



Observatório
Nacional

TESE DE DOUTORADO

FORMAÇÃO DE MERCÚRIO VIA COLISÕES EROSIVAS ENVOLVENDO
CORPOS DE MASSAS SIMILARES

PATRICK FRANCO DE OLIVEIRA

RIO DE JANEIRO

2023

Ministério da Ciência, Tecnologia e Inovação
Observatório Nacional
Programa de Pós-Graduação

Tese de Doutorado

FORMAÇÃO DE MERCÚRIO VIA COLISÕES EROSIVAS ENVOLVENDO
CORPOS DE MASSAS SIMILARES

por

Patrick Franco de Oliveira

Tese submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-graduação em Astronomia do Observatório Nacional, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Grau de Doutor em Astronomia.

Orientador: Dr. Fernando Virgilio Roig

Co-orientador: Prof. Dr. Othon Cabo Winter

Rio de Janeiro, RJ – Brasil
Abril de 2023

F825

Franco de Oliveira, Patrick

Formação de Mercúrio via colisões erosivas envolvendo corpos de massas similares [Rio de Janeiro] 2023.

xvii, 72 p. 29,7 cm: graf. il. tab.

Tese (doutorado) - Observatório Nacional - Rio de Janeiro, 2023.

1. planetas terrestres. 2. planetas: formação. 3. planetas: composição. 4. métodos numéricos. I. Observatório Nacional. II. Título.

CDU 523.41

“FORMAÇÃO DE MERCÚRIO VIA COLISÕES EROSIVAS ENVOLVENDO
CORPOS DE MASSAS SIMILARES”

PATRICK FRANCO DE OLIVEIRA

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ASTRONOMIA DO OBSERVATÓRIO NACIONAL COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM ASTRONOMIA.

Aprovada por:

Dr. Fernando Virgilio Roig – ON
(Orientador)

Prof. Dr. Othon Cabo Winter – FEG/UNESP
(Co-orientador)

Prof. Dr. Ernesto Vieira Neto – FEG/UNESP

Dra. Maria Paula Ronco – FCAGLP/UNLP e
IALP/CONICET, Argentina

Dr. Roberto Vieira Martins – ON

Dr. Rodney da Silva Gomes – ON

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

17 DE ABRIL DE 2023

*Dedico este trabalho ao meu pai
Josias Franco (In Memoriam).*

Agradecimentos

Agradeço a todas as pessoas que contribuíram para a realização desta tese de doutorado, tornando este momento possível:

Ao meu orientador(a) *Fernando Virgilio Roig*, pela orientação cuidadosa, incentivo, parceria e enorme paciência durante todo o período da pesquisa. Sua sabedoria, experiência e orientação foram fundamentais para a realização deste trabalho.

Ao meu coorientador(a) *Othon Cabo Winter*, pela orientação construtiva, incentivo e criatividade. Sua sabedoria, experiência e orientação foram igualmente fundamentais para a realização deste trabalho.

Aos colaboradores do artigo subjacente à essa tese, os doutores *Rafael Sfair*, *Christoph Burger* e *Christoph Schäfer*, pela pronta colaboração e otimização enorme do trabalho, que pra além da qualidade ajudaram a aumentar a minha motivação para persistir e concluir este estudo.

À minha família, em especial à minha mãe *Terezinha*, pelo apoio. Vocês são o principal motivo para todas as minhas conquistas durante toda a minha trajetória acadêmica e de vida.

À minha namorada Mariana e amigos, pelo incentivo, motivação e momentos de descontração que me ajudaram a manter o equilíbrio emocional durante os momentos mais desafiadores deste percurso.

Aos professores e colegas do *Observatório Nacional*, pela troca de conhecimentos, debates e reflexões que enriqueceram minha formação acadêmica e pessoal.

À agência de fomento *CNPq* pelo suporte financeiro e tornou todo este projeto possível.

À *Universidade Estadual Paulista - Campus de Guaratinguetá*, pelo suporte técnico e disponibilização dos computadores que produziram nossos resultados e da ciência subjacente com o suporte das agências de fomento FAPESP e CAPES.

Ao meu cachorro *Sebaztião*, pela persistente companhia e alegria que tornaram o processo menos exaustivo.

À todos estes, meu muito obrigado!

Patrick Franco de Oliveira

Patrick Franco de Oliveira

FORMAÇÃO DE MERCÚRIO VIA COLISÕES EROSIVAS ENVOLVENDO
CORPOS DE MASSAS SIMILARES

RESUMO

A origem de Mercúrio ainda permanece pouco compreendida em comparação com os outros planetas rochosos do Sistema Solar. Uma das condicionantes mais relevantes que qualquer modelo de formação tem de cumprir refere-se à sua estrutura interna, com um núcleo predominantemente de ferro coberto por uma fina camada de silicato. Isso levou à ideia de que Mercúrio poderia ser o produto de um evento de remoção do manto por um impacto gigante. Estudos anteriores nesta linha focaram em colisões binárias envolvendo corpos de massas muito diferentes. No entanto, tais colisões são realmente raras em simulações de N-corpos de formação de planetas terrestres, enquanto colisões envolvendo corpos de massa semelhantes resultam ser bem mais frequentes. Neste trabalho, realizamos simulações hidrodinâmicas com SPH para investigar as condições sob as quais as colisões de corpos de massas semelhantes são capazes de formar um planeta análogo a Mercúrio. Nossos resultados mostram que tais colisões podem cumprir as restrições necessárias, em termos de valores de massa ($0,055 M_{\oplus}$) e composição (30/70 razão de massa de silicato/ferro), dentro de uma tolerância menor que 5%, desde que os ângulos e velocidades de impacto sejam devidamente ajustados de acordo com leis de escala bem estabelecidas.

Patrick Franco de Oliveira

FORMING MERCURY BY A GRAZING GIANT COLLISION INVOLVING
SIMILAR MASS BODIES

ABSTRACT

The origin of Mercury still remains poorly understood compared to the other rocky planets of the Solar System. One of the most relevant constraints that any formation model has to fulfill refers to its internal structure, with a predominant iron core covered by a thin silicate layer. This led to the idea that it could be the product of a mantle stripping event by a giant impact. Previous studies in this line focused on binary collisions involving bodies of very different masses. However, such collisions are actually rare in N-body simulations of terrestrial planet formation, while collisions involving similar mass bodies appear to be more frequent. Here, we perform smooth particle hydrodynamics simulations to investigate the conditions under which collisions of similar mass bodies are able to form a Mercury-like planet. Our results show that such collisions can fulfill the necessary constraints in terms of mass ($0.055 M_{\oplus}$) and composition (30/70 silicate-to-iron mass ratio) within less than 5%, as long as the impact angles and velocities are properly adjusted according to well established scaling laws.

Lista de Figuras

1.1	Comparação estrutural dos planetas terrestres do Sistema Solar. . .	2
1.2	Exemplo de simulação numérica hidrodinâmica de uma colisão <i>hit-and-run</i>	4
1.3	Comparação entre o manto do que seria o proto-Mercúrio ($A+B$) e o manto do Mercúrio atual (B).	4
1.4	Resultados de simulações de impacto para a formação de Mercúrio a partir de estudos anteriores. Gráfico da razão de ferro em função da massa final do aglomerado remanescente normalizada pela massa de Mercúrio.	6
2.1	Representação esquemática da definição do maior fragmento . . .	16
2.2	Configuração geométrica de uma colisão numa perspectiva lateral.	19
2.3	Esquema do impacto numa perspectiva frontal (na direção do movimento relativo), para análise da região que interage entre o projétil e o alvo.	21
2.4	Exemplo de diagrama dos regimes de colisão determinados a partir das leis de escala.	22
2.5	Número de colisões do tipo <i>hit-and-run</i> em simulações de N-corpos para acreção de planetas terrestres no Sistema Solar.	25
2.6	Parâmetros de impacto iniciais estipulados pelas leis de escala. . .	28
2.7	Exemplo de implementação do cálculo da classe modal em R. . . .	33
2.8	Exemplo de implementação do cálculo da esfera modal em R. . . .	33
2.9	Exemplo de implementação do cálculo da massa final e da razão de massa do remanescente do projétil em R.	34
3.1	Exemplo de simulação do grupo AC.	43
3.2	Exemplo de simulação do grupo AD.	44
3.3	Exemplo de simulação do grupo AF.	45
3.4	Exemplo de simulação do grupo BC.	46
3.5	Exemplo de simulação do grupo BD.	47
3.6	Exemplo de simulação do grupo BF.	48

3.7	Síntese dos resultados das simulações do Grupo A.	49
3.8	Síntese dos resultados das simulações do Grupo B.	50
3.9	Comparativo em termos de resolução das simulações.	51
3.10	Distribuição temporal de colisões em regimes de acreção e de <i>hit-and-run</i> registrados em simulações N-corpos.	52
3.11	Comparação entre o modelo de ANEOS mais recente para forsterita e um modelo de Tillotson para olivina.	53
3.12	Exemplo de simulação usando as equações de estado de Tillotson.	54

Lista de Tabelas

2.1	Parâmetros para os materiais considerados nas simulações.	14
2.2	Estatística das colisões registradas nas simulações de N-corpos, categorizadas mediante as leis de escala.	24
3.1	Resultados das diferentes configurações de impacto simuladas. . .	37

Conteúdo

Lista de Figuras	xiii
Lista de Tabelas	xv
1 Introdução	1
2 Metodologia	9
2.1 Hidrodinâmica de Partículas Suavizadas (SPH)	9
2.2 Equações Analíticas de Estado (ANEOS)	11
2.3 Modelo de Plasticidade	12
2.4 Modelo de dano	13
2.5 Leis de escala	14
2.5.1 Regime de ruptura do projétil	18
2.6 Colisões em discos de acreção	23
2.7 Condições iniciais das simulações	26
2.8 Tratamento dos resultados das simulações	31
3 Resultados	35
3.1 Dependência com os ângulos de impacto	37
3.2 Dependência da resolução da simulação	38
3.3 Reacção do material ejetado	39
3.4 Efeitos sobre o alvo	40
3.5 ANEOS vs. Tillotson	41
4 Discussão e conclusões	55
4.1 Considerações finais	58
Bibliografia	61

Capítulo 1

Introdução

O planeta Mercúrio é um dos planetas mais complexos do Sistema Solar interior. Durante décadas, estudos têm se esforçado para entender sua estrutura interna, geologia e atmosfera. A missão Mariner 10 foi a primeira missão espacial a fazer *flybys* por Mercúrio e forneceu uma visão inicial da superfície do planeta. Entre as principais observações da missão, destacam-se a descoberta de que Mercúrio possui um campo magnético fraco em comparação ao terrestre (ex. [NESS *et al.*, 1974](#)) e a descoberta de que a superfície de Mercúrio é coberta de crateras e montanhas, semelhante à superfície lunar (ex. [MURRAY, 1975](#)).

Após três décadas sem missões para Mercúrio, a missão MESSENGER (*MERcury Surface, Space ENVIRONMENT, GEOchemistry, and RANGing*) foi a primeira a orbitar o planeta e forneceu uma visão ainda mais detalhada sobre a composição química da sua superfície, geologia, campo magnético e estrutura interna. Hipóteses sobre a formação do planeta Mercúrio tornaram-se ainda mais contraditórias com o advento das observações espectroscópicas de raios gama da missão MESSENGER. Além da alta densidade de Mercúrio ($5,43 \text{ g cm}^{-3}$), há longo tempo conhecida e investigada e devida à uma alta fração de ferro que corresponde a $\sim 70\%$ de sua massa (ex. [AGNOR e ASPHAUG, 2004](#); [ASPHAUG, 2014](#); [BENZ *et al.*, 1988, 2007](#); [CAMERON *et al.*, 1988](#); [EBEL e STEWART, 2018](#); [SIEGFRIED e SOLOMON, 1974](#); [UREY, 1951](#), conferir Fig. 1.1)¹, dados da missão MESSENGER revelaram que a superfície de Mercúrio não demonstra um empobrecimento de elementos moderadamente voláteis, tais como Na, S, K e Cl, apesar de sua fina camada de manto. Ao contrário, estes elementos são abundantes e se encontram presentes em diversas regiões em sua superfície ([EVANS *et al.*, 2015](#); [NITTLER *et al.*, 2011](#); [PEPLOWSKI *et al.*, 2011, 2012, 2014](#); [WEIDER](#)

¹Mercúrio é o segundo planeta mais denso do Sistema Solar, perdendo apenas para a Terra. Embora a Terra tenha uma densidade média um pouco maior, as pressões no seu interior são muito altas. Se medíssemos a densidade não comprimida da Terra seria de $4,2 \text{ g cm}^{-3}$, enquanto que a de Mercúrio seria $5,4 \text{ g cm}^{-3}$.

et al., 2012, 2015). A missão também revelou que a superfície do planeta Mercúrio apresenta uma razão de potássio-tório, K/Th, similar à dos outros planetas terrestres do Sistema Solar (PEPLOWSKI *et al.*, 2011; RINGWOOD e KESSON, 1977; SOLOMON e ANDERSON, 2018; TAYLOR, 1982). Reconciliar a estrutura geofísica e a composição volátil de Mercúrio simultaneamente, dentro de um modelo de formação unificado, constitui o chamado “problema de Mercúrio”, que tem provado ser extremamente desafiador (EBEL e STEWART, 2018).

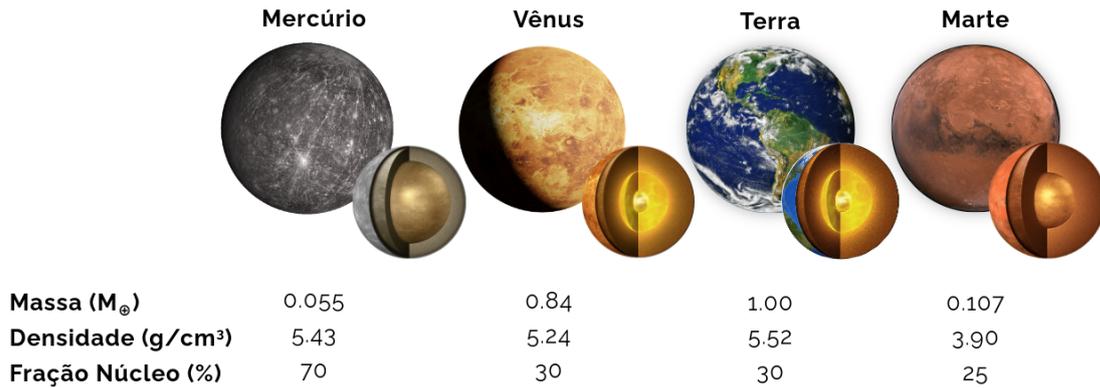


Figura 1.1: Comparação estrutural dos planetas terrestres do Sistema Solar. Os valores da fração de núcleo são baseados em DYCK *et al.* (2021); LAURETTA e MCSWEEN (2006); SOLOMON e ANDERSON (2018); SZURGOT (2015).

Reproduzir a massa de Mercúrio também constitui um grande desafio para os estudos de formação planetária baseados em simulações numéricas de N-corpos, que buscam reproduzir, tanto quanto possível, os diferentes vínculos do Sistema Solar interior (ex. CARTER *et al.*, 2015; CHAMBERS, 2001, 2013; CHAMBERS e WETHERILL, 1998; IZIDORO *et al.*, 2013, 2014; LEINHARDT *et al.*, 2015; LYKAWKA, 2020; NESVORNÝ *et al.*, 2021; WETHERILL, 1986, 1991). Nessas simulações, poucos corpos se formam na região atualmente ocupada por Mercúrio, e aqueles que se formam são frequentemente mais massivos que Mercúrio (ex. CLEMENT *et al.*, 2019a, 2023; FRANCO *et al.*, 2022; IZIDORO e RAYMOND, 2018; IZIDORO *et al.*, 2015; LYKAWKA e ITO, 2017; RAYMOND *et al.*, 2009).

Isto se deve, em parte, às distribuições iniciais de massa utilizadas nos discos protoplanetários simulados e em parte também ao tratamento das colisões, normalmente assumidas como perfeitamente inelásticas, em que os corpos colidores formam um novo corpo no sistema cuja massa resultante corresponde à soma de suas massas individuais enquanto que o momento linear se conserva (ex. CHAMBERS, 1999; DUNCAN *et al.*, 1998). No entanto, mesmo em simulações em que a fragmentação por colisão e a perda de massa associada são levadas em consideração, através da aplicação de leis de escala, os resultados não mostram uma

melhora significativa na massa final resultante para corpos semelhantes a Mercúrio (ex. CHAMBERS, 2013; EMSENHUBER *et al.*, 2020). O uso de simulações híbridas, que combinam algoritmos de N-corpos para simular a interação gravitacional distante e algoritmos hidrodinâmicos para simular as colisões binárias individuais (BURGER *et al.*, 2020a), contribuem parcialmente para superar esse problema.

Uma das hipóteses propostas para explicar a peculiar estrutura interna de Mercúrio é justamente a de que uma porção substancial de seu manto primordial teria sido removida como resultado de colisões em escala planetária, seja num único evento decisivo ou por meio de múltiplos impactos erosivos (ver por exemplo ASPHAUG, 2010). O cenário de impacto gigante denominado “canônico”, que consiste num único impacto gigante frontal entre um proto-Mercúrio com 2,25 vezes a massa atual do planeta e um corpo menor (projétil) com um sexto da massa do proto-Mercúrio (BENZ *et al.*, 1988, 2007), conseguiu provocar a remoção do manto do proto-Mercúrio. No entanto, além do problema da reacção de parte do silicato ejetado após o impacto, este cenário de impacto energético ainda exige que o projétil esteja numa órbita excêntrica extrema, o que é raro de acontecer em simulações de formação de planetas terrestres (CLEMENT *et al.*, 2019b; EBEL e STEWART, 2018; JACKSON *et al.*, 2018; O’BRIEN *et al.*, 2006; STEWART *et al.*, 2016).

Para evitar esses problemas, estudos posteriores sugeriram a ocorrência de uma colisão oblíqua, no chamado de regime de *hit-and-run* (bater e fugir, por analogia com uma batida de automóveis), no qual o proto-Mercúrio atua como projétil atingindo um corpo muito maior numa configuração rasante e perde uma quantidade significativa de material do manto, escapando posteriormente da região do impacto e evitando assim a reacção do material ejetado (ex. ASPHAUG e REUFER, 2014; CHAU *et al.*, 2018; SARID *et al.*, 2014, ver Fig. 1.2). A Fig. 1.3 mostra uma comparação de tamanho entre o proto-Mercúrio e o atual Mercúrio, onde podemos perceber visualmente a quantidade de material do manto que o primeiro corpo precisaria perder numa colisão segundo as hipóteses que encontramos na literatura.

Hipóteses alternativas para a formação de Mercúrio, que não invocam eventos de impacto gigante, sugerem que o planeta já tinha uma composição rica em ferro no início das fases finais da formação dos planetas terrestres. Esta composição seria decorrente da condensação *in loco* de elementos químicos mais pesados, como o ferro metálico, durante os primeiros estágios de acreção do disco protoplanetário (EBEL e ALEXANDER, 2011; KRUSS e WURM, 2018, 2020; PIGNATALE *et al.*, 2016; WURM *et al.*, 2013).

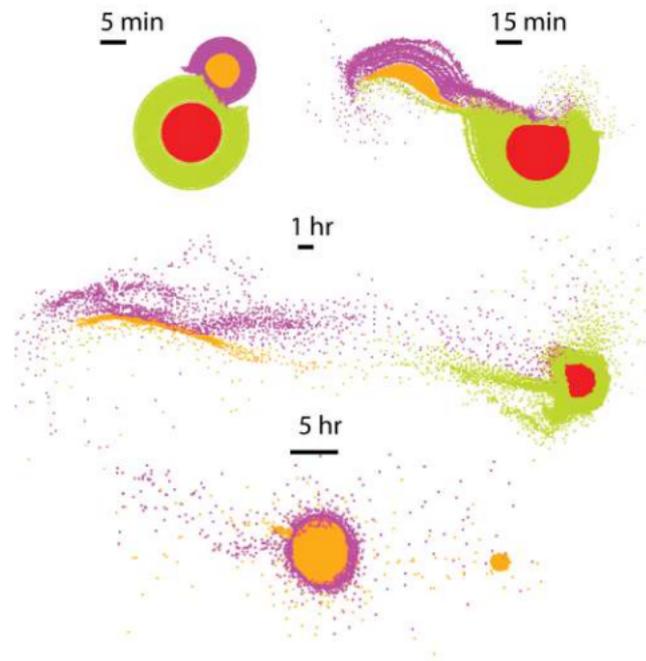


Figura 1.2: Exemplo de simulação numérica hidrodinâmica de uma colisão *hit-and-run*.

O proto-Mercúrio (laranja e lilás) impacta de forma oblíqua um corpo muito mais massivo (vermelho e verde) perdendo boa parte do seu manto. Fonte: SARID *et al.* (2014).

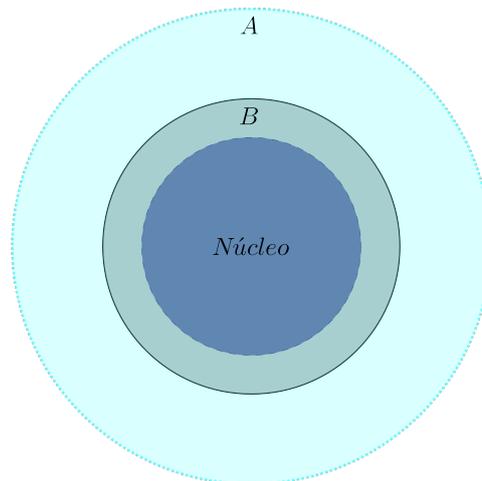


Figura 1.3: Comparação entre o manto do que seria o proto-Mercúrio ($A+B$) e o manto do Mercúrio atual (B).

Neste trabalho de tese estamos interessados nas colisões de *hit-and-run*. Este regime de colisão corresponde tipicamente a quase um terço de todas as colisões registradas em simulações numéricas da evolução de discos protoplanetários

utilizando códigos de N-corpos (ex. FRANCO *et al.*, 2022; STEWART e LEINHARDT, 2012, ver também a seção 2.6). Entretanto, estudos recentes (BURGER *et al.*, 2020a; CLEMENT *et al.*, 2019a,b, 2021; FRANCO *et al.*, 2022), indicam que colisões de tipo *hit-and-run* são eventos relativamente improváveis envolvendo corpos com uma razão de massas alvo/projétil de ~ 10 com um projétil acima de 2 vezes mais massivo que Mercúrio, conforme exigido, por exemplo, por ASPHAUG e REUFER (2014). Além disso, tais colisões também exigiriam órbitas excêntricas extremas (CLEMENT *et al.*, 2019b; JACKSON *et al.*, 2018), como no modelo canônico. Isto porque, em geral, as colisões de um proto-Mercúrio atingindo um alvo do tamanho da Terra ocorrem em velocidades comparativamente baixas, resultando normalmente em acreção dos dois corpos em vez de um regime de *hit-and-run* erosivo.

Por outro lado, num trabalho recente, nós observamos em simulações de N-corpos uma maior ocorrência de impactos gigantes oblíquos envolvendo corpos de massas similares. Nestes casos, projéteis de aproximadamente o tamanho de Marte costumam colidir com alvos apenas 1,5 a 4,0 vezes mais massivos (FRANCO *et al.*, 2022). Este tipo de cenário foi explorado pela primeira vez por CHAU *et al.* (2018); SARID *et al.* (2014) e, embora as colisões em geral tendam a ter um caráter estocástico em simulações numéricas, é possível concluir que os impactos de *hit-and-run* são mais comuns sob certas configurações ou parâmetros dos modelos (ver Fig. 2.5). Cabe destacar que colisões de tipo *hit-and-run* entre corpos de tamanho semelhantes demonstram ser frequentes em modelos de N-corpos considerando-se várias restrições dinâmicas (CLEMENT *et al.*, 2021).

O nosso objetivo neste trabalho é mostrar que, enquanto os cenários de *hit-and-run* investigados no passado representam ocorrências improváveis em simulações de N-corpos, o cenário de *hit-and-run* considerando corpos de massas similares e colisões em baixas velocidades se apresenta como muito mais promissor para produzir análogos de Mercúrio.

Como mencionado anteriormente, o cenário de colisões entre corpos de massas similares foi parcialmente explorado por CHAU *et al.* (2018); SARID *et al.* (2014) através de simulações hidrodinâmicas. A abordagem nesses estudos foi considerar um espaço paramétrico que varre vários cenários de colisão, testando um grande número de combinações de parâmetros de impacto, como as massas dos corpos, velocidades relativas e ângulos de impacto (ex. GABRIEL *et al.*, 2020). Tais estudos são computacionalmente caros e, em geral, não visam testar configurações de impacto mais específicas que levariam a formar bons análogos de Mercúrio. Como consequência, mesmo considerando razões de massa plausíveis, os estudos de CHAU *et al.* (2018); SARID *et al.* (2014) fornecem apenas poucos casos de

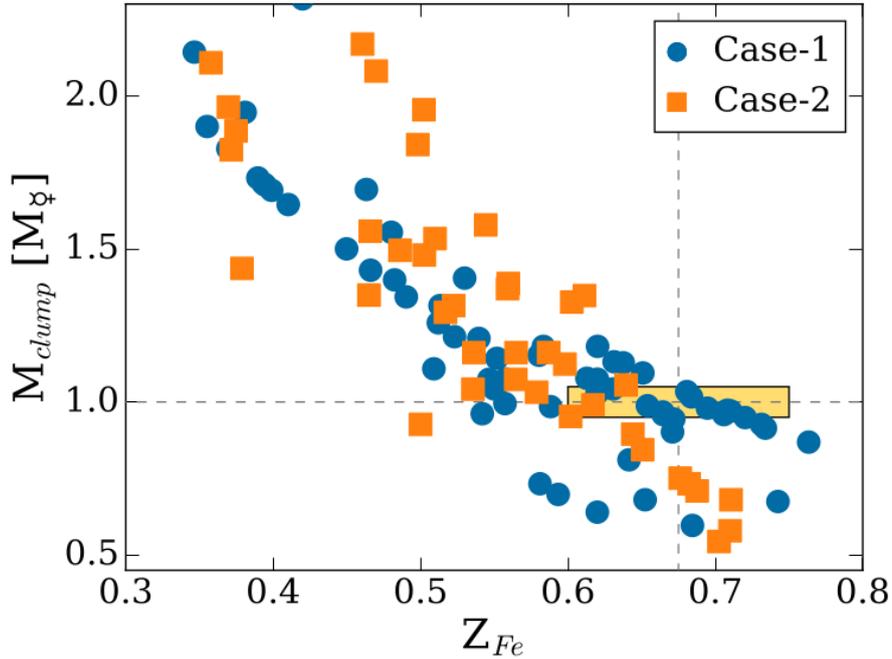


Figura 1.4: Resultados de simulações de impacto para a formação de Mercúrio a partir de estudos anteriores. Gráfico da razão de ferro em função da massa final do aglomerado remanescente normalizada pela massa de Mercúrio.

