas (fig 8), las curvas se adaptan a la misma ley de crecimiento, siendo este crecimiento mayor para los radios menores. En los análisis realizados por Ringl (33) para proyectiles mono-grano el diámetro se satura para velocidades mayores a 20m/s y radios mayores a 20 – 30 Rgrain, cuyos valores son 1,52 – 2,28 e-6 m.

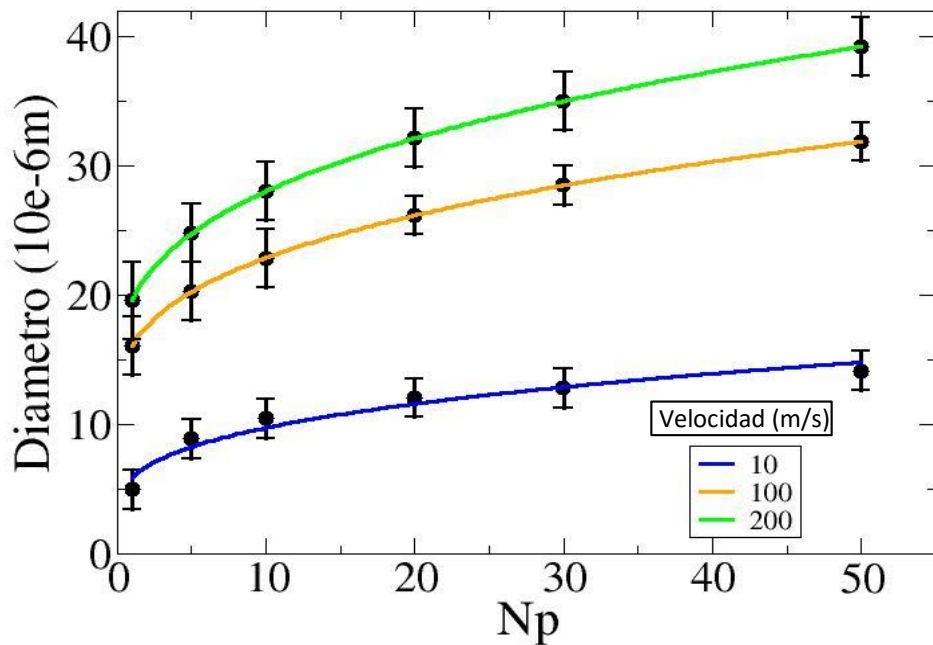


Fig. 8 Diámetro vs número de partículas en el proyectil. Las líneas son fits siguiendo una ley $N^{(1/3)}$. Las barras de error provienen del cálculo del promediar distintos diámetros a través de varios cortes en el eje x y en el eje y.

Al considerar proyectiles multi-granos y un rango mayor de velocidades observamos que el diámetro sigue creciendo y si bien la tasa de crecimiento disminuye notablemente para velocidades mayores a 10 m/s y proyectiles con más de 10 partículas (un proyectil de radio 1,99 ($\pm 0,47$) e-6m), valores que coinciden con el trabajo de Ringl, el diámetro no se satura completamente.

Esto indica que la forma del cráter podría variar, y el aumento del diámetro indica que, en lugar de un cráter cónico, como los obtenidos con proyectiles mono-grano (33), podríamos obtener una forma más esférica. Para esto debemos analizar el comportamiento de la profundidad.

4.1.2. Profundidad del cráter vs Radio del proyectil

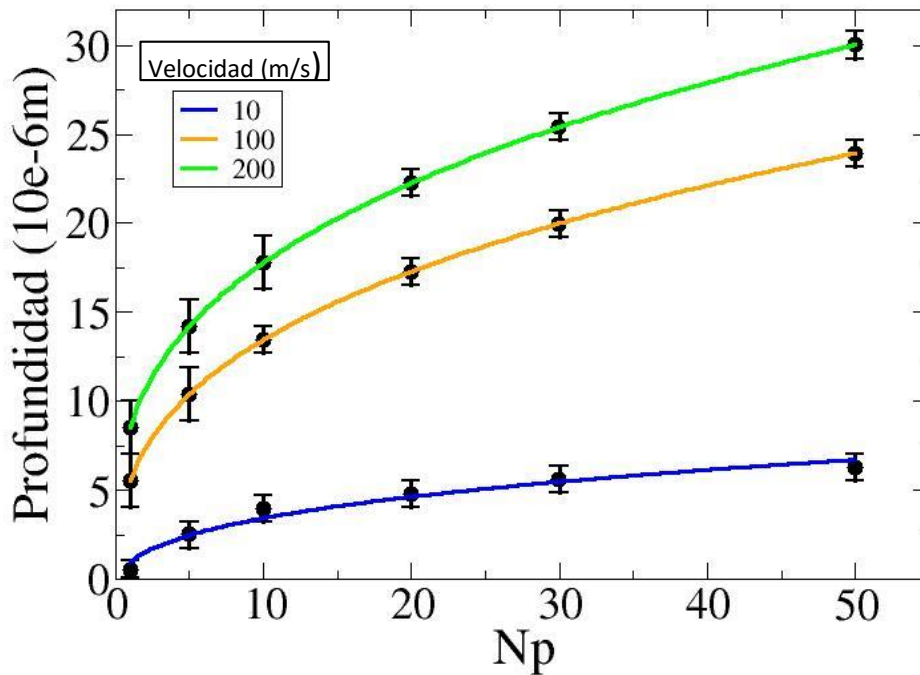


Fig. 9 Profundidad vs número de partículas en el proyectil. Las líneas son fits siguiendo una ley $N^{1/3}$. Las barras de error provienen del cálculo del promediar distintos diámetros a través de varios cortes en el eje x y en el eje y.

Observamos que para la profundidad (fig 9), las curvas analizadas siguen la misma ley que en el caso del diámetros, esto es, una ley $N^{1/3}$, concordando con el modelo de Ringl(33). Si bien el crecimiento es mucho mayor en proyectiles pequeños (compuestos por 10 partículas o menos) la tasa de crecimiento decae y los valores finales se mantienen por debajo de los valores obtenidos para el diámetro, esta diferencia se incrementa para velocidades mayores.

Por lo cual el cráter tendrá una forma elipsoidal. Ahora bien, dado que los distintos diámetros del elipsoide son similares, el cráter podría verse aproximadamente como un hemisferio esférico.

Las fig. 10 y 11 afirman nuestra hipótesis, en ella podemos observar algunos de los diferentes cráteres obtenidos en nuestras simulaciones, donde hemos variado radios y velocidades. Se muestran los mismos cráteres desde un corte en el eje x (fig. 10) y en el eje y (fig. 11).

En todos ellos observamos una formación similar a un hemisferio elíptico.

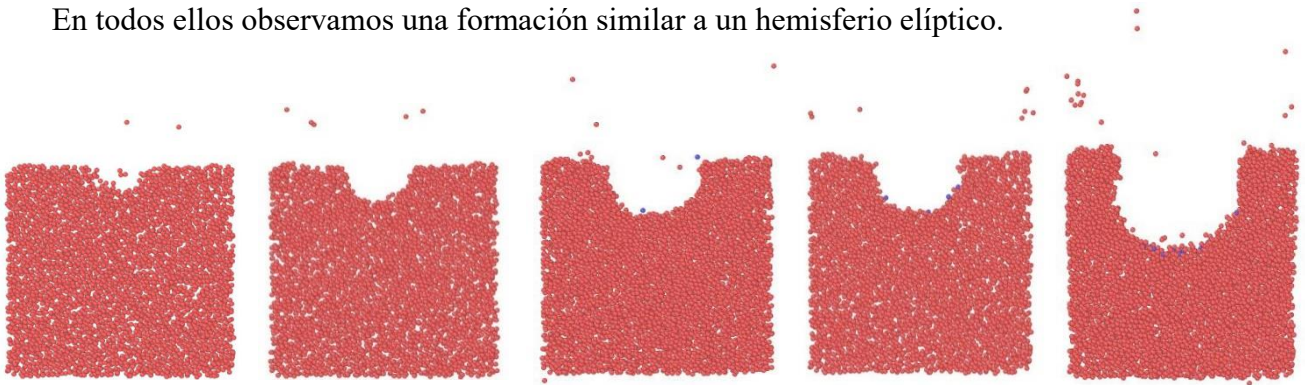


Fig. 10 Crater. Corte en el eje x (a) radio 1 velocidad 10 (b) radio 5 velocidad 100 (c) radio 10 velocidad 200 (d) radio 20 velocidad 100 (e) radio 50 velocidad 200

