

# Simulaciones atomísticas de la interacción entre viento solar y regolito

D.R. Tramontina<sup>a</sup>, E.M. Bringa<sup>b</sup>

CONICET, Facultad de Ingeniería, Universidad de Mendoza, Mendoza, 5500, Argentina.

<sup>a</sup>[diego.tramontina@gmail.com](mailto:diego.tramontina@gmail.com) <sup>b</sup>[ebringa@yahoo.com](mailto:ebringa@yahoo.com)

**Simposio:** "Formación, evolución, y supervivencia de las partículas milimétricas y submilimétricas"

## Resumen

Las superficies de cuerpos planetarios sin atmósfera, como la Luna y Mercurio, están directamente bombardeadas por partículas del viento solar, predominantemente protones. Observaciones in situ, realizadas por misiones como Chandrayaan-1 e IBEX, han demostrado que una parte significativa de estos protones incidentes se retrodispersa como átomos de hidrógeno neutros energéticos (Energetic Neutral Atoms, ENA). Sin embargo, la amplia gama de coeficientes de reflexión reportados subraya una comprensión incompleta de cómo la estructura del regolito influye en este proceso. La medición de la distribución del flujo de energía de estas partículas neutras proporciona una clave para desentrañar los procesos que ocurren en el regolito superficial cuando los protones incidentes colisionan con los granos superficiales.

Como parte de una colaboración internacional se ha desarrollado un modelo multi-escala para describir estos procesos. Se utiliza un modelo de Monte Carlo (MC) para seguir las trayectorias de H en una estructura de regolito con granos esféricos polidispersos de micrones de diámetro, y una porosidad aproximada del 65%. Por tanto, se incluyen impactos con distinto ángulo respecto a la normal a la superficie, posible penetración entre granos y reabsorción del H dispersado. El MC precisa coeficientes de reflexión, sputtering, etc., datos que se suelen obtener de modelos muy simplificados. En este caso utilizamos la técnica de dinámica molecular (Molecular Dynamics, MD) para obtener coeficientes de reflexión de H incidiendo sobre una superficie amorfa de SiO<sub>2</sub>, compuesta de decenas de miles de átomos.

Las interacciones entre los átomos se describen mediante un campo de fuerza reactivo (ReaxFF), que incluye interacciones de Coulomb apantalladas y permite el intercambio de carga y diversos entornos de enlace químico. Adicionalmente, para interacciones de corto alcance se incorporó un potencial de Ziegler, Biersack y Littmark (ZBL). Se realizaron miles de simulaciones de impacto (500 eventos para cada combinación de energía y ángulo) para caracterizar completamente las colisiones hidrógeno-grano. A partir de estos resultados de MD, derivamos parámetros clave que alimentan el modelo de Monte Carlo (probabilidad de reflexión con dependencias de la energía y el ángulo de incidencia, distribución de energía y velocidad de las partículas re-emitidas, probabilidad de implantación, etc.). Este enfoque detallado permite una descripción física más precisa de las colisiones átomo-grano.

Este tipo de simulaciones permite evaluar también sputtering y cambios en la estequiometría y la química del regolito, lo cual en este caso involucra la formación observada de moléculas de agua, y que pueden llevar a cambios en los espectros de transmisión y reflexión, sobre todo en el IR.

En conclusión, la integración de la Dinámica Molecular en el modelo híbrido MC/MD ha sido fundamental para desentrañar la física subyacente de la interacción protón-regolito. Esta metodología nos permite interpretar mejor las mediciones de ENA y hacer predicciones para otros cuerpos sin atmósfera, como Mercurio, donde se esperan futuras observaciones de misiones como BepiColombo.

**Palabras clave:** Átomos Neutros Energéticos (ENA), Viento Solar, Luna, Mercurio, Regolito, Dinámica Molecular (MD), Monte Carlo (MC), ReaxFF, Chandrayaan, IBEX, BepiColombo.