Caso-1 corresponde ao cenário canônico (colisão em alta velocidade). Caso-2 ao cenário *hit-and-run* (colisão em baixa velocidade). Fonte: CHAU *et al.* (2018).

sucesso. Além disso, como os casos de sucesso decorrem de um processo aleatório de tentativa e erro, se a razão de massas muda os autores seriam obrigados a executar uma nova série de simulações para achar os respectivos casos de sucesso.

O trabalho de CHAU *et al.* (2018) é sintetizado no gráfico apresentado na Fig. 1.4. Nele estão todas as simulações desses autores, divididas em dois casos: o Caso-1 (círculos azuis) se refere ao cenário onde o proto-Mercúrio é o alvo e é atingido por um corpo menor, tal como o cenário canônico proposto por BENZ *et al.* (2007). Nesse caso, as velocidades de colisão são, em média, mais altas. O Caso-2 (quadrados laranjas) corresponde às simulações cujo cenário é igual ao que adotamos aqui, no regime de impacto de *hit-and-run* com baixas velocidades. O gráfico mostra os resultados de ambos os cenários com as massas dos remanescentes (M_{clump}), em massas de Mercúrio, em função de suas razões finais de ferro (Z_{Fe}). O retângulo amarelo no gráfico representa a região de sucesso de Mercúrio, com $0.6 < Z_{Fe} < 0.75$ e massas finais dentro de $\pm 5\%$ de tolerância em relação à massa atual de Mercúrio. Notamos que no Caso-2 há uma dificuldade em conseguir bons análogos de Mercúrio.

Em contraste com as abordagens mencionadas anteriormente, neste trabalho de tese nós investigamos as configurações específicas que são capazes de reproduzir corretamente a estrutura de Mercúrio, tanto em termos de massa total como de fração de massa do núcleo, impondo limites bem estreitos para a obtenção de casos de sucesso. Nossa estratégia consiste em estimar *a priori* os parâmetros de impacto adequados, em particular as velocidades relativas e os ângulos de impacto, usando leis de escala bem estabelecidas (LEINHARDT e STEWART, 2012) que fornecem: (i) a energia de impacto mais baixa possível para cada configuração, correspondendo assim à energia de colisão média observada em simulações de discos protoplanetários (baixas velocidades de impacto) e (ii) o segundo maior fragmento remanescente da colisão com uma massa semelhante à do atual Mercúrio.

Realizamos uma série de simulações de colisões de tipo *hit-and-run* utilizando um código de hidrodinâmica de partículas suavizadas (SPH, do inglês *Smoothed Particles Hydrodynamics*). Nestas simulações consideramos alvos com diferentes tamanhos/massas iniciais e diferentes frações de massa núcleo-manto. A metodologia aplicada neste estudo é descrita no capítulo 2. Nossos resultados são apresentados e comentados no capítulo 3. Finalmente, as nossas conclusões e considerações finais se encontram no capítulo 4.

Capítulo 2

Metodologia

Neste capítulo, apresentaremos inicialmente os detalhes do código hidrodinâmico que utilizamos para a realização de nossas simulações e posteriormente falaremos sobre os mecanismos que adotamos para calcular os parâmetros de impacto iniciais, em função da massa esperada para os maiores fragmentos da colisão, através das leis de escala.

2.1 Hidrodinâmica de Partículas Suavizadas (SPH)

Para modelar as colisões de corpos com dimensões planetárias nas nossas simulações utilizamos o código `miluphcuda` (SCHÄFER *et al.*, 2016, 2020). Este é um código hidrodinâmico baseado no método de SPH e está paralelizado em CUDA (*Compute Unified Device Architecture*). O código está em desenvolvimento ativo e disponível publicamente em github.com/christophmschaefer/miluphcuda.

Os métodos SPH (GINGOLD e MONAGHAN, 1977; LUCY, 1977) são uma das alternativas mais utilizadas para a simulação da dinâmica de fluidos resolvendo as equações de Navier-Stokes em 3D. Ao contrário dos métodos hidrodinâmicos de malha, em que a unidade de trabalho é uma célula normalmente fixa no espaço, os métodos SPH utilizam como unidade elementar partículas que carregam a informação das grandezas envolvidas (massa, densidade, temperatura, etc.). Pelo fato das partículas SPH poderem se movimentar espacialmente, estes métodos tem resultado particularmente úteis para modelar a dinâmica de fluidos muito densos em 3D e são os métodos escolhidos para simular colisões entre corpos sólidos. A primeira aplicação astrofísica de SPH levando em consideração a resistência interna do material modelado foi realizada por BENZ e ASPHAUG (1994).

Em SPH, as partículas interagem entre si através de um processo de convolução, envolvendo uma dada função distribuição denominada de *kernel*. A função *kernel* determina a influência de uma partícula sobre suas vizinhas e é usada para calcular a densidade e pressão do fluido na posição de cada partícula da vizinhança. O movimento da partícula é então determinado pelas forças resultantes atuando sobre ela, como pressão, viscosidade e gravidade (BENZ e ASPHAUG, 1999). O *kernel* é sempre uma distribuição $\delta(x) \geq 0$ simétrica e de suporte compacto (ou seja, é igual a zero para valores do domínio $|x| > x_{\max}$).

O método SPH consiste numa abordagem Lagrangiana das equações hidrodinâmicas que acompanha o movimento das partículas individuais em vez de resolver as equações diferenciais parciais por diferenças finitas em uma grade fixa. Ele pode ser resumido da seguinte forma:

- Inicialmente se faz a representação por partículas do domínio do problema. Caso o problema seja contínuo, deve-se usar algum método para criar as partículas, que podem ser pensadas como regiões do domínio original em que se tem interesse de saber o valor das grandezas. Caso o domínio inicial já seja discreto, cada ponto do domínio discreto, ou cada subconjunto de pontos, constitui por si só uma partícula SPH.
- O segundo passo é a aproximação de *kernel* das funções de interesse (densidade, pressão, temperatura, etc.). Cada função de interesse é avaliada nas partículas criadas no passo anterior. Primeiro, se usa o método de representação integral das funções de interesse em todo o domínio original do problema e posteriormente é aplicada a aproximação do *kernel*, que consiste na substituição das funções originais por funções suavizadas (convolução).
- O terceiro passo é a aproximação por partículas das funções de interesse. Aqui a integral que aproxima cada função é substituída por um somatório discreto dos valores dessa função nas partículas adjacentes.
- Finalmente, substituindo-se a aproximação por partículas das funções nas equações diferenciais originais, obtém-se um conjunto de equações diferenciais ordinárias como função apenas do tempo, que podem ser resolvidas usando métodos numéricos clássicos, como Runge-Kutta.

Uma descrição completa da função *kernel* utilizada, bem como das demais equações que compõem o algoritmo de SPH implementado no código `miluphcuda` podem ser encontradas no artigo de SCHÄFER *et al.* (2016).

2.2 Equações Analíticas de Estado (ANEOS)

Uma das principais equações que precisam ser levadas em consideração na dinâmica de fluidos é a denominada equação de estado. Esta equação estabelece uma relação entre as variáveis termodinâmicas do problema, em particular a densidade ρ , a pressão P , e a energia específica interna u (ou equivalentemente, a temperatura T). A equação de estado apresenta, em geral, uma forma analítica simples no caso dos gases, mas adota uma forma bastante complexa no caso de fluidos densos ou sólidos, que requer lançar mão de uma representação tensorial.

Em nosso trabalho, utilizamos as equações analíticas de estado M-ANEOS (*Modified ANalytical Equations Of State*; MELOSH, 2007) para modelar a resposta termodinâmica dos materiais. Trata-se de um complexo código computacional que calcula as equações de estado e cuja versão mais recente foi modificada e melhorada em relação à versão original, para permitir incluir o uso de materiais geológicos (COLLINS e MELOSH, 2014; MELOSH, 2007). Por ser uma das aproximações mais precisas existentes, o pacote de equações de estado ANEOS é amplamente utilizado nas mais recentes simulações de impactos gigantes. Em comparação com outras representações analíticas mais simples das equações de estado (ver seção 3.5), ele possui algumas vantagens como a consistência termodinâmica, a definição dos limites de fase, um tratamento melhor do vapor e a capacidade de cálculo da temperatura e da entropia.

As equações de ANEOS são baseadas num conjunto de aproximações analíticas em partes diferentes do espaço de fase termodinâmico, usadas para o cálculo da física do impacto. Na estrutura fundamental de ANEOS, a expressão para a energia livre de Helmholtz $F(\rho, T)$, potencial termodinâmico que mensura a parcela de energia interna de um sistema possível de ser utilizada na forma de trabalho, e em termos de suas variáveis fundamentais é decomposta em três partes:

$$F(\rho, T) = F_{\text{fria}}(\rho) + F_{\text{térmica}}(\rho, T) + F_{\text{eletrônica}}(\rho, T) \quad (2.1)$$

onde se tem: (i) uma componente fria, F_{frio} , que contém as partes das interações atômicas como uma função da compressão na temperatura de zero absoluto; (ii) uma componente térmica, $F_{\text{térmico}}$, que descreve as partes das forças interatômicas dependentes da temperatura e que, por sua vez, desaparece na temperatura do zero absoluto e se aproxima de uma equação de estado do gás ideal em altas pressões e baixas densidades; e (iii) uma componente eletrônica, $F_{\text{eletrônico}}$, que considera a ionização de elétrons e se torna importante em temperaturas muito altas e baixas densidades. Esta abordagem é vantajosa porque todas as funções termodinâmicas necessárias podem ser obtidas da energia livre de Helmholtz e de

suas derivadas e podem ser decompostas, de forma semelhante, em componentes disjuntas (fria, térmica, eletrônica; MELOSH, 2007).

O conjunto completo de expressões analíticas usadas para definir as várias componentes das funções termodinâmicas em diferentes partes do espaço de fase é descrito no manual de ANEOS de THOMPSON (1970). A versão original de ANEOS inclui uma funcionalidade que considera três transições de fase: sólido-líquido (fusão), sólido/líquido-vapor (vaporização) e uma única transição de fase sólido-sólido. No entanto, as transições de fase sólido-líquido e sólido-sólido não podem ser consideradas simultaneamente. Modificações à versão original incluem um tratamento mais preciso da fase de vapor (MELOSH, 2007), a possibilidade da inclusão simultânea da fase única de transição sólido-sólido e da fase de fusão sólido-líquido (COLLINS e MELOSH, 2014) e, mais recentemente, um ajuste da componente térmica para as fases sólida e líquida (STEWART *et al.*, 2020).

2.3 Modelo de Plasticidade

O modelo de ANEOS é combinado com um limite de resistência de von Mises (VON MISES, 1913) para modelar o comportamento plástico dos materiais quando uma tensão suficientemente alta é aplicada, ou seja, quando o material sofre uma deformação permanente. Este modelo se baseia em fazer uma redução do tensor de tensão de cisalhamento (*deviatoric stress tensor*) por um fator f (SCHÄFER *et al.*, 2016), tal que:

$$S^{\alpha\beta} \rightarrow fS^{\alpha\beta}, \quad (2.2)$$

Um estado de tensão pode ser decomposto em duas partes: a tensão hidrostática e a tensão de cisalhamento. A tensão hidrostática é simplesmente a média das três componentes de tensão normal de qualquer tensor de tensão. A tensão de cisalhamento $S^{\alpha\beta}$ descreve a componente do tensor de tensão, $\sigma_{\alpha\beta}$, que está relacionada com a mudança da estrutura no material, isto é:

$$\sigma_{\alpha\beta} = -p\delta_{\alpha\beta} + S_{\alpha\beta}, \quad (2.3)$$

onde $-p\delta_{\alpha\beta}$ representa a componente de pressão e $\delta_{\alpha\beta}$ é a delta de Kronecker. α e β são os índices da matriz de tensão.

O fator de redução f é dado por:

$$f = \min\left(\frac{Y_0^2}{3J_2}, 1\right), \quad (2.4)$$

onde Y_0 é o denominado limite de resistência, que dependente do material e também de outros fatores como temperatura e densidade. Em nosso trabalho, adotamos valores do limite de resistência de 10,5 GPa para o ferro e 3,5 GPa para o basalto (MELOSH, 1989). J_2 é o segundo invariante de $S^{\alpha\beta}$, definido como:

$$J_2 = \frac{1}{2} S^{\alpha\beta} S^{\alpha\beta}, \quad (2.5)$$

que é uma medida da intensidade da componente de tensão de cisalhamento num material sólido.

2.4 Modelo de dano

Para uma descrição mais realista de um corpo sólido, em comparação com corpos fluidos, as nossas simulações precisam incluir a modelagem completa da resistência do material. Isto é feito utilizando o modelo de fragmentação de Grady-Kipp para o manto de basalto (BENZ e ASPHAUG, 1995; GRADY e KIPP, 1980). Este modelo se baseia na distribuição probabilística de falhas (*failures*) dentro do corpo, que é representada pelo número n de falhas por unidade de volume cuja deformação é menor que uma dada deformação limite ϵ , definida pelo usuário:

$$n(< \epsilon) = k\epsilon^m \quad (2.6)$$

(WEIBULL, 1939) onde os valores das constantes de Weibull para o basalto são $k = 5 \times 10^{34}$ e $m = 8,5$ (MELOSH, 1989).

A deformação escalar local ϵ determina-se a partir da máxima tensão elástica (*tensile stress*) tridimensional, $\sigma_{\max} = \max(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$, onde σ_j são os termos diagonais do tensor de tensão $\sigma_{\alpha\beta}$:

$$\epsilon = \frac{\sigma_{\max}}{(1-d)E}, \quad (2.7)$$

Nesta expressão, E é o módulo de Young do material intacto, que depende da resistência do material à compressão e ao cisalhamento, e $0 \leq d \leq 1$ é o *dano*, que quantifica a influência das rachaduras num determinado volume. Desta forma, $d = 0$ representa um material intacto, sem danos, e $d = 1$ representa um material completamente danificado que não consegue sofrer mais nenhuma tensão (SCHÄFER *et al.*, 2016). O dano evolui seguindo uma equação diferencial que depende da densidade do material ρ_0 , do módulo volumétrico na pressão zero K_0 , e do módulo de cisalhamento μ_c .

Na prática, as deformações limite são atribuídas às partículas SPH antes da

simulação ser executada exigindo-se que

$$k\epsilon_i^m V = i, \quad (i = 1, 2, 3, 4, \dots) \quad (2.8)$$

em que o lado esquerdo da equação representa o número de falhas com limites de deformação menores que ϵ_i considerando o volume global V . Da equação 2.8 obtemos

$$\epsilon_i = \left(\frac{i}{kV} \right)^{1/m} \quad (2.9)$$

que permite calcular uma sequência crescente de deformações limites ϵ_i , cada uma das quais é atribuída às partículas SPH em forma aleatória. Este procedimento deve ser repetido até que cada partícula SPH tenha atribuída pelo menos uma deformação limite, para evitar a ocorrência de regiões indestrutíveis. A fratura então começa quando uma partícula sofre uma deformação ϵ maior que o seu limite de deformação (BENZ e ASPHAUG, 1995).

Em outras palavras, se uma força aplicada a um corpo sólido é alta o suficiente para quebrar as ligações atômicas, o material começa a se fraturar e a desenvolver rachaduras. Quando uma única rachadura não consegue suportar um aumento da tensão, mais falhas são ativadas, resultando em mais rachaduras e, consequentemente, em mais danos (SCHÄFER *et al.*, 2016). A Tabela 2.1 apresenta os valores adotados em nosso estudo para os parâmetros discutidos nesta seção.

Tabela 2.1: Parâmetros para os materiais considerados nas simulações.

Material	m	k (m^{-3})	ρ_0 (kg m^{-3})	α	β	μ_c (GPa)	K_0 (GPa)	Y_0 (GPa)
Ferro	-	-	7850	1	2	105,0	113,5	10,5
Basalto	8,5	5×10^{34}	2860	1	2	22,7	19,3	3,5

Nota: m e k são as constantes de Weibull; ρ_0 é a densidade inicial; α e β são os parâmetros para viscosidade artificial, para tratar a dissipação da velocidade cinética das ondas de choque; μ_c é o módulo de cisalhamento, uma medida da rigidez de cisalhamento elástico de um material; K_0 é o módulo volumétrico na pressão zero, uma medida da resistência do material à compressão; Y_0 é o limite de resistência de von Mises.

2.5 Leis de escala

Uma lei de escala é uma relação, analítica ou numérica, que vincula as diferentes variáveis envolvidas numa colisão binária (massas dos corpos, velocidade e ângulo de impacto, propriedades dos materiais, etc.) e que permite prever o resultado da

colisão, seja em termos de distribuição de tamanhos dos fragmentos, velocidades de ejeção, tamanho de crateras, etc. As leis de escala dependem de parâmetros que são ajustados a partir dos resultados de uma grade de simulações numéricas hidrodinâmicas, considerando-se diversas configurações e regimes possíveis para as colisões.

Nesta seção descrevemos as leis de escala que adotamos em nosso estudo e que foram utilizadas para nos auxiliar a encontrar configurações de impacto adequadas, dentro de um regime de *hit-and-run*, de modo que a massa do objeto remanescente da colisão fosse próxima à massa atual de Mercúrio.

LEINHARDT e STEWART (2012) realizaram um conjunto bastante abrangente de simulações hidrodinâmicas, considerando diferentes configurações de impacto em termos de velocidades, parâmetros de impacto, razões de massa alvo/projétil e composição dos corpos (veja-se também AGNOR e ASPHAUG, 2004; GENDA *et al.*, 2012). As autoras deduziram uma série de funções ajustadas que descrevem as distribuições de massa e velocidade dos fragmentos pós-colisão. Segundo as autoras, o resultado de um impacto pode ser classificado dentro de alguma das seguintes categorias, dependendo da velocidade do impacto v_i , do parâmetro de impacto b e da massa do maior fragmento remanescente M_{lr} :

- *Acreção*: quando a velocidade de impacto é menor do que a velocidade de escape do sistema ($v_i < v_{esc}$); nesse caso, os corpos envolvidos na colisão se fundem completamente.
- *Graze-and-merge*: quando a colisão é oblíqua ($b > b_{crit}$) e a velocidade de impacto é maior do que a velocidade de escape, mas não suficientemente alta como para evitar que, numa segunda interação, os corpos acabem se fundindo ($v_{esc} < v_i < v_{hr}$).
- *Hit-and-run*: quando a colisão é oblíqua ($b > b_{crit}$) e a velocidade de impacto é suficientemente alta como para evitar uma posterior fusão ($v_{hr} < v_i < v_{ero}$); neste caso a massa do alvo fica inalterada e corresponde à massa do maior fragmento ($M_{lr} = M_t$).
- *Acreção Parcial*: colisão não oblíqua ($b < b_{crit}$) em que os corpos se fundem parcialmente ($v_{esc} < v_i < v_{ero}$ e $M_{lr} > M_t$).
- *Erosão*: colisão onde ambos os corpos são danificados e se fundem parcialmente ($v_i > v_{ero}$ e $M_{lr} < M_t$).

Nas definições anteriores, temos que $b = \sin(\theta_i)$, sendo θ_i é o ângulo de impacto, e $b_{crit} = R_t/(R_t + R_p)$ é o parâmetro de impacto crítico, que define a transição de

impacto frontal para impacto oblíquo. As grandezas R_t e R_p são os raios físicos do alvo e do projétil, respectivamente. Por outro lado, v_{esc} , v_{hr} e v_{ero} são as velocidades de escape mútua, de *hit-and-run* e de erosão, respectivamente, que descreveremos a seguir.

A velocidade de escape mútua é dada por:

$$v_{\text{esc}} = \sqrt{\frac{2G(M_t + M_p)}{R_t + R_p}}, \quad (2.10)$$

onde G é a constante gravitacional e M_t e M_p são as massas do alvo e do projétil, respectivamente.

A velocidade de *hit-and-run* é dada por:

$$v_{\text{hr}} = v_{\text{esc}} [c_1 \zeta^2 (1 - b)^{5/2} + c_2 \zeta^2 + c_3 (1 - b)^{5/2} + c_4], \quad (2.11)$$

onde $\zeta = (M_t - M_p)/(M_t + M_p)$ e $c_1 = 2,43$, $c_2 = -0,0408$, $c_3 = 1,86$ e $c_4 = 1,08$ são obtidos por ajuste a partir de simulações hidrodinâmicas (GENDA *et al.*, 2012; KOKUBO e GENDA, 2010). O regime de *graze-and-merge* está compreendido entre as curvas de velocidade que delimitam os regimes de acreção e de *hit-and-run*.

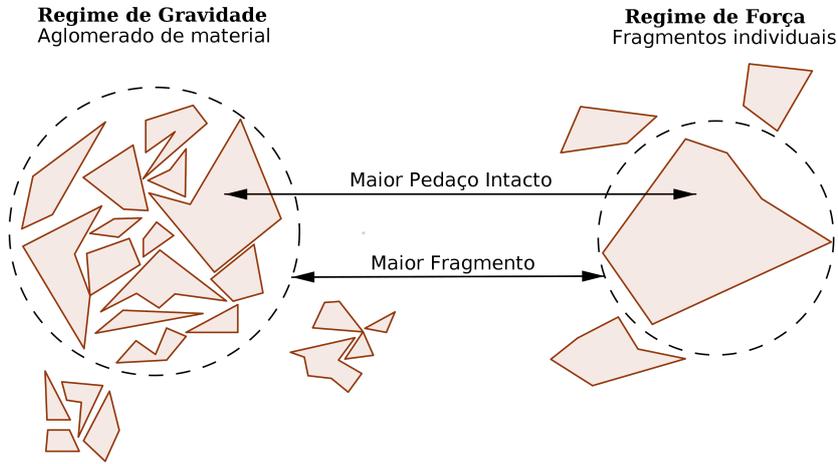


Figura 2.1: Representação esquemática da definição do maior fragmento
 No regime dominado pela gravidade (à esquerda), o maior fragmento é um aglomerado gravitacional de materiais de diferentes tamanhos. No regime dominado pela tensão (à direita), o maior fragmento é um pedaço de material intacto. Fonte: BENZ e ASPHAUG (1999).

Após o impacto, a massa do maior fragmento (*largest remnant*) M_{lr} , pode ser definida de duas formas diferentes, dependendo do regime dominante na colisão. Para colisões envolvendo corpos de grande massa, o regime dominante é o da

gravidade e, neste caso, o maior fragmento é representado pelo maior aglomerado de corpos que ficam ligados gravitacionalmente entre si (ver Fig. 2.1). Por outro lado, para colisões envolvendo corpos pouco massivos, o regime dominante é o da tensão interna e, neste caso, o maior fragmento é representado simplesmente pelo maior corpo que permanece intacto. A transição entre os dois regimes ocorre para corpos com tamanhos de entre algumas centenas de metros e alguns quilômetros (LEINHARDT e STEWART, 2012). Portanto, em nossas simulações estaremos sempre trabalhando no regime dominado pela gravidade.

Dentro deste regime, a massa do maior fragmento é estimada pela seguinte equação:

$$M_{lr} = \begin{cases} \left(1 - \frac{Q_R}{2Q_{RD}^*}\right) (M_t + M_p), & \text{se } 0 < Q_R/Q_{RD}^* < 1,8, \\ \frac{0,1}{1,8^\eta} \left(\frac{Q_R}{Q_{RD}^*}\right)^\eta (M_t + M_p), & \text{se } Q_R/Q_{RD}^* \geq 1,8, \end{cases} \quad (2.12)$$

onde $\eta \sim -1,5$ é um coeficiente obtido por ajuste a partir de simulações hidrodinâmicas (LEINHARDT e STEWART, 2012) e Q_R/Q_{RD}^* é a energia do impacto normalizada pelo critério de ruptura catastrófica, ou seja, a energia específica de impacto necessária para dispersar metade da massa total envolvida na colisão.

Leinhardt e Stewart apresentam um *script* completo para determinar as velocidades de impacto que delimitam cada um dos regimes de colisão, bem como o critério de ruptura catastrófica, também chamado de energia específica crítica, que é definido como:

$$Q_{RD}^* = \left(\frac{\mu}{\mu_\alpha}\right)^{2-3\bar{\mu}/2} Q_{RD}^*, \quad (2.13)$$

onde $\mu = M_p M_t / (M_t + M_p)$ é a massa reduzida do sistema, $\mu_\alpha = \alpha M_p M_t / (\alpha M_p + M_t)$ é a massa reduzida em termos da fração α de massa de interação, que depende do ângulo de impacto, $\bar{\mu} = 0,36$ é uma constante do material ajustada numericamente no regime de gravidade para materiais como gelo, rocha fraca e detritos e fornece a medida de como a energia e o momento do projétil se acoplam ao alvo e, finalmente, Q_{RD}^* é o critério de ruptura catastrófica para uma colisão frontal (HOUSEN e HOLSAPPLE, 1990).