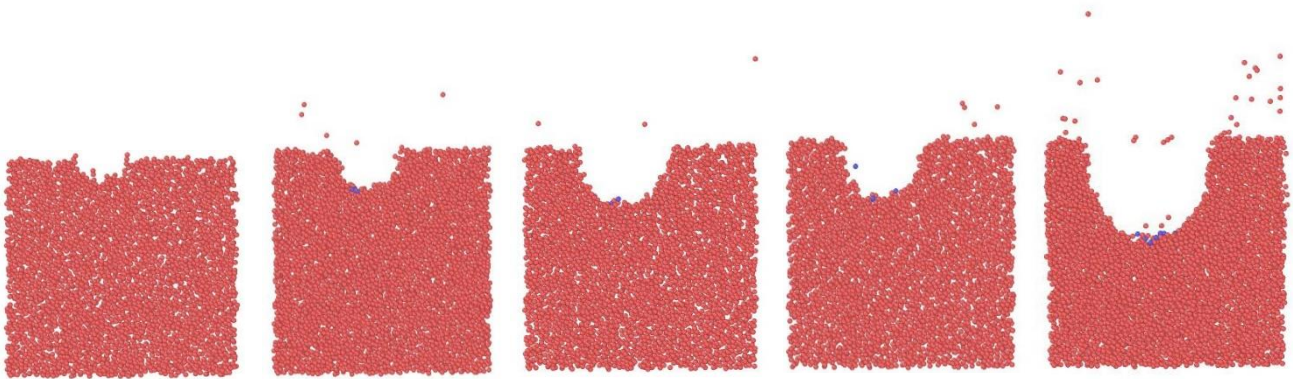


Fig. 11 Cráter. Corte en el eje y (a) radio 1 velocidad 10 (b) radio 5 velocidad 100 (c) radio 10 velocidad 200 (d) radio 20 velocidad 100 (e) radio 50 velocidad 200

4.1.3. Volumen del cráter vs Radio del proyectil

En general para calcular el volumen de un elipsoide tenemos:

$$\text{Vol} = 4/3 \Pi a b c \quad \text{donde } a, b, c \text{ son los semiejes del elipsoide}$$

En nuestro caso calculamos el radio a partir del diámetro, que estaba promediado entre los ejes x y y, por lo tanto, obtenemos:

$$\text{Vol} = 4/3 \Pi (\text{radio})^2 (\text{profundidad})$$

Como nuestro volumen es sólo un hemisferio de este elipsoide tenemos

$$\text{Vol} = \frac{2}{3} \Pi (\text{radio})^2 (\text{profundidad})$$

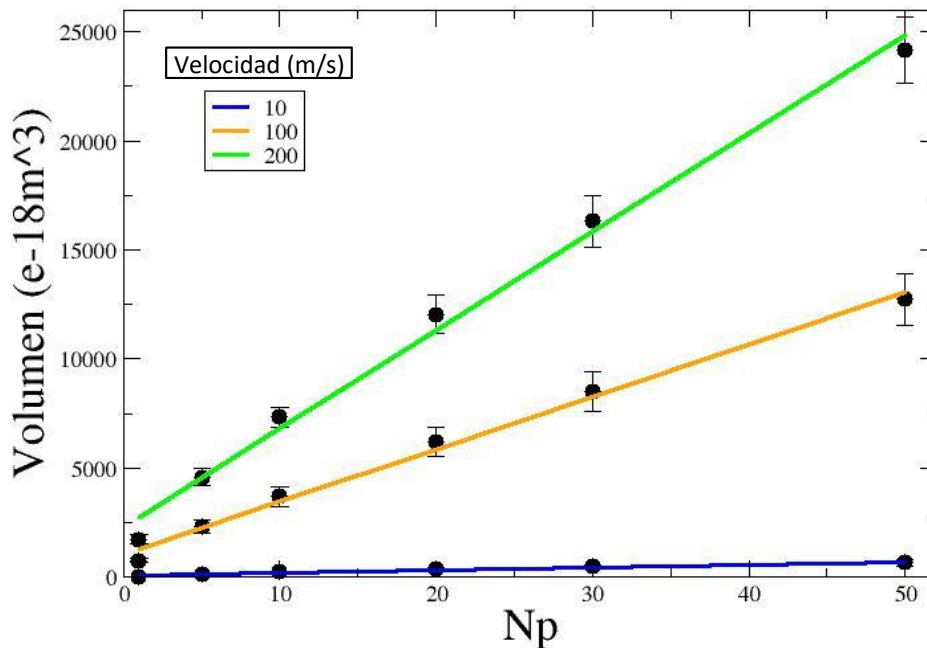


Fig. 12 Volumen del cráter vs Número de partículas en el proyectil.

Las barras de error provienen del cálculo de la propagación de errores para el volumen, teniendo en cuenta los errores anteriormente calculados para el diámetro y la profundidad

Recordemos que tanto el radio como la profundidad tenían una dependencia de $N^{1/3}$ respecto al número de partículas en el proyectil, por lo tanto, esperamos que el volumen siga una relación lineal respecto al número de partículas en el proyectil.

Como se observa en la fig. 12, el volumen sigue una relación aproximadamente lineal como se había predicho, sin embargo, el último valor, para un proyectil de 50 partículas tiene un leve decrecimiento en la curva, para todas las velocidades simuladas.

El valor correspondiente $N_p = 1$ no se ajusta a las rectas mostradas, pero consideramos que pertenece a un régimen umbral donde, al ser proyectiles pequeños no producen un cráter notable y el error que conlleva su medición es grande.

Esta dependencia coincide con la propuesta por Anders (29) para tamaños atomísticos en materiales metálicos y es aproximadamente la predicha por Ringl (33) para proyectiles individuales.

Sin embargo, considerábamos la posibilidad de que, para proyectiles compuestos por muchos granos, el hecho de tener una fricción interna cambiara esta dependencia. Quizás este fenómeno se observe para proyectiles mucho mayores que los analizados.

4.1.4. Conclusiones

Como extensión al trabajo de Ringl (33) podemos decir que al considerar proyectiles multi-granos en lugar de mono-grano obtuvimos los siguientes resultados

(a) La profundidad aumenta siguiendo una ley $N^{1/3}$, con un crecimiento similar al trabajo de Ringl.

(b) El diámetro sigue aumentando, siguiendo una ley $N^{1/3}$, y no se observa la saturación obtenida con los proyectiles mono-grano, razón por la cual esperamos que la forma del cráter sea distinta.

(c) La forma del cráter obtenido en todas nuestras simulaciones de proyectiles multi-grano presenta la forma de un hemisferio elipsoidal, a diferencia de la forma cónica obtenida con proyectiles mono-grano.

(d) El volumen del cráter tiene una dependencia lineal con el número de partículas en el proyectil, N_p como se esperaba de las dependencias del diámetro y la profundidad. Esta dependencia coincide con modelos anteriormente estudiados (29) y (33).

4.2 Análisis de las partículas eyectadas

Un grano se considera eyectado cuando su altura está por encima de la superficie del blanco y su velocidad es superior a cero. Por lo tanto, los granos que forman la cresta del cráter no se cuentan como eyectados, ya que su velocidad es cero. Por otro lado, hay granos de baja energía que aún se

mueven en la zona vacía del cráter y que finalmente podrían ser eyectados.

Para los gráficos presentados se utilizaron los programas Xmgrace y Gnuplot. En primer lugar, se analizó si el número de partículas eyectadas era estable en el paso 400.000, para lo cual se realizaron simulaciones de 700.000 pasos temporales y se compararon los resultados finales. Esto es importante, ya que no debemos contabilizar las partículas que sufren una redeposición, sino sólo aquellas que definitivamente fueron eyectadas en la colisión.

Definimos Y como el número de partículas eyectadas. A continuación, analizamos la dependencia de Y respecto del radio y velocidad del proyectil, y el volumen del cráter formado.

Para la contabilidad de las partículas eyectadas se utilizó el programa Ovito, y el procedimiento fue realizar un corte a una altura razonable desde la superficie, por encima de la cresta del cráter para evitar cualquier tipo de confusión y estar seguros de contabilizar efectivamente las partículas que permanecen fuera del cráter y de la superficie.

4.2.1. Y vs tiempo (estabilización)

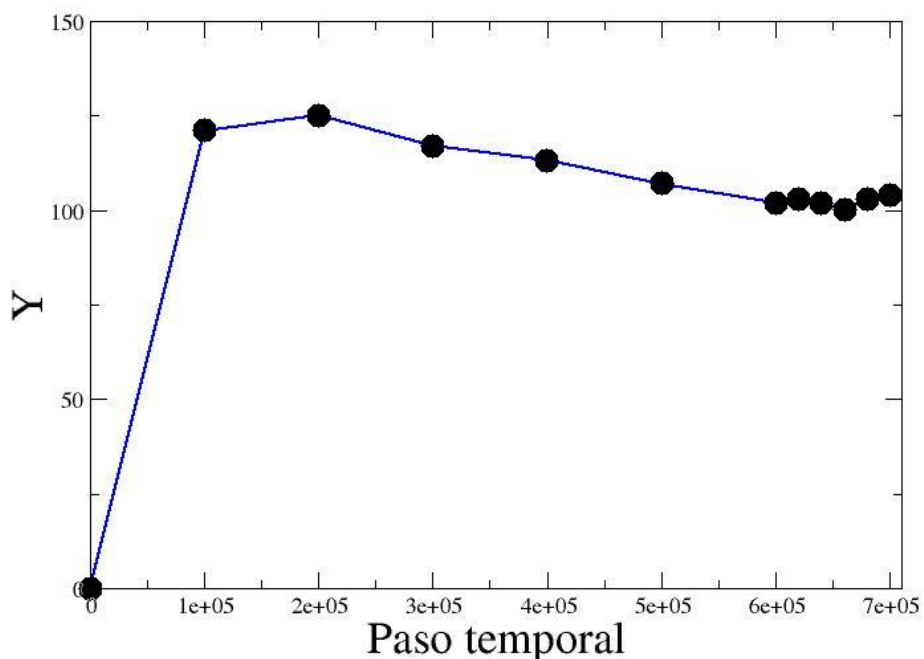


Fig. 13 Simulación realizada con 700.000 pasos temporales. La gráfica corresponde a un proyectil conformado por 20 partículas y con una velocidad de 100 m/s.

Observamos de la fig. 13 que desde el paso 400.000 al 700.000 hay una leve continuación en la redeposición de las partículas eyectadas. En las simulaciones analizadas hasta el paso temporal 700.000 esta diferencia siempre se mantuvo menor al 10%. Para nuestro análisis este error será contemplado y procederemos al análisis de nuestras simulaciones de 400.000 pasos.

4.2.2. Y vs Radio del proyectil

Como observamos en la fig. 14, obtuvimos una buena aproximación modelando la dependencia de Y respecto del número de granos del proyectil como curvas $N^{1/3}$, lo que obtenemos es una buena aproximación lineal en la escala log-log.

Obviamente, este número crece con la velocidad de impacto y con el radio del proyectil, pero para proyectiles formados por más de 30 partículas, es decir, con radio mayor a $2,7 (\pm 0,4) \times 10^{-6}$ m la tasa de crecimiento disminuye.

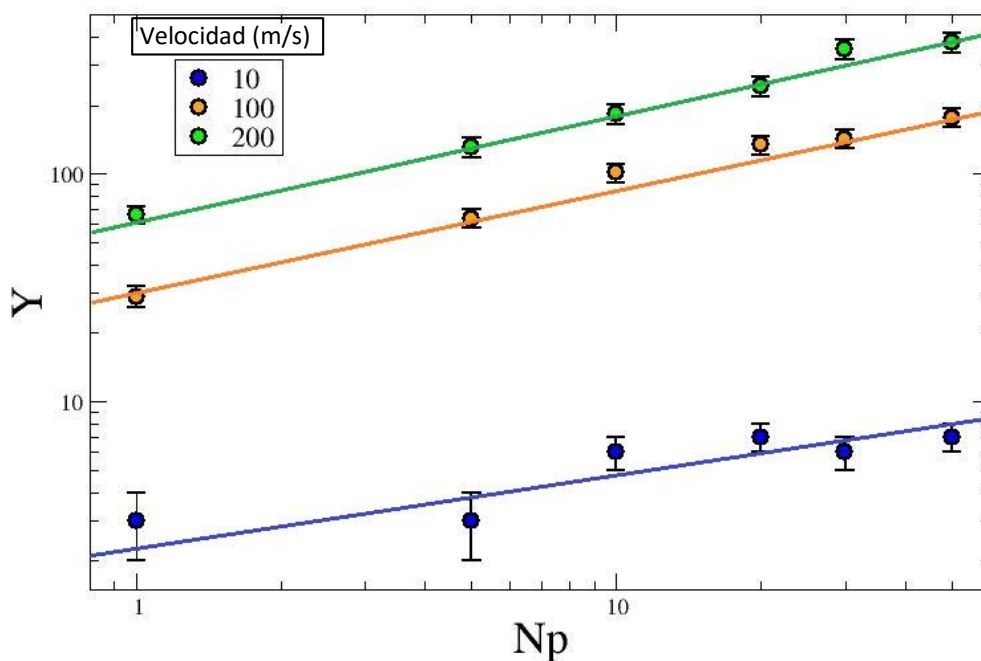


Fig. 14 Gráfico en escala log-log
 Número de partículas eyectadas vs número de partículas en el proyectil.
 Las barras de error provienen del error obtenido al calcular Y en diferentes cortes sobre los distintos ejes.

4.2.3. Y vs Velocidad del proyectil

En el trabajo de Ringl (33) se había hallado que el número de partículas eyectadas como función de la velocidad del proyectil tiene una dependencia lineal, $Y = \alpha v$.

Nosotros encontramos que, en concordancia con el trabajo de Ringl (33), hay una dependencia lineal entre el número de partículas eyectadas y la velocidad del proyectil, siendo el valor de la pendiente α . Los diferentes valores de α se muestran en la tabla.

N_p	α
1	3,22
5	6,51
10	9,33
20	12,35
30	17,04
50	18,64

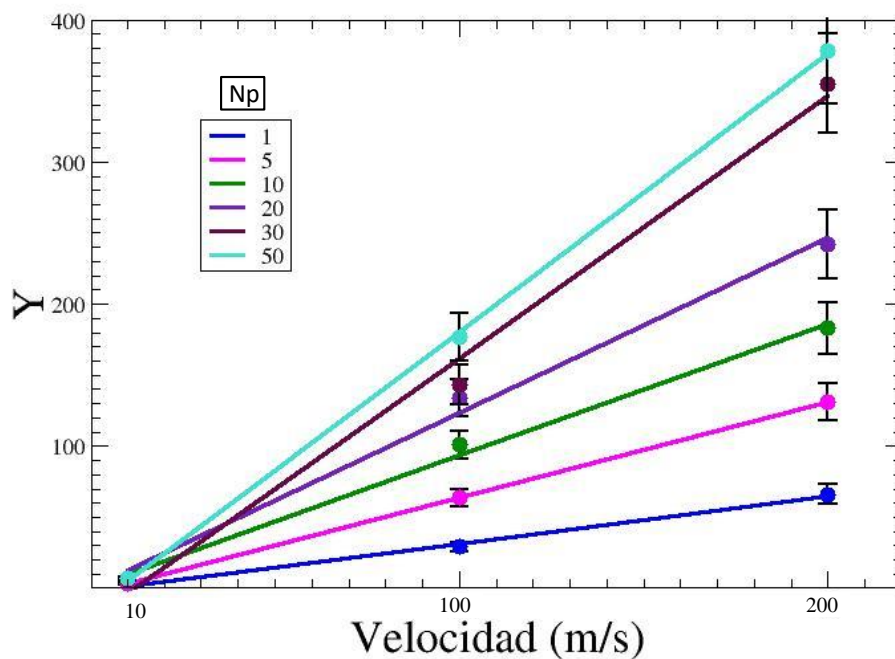


Fig. 15 Partículas eyectadas vs velocidad del proyectil.

Las barras de error provienen del error obtenido al calcular Y en diferentes cortes sobre los distintos ejes.

Ringl (33) encuentra que para un factor de llenado como el nuestro y un proyectil de radio aproximadamente $2\mu\text{m}$ el valor de la pendiente es $\alpha=2,91$. Esto corresponde a nuestras simulaciones con un valor de N_p entre 5 y 10. Por lo cual al considerar proyectiles multigranos en lugar de monogranos obtenemos una pendiente de 2 a 3 veces mayor para proyectiles pequeños.

Sin embargo, el valor de α es muy similar para nuestra simulación donde el proyectil está formado por una sola partícula, solo que es un tercio de la que Ringl utiliza en su análisis (33).

Además, ampliamos el rango analizado y podemos concluir que, si bien α aumenta con el aumento del radio del proyectil, como es lógico, esta tasa de crecimiento comienza a ser menor para proyectiles mayores a los que contienen 20 granos.

También consideramos que al tener sólo tres puntos es muy difícil afirmar el modelo de curva a seguir, ya que, si bien el lineal fue el elegido por tener menor desviación, esto puede variar al considerar más puntos. Como trabajo futuro se propondrá ampliar esta sección de la investigación utilizando un mayor número de velocidades.

4.2.4. Y vs volumen del cráter

En esta sección analizamos el número de partículas eyectadas vs el volumen del cráter formado, como esperábamos la fig. 16 nos muestra que Y crece con el volumen.

Por otro lado consideremos el volumen V_Y , formado por las partículas eyectadas Y. Se espera una relación lineal $x=y$ en relación con V_C , el volumen del cráter. Para ello normalizamos las mediciones, calculando el volumen que formaría el total de partículas eyectadas y dividiendo ambos ejes por el volumen total de la muestra, V.

Encontramos una relación lineal:

$$V_Y = \alpha V_C$$

donde V_Y es el volumen formado por las partículas eyectadas y V_C es el volumen del cráter.

El valor de la pendiente (fig. 17) es $\alpha = 0,094$. Como se aprecia en la fig. El eje x tiene un orden de magnitud mayor que el eje y, por lo tanto, el volumen del cráter es casi un orden de magnitud mayor que el volumen formado por las partículas eyectadas.