Este último é dado pela expressão:

$$Q_{RD}^* = q_g (\rho_1 G)^{3\bar{\mu}/2} R_{C1}^{3\bar{\mu}} V^{*(2-3\bar{\mu})}, \quad (2.14)$$

onde q_g é um coeficiente com valor próximo a 1, R_{C1} é o raio esférico equivalente das massas do alvo e do projétil combinadas e assumindo uma densidade ρ_1 , ou

seja, $R_{C1} = (3(M_t + M_p)/4\pi\rho_1)^{1/3}$, e V^* é a velocidade crítica de impacto. O parâmetro R_{C1} é introduzido com o objetivo de ajustar e comparar o critério de ruptura para colisões envolvendo diferentes razões de massas e densidades dos corpos. Cabe destacar que, no regime dominado pela gravidade, a energia específica crítica, Q_{RD}^* , aumenta conforme aumenta o tamanho dos corpos envolvidos na colisão, enquanto que no regime de tensão interna, a energia específica crítica aumenta à medida que diminui o tamanho dos corpos¹ (STEWART e LEINHARDT, 2009).

Finalmente, para definir a velocidade de erosão, v_{ero} , primeiro é necessário calcular a energia de impacto específica, Q_R , para a qual o alvo permanece intacto após a colisão, ou seja, assumindo que $M_{lr} = M_t$. Da equação 2.12 obtemos as seguintes equações:

$$Q_{R,M_{lr}=M_t} = \begin{cases} 2 Q_{RD}^* \left(1 - \frac{M_{lr}}{M_t + M_p}\right), & \text{se } 0,1 < M_{lr}/(M_t + M_p) < 1, \\ Q_{RD}^* \left[\frac{1,8^\eta}{0,1} \left(\frac{M_{lr}}{M_t + M_p}\right)\right]^{1/\eta}, & \text{se } M_{lr}/(M_t + M_p) \leq 0,1, \end{cases} \quad (2.15)$$

e a partir destas, a velocidade de erosão é dada por:

$$v_{ero,M_{lr}=M_t} = \sqrt{\frac{2 Q_{R,M_{lr}=M_t} (M_t + M_p)}{\mu}}. \quad (2.16)$$

2.5.1 Regime de ruptura do projétil

Na seção anterior, apresentamos a relação entre velocidade e ângulo de impacto que determina o início da erosão do alvo (equação 2.16)². Entretanto, no regime de *hit-and-run* consideramos que o alvo permanece intacto após a colisão, mas o projétil pode sofrer severa ruptura pelo impacto. Nessa configuração, o maior fragmento remanescente da colisão seria o próprio alvo, enquanto que o segundo maior fragmento remanescente seria o que sobra do projétil erodido.

Apresentaremos a seguir as equações que são utilizadas para estimar a massa do segundo maior fragmento pós-impacto e que, em nosso caso, seria o corpo que daria origem de um análogo de Mercúrio. Isto envolve determinar as velocidades a partir das quais se inicia o processo de erosão e ruptura catastrófica do projétil no regime de *hit-and-run*.

¹Isto é devido a que, quanto menor é o corpo, mais relevantes são as forças de coesão interna e mais energia é necessária para causar a sua ruptura.

²A dependência com o ângulo de impacto se dá através de Q_R , vide eq. 2.13.

Para isto, a ideia será considerar o denominado impacto reverso, ou seja, considerar que o projétil original passa agora a ser o corpo que sofre o impacto (o novo alvo), enquanto que uma parte da massa específica do alvo original, a massa que de fato interage, passa agora a ser o corpo impactante (o novo projétil). Doravante, esses corpos serão referidos como o alvo e o projétil do impacto reverso, respectivamente.

Um parâmetro relevante que vamos utilizar mais adiante para comparar as diferentes configurações de impacto é chamado de comprimento de interação L_{int} . Este parâmetro representa o comprimento da massa de interação do projétil projetado no alvo (ex. LEINHARDT e STEWART, 2012; QUINTANA *et al.*, 2016; STEWART e LEINHARDT, 2012) e fornece uma ideia do grau de sobreposição entre o projétil e o alvo durante a colisão. Ele é dado por:

$$L_{\text{int}} = (R_t + R_p)(1 - \sin \theta), \quad (2.17)$$

no caso de uma colisão oblíqua, ou seja, quando:

$$\sin \theta > 1 - \frac{2R_p}{R_t + R_p}. \quad (2.18)$$

A seção transversal entre os corpos colidores é maior quanto menor é o ângulo de impacto e, conseqüentemente, L_{int} aumenta. O comprimento de interação é representado esquematicamente na Fig. 2.2.

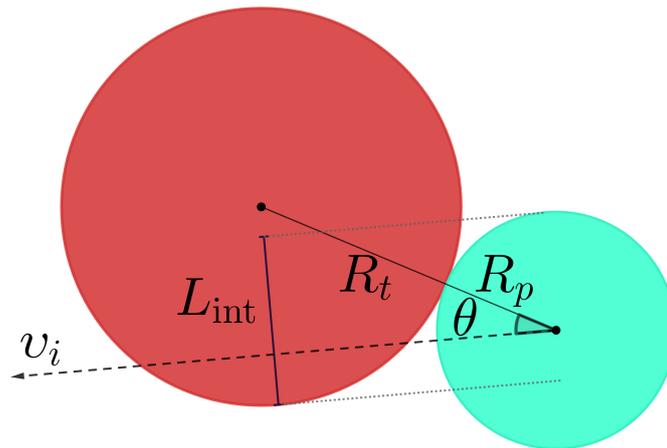


Figura 2.2: Configuração geométrica de uma colisão numa perspectiva lateral. V_i denota a velocidade de impacto relativa entre o alvo de raio R_t e o projétil de raio R_p . θ é o ângulo de impacto, definido entre a linha $R_t + R_p$ e o vetor de velocidade relativa no momento do primeiro contato entre os corpos colidores. L_{int} representa o comprimento de interação.

Assume-se que a massa que não se projeta sobre o alvo do impacto reverso escapa completamente à colisão e portanto podemos negligenciá-la. Como ponto de partida, calculamos a área da seção transversal de um projétil original circular que interage com o alvo original e depois calculamos a massa correspondente que de fato se projeta sobre o alvo do impacto reverso. Para isso, vamos definir o apótema a como sendo $a = l - R_p$, em que $l \equiv L_{\text{int}}$. Então o ângulo central (ver Fig. 2.3) é dado por:

$$\phi = 2 \cos^{-1} \left(\frac{a}{R_p} \right). \quad (2.19)$$

A seção transversal do projétil envolvida na colisão é

$$A_{\text{int}} = R_p^2 \left(\pi - \frac{\phi - \sin \phi}{2} \right). \quad (2.20)$$

e aproximamos o comprimento de interação sobre o alvo pela corda com $l/2$

$$D_{\text{int}} = 2\sqrt{R_t^2 - (R_t - l/2)^2}. \quad (2.21)$$

Finalmente, a massa do alvo que interage com o projétil é da ordem de

$$M_{\text{int}} = \rho_t A_{\text{int}} D_{\text{int}}, \quad (2.22)$$

onde ρ_t é a densidade do alvo. Então, para o impacto reverso (identificado pelo símbolo \dagger) definimos:

$$M_p^\dagger = M_{\text{int}}, \quad M_t^\dagger = M_p. \quad (2.23)$$

O critério de ruptura catastrófico para o impacto reverso, $Q_{RD}^{\dagger*}$, calcula-se da mesma forma como no impacto direto e, a partir daí, podemos determinar a velocidade de erosão do projétil (alvo reverso) adotando um procedimento similar ao que foi usado para definir a velocidade de erosão do alvo na configuração original. Primeiro fixamos $M_{\text{lr}} = M_t^\dagger$ e então calculamos a energia de impacto, Q_R^\dagger , e a respectiva velocidade de erosão do alvo reverso, v_{ero}^\dagger , da seguinte forma:

$$Q_R^\dagger = 2 Q_{RD}^{\dagger*} \left(1 - \frac{M_{\text{lr}}}{M_t^\dagger + M_p^\dagger} \right), \quad (2.24)$$

$$v_{\text{ero}}^\dagger = \sqrt{\frac{2 Q_R^\dagger (M_t^\dagger + M_p^\dagger)}{\mu^\dagger}}. \quad (2.25)$$

Assim, o processo de erosão do projétil original inicia-se a partir de velocidades de impacto maiores que v_{ero}^\dagger .

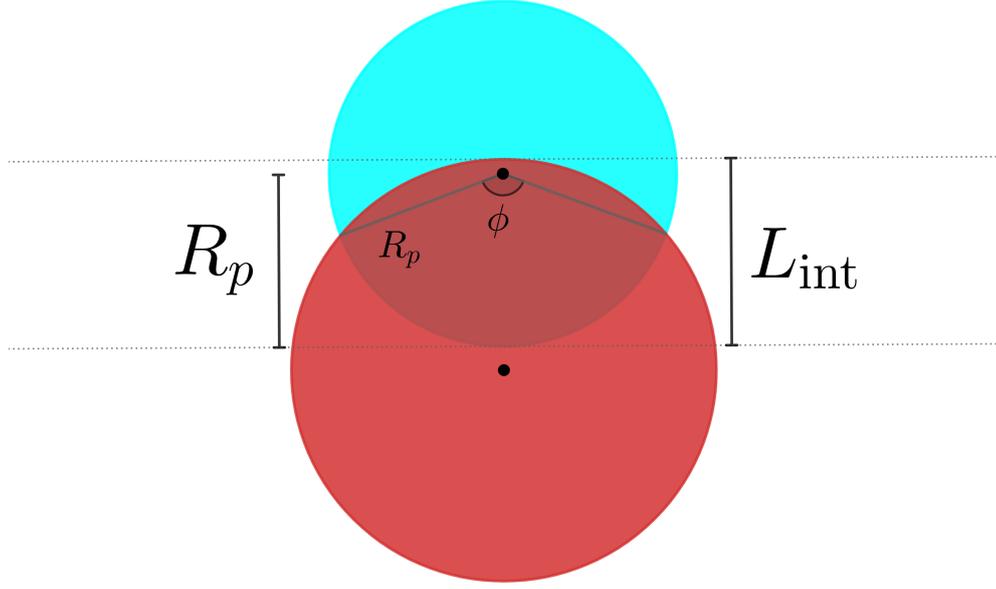


Figura 2.3: Esquema do impacto numa perspectiva frontal (na direção do movimento relativo), para análise da região que interage entre o projétil e o alvo.

Em nosso caso, a velocidade v_{p}^{\dagger} , necessária para causar uma erosão no projétil que resulte num análogo de Mercúrio é obtida a partir das equações (2.24) e (2.25) fixando

$$M_{\text{lr}} = 1 \quad M_{\text{p}}^{\dagger} = 0,055 M_{\oplus} \quad \text{e} \quad M_t^{\dagger} = 2,36 M_{\text{p}}^{\dagger}, \quad (2.26)$$

que é a massa assumida para o proto-Mercúrio em nossas simulações³ e para garantir um corpo suficientemente condrítico para produzir a massa de núcleo de Mercúrio desejada. A dependência desta velocidade com o ângulo de impacto se dá através de $Q_{RD}^{\dagger*}$ (vide eq. 2.13) e também de M_p^{\dagger} (vide eq. 2.22).

As previsões das leis de escala podem ser sintetizadas num diagrama como o apresentado na Fig. 2.4, que mostra o resultado esperado de uma colisão dependendo da velocidade e do ângulo de impacto. Na região azul escuro, o regime corresponde a acreção perfeita; na região azul claro ocorre o regime de acreção parcial; na região branca se encontra o regime de erosão do alvo; a região laranja corresponde ao regime de *hit-and-run*, e a região vermelha ao regime de *graze-and-merge*. A linha vermelha vertical corresponde ao limite entre os regimes de impactos oblíquos (à direita) e frontais (à esquerda).

No regime de erosão do alvo, a curva preta grossa representa a velocidade crítica para a ruptura catastrófica, i.e. $M_{\text{lr}} = 0,5(M_t + M_p)$; as curvas pretas tracejadas acima e abaixo da ruptura catastrófica representam as velocidades

³Aproximadamente $0,13 M_{\oplus}$ ou 1 massa de Marte.

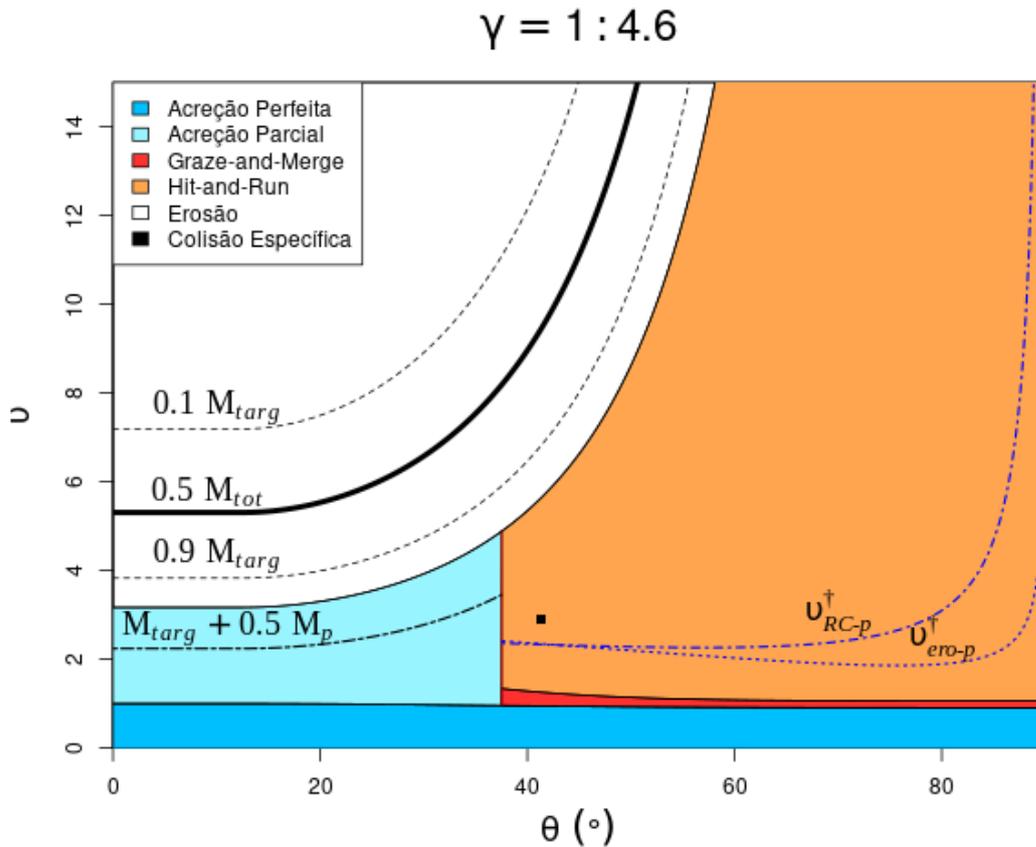


Figura 2.4: Exemplo de diagrama dos regimes de colisão determinados a partir das leis de escala.

São mostradas as curvas das velocidades de impacto normalizadas pela velocidade de escape mútua, v , como função do ângulo de impacto, θ . O diagrama corresponde a colisões envolvendo corpos com razão de massa alvo/projétil de aproximadamente 1,0 a 4,6, como as consideradas neste trabalho. Ver texto para detalhes.

requeridas para que M_{lr} fique com 10% e 90% da massa do alvo, respectivamente.

No regime de acreção parcial, a curva tracejada e pontilhada preta indica a velocidade mínima para que haja acreção de 50% do projétil no alvo.

No regime de *hit-and-run*, as curvas pontilhada e tracejada-pontilhada azuis indicam o início (por cima de ambas) da erosão do projétil e da ruptura catastrófica do projétil, respectivamente. O ponto quadrado preto representa a configuração de uma colisão específica que gerou o melhor análogo de Mercúrio nas nossas simulações hidrodinâmicas (ver capítulo 3).

Cabe lembrar que toda a formulação apresentada até o momento corresponde a assumir corpos sólidos e homogêneos no regime dominado pela gravidade. As leis de escala para o regime dominado pela tensão interna são diferentes, mas

não abordaremos elas no trabalho. Também é importante mencionar que não estamos adotando no trabalho as versões mais recentes de leis de escala, propostas por REINHARDT *et al.* (2022), pois o roteiro de LEINHARDT e STEWART (2012); STEWART e LEINHARDT (2009) serve satisfatoriamente para o tipo de colisões que desejamos analisar, isto é, colisões envolvendo corpos de pouca massa ($0.1M_{\oplus}$ - $1M_{\oplus}$) e de baixa velocidade ($1\nu_{\text{esc}}$ - $4\nu_{\text{esc}}$). Motivados pela observação de super-Mercúrios com massas acima de $5M_{\oplus}$, REINHARDT *et al.* (2022) propõe leis de escala mais precisas para colisões envolvendo super-Terras ($1M_{\oplus}$ - $19M_{\oplus}$) em regimes de impacto mais energéticos ($1\nu_{\text{esc}}$ - $6\nu_{\text{esc}}$) do que as leis de escala que adotaremos aqui. Contudo, as duas versões das leis de escala são adequadas e analiticamente preveem bem os resultados de massa pós impacto para o tipo de colisões que estudamos aqui. Nas próximas seções, explicaremos como são obtidas as configurações iniciais que adotamos em nossas simulações.

2.6 Colisões em discos de acreção

Aplicando as leis de escala apresentadas anteriormente, pretendemos procurar condições iniciais de impacto que sejam favoráveis para a formação de um análogo de Mercúrio e aplicar as mesmas para inicializar as nossas simulações hidrodinâmicas. O nosso trabalho se diferencia de outros trabalhos semelhantes na literatura justamente por causa desta abordagem, focada em encontrar configurações específicas, ao invés de explorar o espaço de parâmetros em forma “aleatória”. Além disso, nosso intuito é analisar configurações de impacto que, além de produzirem análogos de Mercúrio, sejam compatíveis com os parâmetros colisionais observados em simulações de acreção em discos protoplanetários. Discutiremos este último a seguir.

No trabalho de FRANCO *et al.* (2022) foi analisada a evolução de diferentes discos protoplanetários durante a última fase de formação planetária no Sistema Solar, por meio de simulações numéricas de N-corpos. As colisões que ocorrem ao longo dessas simulações estão inseridas em diferentes contextos dinâmicos, uma vez que foram testados diferentes cenários, com as órbitas dos planetas gigantes em configurações diversas e considerando diferentes distribuições iniciais de massa para a parte interna do disco.

No que se refere aos planetas gigantes, em FRANCO *et al.* (2022) foram testadas configurações orbitais mais excêntricas do que as atuais, configurações em ressonâncias de movimentos médios (em particular, 1:2 e 2:3 entre Júpiter e Saturno), bem como a configuração orbital atual. No que se refere aos discos, foram consideradas distribuições de massa seguindo perfis de densidade superficiais que

Tabela 2.2: Estatística das colisões registradas nas simulações de N-corpos, categorizadas mediante as leis de escala.

Regime de colisão	Planetesimais		Embriões	
	n	%	n	%
Total	331 534		32 262	
Super-Catastrófico	0	0	0	0
Erosão	3 550	1	465	1
Acreção Parcial	205 794	62	14 935	46
Acreção Perfeita	34 744	10	1 785	6
<i>Graze-and-Merge</i>	29 408	9	6 296	20
<i>Hit-and-run</i>	58 038	18	8 781	27
<i>Hit-and-run</i> com erosão do projétil	55 375	17	4 821	15

Nota: As simulações de N-corpos dos discos protoplanetários começam com uma população dividida entre de embriões planetários e planetesimais (estes últimos não interagem entre si) e todas as colisões são tratadas pelo código como acreção perfeita.

obedecem uma lei de potência proporcional a $r^{-\gamma}$, onde γ varia de 0,5 a 5,5. Isso distribui o material com diferentes declives ao longo do disco de acordo com a distância radial r , sendo $\gamma = 0,5$ o caso da distribuição mais íngreme e mais compacta de todas. Ao total, foram testados 8 cenários de discos de acreção diferentes.

As distintas configurações refletiram no comportamento evolutivo de cada disco, nos sistemas planetários resultantes e, obviamente, nas colisões dos embriões e planetesimais terrestres ocorridas em cada cenário. Por exemplo, discos dinamicamente frios produziram um maior número de colisões, mas com velocidades de impacto em média mais baixas. Ao passo que discos dinamicamente excitados (planetas gigantes em órbitas excêntricas e distribuição do material com valores mais baixos de γ) registraram um menor número de impactos, mas com média mais alta de velocidade de impacto. É justamente nestes últimos cenários onde ocorreram um maior número de impactos com características de *hit-and-run* erosivos.

Nas simulações de [FRANCO *et al.* \(2022\)](#), a configuração do impacto (massas dos corpos, velocidade mútua e ângulo de impacto) foi registrada para cada evento colisional num arquivo. Assim, utilizando esta informação como ponto de partida e aplicando as leis de escala discutidas na seção anterior, procedemos aqui determinar o regime específico em que cada colisão ocorreu.

A Tabela 2.2 reporta o número de colisões registradas em cada regime para a

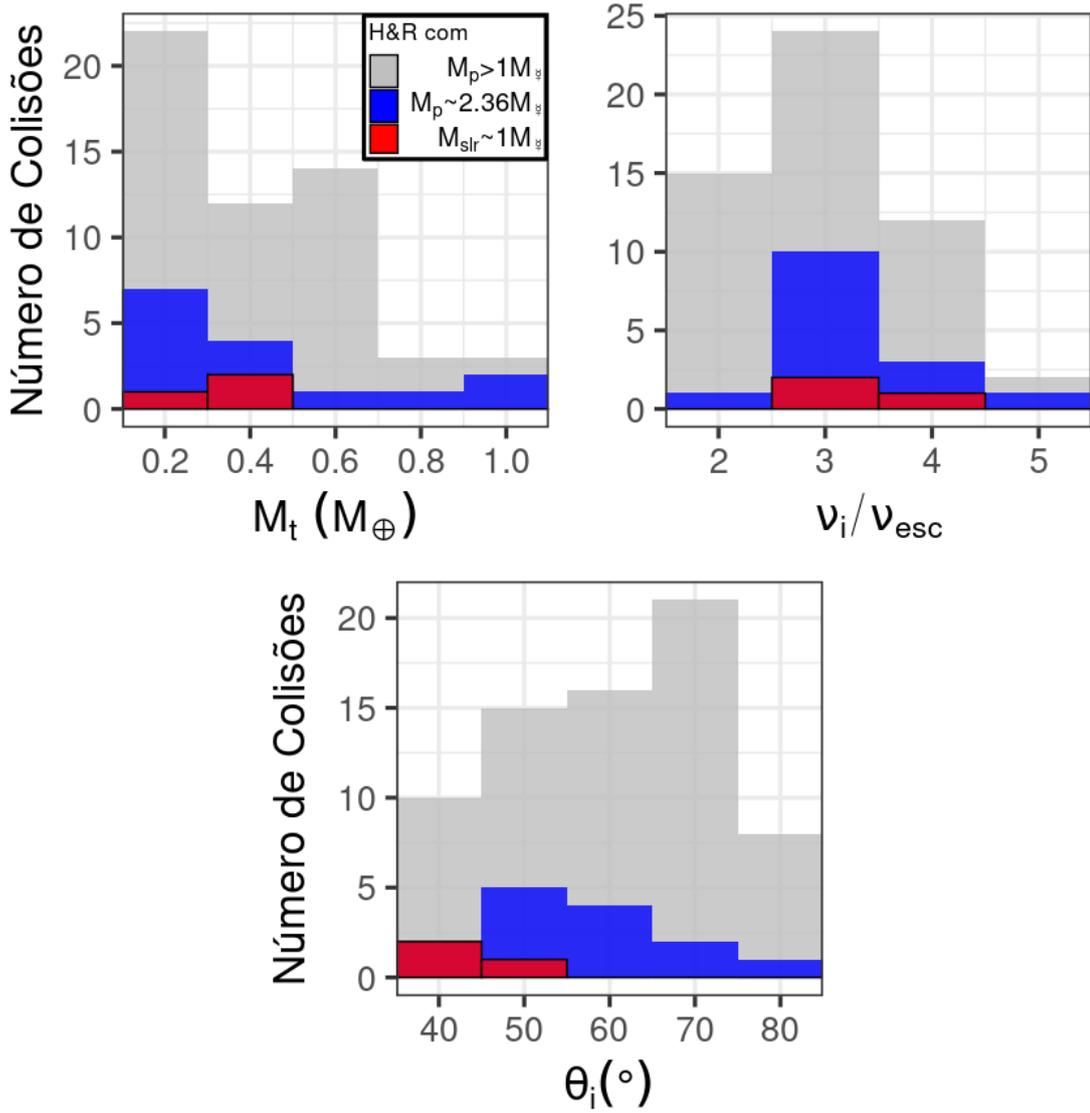


Figura 2.5: Número de colisões do tipo *hit-and-run* em simulações de N-corpos para acreção de planetas terrestres no Sistema Solar.

Distribuições em termos de massa do alvo (acima à esquerda), velocidades de impacto normalizadas (acima à direita) e ângulos de impacto (em baixo). Os resultados foram compilados de 8 configurações de discos protoplanetários diferentes analisados em FRANCO *et al.* (2022). Ver o texto para detalhes. Em todas as colisões, a massa do alvo é maior que a do projétil. Colisões *hit-and-run* entre um corpo tipo Marte e um corpo tipo Terra são raras. Colisões capazes de produzir análogos de Mercúrio tendem a ocorrer entre corpos com uma razão de massa alvo/projétil entre ~ 1 e 4.

totalidade dos 8 cenários estudados por FRANCO *et al.* (2022) de acordo com a nossa análise. Notamos que, no caso dos embriões, que são os corpos que estão dentro do intervalo de massas que queremos analisar, as colisões no regime de

hit-and-run são as segundas mais frequentes, perdendo apenas para as colisões com acreção parcial (que se espera que sejam dominantes num disco de acreção).

As leis de escala nos permitem ainda identificar quais das colisões no regime de *hit-and-run* causariam alguma erosão no projétil. Estas últimas são, precisamente, as que nos interessam para formar análogos de Mercúrio. Assim, quando escolhermos os parâmetros de impacto para inicializar as nossas simulações hidrodinâmicas, estaremos atentos às condições dentro deste último grupo de colisões que sejam capazes de produzir um bom análogo do atual Mercúrio.

Os resultados da nossa análise das colisões registradas nas simulações de FRANCO *et al.* (2022) estão compilados na Fig. 2.5. Esta figura mostra a distribuição de todas as colisões em regime de *hit-and-run* entre embriões, nas quais o projétil era inicialmente mais massivo que Mercúrio e sofreu alguma erosão após a colisão, ou seja, um subconjunto das 4821 colisões reportadas na última linha da Tabela 2.2. Estas colisões são representadas pelos histogramas em cinza. Dentro desse subconjunto de colisões, consideramos apenas aquelas nas quais o projétil tinha inicialmente uma massa próxima a $2,36 M_{\oplus}$ (proto-Mercúrio), representadas na figura pelos histogramas em azul. Finalmente, os histogramas em vermelho representam as colisões, dentro do subconjunto anterior, que seriam capazes de criar, de acordo com as leis de escala, um segundo maior fragmento análogo ao Mercúrio atual, especificamente, com uma massa de $1 \pm 0,25 M_{\oplus}$.

2.7 Condições iniciais das simulações

Nossas simulações hidrodinâmicas de colisão envolvem dois corpos, ambos considerados como totalmente diferenciados e compostos por um núcleo de ferro e um manto de silicato ou basalto. Os parâmetros relevantes destes materiais se encontram listados na Tabela 2.1. Assumimos que o corpo que faz o papel de projétil na colisão, que seria o proto-Mercúrio, é composto por uma proporção manto-núcleo de 70%-30% (ex. ASPHAUG e REUFER, 2014; BENZ *et al.*, 2007; CHAU *et al.*, 2018). Por outro lado, para o corpo que cumpre o papel de alvo, consideramos duas configurações diferentes, com o objetivo de explorar as possíveis composições planetárias extremas: uma com proporção manto-núcleo de 50%-50% (ex. EMSENHUBER *et al.*, 2018) e outra com proporção de 70%-30%. Esta última proporção de silicato-ferro garante uma abundância condritica suficiente e uma composição média similar à dos outros planetas terrestres (AGNOR e ASPHAUG, 2004; CAMERON *et al.*, 1988). Doravante, vamos nos referir ao conjunto de simulações com alvos com proporção manto-núcleo de 50%-50% como **Grupo A** e aquele com alvos com proporção de 70%-30% como **Grupo B**.

Para determinar os restantes parâmetros iniciais em nossas simulações, fixamos a massa do maior fragmento (na colisão reversa, ou seja, o segundo maior fragmento na colisão direta) em 1 massa de Mercúrio. Em seguida, aplicamos as equações 2.24 e 2.25 e calculamos a energia do impacto, $Q_{R, M_{\text{tr}}=M_{\text{M}}}$, e a velocidade de impacto correspondente, v_{M} , em função do ângulo de impacto compreendido no intervalo $[\arcsin(b_{\text{crit}}), \pi/2]$. Com base nos resultados apresentados na Fig. 2.5, assumimos massas iniciais para o alvo (M_t) variando entre 0,2 e 0,6 M_{\oplus} , isto é, entre $\sim 1,5$ e $4,5$ vezes a massa do projétil que, como já mencionamos, foi fixada em $2,36 M_{\text{M}}$.

Dado que as leis de escala consideram corpos homogêneos, o que não é o caso dos corpos diferenciados que utilizamos em nossas simulações, sua aplicação requer assumir uma densidade média para os corpos diferenciados. O que fazemos é manter a massa do corpo fixa e calculamos a densidade média ponderada, com base nas densidades do ferro e do basalto e na proporção manto-núcleo correspondente⁴. Com a massa e a densidade média, define-se então o raio equivalente do corpo, que é inserido nas leis de escala.

A abordagem adotada a partir das leis de escala gera uma vasta gama de possibilidades para os parâmetros de impacto iniciais das simulações, como as representadas pelas curvas coloridas na Fig. 2.6. Esta figura mostra a velocidade de impacto, normalizada pela velocidade de escape, (painel esquerdo) e o comprimento de interação, L_{int} , (painel direito), ambos como função do ângulo de impacto, para os casos em que a proporção manto-núcleo do alvo é 50%-50% (Grupo A; uma figura semelhante é obtida para o Grupo B). Para cada massa atribuída ao alvo, a curva respectiva indica as combinações possíveis dos parâmetros de impacto que gerariam um segundo maior fragmento pós-colisão com $1 M_{\text{M}}$. Devido ao alto custo computacional das simulações hidrodinâmicas, é impossível testar todas as combinações ao longo de cada curva na Fig. 2.6. Portanto, acabamos escolhendo alguns conjuntos de parâmetros específicos para testar nas simulações.

Nossa primeira escolha foi adotar as configurações correspondentes ao ângulo de impacto que exigisse a menor velocidade de impacto, isto é, os mínimos de cada curva no painel esquerdo da Fig. 2.6. Denominamos a estes ângulos, representados pelos pontos pretos na figura, de *ângulos críticos*. Nestas configurações, os ângulos de impacto se encontram na faixa de 40° a 65° e as velocidades relativas se encontram na faixa de $2,7 v_{\text{esc}}$ a $3,8 v_{\text{esc}}$, dependendo da massa do alvo. Veremos no próximo capítulo, entretanto, que as simulações utilizando estes parâmetros

⁴O `miluphcuda` faz este cálculo automaticamente para a distribuição de partículas SPH considerada.

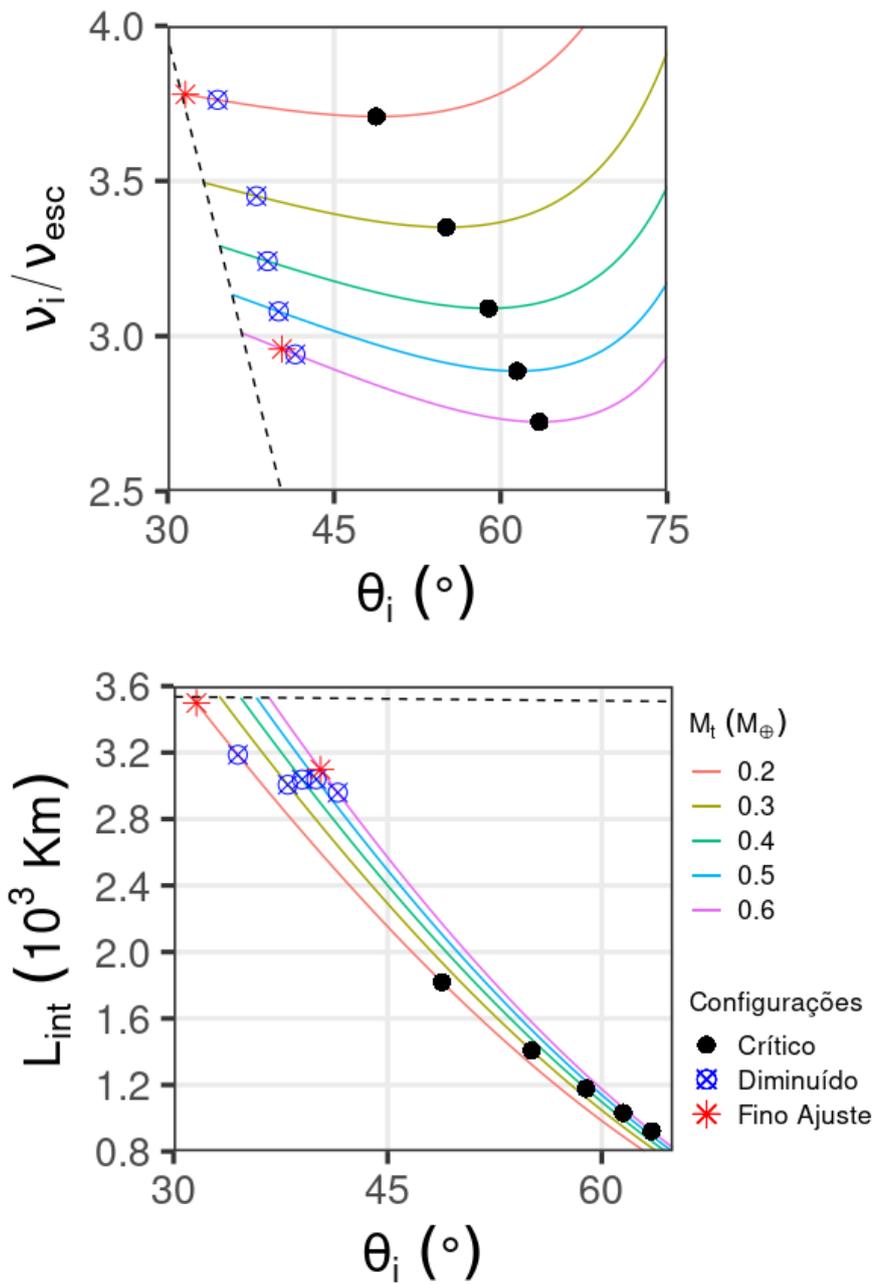


Figura 2.6: Parâmetros de impacto iniciais estipulados pelas leis de escala.

Velocidade de impacto (painel esquerdo) e comprimento de interação (painel direito) como função do ângulo de impacto, para o caso em que os alvos são constituídos por uma proporção de ferro-silicato de 50%-50%. Cada curva corresponde ao comportamento previsto pelas leis de escala para gerar um análogo de Mercúrio. Ver texto para mais detalhes. A linha tracejada no painel esquerdo corresponde ao limite entre os regimes de impactos oblíquos, à direita da linha, e frontais, à esquerda.

como condições iniciais não produziram bons resultados em termos da massa e composição final do Mercúrio formado.

Num segundo conjunto de configurações, consideramos ângulos de impacto que são cerca de 30% a 40% menores que os ângulos críticos, para o Grupo A de simulações, e cerca de 20% a 35% menores para o Grupo B. Essas configurações correspondem a ângulos de impacto na faixa de $\sim 33^\circ$ a $\sim 41^\circ$ e velocidades relativas na faixa de $3 v_{\text{esc}}$ a $4 v_{\text{esc}}$. Denominamos a estes ângulos, representadas pelos círculos cruzados azuis na Fig. 2.6, de *ângulos diminuídos*. Estes ângulos de impacto menores aumentam o comprimento de interação ($L_{\text{int}} \sim 3000$ km), e nosso critério de escolha desses ângulos foi justamente para que houvesse uma maior interação colisional entre os corpos e, conseqüentemente, uma maior erosão do projétil, produzindo um remanescente com uma massa de manto menor. Como veremos no próximo capítulo, estas configurações produziram resultados muito melhores em termos de análogos de Mercúrio, porém ainda não totalmente satisfatórios.

Não consideramos ângulos de impacto maiores do que os ângulos críticos – por exemplo, aqueles com as mesmas velocidades de impacto correspondentes aos ângulos diminuídos – porque ângulos de impacto mais oblíquos projetam uma seção transversal menor entre os corpos e tais impactos não removeriam efetivamente o manto do projétil nas velocidades consideradas (CHAU *et al.*, 2018).

Finalmente, um terceiro conjunto de configurações envolveu um ajuste fino dos parâmetros. Observamos que, nas simulações anteriores, ângulos de impacto que forneceram o mesmo comprimento de interação não produziram necessariamente os mesmos resultados. Isto se deve a que o resultado depende não apenas de L_{int} , mas também da razão de massas alvo/projétil. Por exemplo, quanto maior é essa razão de massas, maior é a erosão causada no projétil e uma forma de compensar isso seria utilizar um valor menor de L_{int} . Assim, nossa abordagem para definir este terceiro conjunto de condições iniciais consistiu em analisar a relação entre o comprimento de interação e a razão de massas dos corpos (painel inferior na Fig. 2.6) e, com base nisto, propusemos valores de $L_{\text{int}} = 3500$ km (equivalente a $\sim 90\%$ do raio do alvo) para o alvo menos massivo ($0,2 M_{\oplus}$) e de $L_{\text{int}} = 3100$ km (equivalente a $\sim 60\%$ do raio do alvo) para o alvo mais massivo ($0,6 M_{\oplus}$). Estas configurações, indicadas pelos asteriscos vermelhos na Fig. 2.6, foram as que forneceram os melhores resultados. Denominamos os ângulos de impacto correspondentes a estas configurações de *ângulos de ajuste fino*.

Nas nossas simulações hidrodinâmicas, o alvo é considerado inicialmente fixo no espaço enquanto que o projétil se movimenta com a velocidade de impacto

prevista. Não consideramos rotação inicial, nem no alvo nem no projétil, porque as velocidades de rotação dos corpos, tipicamente $\sim 1 \text{ km s}^{-1}$ na superfície, seriam muito menores do que as velocidades de impacto envolvidas ($\sim 20 \text{ km s}^{-1}$). Se ambos os corpos estivessem girando, podemos supor que haveria um pequeno aumento (se ambos forem prógrados) ou redução (se um for prógrado e o outro retrógrado) na ruptura do manto, causando um efeito similar a aumentar ou diminuir ligeiramente a velocidade de impacto relativa para corpos sem rotação. Consideramos que esse efeito não seria suficiente para alterar significativamente os resultados de nossas simulações e, portanto, podemos ignorar a rotação dos corpos. Vale a pena mencionar, no entanto, que a rotação em geral tende sempre a aumentar ligeiramente a remoção do manto (ex. CHAU *et al.*, 2018).

Para empacotar as partículas SPH no alvo e no projétil iniciais, aplicamos uma técnica de relaxamento semi-analítica. O relaxamento garante que o arranjo geométrico de partículas SPH terminem com uma boa configuração inicial, ou seja, que o sistema de partículas esteja num estado de equilíbrio auto-consistente, que se assemelha à realidade. O procedimento de relaxamento semi-analítico se baseia em resolver diretamente as equações hidrostáticas que descrevem a estrutura interna de um corpo esférico em equilíbrio e, em seguida, usar a distribuição calculada para produzir um arranjo relaxado, a fim de obter configurações suficientemente equilibradas e fisicamente realísticas. Os perfis hidrostáticos radiais das principais grandezas (densidade, pressão e energia interna) são então calculadas e posteriormente atribuídos à configuração inicial de partículas SPH (BURGER *et al.*, 2018; DIEHL *et al.*, 2015). Este método está incorporado dentro do `miluphcuda` e economiza tempo de cômputo posterior, pois elimina a necessidade de um maior relaxamento numérico inicial e ainda produz arranjos de partículas com baixo ruído e muito próximas do equilíbrio. As simulações utilizam um total de 100 000 partículas SPH, distribuídas entre o alvo (de $\sim 60\,000$ a $80\,000$ partículas) e o projétil (de $\sim 20\,000$ a $40\,000$ partículas).

O tempo total de cada simulação é de aproximadamente 2 dias, que resulta suficiente para que as massas adquiram seus valores praticamente finais, ou seja, que os principais aglomerados remanescentes após a colisão diminuam a taxa de acreção de partículas ejetadas e, portanto, os valores das massas correspondentes não apresentem mais um incremento significativo. A princípio, esse é um intervalo de tempo amplamente adotado na literatura recente (ASPHAUG e REUFER, 2014; CHAU *et al.*, 2018) e se mostra suficiente para obter uma boa estimativa da composição e massa finais do remanescente, sem implicar num custo computacional elevado. Discutiremos na seção 3.3 como um tempo de evolução maior poderia alterar os nossos resultados.

Nós não exploramos condições heliocêntricas iniciais dos embriões e não incluímos uma estrela central em nossas simulações, visto que durante o curto tempo de simulação (2 dias) a principal influência gravitacional sobre o projétil seria do alvo remanescente da colisão, ao mesmo tempo que incluir uma estrela nas simulações seria computacionalmente custoso.

2.8 Tratamento dos resultados das simulações

Nesta seção, discutiremos como é calculada, ao final de cada simulação, a quantidade de massa e composição do segundo maior fragmento resultante da colisão. A ideia consiste em determinar os grupos de partículas SPH que representam os dois principais corpos remanescentes.

Em primeiro lugar, consideramos o centroide de diferentes conjuntos de partículas e determinamos aonde a maioria das partículas está concentrada, formando um aglomerado. Em seguida, verificamos se as velocidades relativas das partículas vizinhas estão abaixo da velocidade de escape do aglomerado e, também, quais dessas partículas se encontram dentro de uma esfera de influência restrita de 5×10^{-2} raios de Hill do aglomerado⁵. Essa abordagem é semelhante à utilizada pelo SKID (*Spline Kernel Interpolative Denmax*; STADEL, 2001), um algoritmo do tipo *friends-of-friends* que determina se uma determinada partícula SPH faz parte ou não de um aglomerado gravitacionalmente coeso (para mais detalhes ver BENINCASA *et al.*, 2019; CHAU *et al.*, 2018; TIMPE *et al.*, 2020).

O roteiro que utilizamos é descrito a seguir:

1. Separamos as partículas referentes ao projétil e ao alvo e, em seguida, separamos o material do manto e do núcleo em cada corpo. Como o código não possui uma *flag* específica para identificar quais partículas SPH se referem ao alvo e quais ao projétil, utilizamos as velocidades iniciais das partículas do projétil, relativas às partículas do alvo, como identificador. Como todas as partículas de cada corpo possuem as mesmas velocidades no início da simulação, partículas com velocidade inicial igual à velocidade máxima do sistema no pré-impacto⁶ corresponderão ao projétil e as demais corresponderão ao alvo;
2. Guardamos os vetores posição finais das partículas do projétil e do alvo, bem como os dos respectivos manto e núcleo;

⁵Neste caso, o raio de Hill é calculado em relação ao remanescente do alvo pós-colisão. Nenhum outro corpo é inserido nas simulações hidrodinâmicas além dos dois embriões e portanto não há outras influências gravitacionais, p. ex: a massa de uma estrela solar.

⁶Isto é, a v_{esc}^{\dagger} determinada a partir das leis de escala.

3. A continuação, fazemos uso de uma função que calcula a moda da distribuição de frequências das posições. Através do histograma de posições, vemos qual região concentra mais partículas do projétil, normalmente mais espalhadas depois da colisão, para determinar o centro da região com maior concentração de partículas de ferro, isto é, o núcleo que normalmente não se espalha tanto quanto o material do manto. A moda da distribuição é calculada como:

$$\text{Moda} = L + \frac{D_1}{D_1 + D_2}C, \quad (2.27)$$

onde L é o limite inferior da classe modal, C é a largura da classe modal e D_1 e D_2 são as diferenças entre a maior frequência e a frequência da classe imediatamente anterior e posterior, respectivamente (FRANCIS e MOUSLEY, 2014). No final, a função fornece o valor da moda que é influenciada pela frequência da classe anterior e posterior. A função pode ser codificada como mostrado na Fig. 2.7;

4. A seguir, determinamos o raio de uma região modal em torno da moda e delimitamos as partículas que estão mais agrupadas em uma determinada coordenada. Fazemos isso para o núcleo e também para o resto do aglomerado. Nesse caso, como as partículas do projétil se espalharam consideravelmente após a colisão, nos interessa usar uma coordenada em que o histograma apresente maior assimetria. Dessa forma, evitaremos incluir muitas partículas que não fazem parte do aglomerado total. O código correspondente é apresentado na Fig. 2.8;
5. Por fim, calculamos o raio de Hill relativo entre o alvo e o projétil e o módulo da velocidade relativa do projétil para determinar a massa e razão de massa de núcleo total das partículas que compõem o remanescente do projétil pós-colisão. O código correspondente é apresentado na Fig. 2.9;

```

classmode <- function(v){

  h_v <- hist(v, plot = F)      # Histograma do vetor v
  max_pt <- which.max(h_v$counts) # Posição do vetor com maior número de pontos
  pt <- h_v$counts[max_pt]      # Quantidade de pontos na classe modal
  if(max_pt-1 != 0){
    pt_l <- h_v$counts[max_pt-1] # Quantidade de pontos na classe à esquerda
  }
  if(max_pt-1 == 0){
    pt_l <- 0
  }

  if(max_pt+1 > length(h_v$counts)){
    pt_r <- 0
  }
  if(max_pt+1 <= length(h_v$counts)){
    pt_r <- h_v$counts[max_pt+1] # Quantidade de pontos na classe à direita
  }
  D_1 <- as.numeric(pt-pt_l)
  D_2 <- as.numeric(pt-pt_r)
  L <- as.numeric(h_v$breaks[max_pt])
  C <- as.numeric(h_v$breaks[max_pt+1]-h_v$breaks[max_pt])

  mode <- L+(C*D_1/(D_1+D_2))
}

```

Figura 2.7: Exemplo de implementação do cálculo da classe modal em R.

```

# Frequências das partículas por bin
dens_core_pj <- h_y_core$counts # Aqui usamos a coordenada y das partículas do núcleo;
dens_pj <- h_z_pj$counts      # Aqui usamos a coordenada z das partículas em geral;

# Região com mais partículas (núcleo, total)
re_max_core_pj <- which(max(dens_core_pj)- dens_core_pj<=0.5*max(dens_core_pj))
re_dens_max_pj <- which(max(dens_pj)-dens_pj<=0.5*max(dens_pj))

# Raio da região modal
R_core_pj <- max(abs(y_core_mode_class-h_y_core$breaks[re_max_core_pj[c(1,
                                                                    length(re_max_core_pj))]]))
R_pj <- mean(abs(z_pj_mode_class-h_z_pj$breaks[re_dens_max_pj[c(1,
                                                                    length(re_dens_max_pj))]]))

# Partículas totais na simulação que estão dentro da esfera
# de raio modal cujo centro tem a moda como coordenadas
circ_core_pj <- which( (x-x_core_mode_class)^2 + (y-y_core_mode_class)^2 +
                      (z-z_core_mode_class)^2 <= (R_core_pj)^2 )
circ_pj <- which( (x-x_core_mode_class)^2 + (y-y_core_mode_class)^2 +
                  (z-z_core_mode_class)^2 <= (R_pj)^2 )

```

Figura 2.8: Exemplo de implementação do cálculo da esfera modal em R.

```

g <- 6.67408e-11 # m3.kg-1.s-2
MS <- 1.989e+30 # kg

# Velocidade de escape do projétil
v_esc_pj <- sqrt(2*g*m_pj_rest_circ/(R_pj))

## Raio de hill relativo entre os corpos ##
r_rel <- sqrt((x_tg_core_mode_class-x_core_mode_class)^2 +
             (y_tg_core_mode_class-y_core_mode_class)^2 +
             (z_tg_core_mode_class-z_core_mode_class)^2 )
mu_p <- m_pj_rest_circ/(m_tg_rest_circ+m_pj_rest_circ)
rh_pjr <- r_rel*(mu_p/3)^(1/3)

#-----#

# Velocidade relativa do núcleo do remanescente
v_pj_core_classmode <- classmode(pj_v_f[circ_core_pj])

# Partículas que reacretam ao remanescente do projétil
reaccretion_pj <- which((x-x_core_mode_class)^2 +
                      (y-y_core_mode_class)^2 +
                      (z-z_core_mode_class)^2 <= (0.05*rh_pjr)^2 &
                      abs(v_f-v_pj_core_classmode) <= v_esc_pj)

# Partículas do manto que reacretam ao remanescente do projétil
basalt_pj <- which( (x-x_core_mode_class)^2 +
                  (y-y_core_mode_class)^2 +
                  (z-z_core_mode_class)^2 <= (0.05*rh_pjr)^2 &
                  abs(v_f-v_pj_core_classmode) <= v_esc_pj &
                  (material== 1 | material == 2))

# Massa total do remanescente, razões de massa do núcleo e do manto
m_total_pj <- sum(m_data_f[reaccretion_pj])/5.97e+24
Z_mant_pj <- length(basalt_pj)/length(reaccretion_pj)
Z_core_pj <- 1-Z_mant_pj

```

Figura 2.9: Exemplo de implementação do cálculo da massa final e da razão de massa do remanescente do projétil em R.

Capítulo 3

Resultados

Neste capítulo, apresentamos e discutimos os resultados que encontramos fazendo uso da metodologia explicada no capítulo anterior. Como já explicamos, testamos diferentes configurações determinadas pela razão de massa alvo/projétil, a composição do alvo e a relação entre o ângulo de impacto e o comprimento de interação, L_{int} . As simulações foram divididas em grupos, identificados com um código de duas letras. A primeira letra faz referência aos Grupos A ou B de simulações, já apresentados na seção 2.7, ou seja, simulações em que o alvo tem inicialmente fração de massa de ferro $Z_{\text{Fe}} = 0,5$ ou $Z_{\text{Fe}} = 0,3$, respectivamente. A segunda letra se refere às configurações dos ângulos de impacto, sendo C para as simulações com os ângulos Críticos, D para as simulações com os ângulos Diminuídos e F para as simulações com os ângulos de ajuste Fino.

Na sequência de Figs. 3.1, 3.2, 3.3, 3.4, 3.5 e 3.6 são apresentados seis quadros (*snapshots*) de diferentes instantes da evolução, para diferentes exemplos de simulações SPH executadas em cada um dos Grupos A e B. Nessas figuras, o proto-Mercúrio é representado por um manto rosa e um núcleo turquesa, enquanto que o alvo é representado por um manto vermelho e um núcleo amarelo. O tempo de cada quadro está indicado no canto superior esquerdo e não é equiespaçado. A escala e orientação espaciais em cada quadro é a mesma. O quadro final mostra apenas o candidato a Mercúrio formado após 48 horas de evolução (não se mostra o alvo original por uma questão de escala). Lembramos que, em todos os casos, a massa do proto-Mercúrio no primeiro quadro é a mesma ($0,13 M_{\oplus}$).

O destaque é para a Fig. 3.6, que corresponde à simulação que produziu um dos melhores resultados a partir de um impacto com velocidade relativamente baixa ($2,9 v_{\text{esc}}$). O primeiro quadro mostra os dois corpos de composição inicialmente condrítica, com uma razão de massa núcleo/manto semelhante à da Terra. No último quadro, o candidato a Mercúrio acaba com um Z_{Fe} de 0,68 e massa de

0,056 M_{\oplus} , valores extremamente próximos aos do atual Mercúrio.