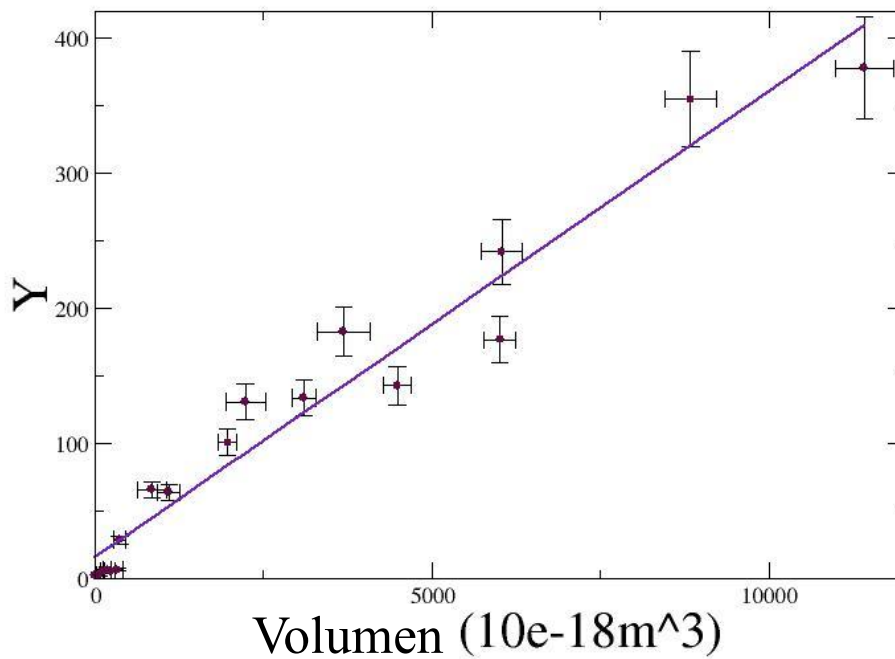


Fig. 16 Partículas eyectadas vs volumen del cráter
 Las barras de error verticales provienen del error obtenido al calcular Y en diferentes cortes sobre los distintos ejes. Las barras de error horizontales provienen del error de propagación obtenido para el cálculo del volumen

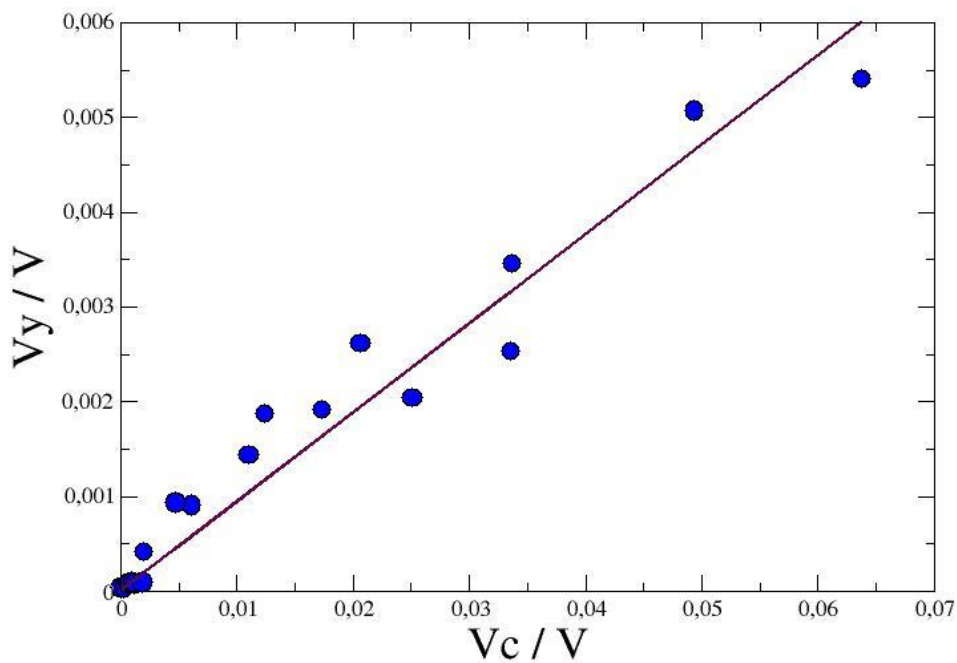


Fig. 17 Volumen de las partículas eyectadas V_Y vs volumen del cráter formado V_c

Esto nos indica que hay una mayor pérdida de partículas en la zona del cráter que las que son eyectadas, esto se debe a dos posibilidades, o bien, las partículas faltantes se ubican formando la cresta del cráter, o hay un fenómeno notorio de compactación en la periferia del cráter lo que provoca un cúmulo de partículas en esta zona. Al ver las imágenes a través del programa Ovito, como las fig. 10 y 11 no observamos la formación de una cresta relevante, por lo que nos inclinamos a pensar que lo que está sucediendo es un gran fenómeno de compactación alrededor del cráter.

Para confirmar esto se propone como trabajo futuro calcular la porosidad en la zona periférica del cráter y calcular las partículas que componen la cresta del mismo.

4.2.5. Conclusiones

A través del análisis de partículas eyectadas podemos concluir que:

- (a) En primer lugar hay un crecimiento de Y cuando aumenta el radio y/o la velocidad del proyectil, como se espera. Sin embargo, encontramos que la tasa de crecimiento es menor para proyectiles compuestos por un número mayor a 30 granos, cuyo radio correspondiente es $2,7 (\pm 0,4) \text{ e-6 m}$.
- (b) La dependencia lineal de Y con la velocidad nos indica que, a diferencia de la saturación en el crecimiento que sucede con el radio, la cantidad de partículas eyectadas crece a un ritmo constante a medida que la velocidad aumenta.
- (c) Si bien en este análisis las simulaciones obtenidas no tienen una concordancia exacta con el modelo lineal sugerido, su predisposición a seguir este modelo concuerda con la lógica de que un aumento del volumen total del cráter debe tener una dependencia lineal con el número de partículas que han sido eyectadas.
- (d) El volumen del cráter es casi un orden mayor de magnitud mayor al volumen formado por Y , lo cual podría indicar una gran compactación de material en las zonas próximas al cráter.

4.3 Análisis de la Energía

Para el análisis de la energía del sistema hemos utilizado los archivos de salida de nuestras simulaciones, que nos brindaban el dato de la energía total del sistema. Recordando el modelo granular utilizado, esperamos que a lo largo de la simulación la energía disminuya rápidamente por fricción en el instante de la colisión. Luego de esto habrá partículas eyectadas que adquieren una energía cinética y partículas aún en movimiento que siguen provocando pérdida por rozamiento. Por lo cual habrá una energía total oscilante.

Debemos tener en cuenta que, como la colisión ocurre antes del paso temporal 10.000 y habíamos fijado ese rango de corte, se realizaron nuevas simulaciones con cortes de 100 pasos a fin de ver en detalle el comportamiento de la energía antes, durante e instantáneamente después de la colisión.

Para estimar el error, realizamos una simulación con el proyectil ubicado en una posición x,y levemente diferente, respetando la distancia en z. Las energías obtenidas presentan un error menor al 10%

Los gráficos presentados se realizaron utilizando Xmgrace y Qtiplot.

Por último, destacamos que en estos análisis hay estudios novedosos de parámetros no estudiados anteriormente.

4.3.1. Volumen del cráter vs energía total

En la fig. 18 apreciamos una relación lineal con pendiente $2/3$ entre el volumen del cráter y la energía total del sistema, en una escala log-log. Esto nos indica que hay una dependencia aproximada como $E^{2/3}$ del volumen respecto de la energía, siendo diferente al modelo de formación de cráter de Anders para escalas atomísticas (29).

La mayor parte de la energía del sistema se utiliza para la creación del cráter en el comienzo de la

simulación.

Esta energía provoca la compactación del material circundante de la zona de impacto, y se pierde por la fricción producida entre las partículas del proyectil y la superficie, y las partículas que se van compactando en los primeros instantes de la colisión. Una vez que el cráter alcanzó su volumen, es decir, se encuentra formado la energía tiende a estabilizarse.

En los diferentes radios y velocidades analizados podemos ver que la pendiente es la misma, esto indica que en el modelo de colisiones utilizado la relación entre volumen y energía sigue el mismo patrón, verificando que esto se cumple aproximadamente independientemente del tamaño y velocidad del proyectil.

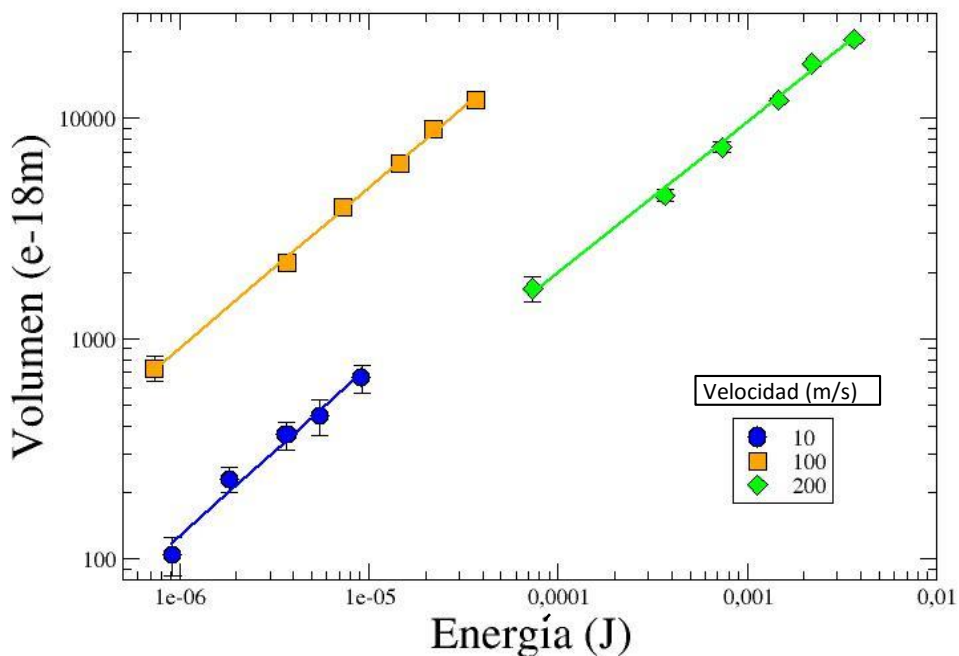


Fig. 18 Gráfico log-log.
Volumen del cráter vs energía total del sistema.
Las barras de error provienen del error de propagación
obtenido para el cálculo del volumen

4.3.2. Energía total vs tiempo

En la fig. 19 se corrobora que la energía inicialmente es estable y decae abruptamente en el momento de la colisión, hecho que sucede casi al comienzo de nuestra simulación. Luego continúa disminuyendo, pero a una tasa mucho menor, hecho provocado por la compactación del material y el movimiento remanente de las partículas en su reacomodamiento lo que sigue provocando pérdida

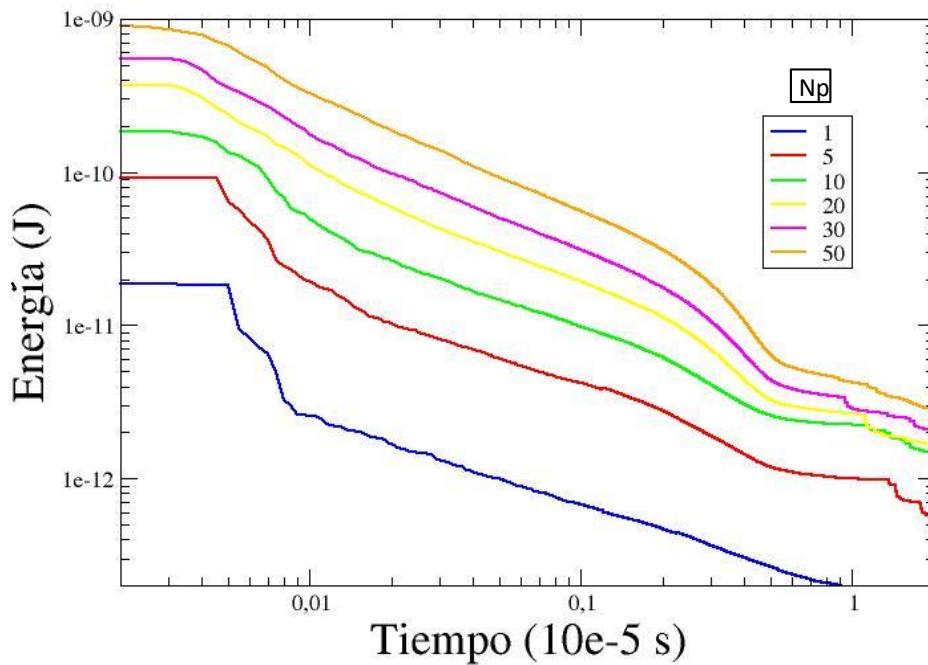


Fig. 19 Gráfico log-log. Energía vs tiempo

4.3.3. Energía total vs centro de masa del proyectil

En la fig. 20 apreciamos de forma cuantitativa la variación en el tiempo de la energía respecto a la posición z del centro de masa del proyectil, cantidad denominada cm. Esta posición se calcula

mediante un script sencillo que realizamos.

Se muestra en la fig. 20 un caso particular, de un proyectil compuesto por 10 partículas y velocidad 200 m/s, los resultados para otras simulaciones realizadas son similares, levemente diferentes para proyectiles pequeños, donde el error de medición es grande.

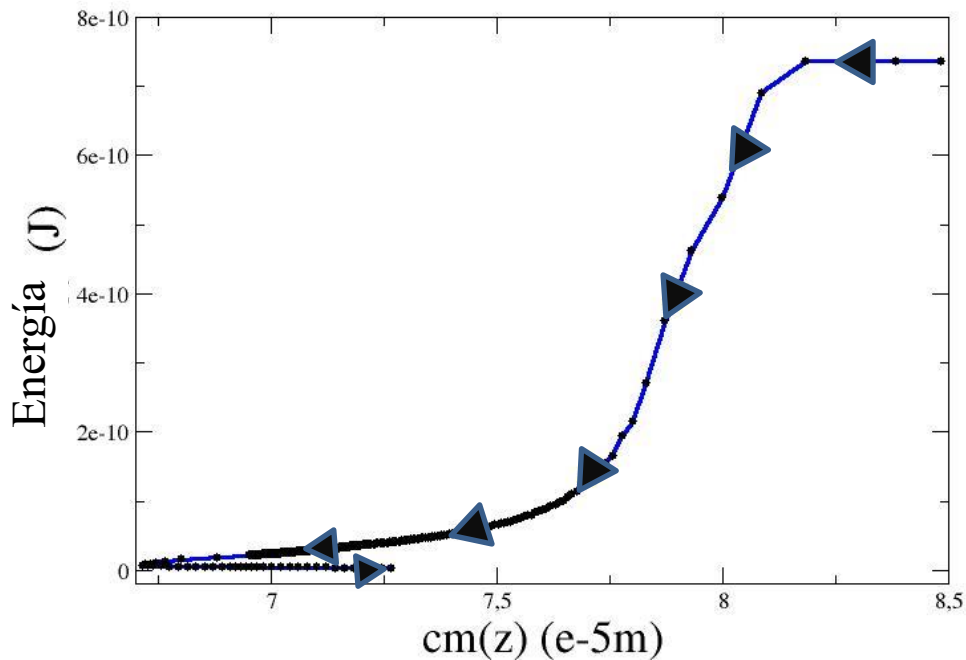


Fig. 20 Energía total vs $cm(z)$, la posición en el eje z del centro de masa, de un proyectil de 10 partículas y velocidad inicial 200 m/s

Esta fig. Nos indica que la energía es estable cuando el cm (coordenada z del centro de masa del proyectil) está a una altura de $8,5 \times 10^{-5}$ m, es decir, en el estado inicial. Luego decae abruptamente cuando el cm se encuentra a una altura de $8,1 \times 10^{-5}$ m, lo que corresponde con la superficie del blanco, es decir, cuando impacta el proyectil. La energía continúa disminuyendo, perdiéndose por fricción mientras los granos que componen el proyectil se acomodan y tiene un punto de cuasi-equilibrio al final de la simulación donde el movimiento de las partículas es mínimo. Estos valores se verificaron calculando el cm mediante Ovito y los valores son congruentes.

4.3.4. $|dE/dcm|$ vs tiempo

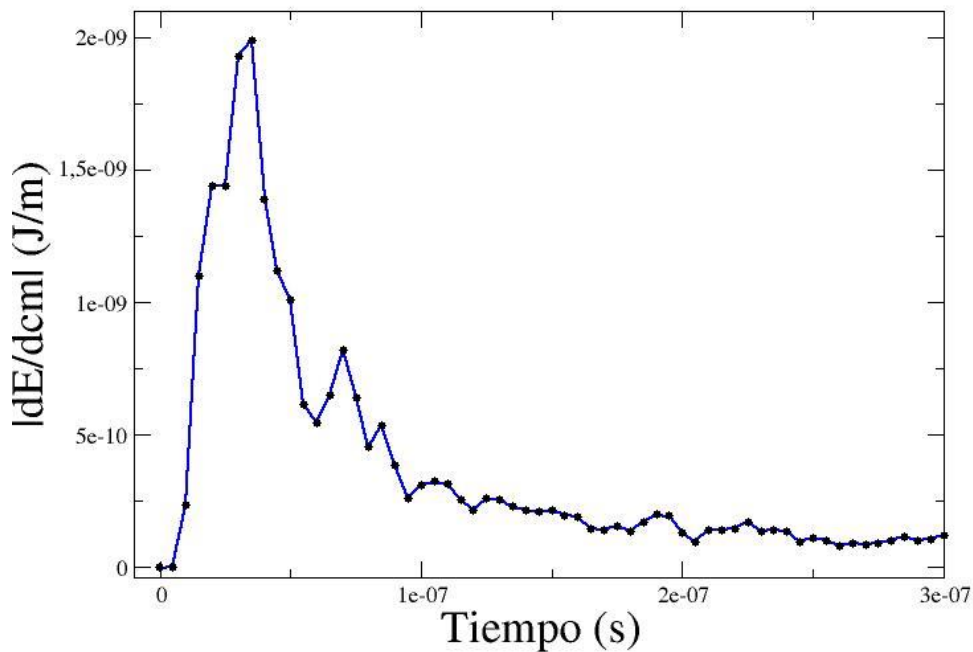


Fig. 21 $|dE/dcm(z)|$ vs tiempo para un proyectil de 10 partículas y velocidad inicial 200 m/s

En esta sección analizamos la derivada de la energía respecto de cm (la coordenada en z del centro de masa del proyectil, dato obtenido en la sección 4.3.3) respecto del transcurso temporal.