As Figs. 3.7 e 3.8 sintetizam os resultados da fração de massa de ferro do aglomerado gravitacional remanescente, para a maioria das nossas simulações nos Grupos A e B, respectivamente.

Os painéis de cima mostram o ângulo de impacto inicial, θ_i , e os painéis de baixo mostram a velocidade de impacto inicial, normalizada pela velocidade de escape, ambos como função da massa do alvo inicial, normalizada pela massa do projétil. Cada círculo na figura representa o tamanho, a escala e a composição finais (vermelho para silicato/basalto e azul para ferro) do segundo maior fragmento remanescente. A fração final de massa de ferro (em %) e a massa final (em M_{\oplus}) estão rotuladas para cada corpo. A massa e composição iniciais do projétil (iguais em todas as simulações) e as do atual Mercúrio aparecem representadas no canto superior direito dos painéis de baixo.

As curvas tracejadas pretas representam a velocidade de impacto mínima estimada para produzir um fragmento do tamanho de Mercúrio, de acordo com as leis de escala, isto é, os pontos pretos da Fig. 2.6. Ainda que as diferenças entre os ângulos de impacto críticos e os ângulos diminuídos sejam notórias, as diferenças entre as respectivas velocidades de impacto são muito pequenas. Em função disso, os painéis de baixo só mostram os resultados para o subgrupo de simulações AD/BD, pois os dos outros subgrupos apareceriam sobrepostos.

Por outro lado, o quadrado, triângulos e círculos verdes nas Figs. 3.7 e 3.8 representam, aproximadamente, os parâmetros de impacto iniciais utilizados por BENZ *et al.* (2007), ASPHAUG e REUFER (2014) e CHAU *et al.* (2018), respectivamente, para obter seus melhores resultados de análogos de Mercúrio em simulações de *hit-and-run*. Deve-se levar em consideração que os pontos verdes correspondem a razões iniciais núcleo/manto distintas, logo, a comparação entre eles e com os nossos resultados deve ser feita com cautela.

As linhas vermelhas horizontais nas Figs. 3.7 e 3.8 representam os valores médios de ângulo e velocidade de impacto, referentes às colisões de *hit-and-run* com erosão do projétil ocorridas na região em torno da órbita atual de Mercúrio (de 0,1 a 0,8 au), que foram registradas nas simulações de N-corpos de FRANCO *et al.* (2022)¹. As regiões em cinza representam o intervalo de $\pm 1\sigma$ ao redor da média.

Os resultados de todas as nossas simulações se encontram compilados na Tabela 3.1. A seguir, analisaremos estes resultados à luz das geometrias do impacto e discutiremos algumas das limitações que poderiam ou não influenciar os mesmos.

¹Trata-se de um subconjunto dos histogramas cinza da Fig. 2.5.

Tabela 3.1: Resultados das diferentes configurações de impacto simuladas.

Configurações	M_t (M_{\oplus})	ρ_t (g cm^{-3})	θ_i ($^{\circ}$)	v_i/v_{esc}	$Z_{\text{Fe,slr}}$	M_{slr} (M_{\oplus})
AC	0.2	5.17	48.8	3.71	0.36	0.108
	0.3	5.44	55.1	3.35	0.33	0.117
	0.4	5.65	58.9	3.09	0.32	0.121
	0.5	5.82	61.2	2.89	0.32	0.123
	0.6	5.98	63.5	2.72	0.32	0.124
AD	0.2	5.17	34.5	3.76	0.63	0.062
	0.3	5.44	38.0	3.45	0.60	0.065
	0.4	5.65	39.0	3.24	0.63	0.062
	0.5	5.82	40.0	3.08	0.65	0.059
	0.6	5.98	41.5	2.94	0.64	0.060
AF	0.2	5.17	31.6	3.78	0.73	0.052
	0.6	5.98	40.3	2.96	0.69	0.053
BC	0.2	4.41	42.5	3.76	0.43	0.090
	0.6	5.09	60.0	2.77	0.33	0.117
BD	0.2	4.41	35.3	3.77	0.60	0.065
	0.6	5.09	42.0	2.90	0.61	0.061
BF	0.2	4.41	32.5	3.78	0.68	0.056
	0.6	5.09	41.0	2.91	0.65	0.055
Mercúrio atual	–	–	–	–	0.70	0.055

Nota: M_t e ρ_t são, respectivamente, a massa inicial e densidade média do alvo; θ_i é o ângulo de impacto; v_i/v_{esc} é a velocidade de impacto normalizada; $Z_{\text{Fe,slr}}$ e M_{slr} são a fração final de massa de ferro do núcleo e a massa final do segundo maior fragmento pós-impacto, ou seja, o candidato a Mercúrio.

3.1 Dependência com os ângulos de impacto

Nas simulações utilizando os parâmetros de impacto correlacionados com os ângulos críticos, os resultados não foram satisfatórios pois o segundo maior fragmento remanescente tinha quase o dobro da massa do Mercúrio atual e sua fração de massa de ferro permaneceu quase inalterada em relação ao seu valor inicial, com $Z_{\text{Fe,slr}} < 0,5$. Nas simulações com os ângulos de impacto diminuídos, os resultados, em geral, foram significativamente melhores, obtendo-se $M_{\text{slr}} \sim 1 M_{\text{♀}}$ e $Z_{\text{Fe,slr}} \sim 0,60\text{-}0,65$. Porém, os melhores resultados foram obtidos com as simulações utilizando os ângulos de ajuste fino, em que M_{slr} corresponde à massa atual de Mercúrio dentro de uma tolerância de 5% e $Z_{\text{Fe,slr}}$ está entre 0,65-0,75.

A escala de tempo para o remanescente do projétil atingir uma massa similar à massa atual de Mercúrio foi de pelo menos 35 horas após o impacto para as simulações do Grupo A, e cerca de 12 horas após o impacto para as simulações do Grupo B. No Grupo A, a escala de tempo maior reflete uma ruptura mais pronunciada do projétil, devido à maior densidade média dos alvos em comparação com os do Grupo B. Isto está vinculado a uma maior quantidade de núcleo ferroso no primeiro caso. Como resultado da ruptura mais pronunciada, o projétil do Grupo A precisa de mais tempo para conseguir reacretar gravitacionalmente o material espalhado e atingir a mesma massa final observada no Grupo B.

É importante ressaltar que os ângulos que produziram bons resultados conforme mencionado acima são ângulos menores que o ângulo de impacto médio (conferir Figs. 3.7 e 3.8). Isso pode ser notado também pelo histograma cinza da Fig. 2.5, onde foram consideradas todas as colisões ocorridas no disco. Porém, o histograma vermelho da mesma figura corrobora os nossos resultados, isto é, ângulos de impacto entre 30° e 40° fornecem uma configuração mais apropriada para a reprodução de Mercúrio, envolvendo corpos com as massas semelhantes que foram definidas nesse trabalho, por meio de um único evento de colisão do tipo *hit-and-run*.

3.2 Dependência da resolução da simulação

A resolução da simulação é outro fator determinante nos resultados. Em nossas simulações, usamos uma resolução relativamente baixa de partículas 1×10^5 . Nós então realizamos simulações de alta resolução com 5×10^5 e 1×10^6 partículas em todo o sistema para avaliar os efeitos da resolução sobre nossos resultados. Como podemos ver na Figura 3.9, a resolução tem efeito nos resultados considerando as primeiras 24 horas das simulações. No entanto, no nosso caso (impacto gigante de *hit-and-run*), a mudança é insignificante e isto pode tornar-se ainda mais aparente à medida que o sistema evolui ao longo do tempo. As alterações nos resultados da fração de massa de ferro são ainda menores dependendo da resolução.

As diferenças mais significativas na massa e na fração de massa de ferro nas simulações de maior resolução (AF) em comparação com as mais baixas estão relacionadas à presença de outros pequenos aglomerados individuais que não são acretados ao aglomerado principal. Eles evoluem em torno do remanescente do projétil e não são observados na maioria das simulações de baixa resolução e de alta resolução BF.

Esses diversos aglomerados são pequenos agregados de material ejetado de silicato que promovem um atraso no processo de acreção do aglomerado principal.

Como resultado, a escala de tempo de acreção do remanescente aumenta. Como eles estão dentro de alguns raios de influência do aglomerado principal e têm velocidades relativas semelhantes, é muito provável que esses pequenos aglomerados acabem sendo acretados ao aglomerado principal. Finalmente, aumentarão a massa final do remanescente e diminuirão a sua fração final de massa de ferro para atingir valores semelhantes aos das simulações de baixa resolução. Porém, notamos que onde ocorrem, a massa remanescente final é menor e a fração final de massa de ferro é maior.

3.3 Reacção do material ejetado

Nas simulações que produziram os melhores resultados, o projétil tem todo o seu manto praticamente removido e, após algum tempo de evolução do sistema, o aglomerado remanescente começa a recretar o material do manto mais próximo a sua volta (cf. Fig. 3.6). No final, o remanescente do projétil fica predominantemente constituído pelo núcleo de ferro e, após dois dias de evolução, a sua massa não aumenta mais de forma significativa.

O material reacumulado no projétil é quase que completamente advindo do projétil original e menos de 0,5% provém do alvo. Isso é esperado devido à geometria da colisão oblíqua e também à velocidade baixa do impacto. O projétil não sofre uma desaceleração significativa após a colisão e, ao mesmo tempo, a maioria do material do manto que é perdido permanece na região do impacto, ao redor do alvo. O restante do material chega a se separar do núcleo do projétil, mas como mantém uma velocidade similar à deste aglomerado ferroso, uma fração cuja velocidade relativa é menor à velocidade de escape do aglomerado acaba recretando nele, fornecendo a maior parte do manto rochoso final.

Por outro lado, o material ejetado que fica na região do impacto é recretado quase que totalmente no alvo, dado que este é o maior corpo na configuração. No entanto, ao final de nossas simulações, ainda encontramos até $\sim 20\%$ do material ejetado do manto do projétil que não foi reacumulado nem ao alvo nem ao projétil. Isto significa que, para que os resultados que obtivemos sejam válidos, o remanescente do projétil deve evitar o reacúmulo de grande parte desse material perdido e espalhado no disco.

Para avaliar esta questão, estendemos nossas melhores simulações de cada grupo de configuração (AF e BF) por 15 dias (aproximadamente $1/5$ do período orbital de Mercúrio). Descobrimos que nossos resultados não mudaram significativamente após esse período. Houve um pequeno aumento nas massas finais (2-5%) e uma diminuição nas frações de massa de ferro (1-3%) do remanescente

do projétil quando comparado aos resultados ao fim de apenas 2 dias. Esses resultados mostram que nossas simulações são consistentes e que o aumento do tempo de simulação e da resolução do sistema tem pouco efeito sobre elas.

3.4 Efeitos sobre o alvo

A possibilidade de produzir um análogo a Mercúrio, a partir do projétil numa colisão *hit-and-run* em baixa velocidade entre corpos de massa semelhante, tem se mostrado plausível. Entretanto, também precisamos abordar a questão acerca do destino do alvo após a colisão.

A princípio, as nossas simulações mostram que a ruptura causada pela colisão no alvo não é desprezível, mas a sua composição final (fração núcleo-manto) apenas se vê alterada. Isto é consistente com o que as leis de escala preveem para o regime de *hit-and-run*, onde o alvo deve permanecer praticamente intacto após a colisão. O alvo sofre uma ruptura e uma alteração na composição mais pronunciadas ($\sim 20\%$ e $\sim 30\%$ de perda de massa total para as simulações dos Grupos A e B, respectivamente) a medida que a razão de massas alvo/projétil diminui, ou seja, quando os corpos são mais parecidos, o que é esperado. O grau de ruptura no alvo também aumenta a medida que os ângulos de impacto se aproximam do limite entre o regime oblíquo e o regime frontal (asteriscos vermelhos na Fig. 2.6). Porém, mesmo nessas situações, a ruptura no alvo é sempre menos acentuada que no projétil e a perda de massa do manto não é significativa ao ponto de gerar um outro análogo de Mercúrio.

Uma outra restrição importante se refere ao destino dinâmico do alvo após a colisão. Nos estudos prévios encontrados na literatura, a ideia era que o proto-Mercúrio colidia com Vênus, ou inclusive com a Terra, nas etapas bem finais do processo de acreção do disco protoplanetário. Desta forma, após a colisão, a arquitetura do Sistema Solar interior ficava coerente com a realidade. Na hipótese de uma colisão entre corpos de massa similar, por outro lado, resulta necessário que haja algum mecanismo pós-impacto para eliminar o corpo alvo do Sistema Solar interior.

Nossas simulações não seguem a evolução orbital de nenhum dos corpos após a colisão; isto é um tema que planejamos investigar em trabalhos futuros. No entanto, as simulações nos permitem calcular as variações médias do desvio da trajetória e da velocidade relativa entre os corpos devidas ao impacto. Os resultados mostram que essas variações seriam insuficientes para causar uma mudança drástica nas órbitas heliocêntricas dos corpos. As simulações que apresentaram as maiores variações chegam a 8% em média no ângulo da trajetória para ambos

os corpos, e a 17% e 13% em média na velocidade relativa entre o alvo e o projétil, respectivamente. Como uma órbita pré-impacto muito excêntrica do alvo é improvável, espera-se então que ele sobreviva no Sistema Solar interior em vez de ser lançado em direção ao Sol ou ser ejetado para fora do sistema.

Por outro lado, devemos lembrar que o alvo é um corpo relativamente pequeno, do tamanho dos embriões típicos que são considerados em simulações de discos de acreção. Logo, se o impacto com o proto-Mercúrio ocorrer nos primeiros milhões de anos do estágio final de acreção do disco protoplanetário, o remanescente do alvo ainda poderia ser posteriormente acretado por outro embrião planetário em processo de crescimento, por exemplo, por um proto-Vênus, num impacto em regime de acreção parcial.

A Fig. 3.10 mostra a distribuição temporal de todas as colisões de acreção parcial ou total registradas nas simulações de FRANCO *et al.* (2022), em amarelo, sobrepostas às colisões de *hit-and-run* que poderiam potencialmente formar um Mercúrio, ou seja, as mesmas apresentadas nos histogramas da Fig. 2.5, utilizando o mesmo código de cores (cinza, azul e vermelho). Da figura podemos concluir que, após que as colisões de *hit-and-run* cessam ou se tornam menos frequentes, ainda há um intervalo de algumas centenas de milhões de anos durante os quais continua havendo uma acreção residual no disco. Seria precisamente durante esta etapa que o alvo da colisão que formou Mercúrio poderia ser acretado por outro embrião.

No entanto, é necessário reconhecer que este cenário deve obedecer à condição de que apenas o alvo seja acretado a outro embrião planetário – com exceção do proto-Mercúrio remanescente – e o projétil não se envolva em acreções posteriores, cujo resultado seja sua fusão com outro embrião e conseqüentemente não se resulte daí um análogo a Mercúrio no sistema. Em particular, como o projétil e o alvo pós-impacto permanecem em órbitas heliocêntricas semelhantes, poderiam vir a colidir novamente entre si num encontro próximo subsequente, com dois resultados possíveis: (i) numa colisão em regime de acreção, dar-se-ia origem a um novo embrião planetário com características incompatíveis com o atual Mercúrio, ou (ii) num regime de *hit-and-run*, poderia ocorrer um aumento da Z_{Fe} do remanescente do projétil, também incompatível com o atual Mercúrio.

3.5 ANEOS vs. Tillotson

Um modelo de equações de estado que também é bastante utilizado na literatura para simular a hidrodinâmica de materiais sólidos é o de TILLOTSON (1962). Trata-se de uma formulação analítica simples, de fácil implementação, porém ca-

rece de um tratamento termodinamicamente consistente das fases mistas e das transições de fase. Para a transição de fase líquido-vapor, por exemplo, o modelo interpola linearmente a pressão entre um líquido de baixa densidade e a fase gasosa, conforme representado na Fig. 3.11. Nas aplicações para simular colisões de corpos sólidos, os modelos de ANEOS e Tillotson produzem resultados semelhantes quando são consideradas velocidades de impacto relativamente baixas, de forma que apenas parte do material rochoso se aproxima do limite de vaporização, onde o tratamento inadequado da transição de fase pode afetar a pressão térmica (CHAU *et al.*, 2018).

Por esse motivo, as equações de estado de Tillotson não são apropriadas para a modelagem de impactos de escala planetária em que a vaporização é um processo físico determinante (STEWART *et al.*, 2020). Entretanto, elas têm se mostrado adequadas para simular colisões de corpos menores, como asteroides e cometas. No caso do evento de formação de Mercúrio, espera-se que os resultados sejam afetados quando aplicadas as equações de Tillotson, uma vez que desejamos avaliar não apenas a massa final total do corpo resultante, mas também a proporção de cada uma das camadas de diferenciação.

Em função da sua fácil implementação, iniciamos nossos primeiros testes de colisões com `miluphcuda` utilizando as equações de estado de Tillotson. Porém, os resultados dessas simulações apresentaram problemas técnicos, atingindo um limite inferior no tamanho do passo da integração que não possibilitou que as simulações fossem além de algumas poucas horas de evolução. Um exemplo disto é apresentado na Fig. 3.12. Em função disso, optamos por adotar as equações de M-ANEOS que, apesar de não serem tão simples nem intuitivas para o usuário, permitiram evoluir o sistema para além de dias sem apresentar limitações técnicas.

Cabe destacar que nas simulações com as equações de Tillotson, obtivemos bons resultados parciais ao assumirmos uma reacção do material ejetado dentro de uma esfera de influência mais abrangente, com 0,5 raios de Hill. Nesses casos, o candidato a Mercúrio tingia uma Z_{Fe} de 0,65 e uma massa de 0,058 M_{\oplus} após um pouco mais de 1 hora de simulação. Curiosamente, simulações similares com ANEOS produziram resultados um pouco piores após evoluir o sistema por um intervalo de tempo maior (ex. grupo AD na Tabela 2.1). Porém, é importante ressaltar que os parâmetros adotados nas simulações com as equações de Tillotson não obedeceram às leis de escala e não podem ser comparados diretamente com os resultados de ANEOS. Os detalhes sobre as simulações com o modelo de Tillotson são mencionados aqui apenas por uma questão de completeza.

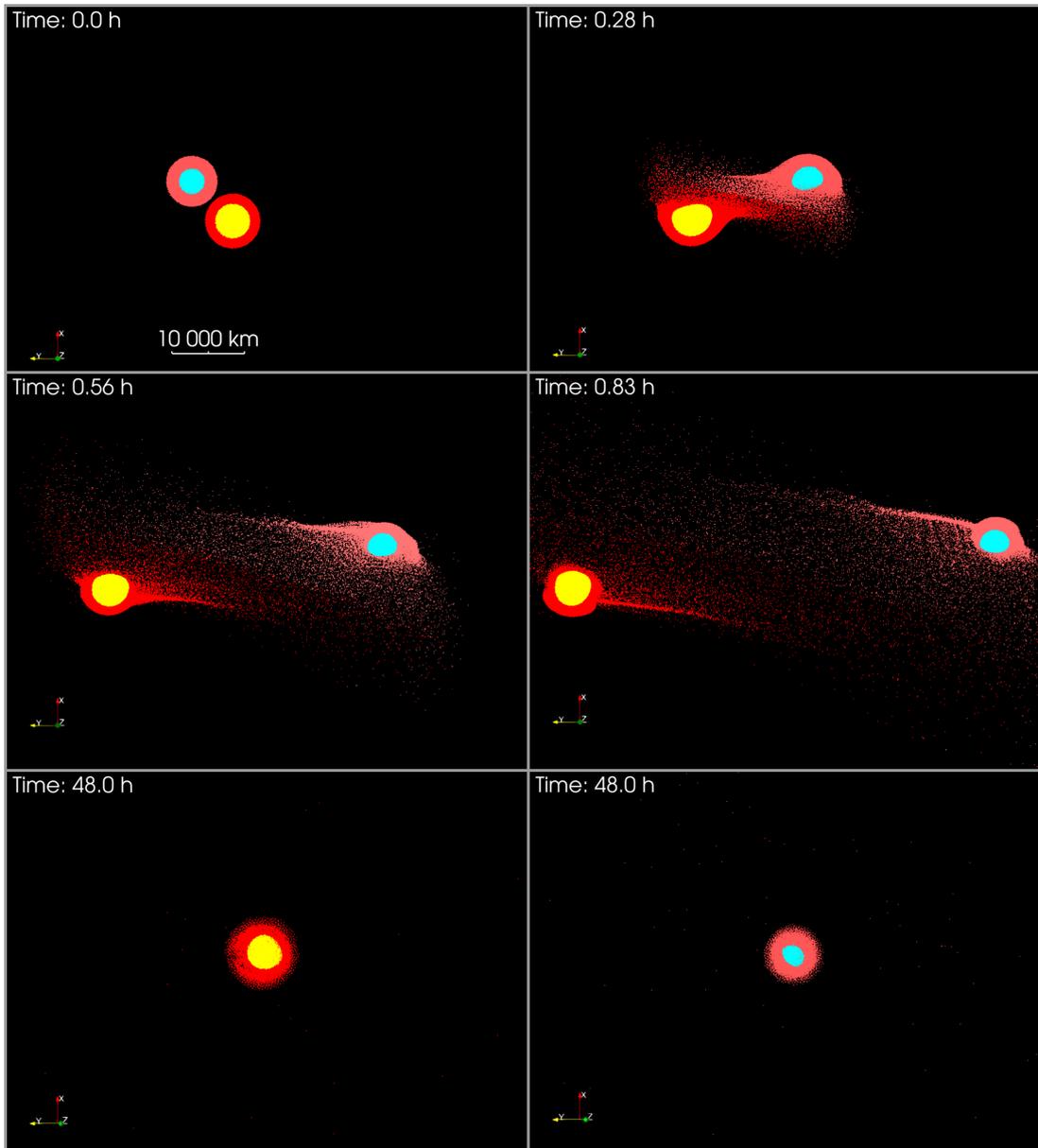


Figura 3.1: Exemplo de simulação do grupo AC.

O alvo tem uma massa inicial de $0,2 M_{\oplus}$. O ângulo de impacto é $48,8^{\circ}$ e a velocidade de impacto é $22,2 \text{ km s}^{-1}$. O quadro final mostra o candidato a Mercúrio que termina com um Z_{Fe} de 0,36 e uma massa de $0,108 M_{\oplus}$.

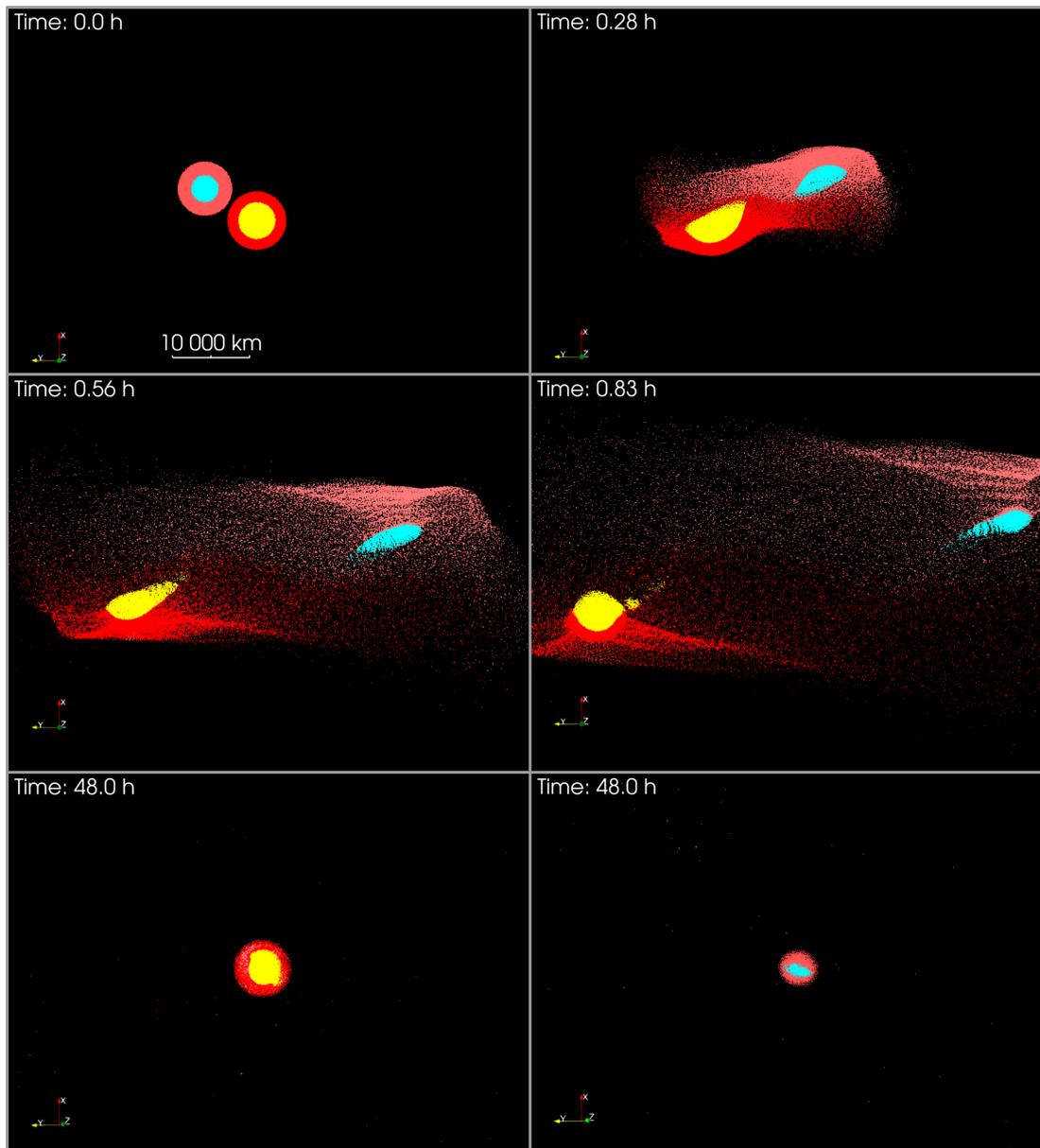


Figura 3.2: Exemplo de simulação do grupo AD.