Este análisis incluye la derivada hasta los 3×10^{-7} segundos, es decir, hasta el paso 6000. Esto corresponde a un valor de $cm = 7,3692 \times 10^{-5} m$, por lo cual no tenemos inconvenientes con la curva de la fig. 20, ya que vemos que hasta este valor la función modelada no tiene inconvenientes para ser derivada.

Este gráfico coincide con nuestros análisis anteriores. En los primeros $1e-7$ segundos (equivalente al paso 2000) tenemos la mayor variación de energía en el sistema, luego la muestra comienza a estabilizarse, y luego de los $2,5e-7$ segundos (paso 5.000) el valor de la tasa de cambio de la energía respecto de la posición en z del centro de masa del proyectil permanece en una situación cuasi-estable.

Este gráfico es de utilidad para estimar donde se deposita la mayor cantidad de energía, lo cual es

necesario por ejemplo para estimar posibles reacciones químicas en el material orgánico que puede estar depositado en granos de sílica.

4.3.5. Conclusiones

(a) El análisis de volumen vs energía sigue una ley $N^{1/3}$. Lo cual indica una diferencia en los modelos presentados para materiales metálicos (29)

(b) La energía decae abruptamente antes del paso 2000 ($1e-7$ seg), que según los gráficos realizados coincide con la formación del cráter, y luego de los 100.000 pasos temporales ($5e-6$ seg) hay una estabilización total en los valores de la energía con leves disturbios, coincidiendo con los análisis de Y de la sección 4.2, donde el movimiento de las partículas en esta etapa era muy leve.

(c) Dentro de un estudio novedoso, analizamos la energía respecto de la posición z del centro de masa, verificamos la pérdida de energía en la superficie (donde se forma el cráter) y luego este análisis nos permitió mostrar cómo se reubica la coordenada z del centro de masa proyectil en la muestra con el transcurso del tiempo.

(d) Siguiendo en el estudio anterior graficamos la derivada de la energía respecto a la posición z del centro de masa, obteniendo las zonas de mayor y menor depósito energético, análisis que tiene numerosas aplicaciones, y poder dar origen a un amplio trabajo a futuro.

Capítulo 5

Conclusiones y Nuevas Perspectivas

Conclusiones

En este trabajo nos planteamos extender las investigaciones realizadas por Ringl (33) y Anders (29), además de estudiar otras propiedades de los cráteres de impacto formados en escala micro. La novedad del trabajo consistió en considerar un proyectil multigrano, formado por un número variable de partículas idénticas entre sí, e idénticas al blanco sobre el cual impactan. También se varió la velocidad del proyectil a fin de comparar la diferencia con los resultados obtenidos previamente.

A través de MD se realizaron decenas de simulaciones a partir de las cuales obtuvimos los siguientes resultados:

* Tanto el diámetro como la profundidad del cráter se incrementan con el aumento del número de partículas en el proyectil, N_p , siguiendo una ley $N^{1/3}$, siendo levemente mayor el crecimiento en el diámetro que la profundidad. El volumen total del cráter tiene una dependencia lineal respecto a N_p , lo cual era de esperarse a partir de las dependencias de diámetro y profundidad. Esta dependencia es la que se ha encontrado en formación de cráteres por proyectiles atomísticos (29), y no era claro que se encontrase en sistemas granulares, donde la fricción cumple un rol importante. Ringl encuentra una dependencia similar para proyectiles individuales (33), pero en nuestro caso la fricción dentro del proyectil podía modificar la dependencia. Quizás esto ocurra recién para tamaños de proyectil mucho mayores a los estudiados en esta tesis, y es importante observar que hay tendencias con N que deben ser estudiadas en mayor profundidad.

* La mayor parte de la energía del sistema se utiliza para la creación del cráter en el comienzo de la simulación. Esta energía provoca la compactación del material circundante de la zona de impacto, la formación de un anillo alrededor del cráter, y continúa perdiéndose por la fricción producida entre las partículas del proyectil y la superficie y las partículas que se van compactando en los primeros instantes de la colisión. Como la mayor parte de la formación del cráter ocurre tan rápidamente, el rol de las pérdidas por fricción se minimiza, contribuyendo a explicar la ley de escala mencionada arriba.

* La forma del cráter formado al considerar proyectiles esféricos multi-granos es un hemisferio elíptico, a diferencia del estudio de Ringl (33), donde el proyectil era un grano único que generaba un cráter cónico.

* Hay una dependencia aproximada de $E^{2/3}$ del volumen respecto de la energía, difiriendo del modelo simple de formación de cráter de Anders(29). Esto nos indica que la mayor parte de la energía del sistema se utiliza para la creación del cráter en el comienzo de la simulación.

* La dependencia de número de partículas eyectadas (sputtering yield, Y), respecto del número de granos del proyectil sigue un modelo $N^{1/3}$. Y crece con la velocidad de impacto y con el radio del proyectil, pero para proyectiles formados por más de 30 partículas, (radio mayor a $2,7 (\pm 0,4) \times 10^{-6}$ m) la tasa de crecimiento disminuye notablemente, coincidiendo con los modelos anteriormente estudiados (29,33).

* También evaluamos la dependencia de Y respecto de la velocidad del proyectil y obtuvimos una relación aproximadamente lineal en concordancia con los trabajos anteriormente publicados por Ringl (33) para proyectiles mono-grano. También podemos ver que para proyectiles mayores a los compuestos por 30 granos la tasa de crecimiento disminuye, verificando el punto anterior y extendiendo la validez del modelo de Ringl (33) propuesto para Y , para proyectiles multi-granos.

* Se encuentra que el volumen equivalente de todas las partículas eyectadas, V_Y , depende linealmente del volumen del cráter formado, V_C . Sin embargo, el coeficiente es 0,094, lo que nos dice que el volumen del cráter tiene cerca de un orden de magnitud mayor que el V_Y .

Nuevas Perspectivas

*En primer lugar nuestra próxima meta es aumentar el tamaño del blanco, para poder realizar simulaciones con proyectiles multigranos mayores, ya que para un número N_p mayor a 50, el contorno del cráter se superponía con los límites de la caja, siendo estas simulaciones desechadas.

* Realizar simulaciones con un mayor número de velocidades, ya que hay gráficos, como la fig.15, que se ha ajustado a una recta con solamente 3 puntos (las 3 velocidades consideradas). Para tener una mayor exactitud en el ajuste a seguir se propone considerar más velocidades dentro del rango 1 – 200 m/s, el límite superior se eligió por su relevancia para el campo de la astronomía.

*Verificar si el volumen del cráter mayor en casi un orden de magnitud al volumen de partículas eyectadas se explica mediante la compactación en la zona periférica del cráter o por la formación de un anillo. La propuesta concreta es realizar un corte superficial y medir desde allí el volumen del anillo formado, luego calcular la porosidad de la zona interna del cráter y a partir de allí poder confirmar cuál es el fenómeno que predomina.

*Estudiar en detalle la tasa de pérdida de energía respecto del tiempo, para poder comprender mejor el rol de las colisiones y la fricción en la formación del cráter y del anillo, y en el proceso de eyección.

*De forma ambiciosa se planea poder trabajar con materiales formados por compuestos de distintos elementos. Si bien se eligió trabajar con sílica por el estudio de colisiones en polvo interestelar y objetos menores del sistema planetario, sería de gran interés para el campo de la astrofísica poder implementar este método para el estudio de materiales compuestos por sílice recubierta con hielo, o bien, de hielo puro, que serían de gran importancia para el análisis de anillos planetarios y comas cometarias.

Divulgación

Los resultados que fuimos obteniendo a lo largo de esta investigación fueron expuestos por medio de una presentación mural (ver Apéndice B) en la 99 Reunión de la Asociación Física Argentina, realizada en septiembre de 2014 en Tandil, Buenos Aires, Argentina; y en la 57 Reunión de la Asociación Astronómica Argentina realizada en septiembre de 2014 en Córdoba, Argentina.

En ambos Congresos hubo interés por el trabajo realizado, y en este marco se contactó con el grupo astronómico de sistemas planetarios de San Juan, para seguir trabajando dentro de este marco, con colisiones granulares relevantes en el campo de la Astronomía, junto al Doctor Ricardo Gil-Huton, director del centro Casleo. El plan de trabajo doctoral que sigue esta línea fue “original y de posible desarrollo” para el comité de CONICET que evaluó el proyecto, y otorgó a la autora de esta tesis una Beca Doctoral.

También se otorgó una conferencia semiplenaria sobre este trabajo en el 7mo Congreso de Juventudes Científicas.

Apéndice A

Script

```
#!/bin/bash

OUTPUT="start_20grains_sphere_collision_v10.init"

VELOCITY="-20.000000000000000e+01"

RADIO="0.60e-11"

awk -v vel1=$VELOCITY -v rad=$RADIO '
BEGIN {
    x0 = 2.1846000000000000563615127e-05;
    y0 = 2.6239599999999995225000507e-05;
    z0 = 2.2726199999999995964841334e-05;

    R2 = rad;

    vel = vel1;

    vel0 = "0.000000000000000e+00";

    id = -1;

    count = 0;
} {
    if((NR > 13 && NR < 70014) &&
        (($5 - x0)^2 + ($6 - y0)^2 + ($7 - z0)^2) <= R2) {
        count += 1;
    }
}
```

```

$7 = $7 + 6.200000000e-5;
$6 = $6 + 1.000000000e-5;
$5 = $5 + 1.000000000e-5;
$2 = 2
id = $1
print $0;
while ((getline < "start.init_nuevo_2013_11_13_2") > 0) {
    if (($1 == id)){
        $4 = vel;
        $2 = $3 = $5 = $6 = $7 = vel0;
        print $0 > "velocities.out";
    }
}
close ("start.init_nuevo_2013_11_13_2");
} else {
    print $0
}
} END { print count;}' start.init_nuevo_2013_11_13 > init_0
echo "Numero de granos en la esfera:"
tail -1 init_0
head -n -1 init_0 > tmp
mv tmp init_0
awk -v vel1=$VELOCITY 'BEGIN {
    vel = vel1;
    vel0 = "0.0000000000000000e+00";

```



```

    id = -1;

    count = 0;
}

NR == FNR {a[$1]=$2; next};

{
    for (i=1; i<=NF; ++i) {
        if ($i in a && NR > 70014) {
            # $i = a[$i];

            $4 = vel;

            $2 = $3 = $5 = $6 = $7 = vel0;

            print $0;
        } else {
            print $0;
        }
    }
}

}' velocities.out init_0 > tmp.out
awk '!a[$0]++' tmp.out > final5.out
sed '2i\' final5.out > tmp
sed '4i\' tmp > final5.out
sed '6i\' final5.out > tmp
sed '10i\' tmp > final5.out
sed '12i\' final5.out > tmp
sed '70013i\' tmp > final5.out
sed '70015i\' final5.out > tmp
mv tmp $OUTPUT

```

rm tmp.out

rm final5.out

rm init_0

rm velocities.out

Apéndice B

Divulgación

Frenamiento, fragmentación y formación de cráter causado por colisiones de granos de alta porosidad

Planes M.B. (belenplanes.88@gmail.com), Millán E.N. (emmanuel.millan@gmail.com), Bringa E.M. (ebringa@yahoo.com)
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - UNCuyo

Resumen

Colisiones entre granos y aglomeraciones de granos son de importancia en astrofísica para estimar la evolución de nubes de polvo interestelares, sistemas protoplanetarios, anillos planetarios, etc. Las aglomeraciones de granos generalmente poseen alta porosidad.

Este trabajo presenta simulaciones computacionales de dinámica de sistemas granulares para recrear impactos de proyectiles porosos en blancos porosos, que representan un grano mucho mayor. La porosidad del proyectil lleva a su desintegración durante el impacto. Se estudian las dimensiones del cráter resultante (diámetro y profundidad), como función del tamaño del proyectil aproximadamente esférico, y de la velocidad inicial del proyectil.

Objetivo

- Estudiar colisiones entre proyectiles y superficies de alta porosidad, relevantes para granos interestelares [1,2,3].
- Investigar la dependencia del volumen del cráter respecto a variables tales como velocidad, tamaño, y energía total del proyectil, expandiendo el trabajo de [4] a proyectiles multigranulares.
- Comparar con modelos existentes, a nivel continuo.

Metodología

- Utilizamos Dinámica Molecular, Molecular Dynamics (MD), con el software LAMMPS (lammps.sandia.gov).
- Utilizamos mejoras implementadas en el código recientemente [3,4], que permiten una mejor descripción de las fuerzas de fricción y adhesión granulares.
- Granos de sílica de 0.8 micrones de radio

Estado inicial

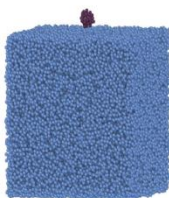


Fig. 1 Momento inicial. Proyectil (partículas del proyectil en violeta) a punto de impactar con la superficie (partículas del blanco en celeste)

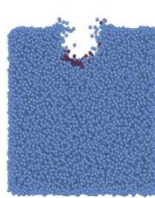
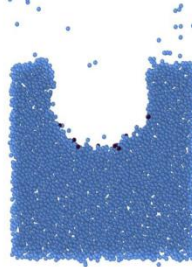


Fig. 2 El proyectil impacta en el blanco. Se muestra la imagen a los 0,5 microsegundos a partir de que se inicia el proceso.

Formación del cráter

Fig. 3 Estado final. Cráter formado por el impacto de un proyectil de 50 partículas (destacadas en color violeta), que impacta con una velocidad inicial de 20 m/s contra el blanco (partículas en celeste).



Resultados

Depth vs number of particles in projectile

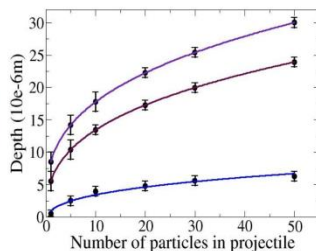


Fig. 4 Profundidad del cráter en función del número de partículas en el proyectil. Las líneas son fits siguiendo una ley $N^{1/3}$. La curva azul modela para una velocidad inicial de 1m/s, la violeta para una velocidad inicial de 10m/s y la lila para una de 20m/s.

Diameter vs Number of particles in projectile

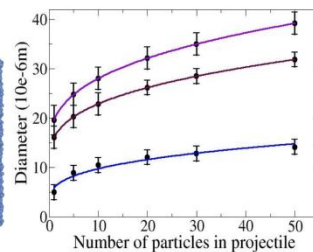


Fig. 5 Diámetro del cráter en función del número de partículas en el proyectil. Las líneas son fits siguiendo una ley $N^{1/3}$. La curva azul modela para una velocidad inicial de 1m/s, la violeta para una velocidad inicial de 10m/s y la lila para una de 20m/s.

Resultados

Volume vs Number of particles in projectile

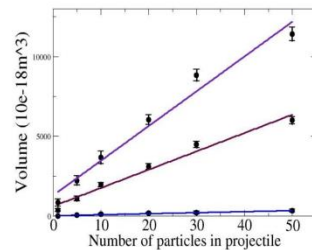


Fig. 6 Volumen vs N. Las líneas son fits que siguen una función lineal. Diferentes colores pertenecen a las diferentes velocidades como en los gráficos 4 y 5.

Volume vs total energy

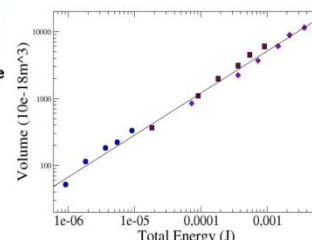


Fig. 7 Gráfico a escala logarítmica. Volumen vs Energía total. Los círculos azules representan velocidad 1m/s, los cuadrados violetos velocidad 10m/s y los diamantes lila velocidad 20m/s

Si uno asume un cráter aproximadamente elíptico, y que la energía disponible en el proyectil se utiliza íntegramente para crear el cráter, entonces se espera que tanto la profundidad como el diámetro del cráter crezcan como $N^{1/3}$, y que el volumen del cráter crezca como N para una velocidad fija, y lineal con la energía total.

Conclusiones

En este estudio se comprueban las leyes de escala simples esperables para proyectiles y blancos compactos, pero para proyectiles mayores, pueden aparecer efectos de "escudo" y efectos de fricción que no aparecen en sólidos compactos [5]. Futuro cercano: estudiar distribución de granos del proyectil, estudiar en detalle geometría del cráter y comparar con leyes de escala de modelos continuos.