O alvo tem uma massa inicial de $0,2 M_{\oplus}$. O ângulo de impacto é $34,5^{\circ}$ e a velocidade de impacto é $22,5 \text{ km s}^{-1}$. O quadro final mostra o candidato a Mercúrio que termina com um Z_{Fe} de 0,63 e uma massa de $0,062 M_{\oplus}$.

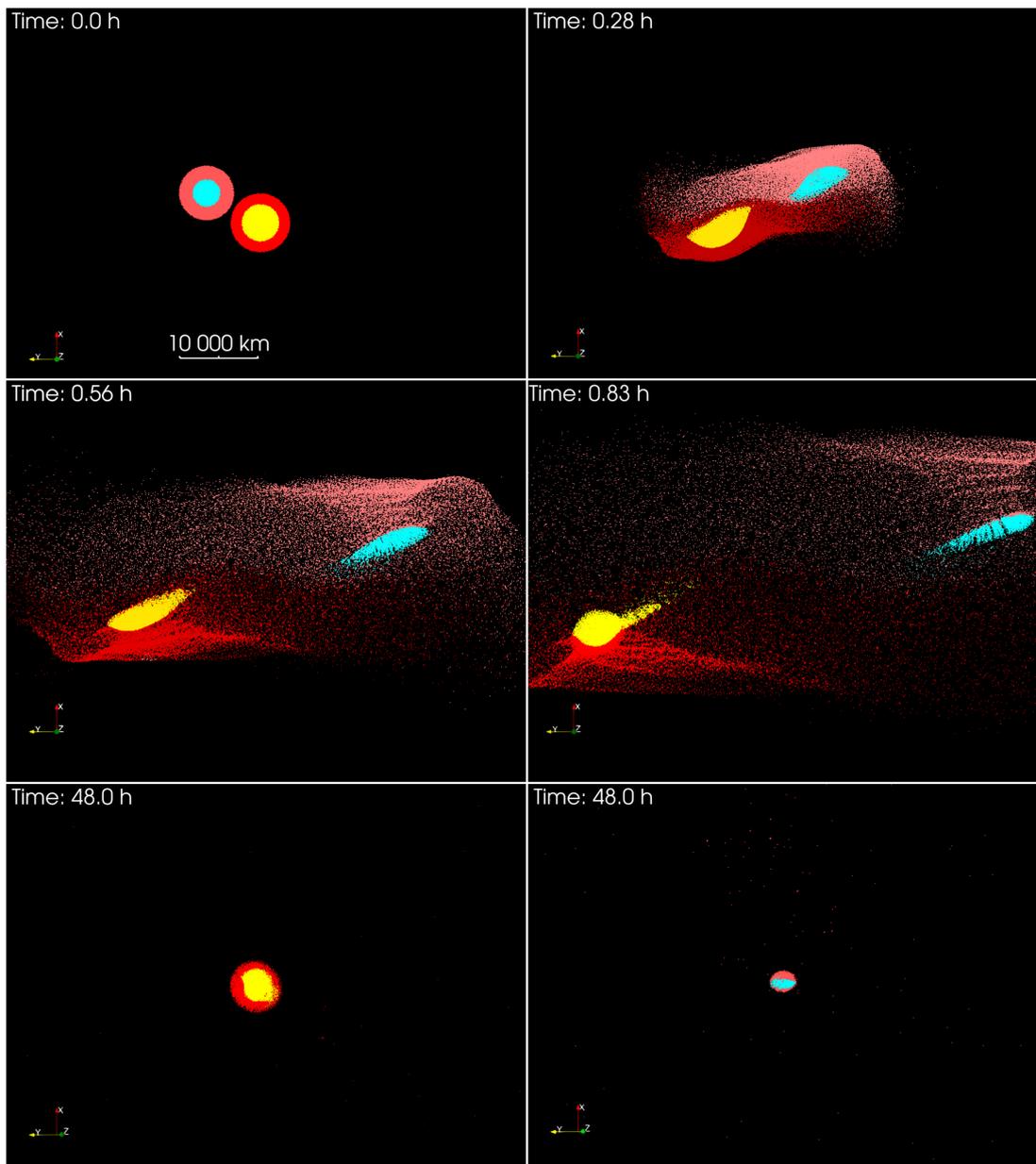


Figura 3.3: Exemplo de simulação do grupo AF.

O alvo tem uma massa inicial de $0,2 M_{\oplus}$. O ângulo de impacto é $31,6^{\circ}$ e a velocidade de impacto é $22,6 \text{ km s}^{-1}$. O quadro final mostra o candidato a Mercúrio que termina com um Z_{Fe} de 0,73 e uma massa de $0,052 M_{\oplus}$.

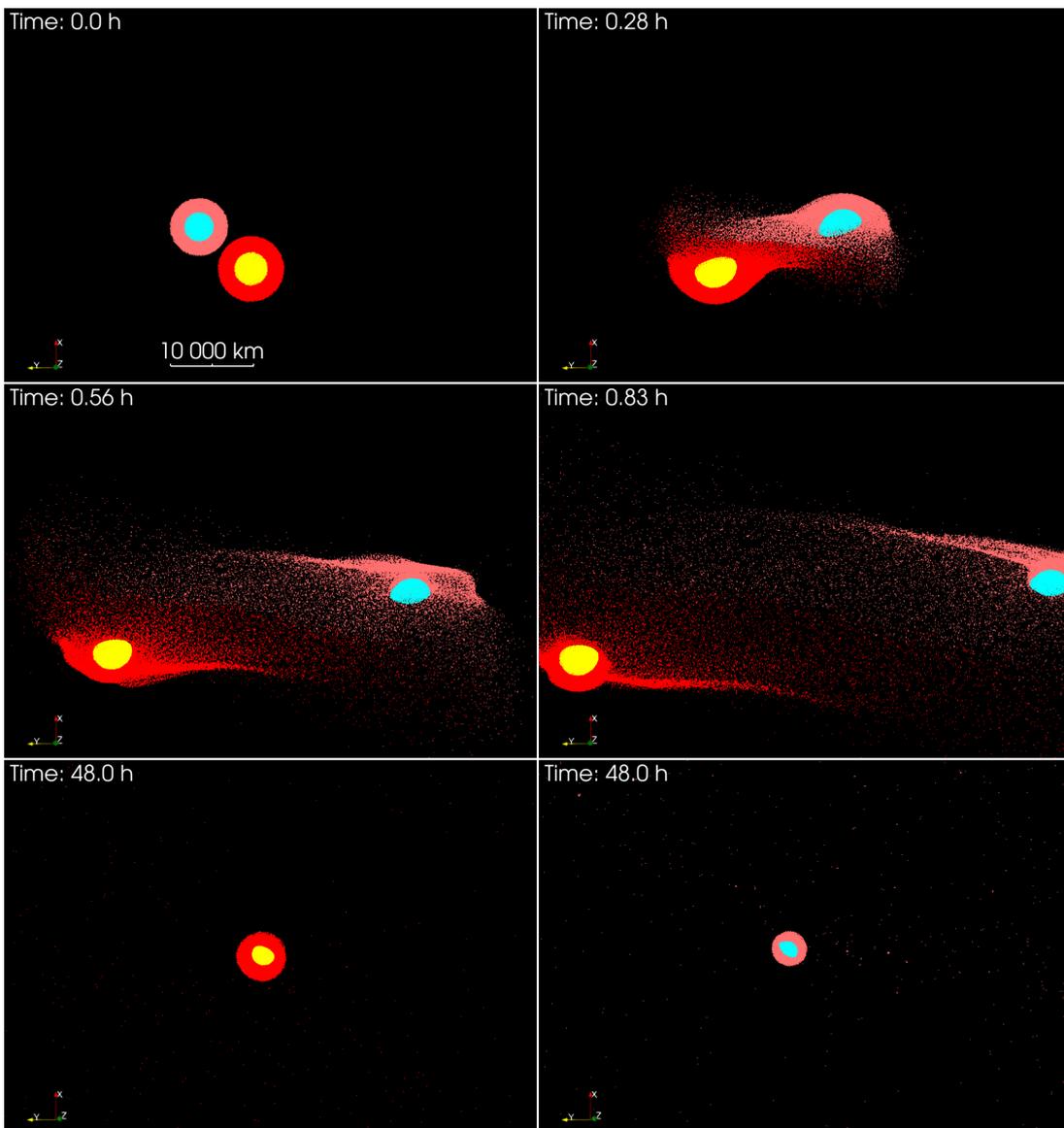


Figura 3.4: Exemplo de simulação do grupo BC.

O alvo tem uma massa inicial de $0,2 M_{\oplus}$. O ângulo de impacto é $42,5^{\circ}$ e a velocidade de impacto é $22,2 \text{ km s}^{-1}$. O quadro final mostra o candidato a Mercúrio que termina com um Z_{Fe} de 0,43 e uma massa de $0,090 M_{\oplus}$.

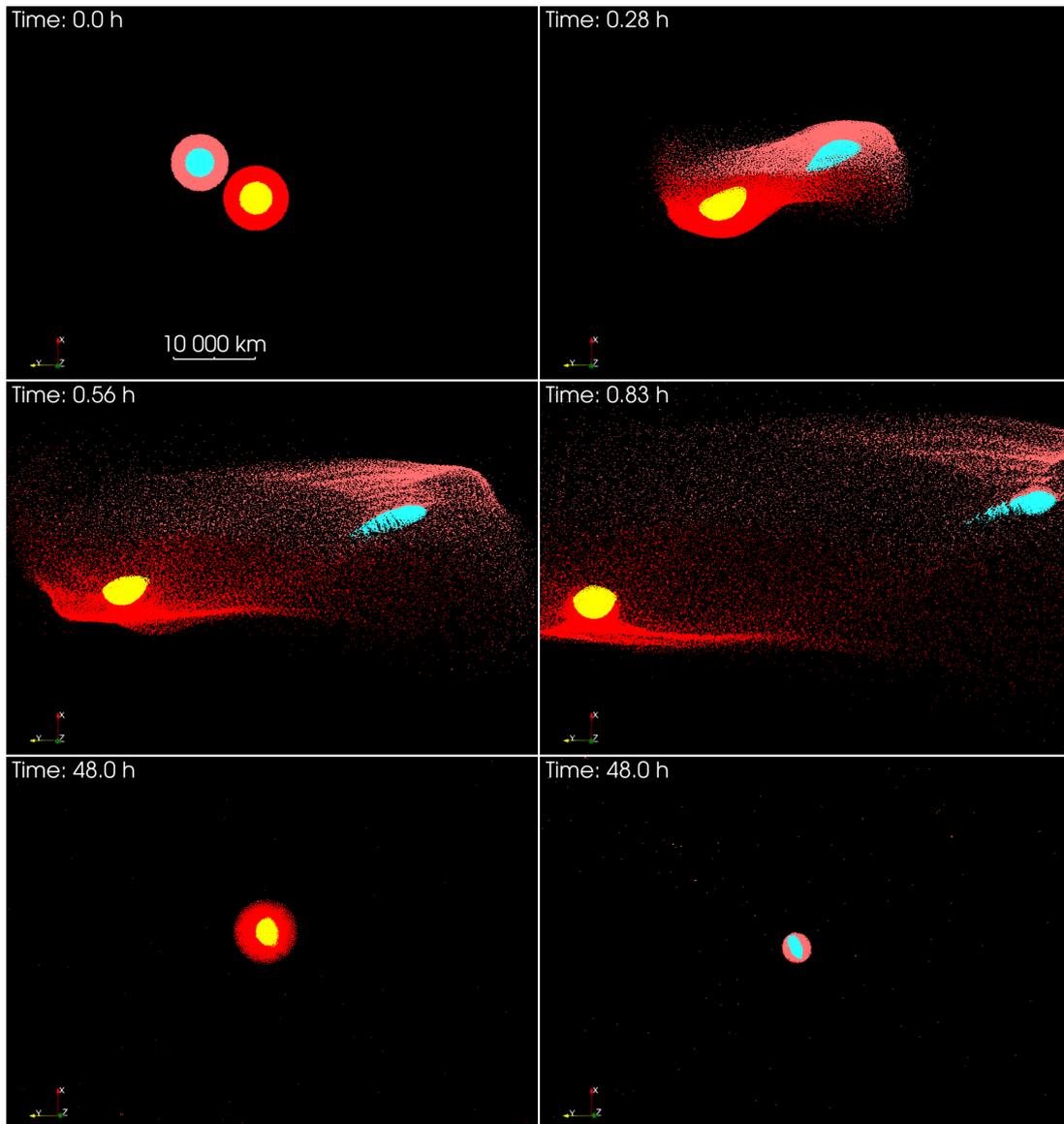


Figura 3.5: Exemplo de simulação do grupo BD.

O alvo tem uma massa inicial de $0,2 M_{\oplus}$. O ângulo de impacto é $35,3^{\circ}$ e a velocidade de impacto é $22,25 \text{ km s}^{-1}$. O quadro final mostra o candidato a Mercúrio que termina com um Z_{Fe} de $0,60$ e uma massa de $0,065 M_{\oplus}$.

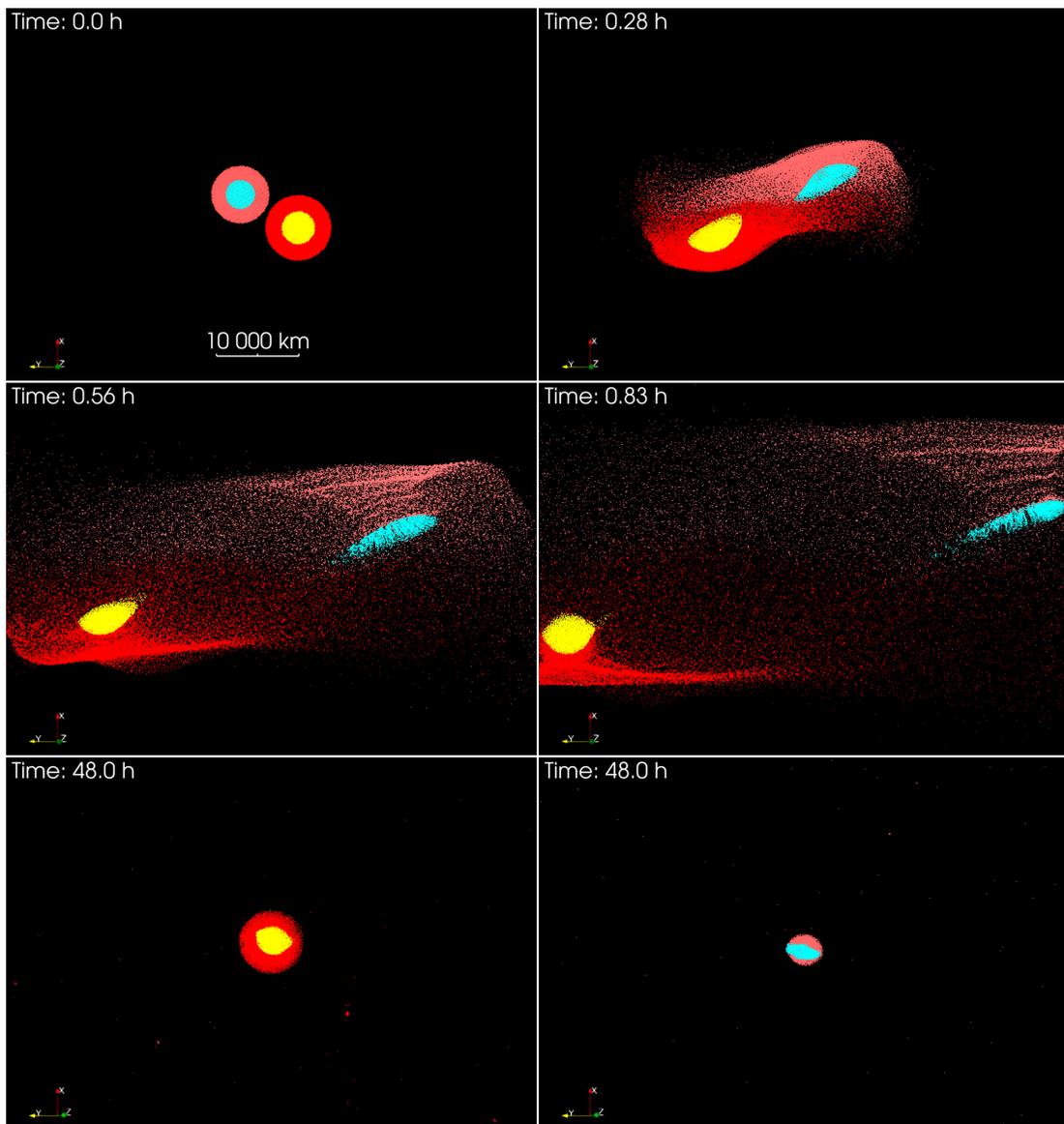


Figura 3.6: Exemplo de simulação do grupo BF.

O alvo tem uma massa inicial de $0,2 M_{\oplus}$. O ângulo de impacto é $32,5^{\circ}$ e a velocidade de impacto é $22,3 \text{ km s}^{-1}$. O quadro final mostra o candidato a Mercúrio que termina com um Z_{Fe} de 0,68 e uma massa de $0,056 M_{\oplus}$.

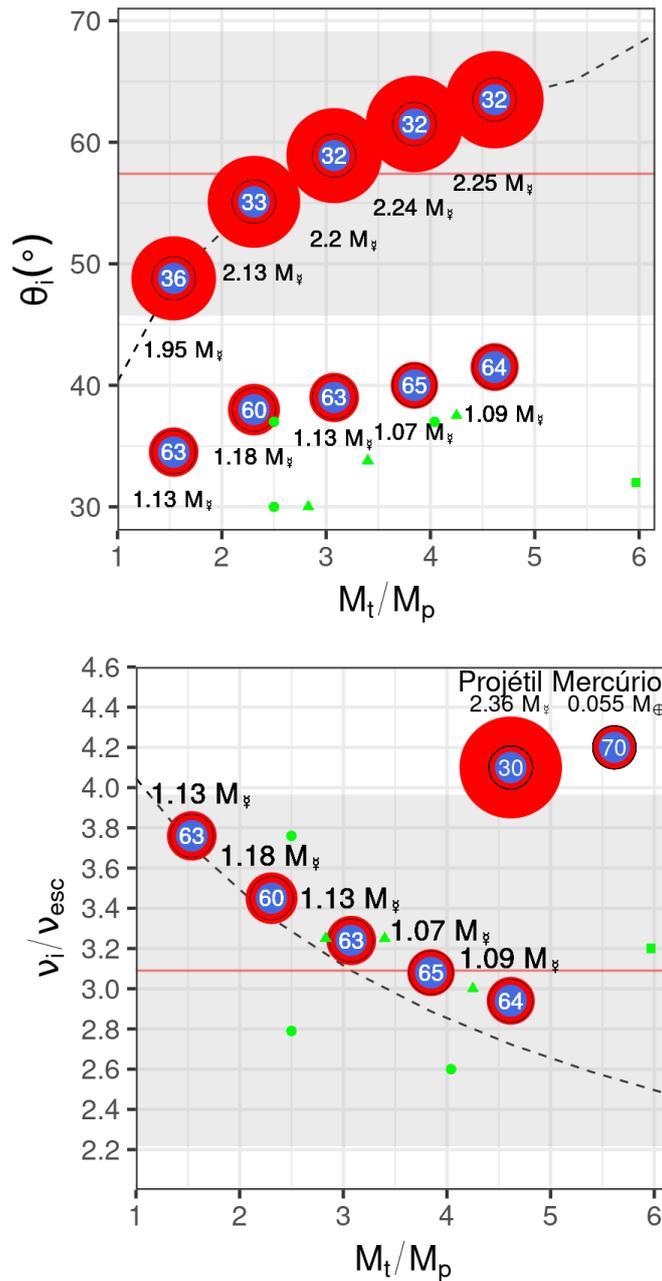


Figura 3.7: Síntese dos resultados das simulações do Grupo A.

Acima: Ângulo de impacto vs. massa do alvo. Simulações dos subgrupos AC e AD, somente. As simulações do subgrupo AF não são apresentadas para evitar sobreposição. *Abaixo:* Velocidade de impacto vs. massa do alvo. Simulações do subgrupo AD, somente. As simulações dos subgrupo AC e AF não são apresentadas para evitar sobreposição. No canto superior direito estão representados o proto-Mercúrio e o Mercúrio atual. O tamanho dos círculos está a escala. Os pontos verdes correspondem a resultados de outros autores. Ver texto para mais detalhes.

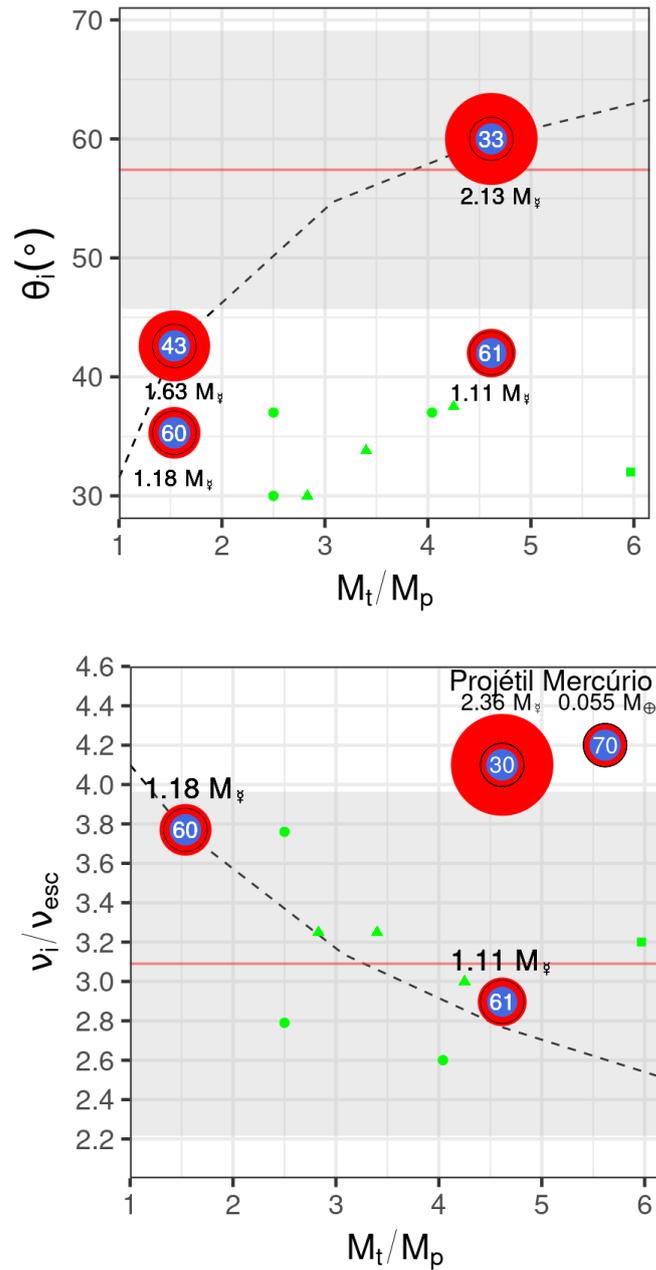


Figura 3.8: Síntese dos resultados das simulações do Grupo B. Semelhante à Fig. 3.7. No painel de cima se mostram apenas os resultados dos subgrupos BC e BD e no de baixo apenas os do subgrupo BD, para evitar sobreposição.

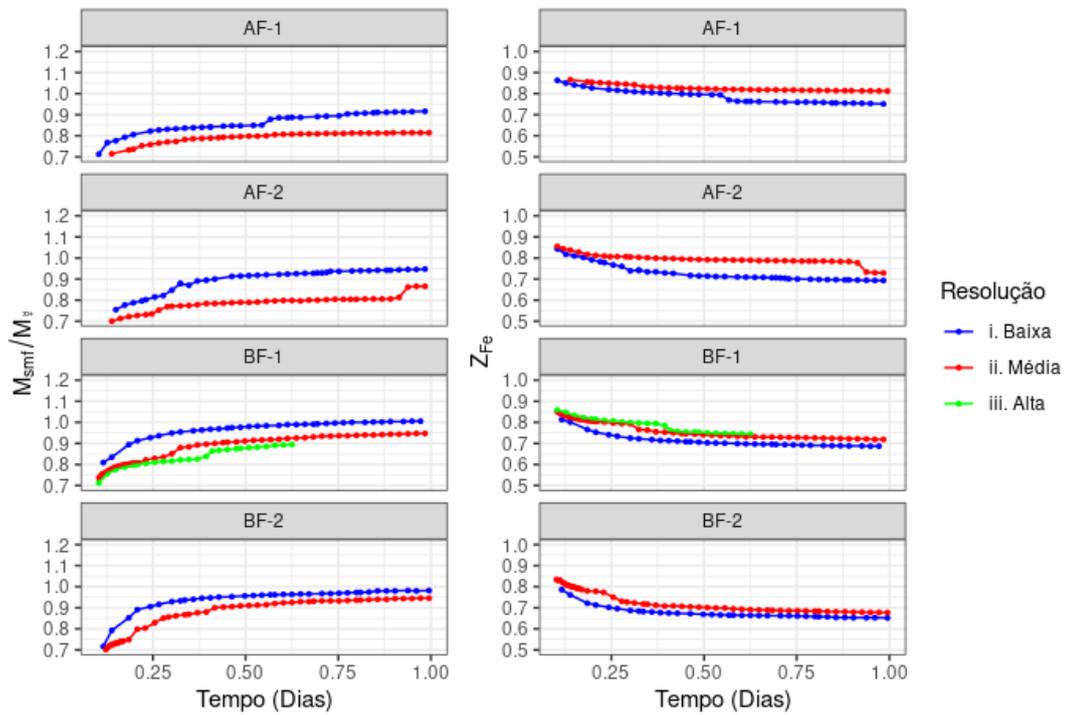


Figura 3.9: Comparativo em termos de resolução das simulações.

Comparação da resolução das nossas melhores simulações em termos de massa normalizada (esquerda) e fração de massa de ferro (direita) do segundo maior remanescente ao longo do tempo. AF e BF (-1) e (-2) correspondem a simulações envolvendo alvos de 0,2 e 0,6 massas terrestres, respectivamente. Resoluções baixa, média e alta correspondem ao total de partículas de 1×10^5 , 5×10^5 e 1×10^6 , respectivamente.

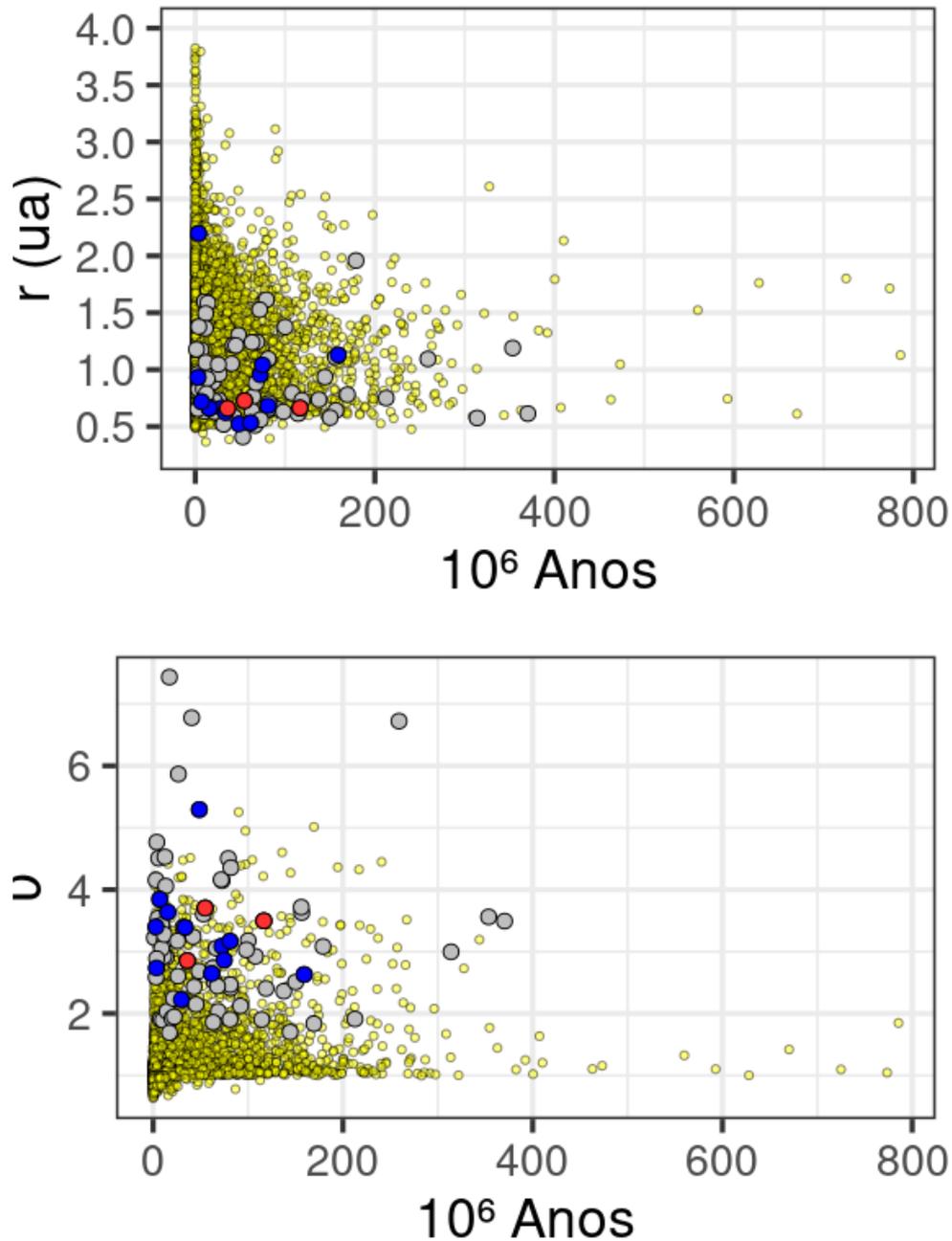


Figura 3.10: Distribuição temporal de colisões em regimes de acreção e de *hit-and-run* registrados em simulações N-corpos.

Acima: Distância heliocêntrica vs. tempo. *Abaixo:* Velocidade relativa normalizada vs. tempo. Os pontos amarelos representam todas as colisões entre embriões em regimes acretivos: acreção parcial, acreção perfeita e *graze-and-merge*. Os pontos cinzas, azuis e vermelhos representam as colisões de *hit-and-run* com erosão do projétil que poderiam formar Mercúrio (cf. Fig. 2.5). Dados processados a partir das simulações de FRANCO *et al.* (2022).

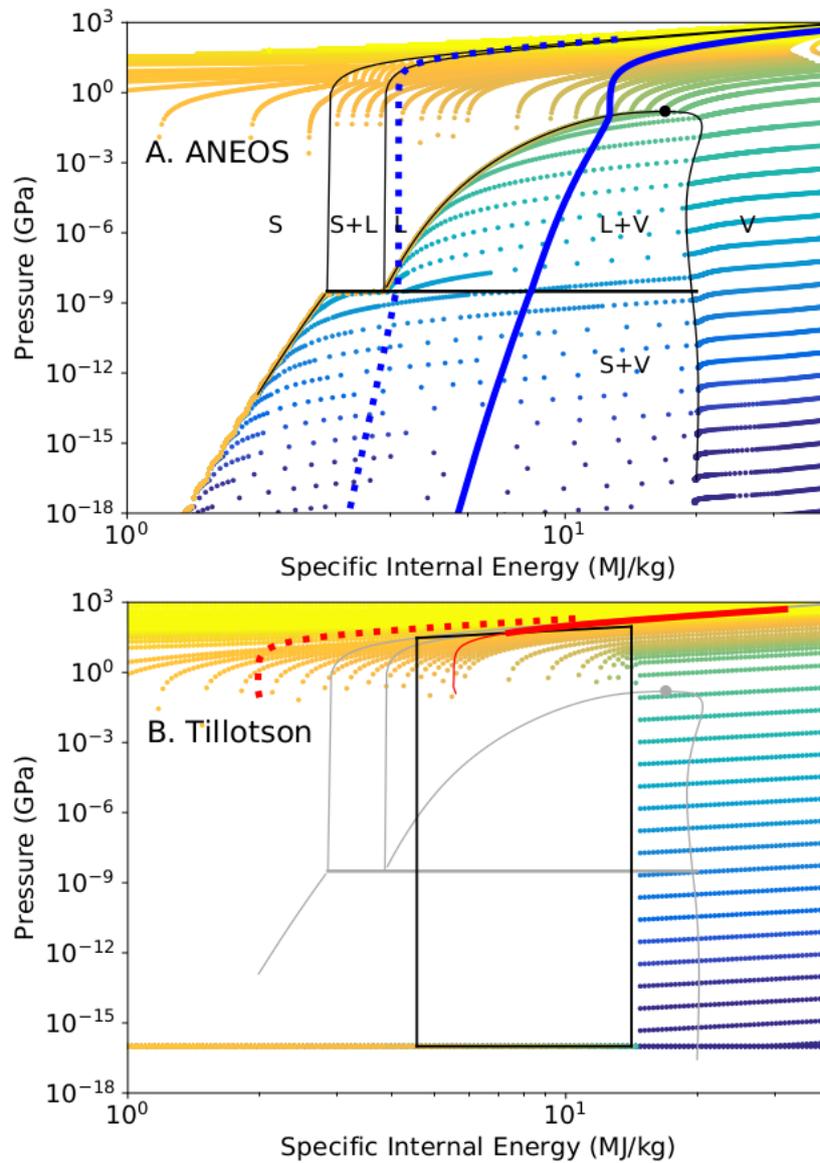


Figura 3.11: Comparação entre o modelo de ANEOS mais recente para forsterita e um modelo de Tillotson para olivina.

As linhas pretas/cinzas representam os limites das diferentes transições de fase no diagrama de pressão vs. temperatura. Cada ponto nos gráficos corresponde a um valor tabelado. A caixa preta no gráfico de Tillotson indica a região onde as equações de estado são interpoladas. As linhas pontilhadas azul e vermelha mostram a isometria com os limites de fase. Os limites de fase de ANEOS estão em cinza no painel B como referência. Fonte: STEWART *et al.* (2020).

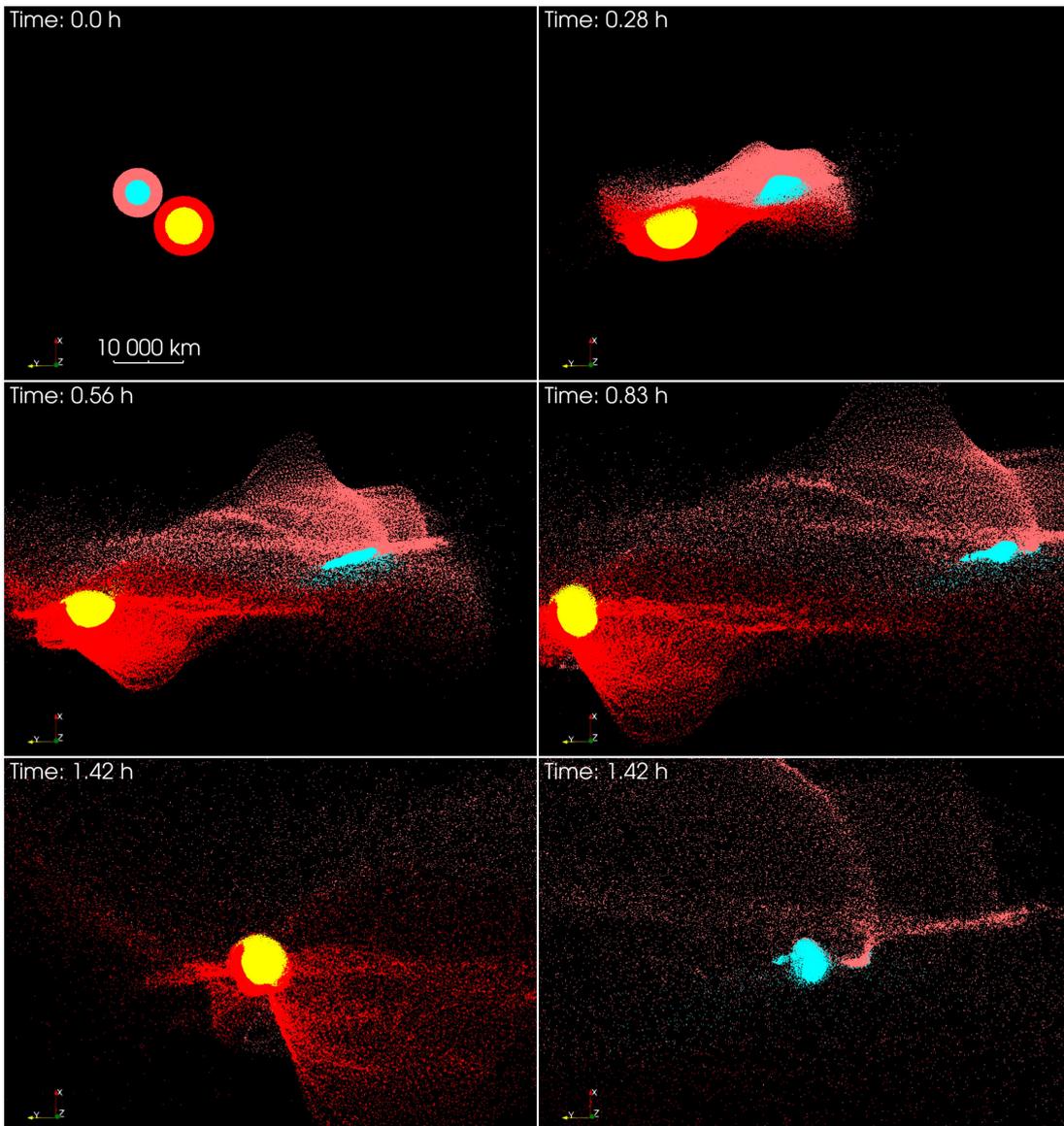


Figura 3.12: Exemplo de simulação usando as equações de estado de Tillotson. A simulação corresponde ao Grupo A, com um alvo de $0,3 M_{\oplus}$. O ângulo de impacto é $37,8^{\circ}$ e a velocidade de impacto é $23,8 \text{ km s}^{-1}$. O tempo total da simulação é de $\sim 1,5$ horas. O quadro final mostra o candidato a Mercúrio, que fica com um Z_{Fe} de 0,65 e uma massa de $0,058 M_{\oplus}$. O código de cores é o mesmo adotado anteriormente.

Capítulo 4

Discussão e conclusões

Neste trabalho de tese abordamos o problema da formação de Mercúrio através de uma colisão energética em escala planetária, combinando: (i) resultados obtidos a partir de modelos de N-corpos de acreção de discos protoplanetários, (ii) leis de escala para fragmentação, e (iii) simulações hidrodinâmicas de colisões usando SPH.

Nossos resultados mostram que uma única colisão em baixa velocidade no regime de *hit-and-run*, envolvendo dois embriões planetários de massas comparáveis, produz com sucesso um planeta igual a Mercúrio, tanto em termos de massa total quanto de fração de núcleo de ferro. Isto evita a necessidade de apelar a impactos entre corpos de massas muito diferentes, como os considerados previamente na literatura, que se mostram bastante improváveis de ocorrer em simulações de acreção de discos em comparação com colisões entre corpos de massas semelhantes, que são muito mais frequentes.

Nem todos os conjuntos de parâmetros de impacto favoráveis, previstos pelas leis de escala, fornecem os mesmos resultados, o que é esperado uma vez que tais leis consideram corpos de densidade homogênea, enquanto que as nossas simulações consideram corpos geologicamente diferenciados. No entanto, apenas para certos ângulos e velocidades de impacto, distribuídos dentro das faixas de valores previstos pelas leis de escala para cada razão de massa, é possível obter um segundo maior fragmento remanescente com as propriedades desejadas.

Isto aponta para a hipótese de que um único impacto formador de Mercúrio tratar-se-ia de um evento significativamente abrangente, ou seja, capaz de ocorrer em diferentes cenários colisionais, mas também muito sensível a pequenas alterações nos parâmetros, especialmente no ângulo de impacto. Em nossas simulações, os melhores análogos de Mercúrio são obtidos com ângulos de impacto tais que o comprimento de interação, L_{int} , esteve entre 3 100 e 3 500 km, para razões de massas alvo/projétil entre 4,5 e 1,5, respectivamente.

Por outro lado, a formação de Mercúrio por meio de um único evento colisional envolve algumas restrições que pontuaremos a seguir.

Elementos moderadamente voláteis. Em termos de composição superficial, ainda há uma escassez de trabalhos que analisem a relação entre impactos de tipo *hit-and-run* e a presença de elementos moderadamente voláteis na superfície de Mercúrio. Nosso trabalho não consegue abordar esta questão, embora esta seja uma restrição importante que precisaria ser incorporada em pesquisas futuras. Estudos recentes argumentam que impactos gigantes, como o do modelo canônico, não resultariam necessariamente em um empobrecimento dos elementos moderadamente voláteis que eventualmente existiam no proto-Mercúrio (EBEL e STEWART, 2018; STEWART *et al.*, 2016). Mas estas análises não são conclusivas. Equações de estado aprimoradas (como as de STEWART *et al.*, 2020, por exemplo), em relação às curvas de transição de fase sólido-vapor e líquido-vapor, podem ajudar a fornecer uma análise mais precisa da evolução dos voláteis durante um impacto oblíquo, como o cenário explorado aqui.

Por outro lado, mesmo que a maior parte do conteúdo volátil do proto-Mercúrio seja removida por um impacto gigante, o planeta pode ter experimentado impactos subsequentes não erosivos de cometas ou de fragmentos de planetesimais, que podem ter depositado algum material volátil em sua superfície (ex. BRASSER *et al.*, 2016; HYODO *et al.*, 2021; LAWRENCE *et al.*, 2013; MORBIDELLI *et al.*, 2012). Outra possibilidade é que Mercúrio tenha acumulado poeira interplanetária em escalas de tempo mais longas (ex. FRANTSEVA *et al.*, 2022). Assim, Mercúrio poderia ter sido suprido de voláteis durante os estágios finais da formação do Sistema Solar interior através de processos semelhantes aos ocorridos nos planetas vizinhos (BURGER e SCHÄFER, 2017; BURGER *et al.*, 2018, 2020a,b; LAWRENCE, 2017; MAROV e IPATOV, 2005, 2018, 2004; MORBIDELLI *et al.*, 2000; O'BRIEN *et al.*, 2006; RAYMOND e IZIDORO, 2017; RAYMOND *et al.*, 2004, 2009; RONCO e DE ELÍA, 2018; VENTURINI *et al.*, 2020; WALSH *et al.*, 2011).

Múltiplos impactos erosivos. O cenário de múltiplos impactos erosivos também tem sido proposto como um mecanismo de remoção de parte do manto de Mercúrio (CHAU *et al.*, 2018; SVETSOV, 2011). O sucesso na reprodução da atual fração de massa do núcleo exige um efeito cumulativo de sucessivos impactos por planetesimais ou corpos menores, que impactem com velocidades relativamente altas, em torno de 30 km s^{-1} , e cuja massa cumulativa seja maior do que a massa do proto-Mercúrio (SVETSOV, 2011). Além disso, tanto o material

ejetado no impacto quanto os planetesimais devem evitar ser (re)acretados ao proto-Mercúrio durante esses eventos (CHAMBERS, 2013; EBEL e STEWART, 2018). O intervalo de tempo entre impactos sucessivos também condiciona o modelo, uma vez que intervalos curtos ocasionam uma perda excessiva de massa comparada com a perda sofrida quando os intervalos são longos o suficiente para permitir o proto-Mercúrio esfriar e re-condensar (CHAU *et al.*, 2018). Tais limitações afetam a viabilidade deste cenário, mas há simulações que mostram que corpos com frações de massa do núcleo altas possam decorrer de múltiplos impactos erosivos (ex. BURGER *et al.*, 2020a; CAMBIONI *et al.*, 2021; EMSENHUBER *et al.*, 2020), tornando assim este cenário uma alternativa viável ao cenário de impacto único. Porém, mesmo que colisões menores ocorram mais cedo ou mais tarde durante o processo de formação do proto-Mercúrio, um impacto gigante envolvendo outro corpo de tamanho similar tem o potencial de apagar as impressões de colisões anteriores e pode essencialmente vir a definir a sua composição final.

Há também a possibilidade de que Mercúrio seja o resultado da acreção, parcial ou total, de embriões já ricos em ferro, que por sua vez envolveram-se previamente em seus próprios eventos erosivos de *hit-and-run* (ex. BURGER *et al.*, 2020a), tendo em vista que tais colisões energéticas seriam comuns na região de formação de Mercúrio (assumindo que este tenha se formado *in situ*). Logo, não se pode descartar a possibilidade de que, no final, Mercúrio seja o resultado de uma combinação de todos estes cenários.

Ângulos de impacto diversos. Se por um lado as leis de escala preveem um intervalo bastante estreito de velocidades de impacto, o intervalo de ângulos de impacto é bastante amplo, podendo variar entre $\sim 35^\circ$ e $\sim 75^\circ$. Dentro deste intervalo, os resultados da colisão podem ser bem distintos, desde os casos em que o projétil sofre pouca ou nenhuma alteração, até os casos em que se forma um Mercúrio tal como o atual.

Este resultado, de certa forma inesperado, resulta relevante pois ainda que, por um lado, pareça indicar que a formação de Mercúrio seria um evento muito peculiar, por outro lado, mostra que colisões oblíquas em baixa velocidade, que seriam ubíquas em discos de acreção, podem explicar a sobreabundância observada de planetas extrassolares de tipo terrestre com altíssimas densidades. A diversidade de resultados também dá suporte a cenários como os discutidos no parágrafo anterior.

Como já comentamos, embora não tenhamos realizado simulações com ângulos de impacto maiores que os ângulos críticos, não esperamos produzir bons análogos

de Mercúrio em tais configurações. Ângulos de impacto grandes diminuem o comprimento de interação, exigindo mais energia de impacto para produzir o mesmo resultado. Diminuir o comprimento de interação reduz a ruptura do projétil, que já se mostrou insuficiente ao utilizar os ângulos críticos. Também não esperamos que as simulações com ângulos de impacto intermediários, entre os ângulos críticos e os diminuídos, melhorem nossos resultados, por motivos semelhantes.

Não há dúvidas de que o fator determinante do resultado da colisão é o comprimento de interação, que precisa ocorrer num tamanho apropriado, ou seja, não pode ser muito pequeno – acarretando pouca ruptura do manto do projétil, mas também não pode ser muito grande, sob o risco de passar a danificar o núcleo do projétil e diminuir a razão final desse componente. Cabe destacar que os melhores resultados ocorrem muito próximos da separatriz entre os regimes de colisão oblíqua e frontal.

4.1 Considerações finais

Os resultados deste trabalho de tese representam um aporte importante e original para o entendimento do “problema de Mercúrio”, mas vários aspectos do problema ficaram de fora no nosso estudo e precisariam ser abordados em trabalhos futuros. Destacamos aqui:

- A questão do destino dinâmico do alvo e como removê-lo da configuração final do sistema solar interior, aspecto que poderia ser abordado através de simulações de N-corpos. Após as colisões, avaliamos como os corpos foram afetados em termos de posição e velocidade, o que poderia afetar drasticamente as órbitas originais de cada embrião. Observamos que essas componentes sofrem modificações não significativas. Porém, só conseguiríamos avaliar com precisão em simulações de N-corpos, inclusive para verificarmos um possível reencontro entre os corpos colidores.
- O problema dos voláteis na superfície, que requereria uma abordagem bastante mais complexa e, por enquanto, além do nosso escopo.
- O eventual impacto dos nossos resultados no entendimento das configurações observadas entre as terras e super-terras extrassolares.

Por fim, o debate sobre as origens de Mercúrio está longe de terminar. Novos dados da sonda BepiColombo, missão em curso atualmente para orbitar este planeta único, podem gerar ainda mais controvérsias a respeito das atuais hipóteses

de formação, ou trazer à tona questões que auxiliem os estudos sobre planetas com alta densidade em geral.

Vale ainda ressaltar que o nosso trabalho adota ferramentas que, por sua vez, partem de generalizações e aproximações, bem como uma série de parametrizações para representar o sistema mais fielmente possível à realidade. Portanto, nossos resultados se validam dentro desse contexto e podem sofrer alterações à medida que a gama de considerações seja aprimorada.

Em termos de reproduzibilidade das nossas simulações, as tabelas das equações de estado de ANEOS precisam ser solicitadas ao Christoph Schäfer. Os demais parâmetros das simulações hidrodinâmicas que realizamos se encontram descritos ao longo do texto. Em termos de leis de escala, as equações e parâmetros adotados aqui se encontram descritos em ([LEINHARDT e STEWART, 2012](#); [STEWART e LEINHARDT, 2012](#)).

Bibliografia

- AGNOR, C., ASPHAUG, E., 2004, “Accretion Efficiency during Planetary Collisions”, *Astrophys. J. Lett.*, v. 613, n. 2 (out.), pp. L157–L160. doi: 10.1086/425158.
- ASPHAUG, E., REUFER, A., 2014, “Mercury and other iron-rich planetary bodies as relics of inefficient accretion”, *Nature Geosci.*, v. 7, n. 8 (ago.), pp. 564–568. doi: 10.1038/ngeo2189.
- ASPHAUG, E., 2010, “Similar-sized collisions and the diversity of planets”, *Chem. Erde - Geochem.*, v. 70, n. 3 (jan.), pp. 199–219. doi: 10.1016/j.chemer.2010.01.004.
- ASPHAUG, E., 2014, “Impact Origin of the Moon?” *Ann. Rev. Earth. Planet. Sci.*, v. 42 (maio), pp. 551–578. doi: 10.1146/annurev-earth-050212-124057.
- BENINCASA, S. M., WADSLEY, J. W., COUCHMAN, H. M. P., et al., 2019, “A tale of two clump masses: a new way to study clump formation in simulations”, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.*, v. 486, n. 4 (jul.), pp. 5022–5036. doi: 10.1093/mnras/stz1152.
- BENZ, W., ASPHAUG, E., 1995, “Simulations of brittle solids using smooth particle hydrodynamics”, *Computer Phys. Comm.*, v. 87 (maio), pp. 253–265. doi: 10.1016/0010-4655(94)00176-3.
- BENZ, W., ASPHAUG, E., 1994, “Impact Simulations with Fracture. I. Method and Tests”, *Icarus*, v. 107, n. 1 (jan.), pp. 98–116. doi: 10.1006/icar.1994.1009.
- BENZ, W., SLATTERY, W. L., CAMERON, A. G. W., 1988, “Collisional stripping of Mercury’s mantle”, *Icarus*, v. 74, n. 3 (jun.), pp. 516–528. doi: 10.1016/0019-1035(88)90118-2.