Bibliografía

- (1) G. Caballero, R. Bergmann, D. van der Meer, A. Protopopidis, and D. Lohse, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 018001 (2007).
- (2) K. Wada, H. Tanaka, T. Soyama, H. Kimura, and T. Yamamoto, *Astrophys. J.* **737**, 36 (2011).
- (3) C. Ring and H. M. Urbassek, *Comput. Phys. Commun.* **183**, 966 (2012).
- (4) C. Ring, E.M. Bringa, D.S. Betts, and H.M. Urbassek, *Astrophys. J.* **752**, 151 (2012).
- (5) C. Anonin, E.M. Bringa, G. Zappavigna, G.A. Graham, J.F. Hansen, N. Puk, N. Tebbi and H.M. Urbassek, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 025501 (2012).

Agradecimientos: BP agradece apoyo de una beca SeCTyP y de la FCEN (UNCuyo). ENM agradece a CONICET. EMB agradece apoyo de PICT-PRH-0092, y un subsidio SeCTyP (UNCuyo)

Bibliografía

- (1) J. S. Uehara, M. A. Ambroso, R. P. Ojha, and D. J. Durian, *Phys. Rev. Lett.* *90*, 149902 (E) (2003)
- (2) A. M. Walsh, K. E. Holloway, P. Haddas, and J. R. de Bruyn, *Phys. Rev. Lett.* *91*, 104301 (2003)
- (3) H. Katsuragi and D. J. Durian, *Nat Phys.* *3*, 420 (2007)
- (4) H. Katsuragi, *Phys. Rev. Lett.* *104*, 218001 (2010)
- (5) H. J. Melosh, (1989) *Impacting cratering: A Geologic Process* (New York: Oxford Univ. Press)
- (6) A. Li, J. M. Greenberg, *NATO Science Series II: Mathematics, Physics and Chemistry*, vol 120 (2000)
- (7) A. Chokshi, A. G. G. M. Tielens, D. Hollenbach, *Astrophys. J* *407*, 806 (1993)
- (8) J. R. C. Garry, M. C. Towner, A. J. Ball, J. C. Zarnecki, G. Marcou, *Adv. Space Res.* *23*, 1229 (1999)
- (9) M. F. A'Hearn, M. J. S. Belton, W. A. Delamere, J. Kissel, K. P. Klaasen, L. A. McFadden, K. J. Meech, H. J. Melosh, P. H. Schultz, J. M. Sunshine et al, *Science* *310*, 258 (2005)
- (10) F. Hörz, R. Bastien, J. Borg, J. P. Bridges, D. E. Brownlee, M. J. Burchell, M. Chi, M. J. Cintala, Z. R. Dai et al, *Science* *314*, 1716 (2006)
- (11) T. Poppe, J. Blum, T Henning, *Astrophys. J* *533*, 454 (2000)
- (12) J. Blum, G. Wurm, *Icarus* *148*,138 (2000)
- (13) G. Wurm, J. Blum, *Icarus* *132*,125 (1998)
- (14) M. Krause, J. Blum, *Phys. Rev. Lett.* *93*, 021103 (2004)
- (15) C. W. Ormel, D. Paszun, C. Dominik, A. G. G. M. Tielens, *A&A* *502*,845 (2009)

- (16) A. Chokshi, A. G. G. M. Tielens, D. Hollenbach, *Astrophys J* 407,806 (1993)
- (17) A. G. G. M. Tielens, C. F. McKee, C. G. Seab, D. Hollenbach, *Astrophys J* 10509 (1994)
- (18) A. P. Jones, A. G. G. M. Tielens, D. Hollenbach, C. F. McKee, *Astrophys J* 433, 797 (1994)
- (19) C. Dominik, A. P. Jones, A. G. G. M. Tielens, *Astrophys Space Sci.* 233, 155 (1995)
- (20) C. Dominik, A. G. G. M. Tielens, *Astrophys J* 480, 647 (1997)
- (21) D. Paszun, C. Dominik, *A&A* 507, 1023, (2009)
- (22) K. Wada, H. Tanaka, T. Suyama, H. Kimura, T. Yamamoto, *Astrophys J* 661, 320 (2007)
- (23) K. Wada, H. Tanaka, T. Suyama, H. Kimura, T. Yamamoto, *Astrophys J* 677, 1296 (2008)
- (24) K. Wada, H. Tanaka, T. Suyama, H. Kimura, T. Yamamoto, *Astrophys J* 702, 1490 (2009)
- (25) K. Wada, H. Tanaka, T. Suyama, H. Kimura, T. Yamamoto, *Astrophys J* 737, 36 (2011)
- (26) T. Suyama, K. Wada, H. Tanaka, *Astrophys J* 684, 1310 (2008)
- (27) C. Ringl, E. M. Bringa, D. S. Bertoldi, H. Urbassek, *Astrophys. J* 752, 151 (2012)
- (28) S. Zimmermann, H. Urbassek, *Phys. Rev. Lett. A*, 74, 063203 (2006)
- (29) C. Anders, E. M. Bringa, G. Ziegenhain, et al, *Phys. Rev. Lett.* 108, 027601 (2012)
- (30) P. J. Armitage, *ARA&A* 49,195 (2011)
- (31) C. Güttler, J. Blum, A. Zsom, C. W. Ormel, C. P. Dullemond, *A&A* 513, A56, (2010)
- (32) J. Teiser, I. Engelhardt, G Wurm, *Astrophys J* 742,5 (2011)
- (33) C. Ringl, E. M. Bringa, H. Urbassek, *Phys. Rev. Lett.* E 86, 061313 (2012)
- (34) C. Ringl, H. Urbassek, *Computer Phys. Com.* 183, 986992 (2012)
- (35) D. Koch, W. Borucki, G. Basri et al. *Astrophys J* 713, 2 (2010)
- (36) N. Batalha, W. Borucki, S. Bryson et al. *Astrophys J* 729,1 (2011)
- (37) Carr et al, *Journal of geophysical research*, vol11 (2006)
- (38) T. Pöschel, T. Schwager, *Computational Granular Dynamics: Models and Algorithms* (Springer, New York, 2005)

- (39) N. V. Brilliantov, F. Spahn, J. M. Hertzsch, T. Pöschel, *Phys. Rev. Lett. E* 53, 5382 (1996)
- (40) B. V. Derjaguin, V. M. Muller and Y. P. Toporov, *J. Colloid Interface Sci.* 53, 314 (1975)
- (41) K. L. Johnson, K. Kendall, and A. D. Roberts, *Proc. R. Soc. London A* 324, 301 (1971)
- (42) K. L. Johnson, *Contact Mechanics* (Cambridge University Press, Cambridge 1985)
- (43) D. Maugis, *Contact, Adhesion and Rupture of Elastic Solids* (Springer, Berlin, 2000)
- (44) I. Szlufarska, M. Chandross, and R. W. Carpick, *J. Phys. D* 41, 123001 (2008)
- (45) N. Burnham and A. A. Kulik, *Handbook of Micro/Nano Tribology, 2nd ed., editado por B. Bhushan* (CRC Press, Boca Raton, FL 1999) Cap 5 pag 247
- (46) <http://lammmps.sandia.gov/>
- (47) M. P. Allen, D. J. Tildesley, *Computer simulation of liquids*, Oxford University Press (1989)
- (48) H. Goldstein, *Classical Mechanics, Vol. 4*, Pearson Education India (1962)
- (49) R. W. Hockney, J. W. Eastwood, *Computer simulation using particles*, CRC Press (2010)
- (50) S. Plimpton, *Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics*, *Journal of Computational Physics* 117 (1) (1995) 1–19.
- (51) D. C. Rapaport, *The art of molecular dynamics simulation*, Cambridge university press, (2004)
- (52) H. A. Carmona, F. K. Wittel, F. Kun, H. J. Herrmann, *Phys. Rev. E* 77 (2008)
- (53) L. E. Silbert, D. Erta ş, G. S. Grest, T. C. Halsey, D. Levine, S. J. Plimpton, *Phys. Rev. E* 64 (2001)
- (54) J. Duran, *Sands, powders, and grains: an introduction to the physics of granular materials*, Springer Science & Business Media, (2012)
- (55) M. M. Mariscal, S. A. Dassie, E. P. M. Leiva, *The Journal of Chemical Physics* 123 (18) (2005)
- (56) S.-C. Jung, J.-G. Bang, W.-s. Yoon, *Journal of Aerosol Science* 50, 26–37 (2012)

(57) E. N. Millán, D. Tramontina, C. García Garino, M. F. Piccoli, E. M. Bringa, *Parametric study of the plastic threshold for grain-grain collisions*, Vol. 4, *IV MACI IV Congreso de Matemática Aplicada, Computacional e Industrial, MACI*, 2013, pp. 315–318. (2013)

(58) N. Ohnishi, E. M. Bringa, B. A. Remington, G. Gilmer, R. Minich, Y. Yamaguchi, A. G. G. M. Tielens, *Journal of Physics: Conference Series* 112 (4) 042017 (2008)

(59) M. Kalweit, D. Drikakis, *Phys. Rev. B* 74 (2006)