- BENZ, W., ANIC, A., HORNER, J., et al., 2007, “The Origin of Mercury”, *Space Sci. Rev.*, v. 132, n. 2-4 (out.), pp. 189–202. doi: 10.1007/s11214-007-9284-1.
- BENZ, W., ASPHAUG, E., 1999, “Catastrophic Disruptions Revisited”, *Icarus*, v. 142, n. 1 (nov.), pp. 5–20. doi: 10.1006/icar.1999.6204.
- BRASSER, R., MOJZSIS, S. J., WERNER, S. C., et al., 2016, “Late veneer and late accretion to the terrestrial planets”, *Earth Planet. Sci. Lett.*, v. 455 (dez.), pp. 85–93. doi: 10.1016/j.epsl.2016.09.013.
- BURGER, C., SCHÄFER, C. M., 2017, “Applicability and limits of simple hydrodynamic scaling for collisions of water-rich bodies in different mass regimes”. In: Maindl, T. I., Varvoglis, H., Dvorak, R. (Eds.), *Proceedings of the First Greek-Austrian Workshop on Extrasolar Planetary Systems*, pp. 63–81.
- BURGER, C., MAINDL, T. I., SCHÄFER, C. M., 2018, “Transfer, loss and physical processing of water in hit-and-run collisions of planetary embryos”, *Cel. Mech. Dyn. Astr.*, 130(1):2. doi: 10.1007/s10569-017-9795-3.
- BURGER, C., BAZSÓ, Á., SCHÄFER, C. M., 2020a, “Realistic collisional water transport during terrestrial planet formation. Self-consistent modeling by an N-body-SPH hybrid code”, *Astron. Astrophys.*, 634:A76. doi: 10.1051/0004-6361/201936366.
- BURGER, C., MAINDL, T. I., SCHÄFER, C., 2020b, “Water delivery to dry protoplanets by hit-and-run collisions”. In: Elmegreen, B. G., Tóth, L. V., Güdel, M. (Eds.), *IAU Symposium*, v. 345, pp. 287–288. doi: 10.1017/S1743921318008621.
- CAMBIONI, S., JACOBSON, S. A., EMSENHUBER, A., et al., 2021, “The Effect of Inefficient Accretion on Planetary Differentiation”, *Planet. Sci. J.*, 2(3):93. doi: 10.3847/PSJ/abf0ad.
- CAMERON, A. G. W., BENZ, W., FEGLEY JR, B., et al., 1988, “The strange density of Mercury - Theoretical considerations”. In: Vilas, F., Chapman, C. R., Matthews, M. S. (Eds.), *Mercury*, University of Arizona Press, pp. 692–708, Tucson.
- CARTER, P. J., LEINHARDT, Z. M., ELLIOTT, T., et al., 2015, “Compositional Evolution during Rocky Protoplanet Accretion”, *Astrophys. J.*, 813(1):72. doi: 10.1088/0004-637X/813/1/72.

- CHAMBERS, J. E., 2001, “Making More Terrestrial Planets”, *Icarus*, v. 152, n. 2 (ago.), pp. 205–224. doi: 10.1006/icar.2001.6639.
- CHAMBERS, J. E., 2013, “Late-stage planetary accretion including hit-and-run collisions and fragmentation”, *Icarus*, v. 224, n. 1 (maio), pp. 43–56. doi: 10.1016/j.icarus.2013.02.015.
- CHAMBERS, J. E., 1999, “A hybrid symplectic integrator that permits close encounters between massive bodies”, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.*, v. 304, n. 4 (abr.), pp. 793–799. doi: 10.1046/j.1365-8711.1999.02379.x.
- CHAMBERS, J. E., WETHERILL, G. W., 1998, “Making the Terrestrial Planets: N-Body Integrations of Planetary Embryos in Three Dimensions”, *Icarus*, v. 136, n. 2 (dez.), pp. 304–327. doi: 10.1006/icar.1998.6007.
- CHAU, A., REINHARDT, C., HELLED, R., et al., 2018, “Forming Mercury by Giant Impacts”, *Astrophys. J.*, 865(1):35. doi: 10.3847/1538-4357/aad8b0.
- CLEMENT, M. S., KAIB, N. A., CHAMBERS, J. E., 2019a, “Dynamical Constraints on Mercury’s Collisional Origin”, *Astron. J.*, 157(5):208. doi: 10.3847/1538-3881/ab164f.
- CLEMENT, M. S., KAIB, N. A., RAYMOND, S. N., et al., 2019b, “The early instability scenario: Terrestrial planet formation during the giant planet instability, and the effect of collisional fragmentation”, *Icarus*, v. 321 (mar.), pp. 778–790. doi: 10.1016/j.icarus.2018.12.033.
- CLEMENT, M. S., CHAMBERS, J. E., JACKSON, A. P., 2021, “Dynamical Avenues for Mercury’s Origin. I. The Lone Survivor of a Primordial Generation of Short-period Protoplanets”, *Astron. J.*, 161(5):240. doi: 10.3847/1538-3881/abf09f.
- CLEMENT, M. S., CHAMBERS, J. E., KAIB, N. A., et al., 2023, “Mercury’s formation within the Early Instability Scenario”, *arXiv e-prints*, art. arXiv:2301.09646. doi: 10.48550/arXiv.2301.09646.
- COLLINS, G. S., MELOSH, H. J., 2014, “Improvements to ANEOS for Multiple Phase Transitions”. In: *45th Annual Lunar and Planetary Science Conference*, Lunar and Planetary Science Conference, p. 2664.
- DIEHL, S., ROCKEFELLER, G., FRYER, C. L., et al., 2015, “Generating Optimal Initial Conditions for Smoothed Particle Hydrodynamics Simulations”, *Publ. Astron. Soc. Australia*, 32:e048. doi: 10.1017/pasa.2015.50.

- DUNCAN, M. J., LEVISON, H. F., LEE, M. H., 1998, “A Multiple Time Step Symplectic Algorithm for Integrating Close Encounters”, *Astron. J.*, v. 116, n. 4 (out.), pp. 2067–2077. doi: 10.1086/300541.
- DYCK, B., WADE, J., PALIN, R., 2021, “The Effect of Core Formation on Surface Composition and Planetary Habitability”, *Astrophys. J. Lett.*, 913(1):L10. doi: 10.3847/2041-8213/abf7ca.
- EBEL, D. S., ALEXANDER, C. M. O., 2011, “Equilibrium condensation from chondritic porous IDP enriched vapor: Implications for Mercury and enstatite chondrite origins”, *Planet. Space Sci.*, v. 59, n. 15 (dez.), pp. 1888–1894. doi: 10.1016/j.pss.2011.07.017.
- EBEL, D. S., STEWART, S. T., 2018, “The Elusive Origin of Mercury”. In: Solomon, S. C., Nittler, L. R., Anderson, B. J. (Eds.), *Mercury. The View after MESSENGER*, v. 45, Cambridge University Press, pp. 497–515, Cambridge. doi: 10.1017/9781316650684.019.
- EMSENHUBER, A., JUTZI, M., BENZ, W., 2018, “SPH calculations of Mars-scale collisions: The role of the equation of state, material rheologies, and numerical effects”, *Icarus*, v. 301 (fev.), pp. 247–257. doi: 10.1016/j.icarus.2017.09.017.
- EMSENHUBER, A., CAMBIONI, S., ASPHAUG, E., et al., 2020, “Realistic On-the-fly Outcomes of Planetary Collisions. II. Bringing Machine Learning to N-body Simulations”, *Astrophys. J.*, 891(1):6. doi: 10.3847/1538-4357/ab6de5.
- EVANS, L. G., PEPLOWSKI, P. N., MCCUBBIN, F. M., et al., 2015, “Chlorine on the surface of Mercury: MESSENGER gamma-ray measurements and implications for the planet’s formation and evolution”, *Icarus*, v. 257 (set.), pp. 417–427. doi: 10.1016/j.icarus.2015.04.039.
- FRANCIS, A., MOUSLEY, B., 2014, *Business mathematics and statistics*. Andover, Cengage Learning.
- FRANCO, P., IZIDORO, A., WINTER, O. C., et al., 2022, “Explaining mercury via a single giant impact is highly unlikely”, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.*, v. 515, n. 4 (out.), pp. 5576–5586. doi: 10.1093/mnras/stac2183.
- FRANTSEVA, K., NESVORNÝ, D., MUELLER, M., et al., 2022, “Exogenous delivery of water to Mercury”, *arXiv e-prints*, art. arXiv:2204.11825.

- GABRIEL, T. S. J., JACKSON, A. P., ASPHAUG, E., et al., 2020, “Gravity-dominated Collisions: A Model for the Largest Remnant Masses with Treatment for “Hit and Run” and Density Stratification”, *Astrophys. J.*, 892(1):40. doi: 10.3847/1538-4357/ab528d.
- GENDA, H., KOKUBO, E., IDA, S., 2012, “Merging Criteria for Giant Impacts of Protoplanets”, *Astrophys. J.*, 744(2):137. doi: 10.1088/0004-637X/744/2/137.
- GINGOLD, R. A., MONAGHAN, J. J., 1977, “Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars.” *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.*, v. 181 (nov.), pp. 375–389. doi: 10.1093/mnras/181.3.375.
- GRADY, D. E., KIPP, M. E., 1980, “Continuum modelling of explosive fracture in oil shale”, *Intl. J. Rock Mech. Mining Sci. & Geomech. Abstracts*, v. 17, n. 3 (jun), pp. 147–157. doi: [https://doi.org/10.1016/0148-9062\(80\)91361-3](https://doi.org/10.1016/0148-9062(80)91361-3).
- HOUSEN, K., HOLSAPPLE, K., 1990, “On the Fragmentation of Asteroids and Planetary Satellites”, *Icarus*, v. 84, pp. 226–253.
- HYODO, R., GENDA, H., BRASSER, R., 2021, “Modification of the composition and density of Mercury from late accretion”, *Icarus*, 354:114064. doi: 10.1016/j.icarus.2020.114064.
- IZIDORO, A., DE SOUZA TORRES, K., WINTER, O. C., et al., 2013, “A Compound Model for the Origin of Earth’s Water”, *Astrophys. J.*, 767(1):54. doi: 10.1088/0004-637X/767/1/54.
- IZIDORO, A., HAGHIGHIPOUR, N., WINTER, O. C., et al., 2014, “Terrestrial Planet Formation in a Protoplanetary Disk with a Local Mass Depletion: A Successful Scenario for the Formation of Mars”, *Astrophys. J.*, 782(1):31. doi: 10.1088/0004-637X/782/1/31.
- IZIDORO, A., RAYMOND, S. N., 2018, “Formation of Terrestrial Planets”. In: Deeg, H. J., Belmonte, J. A. (Eds.), *Handbook of Exoplanets*, Springer International Publishing, pp. 2365–2423, Cham. doi: 10.1007/978-3-319-55333-7_142.
- IZIDORO, A., RAYMOND, S. N., MORBIDELLI, A., et al., 2015, “Terrestrial planet formation constrained by Mars and the structure of the asteroid belt”, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.*, v. 453, n. 4 (nov.), pp. 3619–3634. doi: 10.1093/mnras/stv1835.

- JACKSON, A. P., GABRIEL, T. S. J., ASPHAUG, E. I., 2018, “Constraints on the pre-impact orbits of Solar system giant impactors”, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.*, v. 474, n. 3 (mar.), pp. 2924–2936. doi: 10.1093/mnras/stx2901.
- KOKUBO, E., GENDA, H., 2010, “Formation of Terrestrial Planets from Protoplanets Under a Realistic Accretion Condition”, *Astrophys. J. Lett.*, v. 714, n. 1 (maio), pp. L21–L25. doi: 10.1088/2041-8205/714/1/L21.
- KRUSS, M., WURM, G., 2018, “Seeding the Formation of Mercurys: An Iron-sensitive Bouncing Barrier in Disk Magnetic Fields”, *Astrophys. J.*, 869 (1):45. doi: 10.3847/1538-4357/aaec78.
- KRUSS, M., WURM, G., 2020, “Composition and Size Dependent Sorting in Preplanetary Growth: Seeding the Formation of Mercury-like Planets”, *Planet. Sci. J.*, 1(1):23. doi: 10.3847/PSJ/ab93c4.
- LAURETTA, D. S., MCSWEEN, H. Y., 2006, *Meteorites and the Early Solar System II*. Tucson, The University of Arizona Press.
- LAWRENCE, D. J., 2017, “A tale of two poles: Toward understanding the presence, distribution, and origin of volatiles at the polar regions of the Moon and Mercury”, *J. Geophys. Res. Planets*, v. 122, n. 1 (jan.), pp. 21–52. doi: 10.1002/2016JE005167.
- LAWRENCE, D. J., FELDMAN, W. C., GOLDSTEN, J. O., et al., 2013, “Evidence for Water Ice Near Mercury’s North Pole from MESSENGER Neutron Spectrometer Measurements”, *Science*, v. 339, n. 6117 (jan.), pp. 292. doi: 10.1126/science.1229953.
- LEINHARDT, Z. M., STEWART, S. T., 2012, “Collisions between Gravity-dominated Bodies. I. Outcome Regimes and Scaling Laws”, *Astrophys. J.*, 745(1):79. doi: 10.1088/0004-637X/745/1/79.
- LEINHARDT, Z. M., DOBINSON, J., CARTER, P. J., et al., 2015, “Numerically Predicted Indirect Signatures of Terrestrial Planet Formation”, *Astrophys. J.*, 806(1):23. doi: 10.1088/0004-637X/806/1/23.
- LUCY, L. B., 1977, “A numerical approach to the testing of the fission hypothesis.” *Astron. J.*, v. 82 (dez.), pp. 1013–1024. doi: 10.1086/112164.
- LYKAWKA, P. S., 2020, “Can narrow discs in the inner Solar system explain the four terrestrial planets?” *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.*, v. 496, n. 3 (jun.), pp. 3688–3699. doi: 10.1093/mnras/staa1625.

- LYKAWKA, P. S., ITO, T., 2017, “Terrestrial Planet Formation: Constraining the Formation of Mercury”, *Astrophys. J.*, 838(2):106. doi: 10.3847/1538-4357/aa6544.
- MAROV, M. Y., IPATOV, S. I., 2005, “Migration of Dust Particles and Delivery of Volatiles to the Terrestrial Planets”, *Solar Sys. Res.*, v. 39, n. 5 (set.), pp. 374–380. doi: 10.1007/s11208-005-0050-1.
- MAROV, M. Y., IPATOV, S. I., 2018, “Delivery of Water and Volatiles to the Terrestrial Planets and the Moon”, *Solar Sys. Res.*, v. 52, n. 5 (set.), pp. 392–400. doi: 10.1134/S0038094618050052.
- MAROV, M., IPATOV, S., 2004, “Migration Processes and Volatiles Delivery”. In: Norris, R., Stootman, F. (Eds.), *Bioastronomy 2002: Life Among the Stars*, v. 213, *Symposium - International Astronomical Union*, p. 295.
- MELOSH, H. J., 1989, *Impact cratering: a geologic process*. Oxford, Oxford Universtiy Press.
- MELOSH, H. J., 2007, “A hydrocode equation of state for SiO₂”, *Meteor. Planet. Sci.*, v. 42, n. 12 (jan.), pp. 2079–2098. doi: 10.1111/j.1945-5100.2007.tb01009.x.
- MORBIDELLI, A., CHAMBERS, J., LUNINE, J. I., et al., 2000, “Source regions and time scales for the delivery of water to Earth”, *Meteor. Planet. Sci.*, v. 35, n. 6 (nov.), pp. 1309–1320. doi: 10.1111/j.1945-5100.2000.tb01518.x.
- MORBIDELLI, A., LUNINE, J. I., O’BRIEN, D. P., et al., 2012, “Building Terrestrial Planets”, *Ann. Rev. Earth. Planet. Sci.*, v. 40, n. 1 (maio), pp. 251–275. doi: 10.1146/annurev-earth-042711-105319.
- MURRAY, B. C., 1975, “The Mariner 10 pictures of Mercury: An overview”, *J. Geophys. Res.*, v. 80, n. B17 (jun.), pp. 2342–2344. doi: 10.1029/JB080i017p02342.
- NESS, N. F., BEHANNON, K. W., LEPPING, R. P., et al., 1974, “Magnetic Field Observations near Mercury: Preliminary Results from Mariner 10”, *Science*, v. 185, n. 4146 (jul.), pp. 151–160. doi: 10.1126/science.185.4146.151.

- NESVORNÝ, D., ROIG, F. V., DEIENNO, R., 2021, “The Role of Early Giant-planet Instability in Terrestrial Planet Formation”, *Astron. J.*, 161(2): 50. doi: 10.3847/1538-3881/abc8ef.
- NITTLER, L. R., STARR, R. D., WEIDER, S. Z., et al., 2011, “The Major-Element Composition of Mercury’s Surface from MESSENGER X-ray Spectrometry”, *Science*, v. 333, n. 6051 (set.), pp. 1847. doi: 10.1126/science.1211567.
- O’BRIEN, D. P., MORBIDELLI, A., LEVISON, H. F., 2006, “Terrestrial planet formation with strong dynamical friction”, *Icarus*, v. 184, n. 1 (set.), pp. 39–58. doi: 10.1016/j.icarus.2006.04.005.
- PEPLOWSKI, P. N., EVANS, L. G., HAUCK, S. A., et al., 2011, “Radioactive Elements on Mercury’s Surface from MESSENGER: Implications for the Planet’s Formation and Evolution”, *Science*, v. 333, n. 6051 (set.), pp. 1850. doi: 10.1126/science.1211576.
- PEPLOWSKI, P. N., RHODES, E. A., HAMARA, D. K., et al., 2012, “Aluminum abundance on the surface of Mercury: Application of a new background-reduction technique for the analysis of gamma-ray spectroscopy data”, *J. Geophys. Res. Planets*, 117:E00L10. doi: 10.1029/2012JE004181.
- PEPLOWSKI, P. N., EVANS, L. G., STOCKSTILL-CAHILL, K. R., et al., 2014, “Enhanced sodium abundance in Mercury’s north polar region revealed by the MESSENGER Gamma-Ray Spectrometer”, *Icarus*, v. 228 (jan.), pp. 86–95. doi: 10.1016/j.icarus.2013.09.007.
- PIGNATALE, F. C., LIFFMAN, K., MADDISON, S. T., et al., 2016, “2D condensation model for the inner Solar Nebula: an enstatite-rich environment”, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.*, v. 457, n. 2 (abr.), pp. 1359–1370. doi: 10.1093/mnras/stv3003.
- QUINTANA, E. V., BARCLAY, T., BORUCKI, W. J., et al., 2016, “The Frequency of Giant Impacts on Earth-like Worlds”, *Astrophys. J.*, 821(2): 126. doi: 10.3847/0004-637X/821/2/126.
- RAYMOND, S. N., IZIDORO, A., 2017, “Origin of water in the inner Solar System: Planetesimals scattered inward during Jupiter and Saturn’s rapid gas accretion”, *Icarus*, v. 297 (nov.), pp. 134–148. doi: 10.1016/j.icarus.2017.06.030.

- RAYMOND, S. N., QUINN, T., LUNINE, J. I., 2004, “Making other earths: dynamical simulations of terrestrial planet formation and water delivery”, *Icarus*, v. 168, n. 1 (mar.), pp. 1–17. doi: 10.1016/j.icarus.2003.11.019.
- RAYMOND, S. N., O’BRIEN, D. P., MORBIDELLI, A., et al., 2009, “Building the terrestrial planets: Constrained accretion in the inner Solar System”, *Icarus*, v. 203, n. 2 (out.), pp. 644–662. doi: 10.1016/j.icarus.2009.05.016.
- REINHARDT, C., MEIER, T., STADEL, J. G., et al., 2022, “Forming iron-rich planets with giant impacts”, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.*, v. 517, n. 3 (dez.), pp. 3132–3143. doi: 10.1093/mnras/stac1853.
- RINGWOOD, A. E., KESSON, S. E., 1977, “Basaltic Magmatism and the Bulk Composition of the Moon. II: Siderophile and Volatile Elements in Moon, Earth and Chondrites: Implications for Lunar Origin”, *Moon*, v. 16, n. 4 (jul.), pp. 425–464. doi: 10.1007/BF00577902.
- RONCO, M. P., DE ELÍA, G. C., 2018, “Formation of Solar system analogues - II. Post-gas-phase growth and water accretion in extended discs via N-body simulations”, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.*, v. 479, n. 4 (out.), pp. 5362–5384. doi: 10.1093/mnras/sty1773.
- SARID, G., STEWART, S. T., LEINHARDT, Z. M., 2014, “Mercury, the Impactor”. In: Lunar and Planetary Institute (Ed.), *45th Annual Lunar and Planetary Science Conference*, v. 45, p. 2723.
- SCHÄFER, C., RIECKER, S., MAINDL, T. I., et al., 2016, “A smooth particle hydrodynamics code to model collisions between solid, self-gravitating objects”, *Astron. Astrophys.*, 590:A19. doi: 10.1051/0004-6361/201528060.
- SCHÄFER, C. M., WANDEL, O. J., BURGER, C., et al., 2020, “A versatile smoothed particle hydrodynamics code for graphic cards”, *Astron. & Computing*, 33:100410. doi: 10.1016/j.ascom.2020.100410.
- SIEGFRIED, R. W., I., SOLOMON, S. C., 1974, “Mercury: Internal Structure and Thermal Evolution”, *Icarus*, v. 23, n. 2 (out.), pp. 192–205. doi: 10.1016/0019-1035(74)90005-0.
- SOLOMON, S. C., ANDERSON, B. J., 2018, “The MESSENGER Mission: Science and Implementation Overview”. In: Solomon, S. C., Nit-

- tler, L. R., Anderson, B. J. (Eds.), *Mercury. The View after MESSENGER*, Cambridge University Press, pp. 1–29, Cambridge. doi: 10.1017/9781316650684.002.
- STADEL, J. G., 2001, *Cosmological N-body simulations and their analysis*. Tese de Doutorado, University of Washington, Seattle, jan.
- STEWART, S. T., LOCK, S. J., PETAEV, M. I., et al., 2016, “Mercury Impact Origin Hypothesis Survives the Volatile Crisis: Implications for Terrestrial Planet Formation”. In: Lunar and Planetary Institute (Ed.), *47th Annual Lunar and Planetary Science Conference*, v. 47, p. 2954.
- STEWART, S., DAVIES, E., DUNCAN, M., et al., 2020, “The shock physics of giant impacts: Key requirements for the equations of state”. In: *American Institute of Physics Conference Series*, v. 2272, p. 080003. doi: 10.1063/12.0000946.
- STEWART, S. T., LEINHARDT, Z. M., 2009, “Velocity-Dependent Catastrophic Disruption Criteria for Planetesimals”, *Astrophys. J.*, v. 691, n. 2 (fev.), pp. L133–L137. doi: 10.1088/0004-637X/691/2/L133.
- STEWART, S. T., LEINHARDT, Z. M., 2012, “Collisions between Gravity-dominated Bodies. II. The Diversity of Impact Outcomes during the End Stage of Planet Formation”, *Astrophys. J.*, 751(1):32. doi: 10.1088/0004-637X/751/1/32.
- SVETSOV, V., 2011, “Cratering erosion of planetary embryos”, *Icarus*, v. 214, n. 1 (jul.), pp. 316–326. doi: 10.1016/j.icarus.2011.04.026.
- SZURGOT, M., 2015, “Core Mass Fraction and Mean Atomic Weight of Terrestrial Planets, Moon, and Protoplanet Vesta”. In: LPI Editorial Board (Ed.), *Comparative Tectonic and Geodynamics of Venus, Earth and Rocky Exoplanets*, v. 1839, *LPI Contributions*, p. 5001.
- TAYLOR, S. R., 1982, *Planetary science: A lunar perspective*. Houston, Lunar and Planetary Institute.
- THOMPSON, S. L., 1970, *Improvements in the CHART D Radiation-Hydrodynamic Code I: Analytic Equations of State*. Relatório Técnico SC-RR-70-28, U.S. Department of Energy, Office of Scientific and Technical Information, Albuquerque, jan.

- TILLOTSON, J. H., 1962. “Metallic Equations of State For Hypervelocity Impact”. General Atomic Report GA-3216. 1962. Technical Report, jul.
- TIMPE, M. L., HAN VEIGA, M., KNABENHANS, M., et al., 2020, “Machine learning applied to simulations of collisions between rotating, differentiated planets”, *Comput. Astrophys. & Cosmol.*, 7(1):2. doi: 10.1186/s40668-020-00034-6.
- UREY, H. C., 1951, “The origin and development of the earth and other terrestrial planets”, *Geochim. Cosmochim. Acta*, v. 1, n. 4-6, pp. 209–277.
- VENTURINI, J., RONCO, M. P., GUILERA, O. M., 2020, “Setting the Stage: Planet Formation and Volatile Delivery”, *Space Sci. Rev.*, 216(5):86. doi: 10.1007/s11214-020-00700-y.
- VON MISES, R., 1913, “Mechanik der festen Körper im plastisch-deformablen Zustand”, *Nachrichten von der Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen. Mathematisch-Physikalische Klasse*, v. 1, pp. 582–592.
- WALSH, K. J., MORBIDELLI, A., RAYMOND, S. N., et al., 2011, “A low mass for Mars from Jupiter’s early gas-driven migration”, *Nature*, v. 475, n. 7355 (jul.), pp. 206–209. doi: 10.1038/nature10201.
- WEIBULL, W., 1939, *A statistical theory of the strength of materials*. Stockholm, Generalstabens Litografiska Anstalts Förlag.
- WEIDER, S. Z., NITTLER, L. R., STARR, R. D., et al., 2012, “Chemical heterogeneity on Mercury’s surface revealed by the MESSENGER X-Ray Spectrometer”, *J. Geophys. Res. Planets*, 117:E00L05. doi: 10.1029/2012JE004153.
- WEIDER, S. Z., NITTLER, L. R., STARR, R. D., et al., 2015, “Evidence for geochemical terranes on Mercury: Global mapping of major elements with MESSENGER’s X-Ray Spectrometer”, *Earth Planet. Sci. Lett.*, v. 416 (abr.), pp. 109–120. doi: 10.1016/j.epsl.2015.01.023.
- WETHERILL, G. W., 1986, “Accumulation of the terrestrial planets and implications concerning lunar origin.” In: Hartmann, W. K., Phillips, R. J., Taylor, G. J. (Eds.), *Origin of the Moon*, pp. 519–550.
- WETHERILL, G. W., 1991, “Why Isn’t Mars as Big as Earth?” In: Lunar and Planetary Institute (Ed.), *22nd Annual Lunar and Planetary Science Conference*, v. 22, p. 1495.

WURM, G., TRIELOFF, M., RAUER, H., 2013, “Photophoretic Separation of Metals and Silicates: The Formation of Mercury-like Planets and Metal Depletion in Chondrites”, *Astrophys. J.*, 769(1):78. doi: 10.1088/0004-637X/769/1/78.